

## 61. ZJAZD CHEMIKOV

7. – 11. september 2009

Vysoké Tatry, Tatranské Matliare, hotelový komplex Hutník

### HLAVNÝ ORGANIZÁTOR

**Slovenská chemická spoločnosť**



V spolupráci

Asociácia slovenských chemických  
a farmaceutických spoločností

Asociace českých chemických společností



### ORGANIZAČNÝ VÝBOR

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

## PROGRAMOVÝ VÝBOR

Prof. Ing. Dr. Jozef Tomko, DrSc. (SCHS)  
Doc. Ing. Viktor Milata, CSc. (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, PhD. (SCHS)  
Ing. Marián Janek, PhD. (SCHS)  
RNDr. Jozef Tatiersky, PhD. (SCHS)  
Mgr. Katarína Javorová (SCHS)  
Prof. Ing. Ján Labuda, DrSc. (STU, BA)  
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)  
Prof. RNDr. Jozef Čársky, CSc. (UK, BA)  
Ing. Milan Vrška, CSc. (STU, BA)  
Prof. RNDr. Dušan Kaniansky, 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)  
Doc. 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. Ján Benko, CSc. (UK, BA)  
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 Hamul'áková, PhD. (UPJŠ, KE)  
Doc. RNDr. Mária Ganajová, CSc. (UPJŠ, KE)  
Doc. RNDr. Magdaléna Bálintová, PhD. (TU, KE)  
Ing. Elena Kulichová (Nováky)

**PROGRAM 61. ZJAZDU CHEMIKOV****Pondelok 7. 9. 2009**

- 09:00 – 18:00 Registrácia účastníkov, recepcia Hutníka II  
 14:00 – 17:00 Organizovaný odvoz autobusmi zo železničnej stanice Poprad  
 17:00 – 18:30 Valné zhromaždenie SCHS, Hutník II  
 19:00 – 24:00 Uvítací večierok, Hutník I

**Utorok 8. 9. 2009**

- 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. Jaromíra Pastoreka  
 10:00 – 11:30 Príhovory zástupcov sponzorov, predstaviteľov chemických spoločností a asociácií a funkcionárov MŠ SR, SAV a fakúlt s chemickým profilom  
 11:30 – 12:00 Odvoz autobusmi z Tatranskej Lomnice do hotelového komplexu Hutník  
 12:30 – 13:25 Obed v hotelovom komplexe Hutník, prvý turnus  
 13:25 – 14:20 Obed v hotelovom komplexe Hutník, druhý turnus  
 14:20 – 18:00 Prednášky v sekciách, príprava posterov  
 18:00 – 19:00 Večera v hotelovom komplexe Hutník, prvý turnus  
 19:00 – 20:00 Večera v hotelovom komplexe Hutník, druhý turnus  
 20:00 – 24:00 Posterové prezentácie, hotelový komplex Hutník - telocvičňa, vínný večer

**Streda 9. 9. 2009**

- 08:30 – 12:25 Prednášky v sekciách, príprava posterov  
 12:30 – 13:25 Obed v hotelovom komplexe Hutník, prvý turnus  
 13:25 – 14:20 Obed v hotelovom komplexe Hutník, druhý turnus  
 14:00 – 18:00 Výlety  
 18:00 – 19:00 Večera v hotelovom komplexe Hutník, prvý turnus  
 19:00 – 20:00 Večera v hotelovom komplexe Hutník, druhý turnus  
 20:00 – 21:00 80 rokov SCHS, slávnostný seminár  
 20:00 – 24:00 Posterové prezentácie, hotelový komplex Hutník - telocvičňa, pívny večer

**Štvrtok 10. 9. 2009**

- 08:30 – 12:25 Prednášky v sekciách  
 12:30 – 13:25 Obed v hotelovom komplexe Hutník, prvý turnus  
 13:25 – 14:20 Obed v hotelovom komplexe Hutník, druhý turnus  
 14:20 – 18:15 Prednášky v sekciách  
 19:00 – 24:00 Záverečný večierok, hotel Hutník, vyhodnotenie najlepších posterov, vyhlásenie víťaza Ceny Shimadzu 2009

**Piatok 11. 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  
 14:00 Odchod, odvoz autobusmi do Popradu

## SEKCIE ZJAZDU A GARANTI

### 1. Analytická a fyzikálna chémia

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

Prof. Ing. Peter Šimon, DrSc.

*Ústav fyzikálnej chémie a chemickej fyziky, FCHPT STU, Bratislava*

### 2. Anorganická a materiálová chémia

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

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)

Doc. Ing. Viktor Milata, CSc.

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

### 4. Vyučovanie a história chémie

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

Prof. RNDr. Jozef Čársky, DrSc.

*Lekárska fakulta, Univerzita Komenského, Bratislava*

### 5. Potravinárstvo, životné prostredie a biotechnológia

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

Doc. Ing. Štefan Schmidt, CSc.

*Ústav biotechnológie a potravinárstva, FCHPT STU, Bratislava*

### 6. CHEMPROGRESS

(Priemyselné inžinierstvo, Technológie, Prepojenie vedy a priemyslu)

Prof. Ing. Martin Bajus, DrSc.

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

### Posterová sekcia

Ing. Marián Janek, PhD.

*Technologický inštitút SAV, Bratislava*

## PLENÁRNA PREDNÁŠKA

- PP** Jaromír Pastorek      DIAGNOSTICKÉ A TERAPEUTICKÉ VYUŽITIE  
SULFÓNAMIDOV AKO INHIBÍTOROV KARBONICKÝCH  
ANHYDRÁZ

## ZOZNAM POZVANÝCH PREDNÁŠOK

- PP1** Jozef Rychlý      SVETELNÁ EMISIA Z TEPLOM INICIOVANEJ OXIDÁCIE  
POLYMÉROV A JEJ VZŤAH SO ZVYŠKOVOU STABILITOU  
POLYMÉRNEHO MATERIÁLU
- PP2** Jitka Ulrichová      POLYFENOLY – OD FYTOCHEMIE K FUNKČNÍ  
POTRAVINĚ?
- PP3** Róbert Mistrík      DE NOVO URČOVANIE CHEMICKEJ ŠTRUKTÚRY LÁTOK  
POMOCOU TANDEMOVEJ HMOTNOSTNEJ  
SPEKTROMETRIE
- PP4** Vladimír Filip      MOŽNOSTI VYUŽITÍ ROSTLINNÝCH OLEJŮ
- PP5** Roman Szücs      VPLYV INOVÁCIE V SEPARAČNÝCH METÓDACH NA  
VÝVOJ NOVÝCH FARMACEUTICKY AKTÍVNYCH LÁTOK  
A PRODUKTOV
- PP6** Jozef Lehotay      VÝZNAM ANALYTICKEJ CHÉMIE V SÚČASNOSTI
- PP7** Vladimír Kvasnička      UMELÁ CHÉMIA A DARWINOVA EVOLÚCIA
- PP8** Ján Reguli      "LAST REACTION HERO" – HROZÍ KONIEC CHEMIKOV NA  
SLOVENSKU?

**ZOZNAM PREDNÁŠOK PODĽA SEKCIÍ****Sekcia 1: Analytická a fyzikálna chémia**

- |             |                                                                                                                                  |                                                                                                                                                           |
|-------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>1P01</b> | Erik Szabo, Peter Ševčík                                                                                                         | ON-LINE MERANIE VÝVOJA PLYNOV<br>V BRIGGSOVEJ-RAUSCHEROVEJ A<br>BELOUSOVOVEJ-ŽABOTINSKÉHO OSCILAČNEJ<br>REAKCII                                           |
| <b>1P02</b> | <u>Roman Maršálek</u> , Boleslav Taraba                                                                                          | VLIV TEPLoty NA ADSORPCI CTAB NA UHLÍ                                                                                                                     |
| <b>1P03</b> | Karel Nesměrák                                                                                                                   | OXIDAČNĚ-REDUKČNÍ POTENCIÁL VE VZTAŽÍCH<br>STRUKTURA-VLASTNOSTI, RESP. STRUKTURA-<br>BIOLOGICKÁ AKTIVITA                                                  |
| <b>1P04</b> | Tomáš Bleha                                                                                                                      | POLYETYLÉN A DNA: PODOBNOSTI A ODLIŠNOSTI<br>Z ICH MODELOVANIA                                                                                            |
| <b>1P05</b> | <u>M. Mazúr</u> , K. Furdíková, L. Gaľa, M. Kaliňák and M. Valko                                                                 | NMR SPECTROSCOPY OF GRAPE MUST, “BURČIAK”,<br>“RAMPÁŠ” AND NEW WINE                                                                                       |
| <b>1P06</b> | <u>Ludmila Šimková</u> , František Liška,<br>Jiří Klíma, Jiří Ludvík                                                             | ELEKTROCHEMICKÉ STUDIUM<br>INTRAMOLEKULÁRNÍ DEGRADACE NOVÉHO<br>EXPLOZIVA 2,2-DINITROETHEN-1,1-DIAMINU                                                    |
| <b>1P07</b> | Marián Matejdes, Marián Janek                                                                                                    | ŠTÚDIUM HYBRIDNÝCH MATERIÁLOV NA BÁZE<br>MONTMORILLONITU A SUPRAMOLEKULOVÝCH<br>KOMPLEXOV S FLUORESCENČNÝMI FARBIVAMI                                     |
| <b>1P08</b> | <u>Vojtěch Mlýnský</u> , Pavel Banáš, Nils G. Walter, Jiří Šponer, and Michal Otyepka                                            | MOLECULAR DYNAMICS OF HAIRPIN RIBOZYME                                                                                                                    |
| <b>1P09</b> | <u>Marie Zgarbová</u> , Michal Otyepka,<br>Jiří Šponer a Petr Jurečka                                                            | POROVNATELNOST EMPIRICKÝCH POTENCIÁLŮ A<br>KVANTOVĚ MECHANICKÝCH VÝPOČTŮ                                                                                  |
| <b>1P10</b> | <u>Tomáš Zelený</u> , Martin Pykal, Pavel Hobza                                                                                  | TEORETICKÁ STUDIE HYPERPLOCHY<br>POTENCIÁLNÍ ENERGIE KOMPLEXU<br>INDOL·BENZEN                                                                             |
| <b>1P11</b> | <u>Petra Florová</u> , Petr Sklenovský a Michal Otyepka                                                                          | VLIV EXPLICITNÍCH MODELŮ VOD NA STABILITU<br>A DYNAMIKU CHIGNOLINU V MOLEKULÁRNĚ<br>DYNAMICKÝCH SIMULACÍCH                                                |
| <b>1P12</b> | Pavel Coufal                                                                                                                     | MINIATURIZACE V ANALYTICKÝCH SEPARAČNÍCH<br>METODÁCH                                                                                                      |
| <b>1P13</b> | <u>Pavčina Novotná</u> , Marie Urbanová                                                                                          | STRUCTURAL STUDY ON POLYPEPTIDES USING<br>VIBRATIONAL CIRCULAR DICHROISM                                                                                  |
| <b>1P14</b> | <u>Jiří Pavlovský</u> , Martin Mucha                                                                                             | RŮZNÉ POSTUPY SORPCE HUMINOVÝCH KYSELIN<br>NA JÍLOVÉ MINERÁLY VČETNĚ STUDIA<br>VLASTNOSTÍ INTERKALÁTŮ METODAMI RTG<br>DIGRAKCE, UV-VIS A IČ SPEKTROSKOPIE |
| <b>1P15</b> | David Havlíček                                                                                                                   | MOŽNOSTI A MEZE KVANTITATIVNÍ ANALÝZY<br>PRÁŠKOVOU RENTGENOVOU DIFRAKČÍ                                                                                   |
| <b>1P16</b> | <u>Marcela Lišková</u> , Karel Klepárník ,<br>Věra Hezinová , Ivona Svobodová ,<br>Jan Příkryl , František Foret , Pavel Pazdera | PREPARATION AND MODIFICATION OF QUANTUM<br>DOTS AS SELECTIVE PROBES IN BIOANALYSIS                                                                        |
| <b>1P17</b> | Jiri Klima                                                                                                                       | VÝHODY VYUŽITÍ ULTRAZVUKU<br>V ELEKTROCHEMII, FYZIKÁLNÍ MECHANIZMY<br>A VHODNÉ EXPERIMENTÁLNÍ USPOŘÁDÁNÍ                                                  |
| <b>1P18</b> | <u>Petr Jakubec</u> , Jan Hrbáč, Vladimír Halouzka, Jana Skopalová                                                               | ELEKTROCHEMICKÁ METODA PRO STANOVENÍ<br>LÁTEK S THIOLOVOU A DITHIOLOVOU SKUPINOU                                                                          |

- 1P19** P. Tomčík, M. Rievaj, D. Bustin, R. G. Compton INFLUENCE OF SURFACTANTS ON DEPOSITION PROCESS WHEN CADMIUM IS DETERMINED ON BORON DOPED DIAMOND ELECTRODE
- 1P20** Manová Alena, Beinrohr Ernest AAS FOR TRACE ANALYSIS OF METALS
- 1P21** Aleksandra Augustynek, Jakub M. Milczarek, Janina Zięba-Palus FORENSIC IDENTIFICATION AND COMPARISON OF ADHESIVE TAPES BY MEANS OF INFRARED SPECTROSCOPY (FT-IR) AND PYROLYSIS-GAS CHROMATOGRAPHY-MASS SPECTROMETRY (PY-GC/MS)
- 1P22** Petr Sklenovský, Michal Otyepka IN SILICO TEPELNÁ DENATURACE NEGLOBULÁRNÍHO PROTEINU P18INK4C
- 1P23** Peter Šimon PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES OF BIOPERSISTENT NANOPARTICLES AND THEIR CONCEIVABLE INTERACTIONS WITH BIOMATRICES

## Sekcia 2: Anorganická a materiálová chémia

- 2P01** Miroslav Boča TAVENINY ANORGANICKÝCH SOLÍ - POPOLUŠKA V PRIEMYSLE
- 2P02** Blanka Kubíková, Zuzana Netriová, Miroslav Boča FLUORIDOVÉ SYSTÉMY NA BÁZE ŽIARUVZDORNÝCH KOVOV
- 2P03** Ondřej Kaman, Pavel Veverka, Michal Kačenka, Miroslav Maryško, Miroslav Veverka, Vít Herynek, Jaroslav Kupčík Lukáš Falteisek, Jan Černý, Petr Kašpar, Pavla Jendelová, Veronika Grünwaldová, Romain Epherre, Emil Pollert SILICA COATED AND FUNCTIONALIZED MANGANESE PEROVSKITE NANOPARTICLES FOR BIOMEDICAL APPLICATIONS
- 2P04** František Šimko, Ondrej Prítula, Aydar Rakhmattulin a Catherine Bessada ŠTÚDIUM SÚSTAVY  $\text{Na}_3\text{AlF}_6\text{-FeF}_3$
- 2P05** František Kovanda, David Koloušek, Jana Gaálová, Květa Jiráťová PŘÍPRAVA STRUKTUROVANÝCH KATALYZÁTORŮ DEPOZICÍ PODVOJNÝCH VRSTEVNATÝCH HYDROXIDŮ NA KOVOVÝ NOSIČ
- 2P06** M. Koman, J. Moncol, and M. Melník NEW CARBOXYLATO COMPLEXES OF COPPER(II) WITH NICOTINAMIDE
- 2P07** Jaroslava Maroszová, Ján Moncol, Zuzana Vasková, Dušan Valigura, Marian Koman STRUCTURAL VARIABILITY OF 3-NITRO AND 3,5-DINITRO BENZOATO COOPER (II) COMPLEXES WITH PYRIDYLMETHANOLS
- 2P08** Zuzana Vasková, Jan Moncol, Aleš Růžička, Dušan Valigura VLASTNOSTI NITROBENZOÁTOMEĎNATÝCH KOMPLEXOV S 2,6-PYRIDÍNDIMETANOLOM
- 2P09** Ivan Němec, Irena Matulková, Ivana Císařová, Karel Teubner STUDIUM SLABÝCH VODÍKOVÝCH VAZEB U NELINEÁRNÍCH OPTICKÝCH MATERIÁLŮ NA BÁZI SLOUČEN AMINOTRIAZOLŮ
- 2P10** Václav Šícha, Jaromír Plešek, Bohumír Grüner 2P10 SUBSTITUČNÍ DERIVÁTY METALLAKARBORANŮ JAKO ÚČINNÉ INHIBITORY HIV-1 PROTEÁZY
- 2P11** Petr Ostřížek, Petr Bezdička, Zdeněk Moravec, Jiří Pinkas NANOSCOPIC COBALT FERRITE PARTICLES BY SONOLYSIS OF METAL ACETYLACETONATE COMPLEXES
- 2P12** Milan Drábik NIEKOĽKO POZNÁMOK K OBSAHU POJMU A DEFINÍCIÍ MATERIÁLOVEJ CHÉMIE

- 2P13** Małgorzata M. Zaitz, Katarzyna Furczoń, Marcin Molenda, Lucjan Chmielarz, Zofia Piwowarska, Barbara Dudek, Alicja Rafalska-Lasocha and Roman Dziembaj NANOSTRUCTURED CERIA DOPED WITH METAL IONS OBTAINED BY THE REVERSE MICROEMULSION METHOD AS A CATALYST FOR VOCS OXIDATION
- 2P14** Z. Klika, P. Pustková, P. Čapková, M. Dudová MONTMORILLONITE INTERCALATES WITH PROTONATED METHYLENE BLUE CATIONS
- 2P15** Jaromír Hnát, Martin Paidar, Karel Bouzek, Jan Žitka a Jan Schauer AKALICKÉ POLYMERNÍ MEMBRÁNY PRO ALKALICKOU ELEKTROLÝZU VODY
- 2P16** Marián Janek, Marián Matejdes, Atilla Gaál, Ignác Bugár, Vojtech Szöcz, Dušan Velič, Juraj Darmo STANOVENIE DIELEKTRICKÝCH VLASTNOSTÍ SLŮD POMOCOOU TERAHERTZOVEJ SPEKTROSKOPIE S ČASOVÝM ROZLIŠENÍM
- 2P17** Mosinger Jiří, Lang Kamil, Kubát Pavel STUDIUM POLYMERNÍCH NANOTKANIN S ENKAPSULOVANÝMI A EXTERNĚ VÁZANÝMI FOTOSENSITIZERY
- 2P18** Barbora Doušová, Lucie Fuitová, Lenka Herzogová, David Koloušek, Ivo Šafařík, Tomáš Grygar, Vladimír Machovič, Miloslav Lhotka, Jan Filip PŘÍPRAVA ANIONAKTIVNÍCH SORBENTŮ Z ODPADNÍCH MATERIÁLŮ – NOVÉ MOŽNOSTI V DEKONTAMINAČNÍCH POSTUPECH
- 2P19** Ivana Luštická, Eliška Leitmannová, Libor Červený IMOBILIZACE AKTIVNÍCH SUBSTANCÍ
- 2P20** Libor Kvítek, Miroslava Vandlíčková, Petr Blažek, Aleš Panáček, Robert Prucek, Taťjana Nevěčná, Radek Zbořil PŘÍPRAVA NANOČÁSTIC STŘÍBRA MODIFIKOVANOU TOLLENSOVOU REAKCÍ
- 2P21** Jan Moncol, Zuzana Vasková, Jozef Halaška, Aleš Růžička SYNTHESIS, STRUCTURE AND SUPRAMOLECULAR HYDROGEN-BONDING NETWORKS OF DIMERIC BENZOATOCOPPER(II) COMPLEXES WITH N-MEHLNICOTINAMIDE

### Sekcia 3: Organická chémia a polyméry

- 3P01** Mária Omastová ÚLOHA TENZIDOV PRI PRÍPRAVE VODIVÝCH POLYMÉROV A KOMPOZITOV
- 3P02** N. V. Blinova, M. Trchová, J. Stejskal A NEW APPROACH FOR THE SYNTHESIS OF POLYANILINE WITH SEPARATED REACTANTS
- 3P03** Bohumil Kratochvíl, Michaela Hájková, Michal Hušák PEVNÉ FORMY MOLEKUL
- 3P04** Oldřich Pytela, Filip Bureš SOLVATOCHROMIE JAKO NÁSTROJ STUDIA SLOUČENIN S NELINEÁRNÍMI OPTICKÝMI VLASTNOSTMI
- 3P05** Jaroslav Kvičala, Michal Beneš, Oldřich Paleta TEORETICKÁ STUDIE NUKLEOFILNÍ AROMATICKÉ SUBSTITUCE NA 2,3,4,5,6-PENTAFLUORBIFENYLU
- 3P06** Štefan Marchalín, Jozefína Žúžiová a Peter Šafář STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA SUBSTITUOVANÝCH INDOLIZIDINOLOV
- 3P07** Miroslav Soural, Jan Hlaváč, Pavel Hradil, Marián Hajdúch EFFICIENT SYNTHESIS AND CYTOTOXIC ACTIVITY OF SOME SYMMETRICAL DISULFIDES DERIVED FROM THE 4(1H)-QUINOLINONE SKELETON
- 3P08** Soňa Křupková, Miroslav Soural and Jan Hlaváč EFFICIENT SOLID-PHASE SYNTHESIS OF 6-NITRO-3-HYDROXY-4(1H)-QUINOLINONES WITH TWO DIVERSITY POSITIONS.
- 3P09** Ján Imrich, Mária Vilková, Jana Tomaščíková, Zdenka Bedlovičová, Eva Balentová, Karel D. Klika NOVÉ TIOMOČOVINY A TIOSEMIKARBAZIDY AKRIDÍNU A ICH CYKLIZAČNÉ REAKCIE



- 3P10** Pavel Pazdera, Barbora Andělová, Vladimíra Datinská, Marcela Chmielová, Dana Němečková, Jan Šimbera a Karel Zelinka IONEXY JAKO IMOBILIZÁTORY PRO KATALYTICKÉ SYSTÉMY V ČISTŠÍCH SYNTÉZÁCH
- 3P11** Naděžda Pudelová, Isabelle Bouillon, Jaroslav Zajíček, Jan Kočí, and Viktor Krchňák SOLID-PHASE SYNTHESIS OF DIVERSE HETEROCYCLES FROM POLYMER-SUPPORTED AMINO KETONES
- 3P12** Luboš Prokůpek, Tereza Titěrová, Vladimír Špaček, Miroslav Večeřa, Jiří Podešva, Jana Kovářová OVĚŘENÍ VLASTNOSTÍ SMĚSNÝCH POLYMERNÍCH STABILIZÁTORŮ NA MODELOVÝCH POLYURETHANOVÝCH SYSTÉMECH
- 3P13** Petr Sysel, Martina Traxmandlová, Evgenia Minko VYSOCE VĚTVENÉ POLYIMIDY NA BÁZI TRIS(2-AMINOETHYL)AMINU
- 3P14** Jozef Lustoň, Juraj Kronek, INICIÁTORY PRE KATIONOVÚ POLYMERIZÁCIU CYKLICKÝCH IMINO ÉTEROV
- 3P15** Michal Černý, Zdeňka Blechová, Ladislav Burgert, Lucia Křištofiková OPTIMALIZACE BARVENÍ CELULÓZOVÝCH MATERIÁLŮ KYPOVÝMI BARVIVY
- 3P16** Ladislav Svoboda, Miroslav Večeřa, Luboš Prokůpek, Miroslav Štancel OPTIMALIZACE PODMÍNEK VYTVRZOVÁNÍ POLYMERNÍCH NOSIČŮ IDENTIFIKAČNÍCH TĚLÍSEK PRO VÝBUŠINY
- 3P17** Silvia Podobeková, Anna Ujhelyiová POTLAČ POLYETYLÉNTEREFTALÁTOVÝCH TEXTÍLIÍ ZA ÚČELOM ZLEPŠENIA BARIÉROVÝCH VLASTNOSTÍ
- 3P18** Martin Hrubý, Čestmír Koňák, Jan Kučka, Miroslav Vetrík, Sergey K. Filippov, Karel Ulbrich, Ondřej Lebeda TERMORESPONIVNÍ POLYMERNÍ MICELY JAKO POTENCIÁLNÍ RADIOFARMAKA
- 3P19** Michal Pechar, Robert Pola, Libor Kostka, Karel Ulbrich, Lucie Bednářová, Petr Maloň, Vlastimil Král, Irena Siegllová, Milan Fábry HYBRIDNÍ KOPOLYMERY OBSAHUJÍCÍ COILED COIL MOTIV PRO ŘÍZENOU DOPRAVU A SMĚROVÁNÍ LÉČIV
- 3P20**
- 3P21** Monika Horáková, Alena Hýbnerová, Ladislav Burgert, Jitka Kunstová, Gabriela Krylová VÝVOJ SAMOSEKVESTRUJÍCÍCH BIODEGRADABILNÍCH TENZIDŮ
- 3P22** Vladimír Proks, František Rypáček SYNTETICKÝ FIBRONEKTIN MIMETICKÝ LIGAND PRO INTEGRINŮ ZPROSTŘEDKOVANOU ADHEZI BUNĚK NA BIOMATERIÁLY
- 3P23** Ivana Šeděnková, Miroslava Trchová, Jan Pilař INFRARED SPECTRA MEASURED DURING POLYMER WEATHERING EVALUATED BY FACTOR ANALYSIS
- 3P24** Miroslav Večeřa, Luboš Prokůpek, Ladislav Svoboda, Petr Lebeda CHARAKTERIZACE AKRYLÁTOVÝCH DISPERZÍ METODOU A4F-MALS
- 3P25** Lucie Brulíková, Jan Hlaváč SYNTHESIS OF 5-MODIFIED URIDINE ANALOGUES AND STUDY OF THEIR CYTOTOXIC ACTIVITY
- 3P26** Jana Raschmanová, Michaela Slaninková, Miroslava Martinková, Jozef Gonda, Juraj Kuchár STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA VYSOKOFUNKCIONALIZOVANÉHO PREKURZORA POLÁRNEJ ČASTI (-)-SFINGOFUNGÍNU E
- 3P27** B. Eignerová, M. Dračínský, M. Buděšínský, and M. Kotora PERFLUOROALKYLATION VIA CROSS-METATHESIS AND ITS APPLICATION IN A SYNTHESIS OF BIOLOGICAL ACTIVE COMPOUNDS
- 3P28** Jiří Ludvík, Irena Hoskvcová, Stanislav Záliš MOLEKULÁRNÍ ELEKTROCHEMIE – VHODNÝ PROSTŘEDEK KE STUDIU ELEKTRONOVÉ STRUKTURY A REAKTIVITY FISCHEROVÝCH AMINOKARBENŮ CHROMU A ŽELEZA

- 3P01** Abdul Wahab, Michal Valasek, Stursa Jan, Josef Michl, Jiri Klima, and Jiri Ludvik  
ELECTROOXIDATION BEHAVIOR OF SUBSTITUTED  $CB_{11}H_{12}$  ANIONS IN LIQUID  $SO_2$  AND HAMMETT EQUATION

#### Sekcia 4: Vyučovanie a história chémie

- 4P01** Hana Čtrnáctová, Pavel Drašar, Eva Stratilová Urváľková, Jiří Zajíček  
CITIES: EVROPSKÝ PROJEKT PRO UČITELE CHEMIE STŘEDNÍCH ŠKOL
- 4P02** Eva Stratilová Urváľková, Hana Čtrnáctová, Šárka Matoušková  
CITIES: MEZINÁRODNÍ WEBOVÁ PREZENTACE PROJEKTU
- 4P03** Renata Šulcová, Hana Böhmová, Eva Stratilová Urváľková, Barbora Zákostelná  
CITIES: MATERIÁLY PRO ZAJÍMAVÉ EXPERIMENTÁLNÍ ČINNOSTI
- 4P04** Hana Böhmová, Hana Čtrnáctová, Renata Šulcová, Eva Stratilová Urváľková  
CITIES: AKTUALITY PRO UČITELE V CHEMICKÉM VZDĚLÁVÁNÍ
- 4P05** Marie Vasileská  
HODNOCENÍ V CHEMII JAKO SOUČÁST NOVÉ STÁTNÍ Maturity v ČR
- 4P06** Beata Vranovičová  
VPLYV NEVERBÁLNYCH PROSTRIEDKOV V ZADANÍ CHEMICKEJ VÝPOČTOVEJ ÚLOHY NA VÝBER SPÔSOBU JEJ RIEŠENIA
- 4P07** D. Sýkorová, O. Smrčková  
ZÁKLADNÍ LABORATOŘE PRO STŘEDOŠKOLSKÉ STUDENTY
- 4P08** Eva Kostolányiová, Katarína Javorová  
AKO PRACOVAŤ S TALENTOVANOU MLÁDEŽOU?
- 4P09** Jozef Čársky  
VZNIK A ČINNOSŤ SLOVENSKO-PODKARPATSKORUSKEJ ODBOČKY ČSSCH (PRÍPRAVA CHEMICKÉHO ZJAZDU, KTORÝ SA MAL KONAŤ V BRATISLAVE)
- 4P10** Jozef Čársky, Michal Uher  
HISTÓRIA TRADIČNÝCH ZJAZDOV SLOVENSKÝCH A ČESKÝCH CHEMIKOV V BANSKEJ ŠTIAVNICI
- 4P11** Miloš Jesenský  
HISTORICAL OUTLINE OF SLOVAK ALCHEMY
- 4P12** Jiří Jirát, Eva Dibuszová  
NOVÉ MOŽNOSTI LICENCOVÁNÍ ELEKTRONICKÝCH VÝUKOVÝCH MATERIÁLŮ – LICENCE CREATIVE COMMONS
- 4P13** Jiří Znamenáček, Michal Božoň, Bedřich Košata  
ESO – JEDNOTNÝ CELOŠKOLNÍ ROZCESTNÍK ELEKTRONICKÝCH STUDIJNÍCH MATERIÁLŮ VŠCHT PRAHA
- 4P14** Jitka Součková, Lukáš Müller, Jana Skopalová  
PROGRAMOVANÁ UČEBNICE ELEKTROANALYTICKÝCH METOD
- 4P15** Vratislav Flemr  
ÚSTAV ANORGANICKÉ CHEMIE, VYSOKÁ ŠKOLA CHEMICKO-TECHNOLOGICKÁ V PRAZE
- 4P16** Iva Dudková  
CELOŽIVOTNÍ VZDĚLÁVÁNÍ NA VŠCHT PRAHA
- 4P17** Jaroslav Šilhánek  
CHEMISCHES ZENTRALBLATT – HISTORICKÁ SOUČASNOST

#### Sekcia 5: Potravinárstvo, životné prostredie a biotechnológia

- 5P01** Agáta Fargašová  
FYTOTOXICITA A GENOTOXICITA CHRÓMU A NIKLU
- 5P02** Daniela Borošová, Iveta Nagyová, Zuzana Melichová  
ARSENIC CONTAMINATION OF SURFACE AND GROUND WATERS AT THE LUBIETOVÁ DEPOSIT (CENTRAL SLOVAKIA)

- 5P03** Zuzana Kramarová and Agáta Fargašová THE EFFECT OF ARSENIC AND SELENIUM ON THE GROWTH AND CHLOROPHYLL PRODUCTION OF *DESMODESMUS QUADRICAUDA* AND *PSEUDOKIRCHNERIELLA SUBCAPITATA*
- 5P04** Alžběta Petraková, Eliška Chrpová, Hana Ledererová OMEZENÍ RŮSTU BAKTERIÍ NA TEXTILÍÍCH A OCHRANA ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ
- 5P05** Martin Kubala, Marika Janovská, Vilím Šimánek, Jitka Ulrichová STUDIUM INTERAKCE SANGUINARINU S  $Na/K^+$ -ATPÁZOU METODAMI FLUORESCENČNÍ SPEKTROSKOPIE
- 5P06** Pavel Zachař, Vladimír Král KATALYZÁTORY NA BÁZI METALOPORFYRINŮ – NÁSTROJ K MODELOVÁNÍ PŮSOBENÍ VYBRANÝCH ENZYMŮ
- 5P07** J. Lipovský, M. Linhová, P. Fribert, P. Patáková, M. Rychtera, K. Melzoch USPOŘÁDÁNÍ KULTIVAČNÍHO PROCESU PRO PRODUKCI BUTANOLU
- 5P08** P. Fribert, J. Lipovský, M. Linhová, P. Patáková, M. Rychtera, K. Melzoch OPTIMALIZACE STRIPOVÁNÍ PLYNEM PŘI SEPARACI 1-BUTANOLU Z KULTIVAČNÍHO MEDIA BĚHEM FERMENTAČNÍHO PROCESU
- 5P09** Michaela Linhová, Petra Patáková, Petr Fribert, Jakub Lipovský, Mojmír Rychtera, Karel Melzoch SLEDOVÁNÍ MORFOLOGICKÝCH A FYZIOLOGICKÝCH ZMĚN U BAKTERIÍ RODU *CLOSTRIDIUM* S VYUŽITÍM PRŮTOKOVÉ CYTOMETRIE
- 5P10** Daniela Smogrovicova, Pavol Nadasky, B. S. Wilhelmi, R. Tandlich, R. Morrison, G. Cambray SLOVAK AND SOUTH AFRICAN MEAD
- 5P11** Ludmila Zajoncova, Michaela Pečová, Marek Šebela, Zdenka Marková, Radek Zbořil, Kateřina Kluchová, Jan Čuda and Dalibor Jančík IMMOBILIZATION OF ENZYMES ON SUPERPARAMAGNETIC NANOPARTICLES
- 5P12** Andriy Synytsya, Alla Synytsya, Roman Bleha, Jan Brindza TŘIDĚNÍ KVĚTOVÝCH A VČELÍCH PYLŮ: VYUŽITÍ SPEKTROSKOPICKÝCH A STATISTICKÝCH METOD
- 5P13** Stanislav Sekretár, Kristína Hovančíková, Štefan Schmidt TRENDY V BALENÍ POTRAVÍN
- 5P14** Barbora Hrvolová, Jiří Kalina SELEKTIVNÍ EXTRAKCE VYBRANÝCH KAROTENOIDŮ
- 5P15** Štefan Schmidt, František Kreps, Zlatica Kohajdová, Stanislav Sekretár TRANS FATTY ACID CONTENT IN SLOVAK MARGARINES

**Sekcia 6: CHEMPROGRESS**

- 6P01** M. Bajus, B. Mlynková COPYROLYSIS AND COCRACKING OF OIL FRACTIONS WITH POLYMERIC WASTES BY CHEMICAL RECYCLING
- 6P02** Petr Zámostný, Adam Karaba, Zdeněk Bělohlav MATEMATICKÝ MODEL PYROLÝZY UHLOVODÍKŮ S AUTOMATICKÝM GENEROVÁNÍM SÍTĚ REAKCÍ
- 6P03** J. Lederer, F. Nečesaný, V. Veselý, J. Kukačka MOŽNOSTI ZPRACOVÁNÍ SMĚSNÝCH ODPADNÍCH PLASTŮ JAKO ALTERNATIVNÍ PALIVO
- 6P04** Václav Veselý, Jiří Hanika, Jaromír Lederer, František Nečesaný a Vratislav Tukač EKONOMICKÉ ASPEKTY RECYKLACE POLYETYLENTEREFTALÁTU
- 6P05** R. Dvorsky FROM STRUCTURAL BIOLOGY TO THE DRUGS AGAINST INFLAMMATORY BOWL DISEASES
- 6P06** Viktor Milata ZELENÁ CHÉMIA – ÁNO ČI NIE ?

- 6P07** Ján Cvangroš, Jozef Mikulec BIOPALIVÁ A ICH PERSPEKTÍVY
- 6P08** Jakub Malíš, Martin Paidar VLIV PROVOZNÍCH PARAMETRŮ NA VÝKON PALIVOVÝCH ČLÁNKŮ
- 6P09** Vdovjak Ladislav KONVERZIA VÁKUOVÉHO ZVYŠKU NA JEDNOTKE LC-FINING V RAFINÉRII SLOVNAFT
- 6P10** Magdaléna Štolcová and Milan Hronec SYNTHESIS AND APPLICATION OF BENZOTHIAZOLYLTHIO-SUBSTITUTED ALKYLAMINOPROPENE
- 6P11** Martin Zapletal SYNTÉZA VYBRANÝCH AMINOETHERŮ V PLYNNÉ FÁZI
- 6P12** Pavol Šajgalík, Miroslav Boča MACHINA – CENTRUM PRE MATERIÁLY, VRSTVY A SYSTÉMY PRE APLIKÁCIE A CHEMICKÉ PROCESY V EXTRÉMNYCH PODMIENKACH
- 6P13** Roman Kodým, Petr Klein, Karel Bouzek, Pavel Novák KOMPLEXNÍ DYNAMICKÝ MODEL PROCESŮ PROBÍHAJÍCÍCH U POVRCHU KATODICKY CHRÁNĚNÉ KOVOVÉ KONSTRUKCE ULOŽENÉ V PŮDĚ
- 6P14** Ladislav Kudrlička, Jana Kolesárová a Josef Kozler MĚŘENÍ A VYHODNOCOVÁNÍ DYNAMICKÉ ADSORPCE TĚŽKÝCH KOVŮ NA PŘÍRODNÍCH SORBENTECH S OBSAHEM HUMINOVÝCH LÁTEK
- 6P15** A. Vincze, A. Šatka, D. Haško, M. Janek, V. Danielik, F. Uherek, J. Matuška CHEMICAL ANALYSIS AND SURFACE INVESTIGATION OF PYROLYTIC BORON NITRIDE (PBN)
- 6P16** Igor Novák, Galina K. Elyashevich, Ivan Chodák, Marian Števiar, Angela Kleinová, Vladimír Pollák POLYETHYLENE MEMBRANES TREATED BY ARGON BARRIER DISCHARGE PLASMA
- 6P17** V. Hanta, J. Poživil USE OF DISCRETE EVENT SYSTEMS AS MEANS OF BUILDING COMPUTER MODELS OF BATCH PLANTS
- 6P18** Benčíková Eleonóra, Berešik Marián, Ondrášiková Katarína FUNCTIONAL MATERIALS IN HEALTH SERVICE INSTITUTIONS
- 6P19** Karol Rakottay, Alexander Kaszonyi KATALYTICKÁ OXIDÁCIA CYKLOHEXYLAMÍNU
- 6P20** Blažej Horváth and Milan Hronec GAS-PHASE EPOXIDATION OF PROPYLENE

**Cena Shimadzu 2009**

- Čacho František, Manová Alena, Beinrohr Ernest STANOVENIE STOPOVÝCH KONCENTRÁCIÍ ORTUTI TECHNIKOU ETAAS PO ELEKTROCHEMICKÉJ ÚPRAVE VZORKY
- Petr Dobiáš, Petra Pavlíková, Martin Adam, Karel Ventura PRESSURISED FLUID AND ULTRASONIC EXTRACTION METHODS FOR ANALYSIS OF PLANT ANTIOXIDANTS AND THEIR ANTIOXIDANT CAPACITY
- Jakub Hraníček, Václav Červený, Petr Rychlovský STANOVENÍ ULTRASTOPOVÝCH KONCENTRACÍ ARSENU A SELENU V PITNÝCH VODÁCH METODOU ECHG-QFAAS
- Peter Kalafut, Radim Kučera, Jiří Klimeš MOŽNOSTI VYUŽITÍ STACIONÁRNÍCH FÁZÍ NA BÁZI OXIDU ZIRKONIČITÉHO VE FARMACEUTICKÉ ANALÝZE
- Kateřina Pešlová, Petr Novák, Tomáš Obšil, Miroslav Šulc PROTEIN-PROTEINOVÉ INTERAKCE POHLEDEM HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE
- Lukáš Rambousek, Syslová Kamila, Petr Kačer DETERMINATION OF DOPAMINE AND ITS METABOLITES BY LC-ESI-MS/MS IN RAT BRAIN MICRODIALYSIS SAMPLES

<u>Václav Ranc</u> , Vladimír Halvíček, Petr Bednář and Karel Lemr	INSTRUMENTAL AND EXPERIMENTAL PARAMETERS IMPORTANT FOR CHIRAL ANALYSIS BY THE KINETIC METHOD
<u>Júlia Ričanyová</u> , Renata Gadzala- Kopciuch, Katarína Reiffová, Boguslaw Buszewski	SUPRAMOLECULAR RECOGNITION OF STEROIDS FROM BIOLOGICAL FLUIDS
<u>Andrea Staňová</u> , Jozef Marák, Soňa Žakovičová and Dušan Kaniansky	PREPARATIVE ISOTACHOPHORESIS AS A SAMPLE PRETREATMENT TECHNIQUE FOR MASS SPECTROMETRY
<u>Monika Štupavská</u> , Monika Aranyosiová, Dušan Velič	MATRICE NA BÁZE UHLÍKA V HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRII SEKUNDÁRNYCH IÓNOV PRI ANALÝZE MAKROMOLEKÚL

**ZOZNAM POSTEROV PODĽA SEKCIÍ****Sekcia 1: Analytická a fyzikálna chémia**

- |              |                                                                                                           |                                                                                                                                                              |
|--------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>1Po01</b> | Lucie Ruppenthalová, Roman Maršálek                                                                       | KONKURENČNÍ ADSORPCE TĚŽKÝCH KOVŮ NA ALTEROVANÉM UHLÍ                                                                                                        |
| <b>1Po02</b> | <u>Pavel Polcr</u> , Petr Jurečka                                                                         | POUŽITELNOST IMPLICITNÍHO MODELU ROZPOUŠTĚDLA PŘI MODELOVÁNÍ SOLVATACE POSTRANNÍCH ZBYTKŮ V PROTEINECH                                                       |
| <b>1Po03</b> | <u>Vlastimil Vyskočil</u> , Vít Prchal, Aleš Daňhel, Jiří Barek                                           | VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ NITRODERIVÁTŮ AROMATICKÝCH UHLOVODÍKŮ NA THIOLOVOU VRSTVOU MODIFIKOVANÉ VISÍCÍ RTUŤOVÉ KAPKOVÉ ELEKTRODĚ                             |
| <b>1Po04</b> | <u>Z. Kolská</u> , T. Luxbacher, M. Vilimovská, K. Voldřich, P. Slepíčka, V. Švorčík                      | SURPASS FOR SOLID POLYMER SURFACE ANALYSIS                                                                                                                   |
| <b>1Po05</b> | <u>Jakub Hraníček</u> , Václav Červený, Petr Rychlovský                                                   | STANOVENÍ ULTRASTOPOVÝCH KONCENTRACÍ ARSENU A SELENU V PITNÝCH VODÁCH METODOU ECHG-QFAAS                                                                     |
| <b>1Po06</b> | E. Smreková, K. Višacká, L. Tomáška, J. Nosek a I. Valent                                                 | OPTIMALIZÁCIA VÄZBOVÝCH PODMIENOK MITOCHONDRIÁLNEHO TELOMÉROVÉHO PROTEÍNU A TELOMÉROVÉHO OLIGONUKLEOTIDU                                                     |
| <b>1Po07</b> | <u>Petra Jančová</u> , Eva Anzenbacherová, Michal Šiller, Vladimír Křen, Pavel Anzenbacher, Vilím Šimánek | IDENTIFICATION OF PHASE II SILYBIN METABOLITES BY HPLC WITH UV DETECTION AND BY LC-MS                                                                        |
| <b>1Po08</b> | <u>Šárka Štěpánková</u> , Patrik Pařík, Markéta Kovářová a Karel Komers                                   | STANOVENÍ INDEXU PI <sub>50</sub> NOVÝCH INHIBITORŮ CHOLINESTERÁZ                                                                                            |
| <b>1Po09</b> | <u>Ján Petrovaj</u> , Taťána Gondová, Peter Kutschy, Aneta Salayová, Daniel W. Armstrong                  | ENANTIOSEPARATION OF SOME PHYTOALEXINS                                                                                                                       |
| <b>1Po10</b> | <u>Ladislav Rábara</u> , Monika Aranyosiová, Dušan Velič                                                  | ŠTÚDIUM CYKLODEXTRÍNOVÝCH VRSTIEV NA POVRCHU PODPORENÉ HMOTNOSTNOU SPEKTROMETRIU SEKUNDÁRNÝCH IÓNOV                                                          |
| <b>1Po11</b> | Silvia Stefanova, Lubomir Pikna                                                                           | PREPARATION AND APPLICATION OF CARBON NANOTUBES MODIFIED PARAFFIN IMPREGNATED GRAPHITE AND GLASSY CARBON ELECTRODE FOR DC VOLTAMMETRIC DETERMINATION OF LEAD |
| <b>1Po12</b> | Eva Kucanová, Dagmar Remeteiová, Radoslav Rusnák, Vojtech Dirner                                          | ŠTÚDIUM ENVIRONMENTÁLNE VÝZNAMNÝCH VLASTNOSTÍ POĽNOHOSPODÁRSKYCH PÔD                                                                                         |
| <b>1Po13</b> | Terézia Vojtylová                                                                                         | KVANTITATÍVNE STANOVENIE BÁRIA A MOLYBDÉNU V MONOKRYŠTÁLE WOLFRAMANU OLOVNATÉHO                                                                              |
| <b>1Po14</b> | Oľga Grančičová, Anna Olexová                                                                             | VPLYV PERTURBANTOV NA NEKATALYZOVANÚ OSCILAČNÚ REAKCIU PYROKATECHOLU S BROMIČNANOM                                                                           |
| <b>1Po15</b> | <u>Michal Zaliibera</u> , Peter Rapta, Andrej Staško, Lucia Brindzová, Vlasta Brezová                     | SPIN TRAPPING OF SO <sub>4</sub> <sup>-</sup> RADICALS; AN ALTERNATIVE ASSAY FOR RADICAL SCAVENGING CAPACITY DETERMINATION IN DIMETHYLSULFOXIDE              |

- 1Po16** Jaroslav Cihelka, Dagmar Babánková, Irena Matulková, Kristýna Sovová and Libor Juha  
OPTICAL EMISSION SPECTROSCOPY OF HIGH-POWER LASER-INDUCED DIELECTRIC BREAKDOWN IN MOLECULAR GASES AND THEIR MIXTURES: INVESTIGATION OF EARLY STAGES OF PLASMA CHEMICAL REACTIONS IN PLANETARY ATMOSPHERES
- 1Po17** Irena Matulková, Jaroslav Cihelka and Petr Kubelík  
THIS WORK WAS SUPPORTED BY THE MINISTRY OF EDUCATION, YOUTH AND SPORTS (COST MP0702), THE GRANT AGENCY OF TRANSFORM INFRARED EMISSION SPECTROSCOPY OF IMINE RADICAL GENERATED BY HOLLOW CATHODE DISCHARGE
- 1Po18** Alena Zavadilová, Dušan Vopálka, Marcela Žáková  
STANOVENÍ CHARAKTERISTIK KOMPLEXU  $Ca_2UO_2(CO_3)_3$  NA ZÁKLADĚ VYHODNOCENÍ FLUORESCENČNÍCH SPEKTER ZÍSKANÝCH POMOCÍ TRLFS
- 1Po19** Daniel Kobliha, Milan Pospíšil, Viliam Múčka  
INFLUENCING OF PROPERTIES OF MIXED OXIDE CATALYSTS BY IONIZING RADIATION
- 1Po20** Radana Kociánová, Jiří Ludvík  
ELEKTROCHEMICKÁ REDUKCE AROMATICKÝCH ALDOXIMŮ A KETOXIMŮ V BEZVODÉM DIMETHYLFORMAMIDU
- 1Po21** Petr Slovák, Libor Kvítek  
PŘÍPRAVA NANOČÁSTIC STŘÍBRA V KOMPLEXOTVORNÉM PROSTŘEDÍ
- 1Po22** Adriana Šturcová, Jiří Dybal, Pavel Schmidt  
THE ROLE OF POLYMER–WATER INTERACTIONS IN TEMPERATURE TRANSITIONS OF POLYETHERS
- 1Po23** Alice Vránková, Tereza Škramlíková, Jiří Widimský jr, Jan Škrha, Zdena Jůzová  
VALIDACE HPLC METODY STANOVENÍ METANEFRINŮ V PLAZMĚ
- 1Po24** Vlasta Sasinková, Anna Malovíková  
FTIR SPEKTROMETRIA – METÓDA NA STANOVENIE STUPŇA SUBSTITÚCIE PEKTÍNŮVÝCH DERIVÁTOV
- 1Po25** Jitka Krouská, Tereza Halasová, Filip Mravec, Miloslav Pekař  
DETERMINATION OF CRITICAL MICELLE CONCENTRATION IN HYALURONAN-SURFACTANT SYSTEM
- 1Po26** Eva Čechová, Martina Klučáková  
SOLUBILITY OF LIGNITIC AND SOIL HUMIC ACID IN WATER AND IN SOLUTIONS OF DIFFERENT SALTS
- 1Po27** Oksana Yosypchuk a Jiří Barek  
STANOVENÍ 1-NITROPYRENU, 1-AMINOPYRENU A 1-HYDROXYPYRENU VYSOKOÚČINNOU KAPALINOVOU CHROMATOGRafiÍ S ELEKTROCHEMICKOU DETEKCIÍ
- 1Po28** Lenka Němcová, Jiří Barek, Jiří Zima,  
STANOVENÍ *TRANS*-RESVERATROLU POMOCÍ HPLC S ELEKTROCHEMICKOU DETEKCIÍ
- 1Po29** Dana Deylová, Jiří Barek, Bogdan Yosypchuk  
VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ 4-NITROFENOLU A 5-NITROBENZIMIDAZOLU NA RŮZNÝCH AMALGAMOVÝCH ELEKTRODÁCH
- 1Po30** A. Chochulová, P. Alexy, P. Šimon, P. Lukáč  
THERMAL STABILITY OF POLYPROPYLENE AND POLYPROPYLENE BLENDS WITH NANOFILLERS
- 1Po31** Jana Bulíčková, Romana Sokolová, Ilaria Degano, Magdaléna Hromadová, Lubomír Pospíšil, Michal Valášek  
MECHANISM OF THE OXIDATIVE DEGRADATION OF HEMATOXYLIN
- 1Po32** Viliam Kolivoška, Michal Valášek, Lubomír Pospíšil, Romana Sokolová, Magdaléna Hromadová  
STUDY OF ADSORPTION AND ELECTROCHEMICAL PROPERTIES OF EXTENDED VIOLIGENS AT THE MERCURY-SOLUTION INTERFACE

- 1Po33** Štěpánka Lachmanová, Magdaléna Hromadová, Romana Sokolová, Lubomír Pospíšil, Stefania Giannarelli REAKTIVITA ANION RADIKÁLU BIFENOXU V PROSTŘEDÍ HOSTITELSKÝCH MOLEKUL
- 1Po34** Anna Lišková, Zuzana Slivová, Iva Kapustíková, Jozef Csöllei ŠTÚDIUM DISTRIBÚCIE POTENCIÁLNYCH LIEČIV V IZOTROPNÝCH A ANIZOTROPNÝCH ROZDEĽOVACÍCH SÚSTAVÁCH
- 1Po35** Ján Labuda BIOANALYTICAL CHEMISTRY OF NEW BIOANALYTES USING NUCLEIC ACID BIOSENSORS
- 1Po36** Tomáš Zacher, Marián Janek NANOKOMPOZITNÉ ÍLOVÉ MATERIÁLY S FLUORESCENČNÝMI VLASTNOSŤAMI NA BÁZE INTERKALOVANÉHO KAOLINITU
- 1Po37** Ján Šepelák, Dušan Velič, Dušan Lorenc, Ignác Bugár FLUORESCENCIA A MORFOLÓGIA TUHÝCH FILMOV NA BÁZE OLIGOTIOFÉNOV
- 1Po38** Marcel Lofaj, Dušan Velič FLUORESCENCIA KUMARÍNU V PROSTREDÍ HYDRATOVANÝCH SOLÍ NaCl A LiCl
- 1Po39** Michal Horčíciak, Marián Masár, Dušan Kaniansky, Peter Bel ELEKTROFORETICKÝ ČIP SO SPÁJANÝMI SEPARAČNÝMI KANÁLIKMI A ZVÝŠENOU DÁVKOVACOU KAPACITOU V STOPOVEJ ANALÝZE PITNÝCH VÔD
- 1Po40** E. Jáné, M. Žitňan, J. Šepelák, I. Bugár, O. Grančičová, D. Lorenc, D. Velič FLUORESCENČNÁ SPEKTROSKOPIA SYSTÉMU KUMARÍN/ CYKLODEXTRÍN/ MICELA
- 1Po41** Vojtech Szöcs GENERAL APPROACH TO 2D PHOTON-ECHO SIGNAL CALCULATIONS
- 1Po42** Z. Formánková, E. Jáné, M. Žitňan, Š. Toma, D. Velič, FLUORESCENCIA KUMARÍNU V IÓNOVEJ KVAPALINE
- 1Po43** Martina Toufarová BEHAVIOUR OF FULLERENES AT EXTREME CONDITIONS
- 1Po44** A. Gaál, I. Bugár, I. Capek, L. Fialová, V. Szöcs, T. Pálszegi, A. Šatka, M. Michalka, F. Uhrek FEMTOSEKUNDOVÁ ČASOVO ROZLIŠENÁ ABSORPČNÁ SPEKTROSKOPIA STRIEBORNÝCH NANOČASTÍC
- 1Po45** František Novák, Martina Šestauberová MILD DEASHING OF HUMIC ACIDS FOR SPECTROSCOPIC ANALYSES
- 1Po46** Ivan Jiranek, Jiri Barek, Vaclav Cerveny and Petr Rychlovsky DETERMINATION OF VAPOR PRESSURE OF MERCURY-BASED ELECTRODE MATERIALS USING AAS
- 1Po47** Jana Musilová, Jiří Barek, Karolina Pecková VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ NITROFENOLŮ PO JEJICH PREKONCENTRACI EXTRAKCÍ TUHOU FÁZÍ POMOCÍ BŮREM DOPOVANÉ DIAMANTOVÉ FILMOVÉ ELEKTRODY
- 1Po48** M. Žitňan, V. Szöcs, M. Janek, E. Jáné, I. Bugár, O. Grančičová, M. Aranyosiová, D. Lorenc, T. Pálszegi, D. Velič FLUORESCENCE DYNAMICS OF COUMARIN IN AQUEOUS CONFINEMENT – FROM CYCLODEXTRINE, THROUGH MONTMORILLONITE, TO MICELLE
- 1Po49** Vladimír Vrkoslav, Josef Cvačka RP-HPLC/MS ANALÝZA VOSKOVÝCH ESTERŮ
- 1Po50** Milan Valach, Silvia Fialová POROVNANIE ANTIOXIDAČNÝCH VLASTNOSTÍ RÔZNYCH DRUHŮ MÁTY (*MENTHA SP.*) POMOCOU DIFERENČNEJ PULZOVEJ VOLTAMPÉROMETRIE
- 1Po51** Jaroslav Blaško, Róbert Kubinec, Zuzana Vetríková, Ivan Ostrovský, Ladislav Soják EXPLOITATION OF CHEMOMETRIC DECONVOLUTION FOR RESOLUTION OF GAS CHROMATOGRAPHIC UNSEPARATED CONJUGATED LINOLEIC ACID ISOMERS IN MILK SAMPLES



- 1Po52** Róbert Kubinec, Jaroslav Blaško, Beáta Meľuchová, Ivan Ostrovský, Ladislav Soják VARIATIONS IN MILK FATTY ACID COMPOSITION IN EWES' COLOSTRUM DURING SUCKLING PERIOD
- 1Po53** Beáta Meľuchová, Róbert Kubinec, Jaroslav Blaško, Ivan Ostrovský, Ladislav Soják FLUCTUATION IN FATTY ACID COMPOSITION OF EWES MILK FROM DRY WINTER TO PASTURE FORAGE
- 1Po54** Vojtěch Adam, Dalibor Húska, Ondřej Zítka, Jaromír Hubálek, Libuše Trnková, Ladislav Zeman, René Kizek CIRKULUJÍCÍ NUKLOVÉ KYSELINY – ZPŮSOB VČASNÉ DETEKCE LIDSKÝCH ONEMOCNĚNÍ
- 1Po55** Olga Kryštofová, Václav Diopan, Vojtěch Adam, Josef Zehnálek, Ladislav Havel, René Kizek MULTIINSTRUMENTÁLNÍ HODNOCENÍ FYTOREMEDIÁČNÍHO POTENCIÁLU
- 1Po56** Marianna Trenčanová, Dušan Velič FLUORESCENCIA SYSTÉMOV KUMARÍN C153/B-CYKLODEXTRÍN, /SILYLOVANÝ B-CYKLODEXTRÍN A /TIOLOVANÝ B-CYKLODEXTRÍN
- 1Po57** Ján Škoviara, Dušan Velič FLUORESCENCIA KUMARÍNU VO VODNOM PROSTREDÍ HYDROGÉLU
- 1Po58** Ivan Ostrovský, Jozef Višňovský, Róbert Kubinec, Jaroslav Blaško, Beáta Meľuchová, Zuzana Vetríková CHROMATOGRAPHIC ANALYSIS OF GALACTOSE AND GALACTITOL IN URINE OF PATIENTS HANDICAPPED WITH INBORN METABOLIC DISORDERS

## Sekcia 2: Anorganická a materiálová chémia

- 2Po01** Josef Holub, Bohumil Štíbr, Petr Štěpnička and Ivana Císařová SYNTHESIS AND REDOX PROPERTIES OF SOME FERROCENYL SUBSTITUTED CARBORANES AND METALLACARBORANES
- 2Po02** E. Plevová, A. Kožušníková, L. Vaculíková THERMAL ANALYSIS, FT-IR SPECTROSCOPY AND OPTICAL MICROSCOPY AS A TOOL FOR CHARACTERIZATION OF MARBLE
- 2Po03** Drahomír Hnyk and Jan Macháček STEREOCHEMISTRY OF VARIOUS FREE BORON CLUSTERS FROM MODEL CHEMISTRIES
- 2Po04** Mario Bakardjiev, Josef Holub, Bohumil Štíbr, Petr Štěpnička and Ivana Císařová SYNTHESIS AND REDOX POTENTIALS OF ISOMERIC 1- $\eta^5$ -C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>-12-*T*-BUNH-1,2,4,12-FEC<sub>3</sub>B<sub>8</sub>H<sub>10</sub> AND 1- $\eta^5$ -C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>-10-*T*-BUNH-1,2,4,10-FEC<sub>3</sub>B<sub>8</sub>H<sub>10</sub> FERRATRICARBOLLIDES SUBSTITUTED BY ME AND PH ON THE CAGE CARBON ATOMS
- 2Po05** Kateřina Mamulová Kutláková, Vlastimil Matějka, Jana Kukutschová, Pavel Kovář OPTIMALIZACE HYDROLÝZY PŘI PŘÍPRAVĚ KOMPOZITŮ KAOLÍN/TIO<sub>2</sub>
- 2Po06** Neuwirthová L., Pěkníková V., Tomášek V. RENTGENOFLOURESCENČNÍ ANALÝZA KOMPOZITŮ KAOLÍN/TIO<sub>2</sub>
- 2Po07** Smrčková Eva, Gabčová Jana, Fellner Pavel VPLYV PRÍMESÍ NA PROCES ZRÁŽANIA MG(OH)<sub>2</sub>
- 2Po08** Radim Dostál, Zbyněk Janoušek and Ivana Císařová SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF NEW DERIVATIVES OF CLOSO-1-CB<sub>7</sub>H<sub>8</sub><sup>-</sup> ANION
- 2Po09** P. Slepíčka, Z. Kolská, N. Kasálková, J. Siegel, A. Vasina, V. Švorčík AU NANOVRSTVY NA PLAZMATICKÝ AKTIVOVANÉM PTFE
- 2Po10** A. Chaloupka, P. Šimek, T. Hubáček, J. Siegel, A. Vasina RŮST ZLATÝCH NANOVRSTEV NA HDPE A SKLE
- 2Po11** Hubáček T., Chaloupka A., Lyutakov O., Siegel J., Švorčík V. ELEKTRICKÉ VLASTNOSTI UHLÍKOVÝCH NANOVRSTEV PŘIPRAVENÝCH NAPAŘOVÁNÍM

- 2Po12** Jakub Siegel, Kateřina Bartečková, Aleš Chaloupka, Tomáš Hubáček, Petr Slepíčka, Václav Švorčík  
STUDIUM SPOJITOSTI AU NANOVRSŤEV NA POLYETHYLENU
- 2Po13** Radim Vrzal, Pavel Štarha, Alena Klanicová, Zdeněk Dvořák, Zdeněk Trávníček  
CYTOTOXICITY OF CU(II), PD(II) AND PT(II) COMPLEXES INVOLVING N6-BENZYLADENINE DERIVATIVES IN SELECTED HUMAN CANCER CELL LINES AND PRIMARY HUMAN HEPATOCYTES
- 2Po14** N. Kasálková, Z. Makajová, P. Slepíčka, L. Bačáková, M. Pařízek, V. Švorčík  
VLIV MOLEKULOVÉ HMOTNOSTI PEG NA BIOKOMPATIBILITU PE
- 2Po15** Z. Makajová, N. Kasálková, A. Macková, V. Švorčík  
FYZIKÁLNĚ–CHEMICKÉ VLASTNOSTI PE ROUBOVANÉHO PEG
- 2Po16** Pavel Bystrzycki, Petra Šulcová  
PŘÍPRAVA SLOUČENIN TYPU  $Bi_2O_3-ER_2O_3-ZRO_2$
- 2Po17** Lillian E. Johnson, Michal Valášek, Bryan Ringstrand, Zbyněk Janoušek  
MICROWAVE ASSISTED ALKYLATION OF CARBORANES. NEW METHOD OF METHYLATION OF *CLOSO*-1-CB<sub>9</sub>H<sub>10</sub><sup>-</sup> ANION AND ITS C-SUBSTITUTED DERIVATIVES.
- 2Po18** Tereza Uhlířová, Peter Barath, Martina Nádherná, Jakub Reiter\*  
PŘÍPRAVA NANOMATERIÁLŮ Z LYOTROPNÍCH KAPALNÝCH KRYSTALŮ
- 2Po19** Markéta Zikmundová, Žaneta Dohnalová, Petra Šulcová  
PEROVSKITOVÉ PIGMENTY TYPU ORTHOFERRITŮ
- 2Po20** Magdalena Kvíčalová, Josef Holub, Bohumír Grüner, Jaromír Plešek  
APCI SONDA – ÚČINNÝ NÁSTROJ PRO MĚŘENÍ HMOTNOSTNÍCH SPEKTER BOROVÝCH SANDWICHOVÝCH KOMPLEXŮ
- 2Po21** Michal Čajan & Zdeněk Trávníček  
DFT VÝPOČTY PARAMETRŮ <sup>57</sup>FE MÖSSBAUEROVY SPEKTROSKOPIE
- 2Po22** Vitásková L., Bořková K., Šulcová P.  
VLIV MINERALIZÁTORŮ NA BAREVNOST PIGMENTU CE<sub>0,9</sub>TB<sub>0,1</sub>O<sub>2</sub>
- 2Po23** Eva Proklešková, Jana Hořejší, Milena Kaufmannová, Petra Šulcová  
PŘÍPRAVA A BAREVNÉ VLASTNOSTI PIGMENTŮ TYPU (BI<sub>1-x</sub>YB<sub>x</sub>)<sub>2</sub>O<sub>3</sub>
- 2Po24** Peter Čopan, Miroslav Hnatko, Pavel Fellner, Pavol Šajgalík  
PŘÍPRAVA PÓROVITEJ SI<sub>3</sub>N<sub>4</sub> – SiO<sub>2</sub> KERAMIKY PRE BIOAPLIKÁCIE
- 2Po25** Jaroslava Haníková, Juraj Kuchár, Juraj Černák, Zdeněk Trávníček  
KOORDINAČNÉ ZLÚČENINY CU (II) S N–METYLDERIVÁTMI ETÁN–1,2–DIAMÍNU A S ANIÓNOM BF<sub>4</sub><sup>-</sup>
- 2Po26** Martin Danko, Pavol Hrdlovič, Juraj Bujdák, Dušan Chorvát, jr.  
PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF FLUORESCENT SILANES FOR MODIFICATION OF ORGANOCLEYS.
- 2Po27** Mária Lučaníková, Pavel Selucký, Magdalena Kvíčalová, Jaromír Plešek, Bohumír Grüner  
EXTRAKCE TROJMOCNÝCH RADIONUKLIDŮ KOBALT BIS(DIKARBOLLIDOVÝMI) ČINIDLY S CMPO FUNKČNÍ SKUPINOU
- 2Po28** Kolářová K., Kasálková N., Makajová Z., Švorčík V.  
METAKRYLÁTY MODIFIKOVANÉ V PLASMĚ PRO BIOAPLIKACE
- 2Po29** Štěpánka Klímková, Tomáš Pluhař, Jaroslav Nosek, Miroslav Černík  
POVRCHOVĚ MODIFIKOVANÉ NANOČÁSTICE PRO SANACE PODZEMNÍCH VOD
- 2Po30** Katarína Pastorková, Karol Jesenák, Magdaléna Kadlečíková, Michal Kolmačka, Filip Lazišťan, Miroslav Michalka  
KATALYTICKÁ SYNTÉZA UHLÍKOVÝCH NANORÚROK NA MONTMORILLONITE A ZEOLITE
- 2Po31** Katarína Pastorková, Jana Hrachová, Vladimír Štefan Fajnor  
SORPCIA IÓNOV OLOVA NA PŘÍRODNÝ A SYNTETICKÝ MONTMORILLONIT
- 2Po32** Katarína Pastorková, Jana Hrachová, Vladimír Štefan Fajnor  
CHARAKTERISTIKA PRODUKTŮ INTERAKCIE KYSELINY STEÁROVEJ S MG-A FE-MONTMORILLONITOM POMOCOUCOU DTA

- 2Po33** Peter Billik, Mária Čaplovičová MECHANOCHEMICKÁ SYNTÉZA  
NANOKRYŠTALICKÝCH OXIDOV
- 2Po34** Zuzana Repická, Ján Moncol',  
Milan Mazúr, Miroslava  
Puchoňová, Dušan Valigura SALICYLÁTOMEĎNATÉ KOMPLEXY  
S NIKOTÍNAMIDOM
- 2Po35** Aleš Stýskalík, David Škoda, Jiří  
Pinkas\*, Zdeněk Moravec NEHYDROLYTICKÉ METODY PŘÍPRAVY  
FOSFOSILIKÁTOVÝCH A TITANOSILIKÁTOVÝCH  
MATERIÁLŮ
- 2Po36** Aleš Panáček, Libor Kvítek, Robert  
Prucek, Jana Soukupová, Markéta  
Vaničková, Milan Kolář, Renata  
Večeřová, Radek Zbořil SYNTHESIS OF SILVER NANOPARTICLES AND  
STUDY OF THEIR ANTIBACTERIAL AND TOXIC  
EFFECTS
- 2Po37** Petr Praus SILVER NANOPARTICLES DEPOSITED ON  
MONTMORILLONITE
- 2Po38** Ondřej Kment, Aleš Panáček SYNTÉZA NANOČÁSTIC STŘÍBRA A STUDIUM  
JEJICH KATALYTICKÉ A ANTIBAKTERIÁLNÍ  
AKTIVITY
- 2Po39** Ladislav Habala, Christian Molitor,  
Annette Rompel SYNTÉZA A VLASTNOSTI HYDROXYCHALKÓNŮ  
A ICH KOMPLEXŮV
- 2Po40** P. Pustková, Z. Klika, P. Malý , J.  
Preclíková FLUORESCENCE STUDY OF REDUCED CHARGE  
MONTMORILLONITE COMPLEXES WITH CATIONIC  
DYES
- 2Po41** Ondřej Kozák, Petr Praus PREPARATION OF ZINC SULPHIDE PARTICLES AND  
ZNS-MONTMORILLONITE COMPOSITES
- 2Po42** Lhotka M., Fíla V., Cílová Z. TITANOSILIKÁT ETS-4 – VLIV IONTOVÉ VÝMĚNY  
NA JEHO VLASTNOSTI
- 2Po43** Pavel Štarha, Radim Vrzal, Zdeněk  
Dvořák, Zdeněk Trávníček IN VITRO CYTOTOXIC ACTIVITY OF PALLADIUM(II)  
OXALATO COMPLEXES WITH N6-BENZYL-9-  
ISOPROPYLADENINE-BASED N-DONOR LIGANDS
- 2Po44** Dalma Gyepesová, Vratislav  
Langer , Mária Kohútová , Aladár  
Valent CRYSTAL STRUCTURE OF DIMERIC  
(ISOQUINOLINE)(N-SALICYLIDENE-D,L-  
GLUTAMATO)COPPER(II) ETHANOLATE
- 2Po45** Lucia Andrežalová, Zdeňka  
Ďuračková, Eva Cibíková, Aladár  
Valent ÚČINOK MEĎNATÝCH KOMPLEXŮ TYPU  
SCHIFFOVÝCH ZÁSAD NA MECHANIZMUS  
POŠKODENIA DNA
- 2Po46** Darina Ondrušová, Tatiana  
Bazyláková, Mariana Pajtášová,  
Slávka Lalíková, Milan Olšovský STUDY OF RUBBER COMPOUNDS WITH ADDITION  
OF ZEOLITE
- 2Po47** Pajtášová Mariana, Lalíková  
Slávka, Ondrušová Darina,  
Bazyláková Tatiana, Olšovský  
Milan CHARACTERISTICS OF INORGANIC FILLERS AND  
THEIR APPLICATION IN RUBBER TECHNOLOGY
- 2Po48** K. Rubešová, O. Smrčková, D.  
Sýkorová, V. Jakeš, T. Hlásek, P.  
Vašek POUŽITÍ EDTA A TEA JAKO CHELATAČNÍCH  
ČINIDEL PŘI PŘÍPRAVĚ BIZMUTOVÝCH  
SUPRAVODIČŮ METODOU SOL-GEL
- 2Po49** Vilém Bartůněk, Olga Smrčková PREPARATION AND SIZE CONTROL OF CERIA  
NANOPARTICLES
- 2Po50** Herzogová Lenka, Fuitová Lucie,  
Doušová Barbora, Lhotka Miloslav,  
Koloušek David, Grygar Tomáš,  
Machovič Vladimír POVRCHOVÁ MODIFIKACE ALUMINOSILIKÁTŮ  
S VYUŽITÍM K ADSORPČNÍMU ODSTRAŇOVÁNÍ  
TOXICKÝCH OXOANIONTŮ AS, SE
- 2Po51** Lucie Fuitová, Lenka Herzogová,  
Barbora Doušová, Vladimír  
Machovič, David Koloušek, Tomáš  
Grygar, Miloslav Lhotka SORPCE OXOANIONTŮ AS/SE NA MODIFIKOVANÉ  
JÍLOVÉ MINERÁLY: SORPČNÍ KAPACITA  
A ÚČINNOST, MECHANIZMUS SORPCE

- 2Po52** Jan Rohlíček, Michal Hušák, Bohumil Kratochvíl FOXGRID A CRYSTALCMP
- 2Po53** M. Ostrčil, L. Mastný PŘÍPRAVA RUTILOVÝCH ZÁRODKŮ ZA ZVÝŠENÉHO TLAKU
- 2Po54** A. Vasina, P. Slepíčka, P. Sajdl, V. Švorčík VLIV PLAZMATICKÉ MODIFIKACE POLYPROPYLENU NA VLASTNOSTI DEPONOVANÝCH AU VRSTEV
- 2Po55** Tomáš Pluhař, Štěpánka Klímková, Jaroslav Nosek, Miroslav Černík LABORATORNÍ STUDIUM VYUŽITELNOSTI ŽELEZNÝCH NANOČÁSTIC PRO SANACE PODZEMNÍCH VOD
- 2Po56** Zora Bazelová, Ladislav Pach, Jana Kozánková, Peter Bugaj VPLYV SURFAKTANTU NA SADROVÚ PENU
- 2Po57** Michal Kačenka, Ondřej Kaman, Jan Kotek, Lukáš Falteisek, Jan Černý, Daniel Jiráček, Jaroslav Kupčík, Pavla Jendelová, Ivan Lukeš, Emil Pollert DUAL MRI AND FLUORESCENCE PROBE BASED ON MANGANESE PEROVSKITE NANOPARTICLES FOR CELLULAR LABELLING
- 2Po58** Ondřej Kaman, Ivana Císařová David Havlíček UREA BASED COMPOUNDS AS SCAFFOLD FOR GEOMETRIC CONTROL OF HYDROGEN BONDED NETWORKS OF ANIONS
- 2Po59** Josef Stejskal, Vlastimil Brožek, Pavel Ctibor, Karel Neufuss, Michal Novák REAKTIVNÍ PLAZMOVÁ DEPOZICE KARBIDU BORU S TITANEM
- 2Po60** Marta Mádlová, Pavel Vojtíšek, Zuzana Kotková, Ivan Lukeš TETRAAZAMACROCYCLES ON CALIX[4]ARENE SCAFFOLD AND THEIR LANTHANIDE COMPLEXES

### Sekcia 3: Organická chémia a polyméry

- 3Po01** David Nečas a Martin Kotora OD ŽELEZA K NIKLU – CESTA PLNÁ PŘEKVAPENÍ
- 3Po02** Jiří Schimer, Ramon Rios Torres and Jan Veselý HIGHLY ENANTIOSELECTIVE ORGANOCATALYTIC SYNTHESIS OF PIPERIDINES. FORMAL SYNTHESIS OF (-)-PAROXETINE
- 3Po03** Jiří Kulhánek, Filip Bureš SYNTÉZA KONJUGOVANÝCH SYSTÉMŮ S BORONESTEROVOU FUNKCÍ
- 3Po04** Filip Bureš, Jiří Kulhánek, Oldřich Pytela CHROMOFORY NA BÁZI IMIDAZOL-4,5-DIKARBONITRILU
- 3Po05** Pavel Mokrejš, Dagmar Janáčková, Vladimír Vašek, Pavol Šujan MODIFIKACE VLASTNOSTÍ KOLAGENNÍHO HYDROLYSÁTU
- 3Po06** Patrik Pařík, Josef Jansa NEW CARBAMATES BASED ON 2-PHENYLIMIDAZOLINE
- 3Po07** Petr Šimůnek, Markéta Svobodová, Aleš Růžička, Vladimír Macháček REAKTIVITA 1-CYKLOPROPYL-3-FENYLAMINOHEX-2-EN-1-ONU VŮČI ETHOXYKARBONYLBENZENDIAZONIUM-TETRAFLUOROBORÁTŮM
- 3Po08** Jiří Hanusek, Vladimír Macháček ACID-CATALYZED DECOMPOSITION OF EXTREMELY STABLE 1-(2,1-BENZISOTHIAZOL-3-YL)-3-PHENYLTRIAZENES
- 3Po09** Svobodová Markéta, Bárta Jan, Josefík František, Šimůnek Petr, Macháček Vladimír, Lyčka Antonín, Bertolasi Valerio  $\beta$ -ENAMINONY A  $\beta$ -ENAMINOAMIDY JAKO VÝCHOZÍ LÁTKY PŘI SYNTÉZE BOROVÝCH HETEROCYKLŮ
- 3Po10** Pavel Drabina, Petr Funk, Miloš Sedlák SYNTÉZA A KATALYTICKÉ VLASTNOSTI 6-(4-ALKYL-4,5-DIHYDRO-1,3-OXAZOL-2-YL)PYRIDIN-2-KARBOXYLÁTŮ

- 3Po11** Anton Popelka, Igor Novák, Marián Lehocký, Ivan Chodák, Angela Kleinová, Marián Števiar VLASTNOSTI POLYETYLÉNU OČKOVANÉHO ANTIBAKTERIÁLNYMI LÁTKAMI S VYUŽITÍM NÍZKOTEPLONEJ PLAZMY
- 3Po12** Ivan Lukáč, Csaba Kósa, Richard G. Weiss PHOTO-CROSSLINKING OF POLYETHYLENE (PE) BY MONO- AND DI-ACETOPHENONE DERIVATIVES AND THEIR PRECURSORS. NORRISH TYPE II REACTION IN PE MATRIX.
- 3Po13** Jan Svoboda, Vítězslav Zima, Klára Melánová, Ludvík Beneš, Ya-Ching Yang, Sue-Lein Wang NOVÉ NÍZKODIMENZIONÁLNI ANORGANICKO-ORGANICKÉ HYBRIDNÍ MATERIÁLY NA BÁZI FOSFONÁTŮ MĚDI: SYNTÉZA A STRUKTURA
- 3Po14** Maroš Bella and Viktor Milata X-NITRO SUBSTITUTED 2-AMINO BENZIMIDAZOLES AS PRECURSORS OF FOOD BORNE CARCINOGENS
- 3Po15** Tomáš Motka, Jaromír Šňupárek STUDIUM DIFUZE V ČÁSTICOVÝCH KOMPOZITECH NA BÁZI EPOXIDOVÉ MATRICE
- 3Po16** Elena N. Konyushenko, Jaroslav Stejskal, Miroslava Trchová PREPARATION OF A CONDUCTING POLYMER, POLYANILINE, IN THE ORGANIC-SOLVENT SUSPENSIONS
- 3Po17** Novotný Michal, Vávrová Kateřina, Hrabálek Alexandr TRANSKARBAM 12: VLIV PH NA TRANSDERMÁLNÍ PERMEACI TEOFYLINU A HYDROKORTISONU.
- 3Po18** Janigová Ivica, Porubská Mária, Chodák Ivan VPLYV ŽIARENIA NA VLASTNOSTI PA-6 KOMPOZITOV
- 3Po19** Jozefína Žúžiová, Peter Šafář and Štefan Marchalín DIASTEREOSELECTIVE APPROACH TO TETRAHYDROFUROINDOLIZIDINOLS
- 3Po20** Janušová Barbora, Lorenc Petr, Vávrová Kateřina, Hrabálek Alexandr KRÁTKÉ ANALOGY CERAMIDŮ A JEJICH VLIV NA ORGANIZACI LIPIDŮ KOŽNÍ BARIÉRY
- 3Po21** Eva Vavříková, Jarmila Vinšová, Jana Mandíková, Jiřina Stolaříková VLIV CHITOSANU NA ANTIMYKOBAKTERIÁLNÍ ÚČINEK A TOXICITU ISONIAZIDU
- 3Po22** Petrlíková Eva, Waisser Karel, Dufková Ida, Vejsová Marcela, Kaustová Jarmila, Stolaříková Jiřina NOVÁ POTENCIÁLNÍ LÉČIVA NA BÁZI KVARTÉRNÍCH AMONIOVÝCH SOLÍ
- 3Po23** Marcela Chmielová, Pavel Pazdera POUŽITÍ HETEROPOLYANIONTŮ IMOBILIZOVANÝCH NA POLYMERNÍCH NOSIČÍCH PŘI OXIDACI PYRIDINU A JEHO ANALOGŮ
- 3Po24** Dana Němečková, Barbora Andělová, Pavel Pazdera VYUŽITÍ PIPERAZINU PRO MEZIFÁZOVÉ KATALYTICKÉ SYSTÉMY
- 3Po25** Barbora Andělová, Dana Němečková, Pavel Pazdera NOVÝ IMOBILIZOVANÝ KATALYZÁTOR PRO KATALÝZU FÁZOVÝM PŘENOSEM
- 3Po26** Tichotová Lucie, Pour Milan, Kuneš Jiří, Šenel Petr NOVÉ DERIVÁTY KORUSKANONU A : SYNTÉZA A JEJICH BIOLOGICKÉ HODNOCENÍ
- 3Po27** Jan Marek, Bohuslav Doležal , Kamil Kuca OPTIMALIZACE SYNTÉZY OBIDOXIMU
- 3Po28** Marian Buchlovič, Stanislav Man, Zdeněk Kříž, Milan Potáček ALLENYLOXIME BASED ONE-POT APPROACH TO FUNCTIONALYZED CYCLIC NITRONES
- 3Po29** Petr Holý, Michal Buchta, Jiří Rybáček, Jiří Závada THIAMAKROCYKLY PRO KOMPLEXACI FULLERENŮ
- 3Po30** Patrik Sobolčiak, Marek Stach, Peter Kasák, \* Dušan Chorvát, Jr., Igor Lacík\* URČENIE KINETICKÝCH PARAMETROV RADIKÁLOVEJ POLYMERIZÁCIE SULFOBETAÍNOVÝCH METAKRYLÁTOVÝCH MONOMÉROV VO VODNOM PROSTREDÍ
- 3Po31** František Šeršeň, Martin Walko, Nikoleta Taitiova ANTIOXIDAČNÉ VLASTNOSTI NIEKTORÝCH HYDROXYL DERIVÁTOV IMÍNOV.
- 3Po32** Alena Fišerová, Petr Antoš PŘÍPRAVA NÁTĚROVÝCH HMOT S VYUŽITÍM PLNIV NA BÁZI KALCINOVANÝCH KAOLÍNŮ

- 3Po33** Ondřej Soukup, Kamil Kuča, Kamil Musílek, Daniel Jun., Jiří Cabal, Jiří Kassa ANTIDOTA OTRAV ORGANOFOSFÁTY-VÝVOJ NOVÝCH LÉČIV
- 3Po34** Jan Kučka, Martin Hrubý, Miroslav Vetrík, Ondřej Lebeda NOVÝ PŘÍSTUP K RADIOISOTOPICKÉMU ZNAČENÍ POLYMERŮ
- 3Po35** Monika Tvrdoňová, Miroslava Martinková and Jozef Gonda STEREOSELECTIVE SYTHESIS OF NEW SPIRO NUCLEOSIDES USING AZA-CLAISEN REARRANGEMENT
- 3Po36** Aleš Marek, Jiří Kulhánek, Filip Bureš PŘEMOSTĚNÉ IMIDAZOLY, SYNTÉZA OPTICKY AKTIVNÍCH DERIVÁTŮ PINCERŮ A CYKLOFANŮ ODVOZENÝCH OD AMINOKYSELIN
- 3Po37** Martin Danko a Pavol Hrdlovič PRÍPRAVA A SPEKTRÁLNA CHARAKTERIZÁCIA KUMARÍNOVÝCH FLUORESCENČNÝCH ZNAČIEK VIAZANÝCH SO STÉRIČKY TIENENÝM AMÍNOM
- 3Po38** Zuzana Nógellová, Ivan Chodák VLASTNOSTI KOMPOZITOV NA BÁZE NÍZKOHUSTOTNÉHO POLYETYLÉNU S HYDROXIDOM HOREČNATÝM.
- 3Po39** Jiří Krupka CYKLOADIČNÍ REAKCE V SYSTÉMU CYKLOPENTADIEN – ISOPREN
- 3Po40** Eva Papajová, Zuzana Kroneková, Martin Danko, Igor Krupa, Dušan Chorvát Jr., Igor Lacík PRÍPRAVA A VLASTNOSTI EXTERNE GÉLOVANÉHO ALGINÁTOVÉHO HYDROGÉLU
- 3Po41** Eliška Bílková, Aleš Imramovský a Miloš Sedlák NOVÝ CÍLENÝ KONJUGÁT NYSTATIN – STAR POLY(ETHYLENGLYKOL) CITLIVÝ K B-GLUKOSIDÁZÁM
- 3Po42** Jana Kovářová, Jiří Podešva SELF-STABILIZED LIQUID POLYBUTADIENES
- 3Po43** Martin Skalický, Vendula Kelbichová, Jaroslav Kvíčala FLUOROVÉ IMIDAZOLIOVÉ SOLI A NHC LIGANDY
- 3Po44** Veronika Fraňková, Martin Holan, Martin Skalický, Markéta Rybáčková, Jaroslav Kvíčala FLUOROVÉ TRIPYRAZOLYLMETHANY
- 3Po45** Martin Walko, Norbert Varga A THREE STATE PHOTOCROMIC SWITCH
- 3Po46** Marek Stach, Peter Kasák, Zuzana Kroneková, Dušan Chorvát Jr., Igor Lacík ELECTROGRAFTING – A POWERFUL TECHNIQUE FOR MODIFICATION OF ELECTROCONDUCTIVE SURFACES
- 3Po47** Dávid Maliňák, Miroslava Martinková and Jozef Gonda NEW AMINO-ANALOGS OF SHIKIMIC ACID AS POTENCIAL NEURAMINIDASE INHIBITORS
- 3Po48** Eva Gajdošíková, Miroslava Martinková and Jozef Gonda MW-INDUCED CLAISEN REARRANGEMENT IN THE SYSTEMS WITH COVALENTLY BONDED IONIC LIQUID
- 3Po49** Jana Paterová, Ondřej Kysilka, Martin Skalický, Markéta Rybáčková, Jaroslav Kvíčala SYNTÉZA A APLIKACE BIS(POLYFLUORPOLYALKOXY)IMIDAZOLIOVÝCH SOLÍ
- 3Po50** Jan Merna, Jana Kredatusová, Jan Sýkora, Jiří Pinkas PHENYLSILANE POLYMERIZATION CATALYZED BY TITANIUM COMPLEXES
- 3Po51** Gabriela Kolláriková,<sup>1</sup> Igor Lacík,<sup>1</sup> David Hunkeler,<sup>2</sup> Meirigeng Qi,<sup>3</sup> José Oberholzer,<sup>3</sup> Dušan Chorvát Jr. STUDY OF SA – CS /PMCG CAPSULES PROPERTIES PREPARED BY USING TWO DIFFERENT SODIUM ALGINATES
- 3Po52** Eva Schütznerová, Petr Cankar VYUŽITÍ DERIVÁTU BROMACETOFENONU PRO SYNTÉZU HETEROCYKlickÉHO SYSTÉMU PODOBNÉHO KYSELINÉ TETRAHYDROLISTOVÉ
- 3Po53** Alena Uhríková, Beáta Oroszová, Miroslava Martinková, Jozef Gonda STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA POLÁRNEJ ČASTI MYCESTERICÍNOV D, F

- 3Po54** Jakub Stýskala, Petr Cankař, Petr Bednář  
PREPARATION OF STANDARTS FOR MONITORING CHEMICAL WARFARE AGENTS, THEIR PRECURSORS AND METABOLITES
- 3Po55** Jozef Kollár, Štefan Chmela, Pavol Hrdlovič  
NOVEL FLUORESCENT PROBES BASED ON 1,8-NAPHTHALIMIDES: INTRAMOLECULAR QUENCHING BY MONO- AND BI-NITROXIDES
- 3Po56** Karel Zelinka, Jan Šimbera a Pavel Pazdera  
INOVACE VÝROBY ETHANDINITRILU
- 3Po57** Marek Baráth, Ján Hirsch and Igor Tvaroška  
SYNTHESIS OF D-PSICOSE BASED INHIBITORS OF GLYCOSYLTRANSFERASES
- 3Po58** M. Matulova, P. Capek, J. Kozák, L. Navarini, F. Suggi-Liverani  
POLYSACCHARIDES OF INSTANT COFFEE POWDER OF *COFFEA ARABICA*: AN ARABINOGALACTAN-PROTEIN
- 3Po59** J. Turjan, M. Drábik, P. Capek, P. Magdolen, J. Švec  
CHARACTERIZATION OF STARCH AND ITS MONO AND HYBRID DERIVATIVES BY THERMAL ANALYSIS AND FT-IR.
- 3Po60** M. Šutovská, P. Capek, G. Nosáľová, S. Fraňová, E. Prisenžňáková  
COUGH SUPPRESSIVE EFFECT OF *ALTHAEA* RHAMNOGALACTURONAN IN GUINEA PIGS TEST SYSTEM
- 3Po61** A. Vincze, R. Lupták, K. Hušeková, M. Michalka, E. Dobročka, K. Fröhlich  
HIGH  $\kappa$ /SI SEMICONDUCTOR STRUCTURES IN MICROELECTRONICS
- 3Po62** Lucia Učňová, Dušan Chorvát Jr., Igor Lacík  
FREE RADICAL POLYMERIZATION OF WATER-SOLUBLE MONOMERS WITH DIFFERENT CHEMICAL BEHAVIOR IN NON-AQUEOUS PHASE BY PLP-SEC METHOD
- 3Po63** L. Drajna, J. Imrich, S. Hamuľáková, P. Kristian  
SYNTÉZA NOVÝCH GLYKOKONJUGÁTOV TAKRÍNOVÉHO TYPU AKO POTENCIÁLNYCH ALZHEIMEROVÝCH LIEČIV
- 3Po64** Richard Ševčík, Pavel Pazdera  
VIMOBILIZOVANÉ KATALYZÁTORY PRO HYDROKYANACE
- 3Po65** Zdeňka Kovářová, Jiří Domlátil, Štěpán Huber, Libor Mastný  
VLIV OXIDU WOLFRAMOVÉHO A MOLYBDENOVÉHO NA ODOLNOST PVC VŮČI POVĚTRNOSTNÍMU STÁRNUTÍ
- 3Po66** R. Kalousková, M. Pešek, R. Slavětínská, L. Mastný, M. Marek  
POUŽITÍ METHYLESTERU ŘEPKOVÉHO OLEJE VE SMĚSÍCH PVC
- 3Po67** O. Novotný, L. Mastný, M. Plešková, R. Kalousková  
VLIV POVRCHOVÉ ÚPRAVY ANATASU NA TEPELNOU A SVĚTELNOU STABILITU SMĚSÍ PVC
- 3Po68** Jana Doháňošová, Lucia Hlavínová, Angelika Lásiková, Tibor Gracza  
DOMINO REACTION: PALLADIUM(II)-CATALYSED CYCLISATION OF UNSATURATED POLYOLS AND CROSS-COUPPING
- 3Po69** Marek Klučiar, Rita Ferreira, Baltazar de Castro and Uwe Pischel  
MODULAR FUNCTIONAL INTEGRATION OF A TWO-INPUT INH LOGIC GATE WITH A FLUOROPHORE-SPACER-RECEPTOR<sub>1</sub>-SPACER-RECEPTOR<sub>2</sub> CONJUGATE<sup>1</sup>
- 3Po70** Oľga Karľubíková, Tibor Gracza  
PALLADIUM(II)- CATALYSED OXYCARBONYLATION OF ALKENE-□□-DIOLS
- 3Po71** Agnesa Fiedlerová, Štefan Chmela, Ivica Janigová, Igor Novák, Eberhard Borsig  
SOLID PHASE GRAFTING OF IPP POWDER WITH METHACRYLATES
- 3Po72** A. Marcinčin, M. Hricová, K. Marcinčin, A. Hoferiková  
THERMAL AND MECHANICAL PROPERTIES OF METALLOCENE POLYPROPYLENE FIBRES

- 3Po73** Slavomíra Husárová, Mickael Vaïtilingom, Martine Sancelme, Mária Matulová, Anne-Marie Delort  
PRODUCTION OF CELLOBIONIC ACID BY A *BACILLUS* STRAIN ISOLATED FROM CLOUD WATER
- 3Po74** Ján Lokaj, Viktor Kettmann, Viktor Milata, Tomáš Solčan  
CRYSTAL AND MOLECULAR STRUCTURE OF TWO PARENT BENZIMIDAZOLE COMPOUNDS
- 3Po75** Alena Hoferiková, Anton Marcinčin, Andrej Rusnák, Marcela Hricová  
VPLYV MONTMORILONITU NA MORFOLÓGIU A ŠTRUKTÚRU KOMPOZITNÝCH VLÁKIEN
- 3Po76** Monika Szymczyk, Piotr Mlynarz, Paweł Kafarski  
VFUNCTIONALIZED BIS(TREN) CRYPTANDS
- 3Po77** Miroslav Ludwig, Jiří Kulhánek, Filip Bureš  
CHIRÁLNÍ LIGANDY TYPU TERPEN-IMIDAZOL: SYNTÉZA A VLASTNOSTI
- 3Po78** Ludmila Hřčková, Štefan Chmela, Jozef Kollár  
UTILIZATION OF FLUORESCENCE MARKED REGULATOR IN NITROXIDE MEDIATED POLYMERIZATION

**Sekcia 4: Vyučovanie a história chémie**

- 4Po01** Aleš Imramovský, Jana Dostálová, Martin Zdráhal  
INOVAČE LABORATORNÍCH ÚLOH Z KAPALINOVÉ A PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE NA PEDAGOGICKÉ FAKULTĚ UHK
- 4Po02** Jan Chyba, Petr Ostřížek, Jiří Pinkas\*  
TERMICKÁ ANALÝZA VE VÝUCE ANORGANICKÉ A MATERIÁLOVÉ CHEMIE

**Sekcia 5: Potravinárstvo, životné prostredie a biotechnológia**

- 5Po01** Veronika Mlejová, Martin Adam\*, Petra Pavlíková, Petr Dobiáš, Karel Ventura  
APLIKACE MIKROEXTRAKČNÍ METODY MEPS PRO ANALÝZU VITAMINU C V NÁPOJÍCH
- 5Po02** Pavel Bláha, Viliam Múčka, Václav Čuba  
VÝVOJ METODIKY SLEDOVÁNÍ RŮSTOVÝCH KŘÍVEK POD VLIVEM IONIZUJÍCÍHO A UV ZÁŘENÍ
- 5Po03** Svatopluk Sukop, Pavel Mokrejš, Karel Kolomazník  
REDUKCE VOLNÉHO FORMALDEHYDU VE FENOLFORMALDEHYDOVÉ PRYSKYŘICI PŘÍDAVKEM KERATINOVÉHO HYDROLYZÁTU
- 5Po04** Barbara Malinowska, Barbara Lejczak, Paweł Kafarski  
DYSSYMMETRIZATION OF 1,3- AND 1,4-BIS[(DIETHOXYPHOSPHORYL)HYDROXYMETHYL]BENZENE *DI*-BUYTL ESTERS BY LIPASES FROM VARIOUS SOURCES
- 5Po05** Petr Čech  
WEBOVSKÝ PROHLÍŽEČ FORMÁTU MMCIF
- 5Po06** J. Palarčík, A. Nemrahová  
ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD Z VÝROBY VÝBUŠNIN POMOCÍ ADSORPCE
- 5Po07** D. Wiczorek, J. Lipok, P. Kafarski  
THE METHODS OF STUDIES OF PHOSPHONIC XENOBIOTICS BIODEGRADATION
- 5Po08** Pavel Rauch, Martina Blažková, Ladislav Fukal  
MOŽNOSTI DETEKCE ENTEROBACTER SAKAZAKII
- 5Po09** J. Mizera, M. Havelcová, V. Machovič, L. Borecká, I. Krausová  
KOMBINOVANÉ SORBENTY KOVŮ NA BÁZI NÍZKOENERGETICKÝCH UHLÍ A CHITOSANU
- 5Po10** Kryštof Dibusz  
REGISTRATION, EVALUATION, AUTHORISATION AND RESTRICTION OF CHEMICAL SUBSTANCES – ELECTRONIC SUPPORT SYSTEM
- 5Po11** Stanislava Pavlíková, František Šeršeň Karol Jesenák, Ivica Sigmundová  
FOTOKATALYTICKÝ ROZKLAD 4-CHLÓRFENOLU POMOCOU MONTMORILLONITU S INKORPOROVANÝM AMONIÓVÝMI SOLAMI STYRYLBEZOTIAZOLU



- 5Po12** Gordon K. Gomba, Andriy Synytsya, Jana Čopíková, Michal Tomšovský STRUKTURNÍ CHARAKTERIZACE POLYSACHARIDŮ DŘEVOKAZNÝCH HUB RODŮ PHELLINUS A INONOTUS
- 5Po13** Michaela Pečová, Marek Šebela, Ludmila Zajoncová Zdenka Marková, Radek Zbořil, Jan Čuda, Kateřina Kluchová and Dalibor Jančík A COVALENT IMMOBILIZATION OF PROTEOLYTIC ENZYMES ON MAGNETIC NANOPARTICLES ISOLATED FROM MAGNETOTACTIC BACTERIA
- 5Po14** Tibor Maliar, Mária Maliarová, Katarína Bugárová, Petra Černá, Stanislav Šilhár ANTIOXIDANT ACTIVITIES OF THE SELECTED MATRIX OF ANTIOXIDANTS
- 5Po15** Doktorová, M. , Vozár, I. ASPEKTY VÝŽIVY (VYŠŠIE KARBOXYLOVÉ KYSELINY) U PACIENTOV S CYSTICKOU FIBRÓZOU
- 5Po16** Vozár I., Doktorová M. STANOVENIE F2-IZOPROSTANOV METÓDOU PLYNOVEJ CHROMATOGRAFIE V SÉRE
- 5Po17** Dvořáková Terezie, Čarnecká Martina, Márová Ivana, Kubáčková Martina PRODUCTION OF CAROTENOIDS BY RED YEASTS CULTIVATED ON VARIOUS WASTE SUBSTRATES
- 5Po18** Obruča Stanislav, Márová Ivana THE INFLUENCE OF SELECTED STRESS FACTORS ON POLY(3-HYDROXYBUTYRATE) BIOSYNTHETIC PATHWAY AND ITS REGULATION ON ENZYMATIC LEVEL IN *WAUTERSIA EUTROPHA*
- 5Po19** Duroňová Kateřina, Ferdová Jitka, Dvořáková Terezie, Márová Ivana CHANGES OF ACTIVE SUBSTANCES IN TWO APPLE VARIETIES DURING LONG-TERM STORAGE UNDER VARIOUS CONDITIONS
- 5Po20** Ondruška Vladimír, Matoušková Petra, Márová Ivana, Obruča Stanislav PRODUCTION OF EXTRACELLULAR POLYSACCHARIDE PULLULAN BY STRESSED *AUREOBASIDIUM PULLULANS* CELLS

**Sekcia 6: CHEMPROGRESS**

- 6Po01** Jan Patera, Jiří Krupka, Květa Jiráťová, Nataliya Murafa VLIV PODMÍNEK PŘÍPRAVY PD/AL<sub>2</sub>O<sub>3</sub> NA VÝSLEDNOU VELIKOST ČÁSTIC PD
- 6Po02** Jiří Krupka, Josef Pašek, Tomáš Herink, Kamil Štěpánek MOŽNOSTI ROZVOJE VÝROB CHEMICKÝCH SPECIALIT NA BÁZI DICYKLOPENTADIENU V ČESKÉ REPUBLICE
- 6Po03** Jiří Trejbal SYNTÉZA 4,4'-METHYLENDIANILINU NA ZEOLITOVÉM KATALYZÁTORU
- 6Po04** Jan Videnský, David Gabriš, Ivona Sedlářová, Jana Jiroušová VYUŽITÍ APATITU KOVDOR PŘI VÝROBĚ KOMBINOVANÝCH HNOJIV
- 6Po05** Eduard Buzetzki, Katarína Švaňová, Zuzana Cvendrošová, Jozef Mikulec, Ján Cvendroš VLASTNOSTI KVAPALNÝCH BIOPALÍV Z KRAKOVANIA OLEJOV A TUKOV
- 6Po06** Daniel Haško, Monika Stupavská, Monika Aranyosiová, Dušan Velič VYUŽITIE ATÓMOVEJ SILOVEJ MIKROSKOPIE PRI CHARAKTERIZÁCII UHLÍKOVÝCH NANORÚROK A FULERÉNU

**PLENÁRNA PREDNÁŠKA****PP****DIAGNOSTICKÉ A TERAPEUTICKÉ  
VYUŽITIE SULFÓNAMIDOV AKO  
INHIBÍTOROV KARBONICKÝCH ANHYDRÁZ**

Jaromír Pastorek, Silvia Pastoreková

*Virologický ústav SAV, Slovenská akadémia vied,  
Dúbravská cesta 9, 845 05 Bratislava*

Karbonické anhydrázy (carbonic anhydrases, CA) sú zinkové metalloenýmy, ktoré katalyzujú reverzibilnú hydratáciu CO<sub>2</sub> na bikarbonátový ión a protón a prostredníctvom tejto aktivity sa zúčastňujú na transporte iónov a regulácii pH. CA sú prítomné takmer vo všetkých živých organizmoch a existujú v mnohých isoformách zaradených do piatich génových rodín. V genóme človeka je kódovaných 15 izoformami  $\alpha$  rodiny, s ktorých 12 je enzymaticky aktívnych. Nachádzajú sa prevažne v metabolicky aktívnych tkanivách, kde sa podieľajú na rôznych fyziologických procesoch. Na rozdiel od ostatných izoformami, prítomnosť CA IX je viazaná na nádorové tkanivá. V nich zohráva dôležitú úlohu pri regulácii pH v nedostatočne oksyložených (tzv. hypoxických) oblastiach. V dôsledku hypoxie nádorové bunky prechádzajú čiastočne na anaeróbny metabolizmus a generujú množstvo kyslých produktov (kyselina mliečna, protóny, CO<sub>2</sub>). Bunky sa týchto produktov zbavujú do vonkajšieho prostredia, pretože inak by neboli schopné udržať neutrálne vnútrobunkové pH a prežiť. Ich mikroprostredie sa zároveň oksyluje, čo vedie k zvýšenej schopnosti invadovať a metastázovať. CA IX k tomuto procesu prispieva tým, že na povrchu buniek účinne katalyzuje hydratáciu CO<sub>2</sub>, čím produkuje protóny a znižuje vonkajšie pH a tiež bikarbonátové ióny, ktoré dodáva priamo transportérom na prepravu do bunky a neutralizáciu vnútrobunkového pH. Inhibícia tejto aktivity CA IX pomocou sulónamidov a ich derivátov vedie k zablokovaniu pH regulácie v hypoxických bunkách a ich zhoršenému prežívaniu, čo sa prejavuje na spomalenom raste nádorových xenograftov. Schopnosť inhibitorov viazať sa iba na hypoxické bunky a redukovať rast nádorov poskytuje možnosť na ich využitie v in vivo zobrazovaní a terapii hypoxických nádorov, ktoré sú veľmi agresívne. Súčasný výskum sa zameriava na vývoj a testovanie takých sulfónamidov a ich derivátov, ktoré by boli selektívne pre CA IX, čím by sa zvýšil ich protinádorový účinok a zmenšili vedľajšie efekty.

**POZVANÉ PREDNÁŠKY****PP1****SVETELNÁ EMISIA Z TEPLOM INICIOVANEJ  
OXIDÁCIE POLYMÉROV A JEJ VZŤAH K  
ZVÝŠKOVEJ STABILITE POLYMÉRNEHO  
MATERIÁLU**Jozef Rychlý, Lýdia Rychlá*Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 842 36  
Bratislava*

Oxidácia polymérov je sprevádzaná vyššou alebo nižšou intenzitou svetelnej emisie (chemiluminiscencie), ktorá závisí od zvyškovej kvality polyméru, teploty, koncentrácie kyslíka v okolí prostredí, od prítomnosti aditív, stabilizátorov, od počiatkovej priemernej mólovej hmotnosti ako aj od jej distribúcie. Doterajšie štúdie chemiluminiscencie pri oxidácii syntetických polymérov a polysacharidov sú pritom na úrovni formulácie hodnovernejších mechanizmov vzniku svetelnej emisie, ktorá túto oxidáciu doprevádza. Zdá sa, že najvýraznejšia svetelná emisia pochádza z hydroperoxidov nachádzajúcich sa v  $\beta$  – polohách k elektrón-akceptórnym skupinám na makromolekulovom reťazci, ako sú karbonyly, karboxyly, amidy alebo hydroxyly. Aj keď také hydroperoxydy tvoria obyčajne iba malú frakciu v polyméri pri porovnaní s izolovanými hydroperoxidmi, ich koncentrácia koreluje s celkovou koncentráciou hydroperoxidov a tým aj s intenzitou chemiluminiscenčného signálu. Metóda chemiluminiscencie tak poskytuje užitočné informácie o rozsahu stabilizácie polyméru, o vplyve počiatkovej mólovej hmotnosti na oxidáciu, ako aj o rýchlosti degradácie polyméru. V predloženej práci sa budú prezentovať výsledky, získané zo štúdia chemiluminiscencie na pracovisku autorov, ktoré s uvedenou tematikou má jednu z najrozsiahlejších skúseností na svete. Pozornosť bude zameraná na vzťahy medzi intenzitou svetelnej emisie a rýchlosťou oxidácie u polyolefínov, polydiénov a celulózy ale aj niektorých ésterov kyseliny olejovej, linoleovej a linolénovej, pričom chemiluminiscencia bude meraná v oboch, izotermickom a neizotermickom režime.

**PP2****POLYFENOLY – OD FYTOCHEMIE  
K FUNKČNÍ POTRAVINĚ**

Jitka Ulrichová

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

Rostlinné polyfenoly tvoří strukturně rozmanitou skupinu sekundárních metabolitů. Patří mezi ně fenolové kyseliny, stilbeny, flavonoidy, isoflavonoidy, lignany, flavonolignany, anthokyaniny, proanthokyanidiny a taniny. V rostlinách mají zejména funkci fytoalexinů (chrání před mikrobiálními infekcemi), UV-protektivních látek a barevných pigmentů. Člověk tyto látky přijímá denně ve své dietě v množství až 2 g. Jejich příznivý účinek na lidský organismus byl zaznamenán již před několika tisíci lety a rostliny je obsahující jsou součástí tradičních medicín. Pro svou biologickou aktivitu jsou polyfenoly stále v zájmu nutričních odborníků, lidových léčitelů, humánních a veterinárních lékařů. Polyfenolům je obecně připisován antioxidační účinek a takto jsou chápány širokou veřejností. Tyto látky však mají řadu často i výraznějších biologických aktivit, které začaly být studovány v posledních letech, např. UV-protektivní, chemoprotektivní a antiadherenční. Tyto účinky byly prokázány jak *in vitro* experimentech, tak i na zvířatech a v klinických studiích. Funkční potraviny a doplňky stravy obsahující polyfenoly se staly součástí preventivní nebo podpůrné terapie u některých chronických onemocnění. V přednášce je věnována pozornost výsledkům *in vitro/in vivo* experimentů s polyfenoly rostlin rodů *Lonicera*<sup>1</sup>, *Silybum*<sup>2</sup> a *Vaccinium*<sup>3</sup>. Na základě klinických zkoušek byly na trh uvedeny přípravky s hypolipidemickým, antiadherenčním a protizánětlivým účinkem.

*Poděkování za finanční podporu grantům MSM6198959216 a FT-TA3/024.*

- [1] Heinrich H., Švarcová I, Valentová K.: Chem. Listy 102, 245-254, 2008.  
[2] Gažák R., Walterová D., Křen V.: Curr Med Chem 14(3), 315-38, 2007  
[3] Valentová K. et al.: J. Agric. Food. Chem. 55, 3217-3224, 2007.

**PP3****DE NOVO DETERMINATION OF CHEMICAL  
STRUCTURES USING TANDEM MASS  
SPECTROMETRY**

Robert Mistrík

*HighChem s.r.o., Bratislava, www.highchem.com*

Unparalleled levels of sensitivity, combined with a wealth of structural information, make mass spectrometry an indispensable bioanalytical research tool. However, due to the immense structural diversity

of small molecules and the inability to decipher spectral information effectively, the structural work remains a huge bottleneck in chemical and biological sciences.

Widely used library search systems are designed to identify compounds represented in the reference library that may have generated the submitted single stage or multi-stage mass spectrum. These systems are based on the assumption that a chemical entity exhibits a unique spectral fingerprint that is likely to have a counterpart in a reference library. If the unknown compound is not represented in the library, the compound cannot be identified by this method. To overcome this shortcoming, various interpretative library search techniques, statistical pattern recognition methods and rule-based approaches have been developed to derive at least partial structural information by the estimation of probabilities of substructure occurrence and absence in a mass spectrum using a predefined set of substructures. The identification of a substructure from a given mass spectrum using these methods can be difficult or even impossible as its characteristic fragmentation pattern convolute with patterns of other structural features of the molecule by a ratio which is dependent on the relative rates of competitive processes, which are highly variable. As a consequence, indirect interpretative, probabilistic and rule-based methods cannot be considered on their own to be general purpose and consistent interpretation approaches. Although certain structural features can be identified with high reliability, their applicability remains limited to assisting in the establishment of a structural proposal.

A novel concept of precursor ion fingerprinting (PIF) for the determination of molecular structures supported by an extensive library of fragmentation mechanisms has been developed. Product-ion spectra acquired using multiple-stage mass spectrometry serve as unique fingerprints of the precursor ions. By searching the product-ion spectra of the molecule under investigation against a library of product-ion spectra of structurally characterized precursor ions, individual segments of the structure are identified. The overall structural arrangement is reconstructed from substructures obtained from identified ion structures. PIF is particularly useful for applications operating in a structurally finite space such as the identification of endogenous metabolic components or the identification of xenobiotic metabolites.

#### PP4 MOŽNOSTI VYUŽITÍ ROSTLINNÝCH OLEJŮ

Vladimír Filip

*Ústav technologie mléka a tuků  
Vysoká škola chemicko-technologická v Praze,  
Technická 5, 166 28 Praha 6; ČR*

Mastné kyseliny představují hlavní složku lipidů, resp. olejů a tuků, a jsou rovněž jedinou obnovitelnou lineární uhlovodíkovou strukturou. Jejich produkce v letech 1980-2007 vzrostla téměř 2x na úroveň cca 115 Mt. Roste produkce především oleje sójového, palmového a řepkového, jejichž produkce je na úrovni 85 Mt. V rozvinutých zemích vzniká přebytek těchto olejů a vytváří se prostor pro jejich nepotravinářské využití.

Využití pro lidskou výživu je nezastupitelné při pokrývání 25-30 % naší denní energetické spotřeby oleji a tuky. Z pohledu vlivu tuků na lidské zdraví je v současnosti zvládnuta výroba rostlinných tuků bez škodlivých *trans*-izomerů mastných kyselin a pro výzkum a průmysl se otevírá nová výzva: Jak dále snižovat obsah méně žádoucích nasycených mastných kyselin, zodpovědných za pevnou konzistenci tuků, aby tato konzistence, kterou požadujeme, zůstala zachována?

Tradiční nepotravinářské využití olejů a tuků je oleochemické a palivářské, především pro výrobu tzv. bionaft – metylesterů mastných kyselin. Současné přístupy v obou oblastech využívají jedinečného složení přírodních triacylglycerolů pro výrobu mastných kyselin a jejich derivátů v oblastech jako je výroba tenzidů, detergentů, kosmetických prostředků, lepidel, nátěrových hmot i bionaft. Ve většině případů odpadá glycerol jako vedlejší produkt. Nabízí se otázka: není účelnější a univerzálnější zpracovávat klasickými petrochemickými procesy rostlinné oleje na ethen, propen, aromáty a uhlovodíky využitelné jako motorová paliva?

Při současné světové úrovni spotřeby ropy, kdy připadá 37 kg ropy na 1 kg rostlinného oleje, je úplná náhrada fosilních uhlovodíků obnovitelnými zdroji nemožná. Další růst jejich produkce je zřejmě možný, ale za jakou cenu? Při nárocích na výživu rostlin ložiskovými minerálními hnojivy obsahujícími P a S se musí dojít k poznání, že pojem „obnovitelná surovina“ je iluzí.

#### PP5 VPLYV INOVÁCIE V SEPARAČNÝCH METÓDACH NA VÝVOJ NOVÝCH FARMACEUTICKY AKTÍVNYCH LATOK A PRODUKTŮV

Roman Szücs<sup>1</sup>, Melissa Hanna-Brown<sup>1</sup> a Pat Sandra<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Pfizer Global R & D, Analytical R&D, Ramsgate Road, Sandwich, Kent CT13 9NJ, UK*

<sup>2</sup> *Pfizer Analytical Research Centre – Ghent University, Krijgslaan 281–S4 bis, B-9000 Ghent, Belgium*

Chemik pracujúci v oblasti vývoja nových farmaceutických produktov má na riešenie analytických problémov omnoho väčší výber možností ako kedykoľvek predtým. Toto tvrdenie môžeme podložiť príkladom HPLC, kde izokratické alebo gradientové zloženie kvapalinovej fázy, mechanizmus separácie, spôsob nastreknutia vzorky, miniaturizácia a viacrozmernosť separácií predstavujú premenné, ktoré treba zvážiť už pri počiatkoch vývoji analytickej metódy. Napriek tomu, že takmer všetky podobné inovácie majú významný potenciálny vplyv na zvýšenie produktivity v analytickom laboratóriu, môžu tieto v konečnom dôsledku predstavovať skutočné prekážky a komplikácie pri výbere a optimalizácii vhodných experimentálnych podmienok. Ako príklad uvádzame takmer nekonečný výber chemického zloženia, morfológie a fyzikálnych rozmerov stacionárnych fáz. V praxi to znamená, že analytický chemik strávi omnoho viac času optimalizáciou metód ako vlastnou analýzou a toto takmer vždy zvyšuje jej cenu.

V prvej časti tejto prednášky sa budeme venovať niektorým hybným silám, ktoré stoja za týmito inováciami napr. potrebe stále sa zvyšujúceho chromatografického rozlíšenia a účinnosti ako aj znižujúcej ceny analýzy. Túto diskusiu vsadíme do kontextu meniaceho sa horizontu vzhľadom na silnejúci tlak zo strany regulačných agentúr, ekonomických tlakov a tiež vzhľadom na potrebu ochrany životného prostredia.

V ďalšej časti sa budeme venovať prehľadu inovácií a praktických príkladov aplikácií vyvinutých v posledných rokoch. Väčšina technológií, ktorými sa budeme venovať v našej prednáške vznikla na základe pokroku vo výskume základných teoretických princípov separačných vied. Tieto technológie majú v súčasnosti významný vplyv na spôsob akým sa vyvíjajú nové farmaceutické látky (napr. ultra rýchla plynová chromatografia, sub-2 $\mu$ m veľkosť častíc stacionárnej fázy, viacrozmerná chromatografia a používanie *in-silico* postupov pri vývoji chromatografických metód).

V poslednej časti sa budeme venovať niektorým vývojovým trendom vo farmaceutickom priemysle ako napr. 'Quality by Design' alebo pokrok v 'knowledge management' a predstavíme ako tieto trendy môžu v

blízkej budúcnosti ovplyvniť spôsob vývoja chromatografických metód.

## PP6 VÝZNAM ANALYTICKEJ CHÉMIE V SÚČASNOSTI

Jozef Lehotay

*Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava.*

Moderná analytická chémia sa zaoberá predovšetkým rozvojom selektívnych a citlivých techník, ktoré sa využívajú v rôznych oblastiach ľudskej činnosti. Objavujú sa nové analytické technológie a metodológie. Hlavný cieľ súčasnej analytickej chémie je spoľahlivá identifikácia a stanovenie látok vo vzorkách z rôznych oblastí pri najmenšej neistote stanovenia a často pri stopových alebo ultrastopových koncentráciách, z tohto hľadiska analytická chémia sa zaraďuje medzi informačné vedy. Zo štatistických údajov vyplýva, že ročne vo svete sa vykoná približne 10 miliárd analýz rôzneho druhu. Rozvoj analytickej chémie ovplyvnil vývoj predovšetkým v biotechnológii, vo farmácii, v medicíne, v toxikológii v patológii, v potravinárstve, v životnom prostredí, v chémii polymérov atď.

Na konci minulého storočia sa začínajú využívať nové technologické prístupy, začína vývoj nových analytických metód, čo umožňuje využiť nové aplikačné postupy pri riešení zložitých úloh v analytickej chémii. Zvlášť zdokonalenie spojenia separačných metód s inými analytickými princípmi (napr. HPLC – MS, HPLC – NMR, GC – ESA atď.) pomáha pri identifikácii skúmaných látok.

Analytická chémia môže sa definovať viacerými spôsobmi:

1. Analytická chémia je vedecká disciplína, kde sa vyvíjajú a aplikujú metódy, prístrojové techniky a stratégie za účelom získavania informácií o štruktúre látok v danom priestore a čase (podľa Working Party on Analytical Chemistry of the Federation of European Chemical Societies).

2. Analytická chémia je metrologická disciplína, kde sa vyvíjajú, optimalizujú a aplikujú postupy merania na získanie (bio)chemickej informácie o globálnych a čiastočných modeloch prírodných a umelých objektov, alebo systémov, aby sa vyriešili analytické problémy odvodené z informačných potrieb (R. Kellner: Analytical Chemistry 2006).

Význam analytickej chémie môže byť vysvetlený na základe troch hlavných bodov:

Chémia sa skladá z troch základných disciplín: teória, syntéza a analýza, kde je veľmi dôležitá aplikácia (priemysel, životné prostredie, farmácia, potraviny);

Do predmetu analytickej chémie patria analýzy, ktoré sú základom celej chémie a úzko súvisia so syntézou a teóriou.

Aplikácie tvoria jedinečnosť analytickej chémie a jasne zvyrazňujú rozdiel od organickej, anorganickej a fyzikálnej chémie, ktoré patria do iných základných dimenzií chémie. Analytická chémia sa zaoberá aj metrologiou, pomocou ktorej sa vyhodnocujú merania založené na štandardoch, aby sa získali spoľahlivé kvalitatívne a kvantitatívne výsledky.

Analytická chémia je aj informatívna disciplína, ktorá poskytuje dôležité informácie o študovaných objektoch alebo systémoch a na základe týchto informácií sa uskutočňujú rozhodnutia v sociálnych a v ekonomických oblastiach. Analytické výsledky sú veľmi dôležité vo vede, v technológiách, v ekonómii a v sociálnych vzťahoch.

Medzi hlavné ciele a úlohy analytickej chémie možno zaradiť: riešenie analytických problémov na základe informačných potrieb v závislosti od objednávateľa (súkromné firmy, výskumné centrá ...), dosiahnutie metrologickej kvality, čo znamená dobrá zhoda medzi analytickým výsledkom a skutočnou hodnotou meraných parametrov (veľmi nízka neistota merania). Principiálnym cieľom analytickej chémie je získanie (bio)chemických informácií podľa možnosti najvyššej kvality v najkratšom čase a pri minimálnych nákladoch.

V súčasnosti možno sledovať dva základné vývojové smery v analytickej chémii:

Vývoj novej analytickej techniky a nových metód, príprava referenčných materiálov vysokej metrologickej kvality, vypracovanie nových kalibračných metód a chemometrických zhodnotení. Z tohto hľadiska je analytická chémia nezávislá vedecká disciplína.

Aplikačný smer analytickej chémie priamo súvisí s riešením analytických problémov, ktoré závisia od potrieb (bio)chemických informácií z rôznych oblastí ekonómie alebo sociológie (napr. stanovenie síry v olejoch, alebo v uhlí, stanovenie PAH vo vodách atď.). Analytické výsledky potom priamo ovplyvňujú rozhodnutia v ekonomickej alebo v socio-logickej sfére. Nové požiadavky ako sú napr. analýzy geneticky modifikovaných potravín, analýza proteínov vyžadujú nové aktivity v analytickej chémii.

V stopovej a ultrastopovej analýze pri identifikácii a stanovení látok v zložitých viaczložkových vzorkách sa využívajú predovšetkým kombinácie štyroch parametrov, ktorými je možné znížiť možnú interferenciu pri stanovení a znížiť medzu stanovenia metódy: selektivita separácie, selektivita detekcie, selektivita derivatizácie a selektivita predkoncentrácie analytu.

Selektivita separácie v chromatografii sa ovplyvňuje zmenou zloženia mobilnej fázy a zložením stacionárnej fázy. V poslednom období sa venuje hlavne pozornosť vývoju nových stacionárnych chemicky viazaných fáz, ktoré umožňujú separáciu chirálnych zmesí. Je možné použiť i "viacrozmerný separačný systém", v ktorom sa menia selektivity separácie. Väčší rozsah zmeny selektivity separácie

predovšetkým umožňuje spojenie dvoch separačných princípov do jedného separačného systému. Príkladom môže byť elektrochromatografia, kde možno využiť spoločne elektroforetické a chromatografické vlastnosti látok.

Selektivita detekcie predovšetkým zohľadňuje optické a elektrochemické vlastnosti separovaných látok. Často sa používa viacero detektorov v "on line" zapojení, aby sa získalo čo najviac navzájom nezávislých informácií o eluovaných zložkách. Vývoj detektorov s diódovým poľom značne rozšíril možnosti získavania informácií o absorpčných spektrách a použitie elektrochemických detektorov pracujúcich na princípe cyklickej voltampérometrie umožňuje charakterizovať eluovanú látku z hľadiska elektrochemických vlastností. V oblasti stopovej analýzy možno sledovať hlavne vývoj nových detekčných techník napr. termooptický detektor, fluorescenčný detektor  $2 \times hv$ , kde sa využíva laserová technika a tiež sa venuje pozornosť spojeniu LC-MS, prípadne v posledných rokoch LC-NMR i keď tento systém zatiaľ nemožno použiť na stopovú analýzu.

Selektivite derivatizácie (pred- alebo po-kolónovej) sa venuje stále veľká pozornosť. Používa sa hlavne z dvoch dôvodov: zlepšenie selektivity separácie alebo selektivity detekcie. Zvlášť výhodné je použiť derivatizáciu, ktorá sa uskutočňuje priamo v mobilnej fáze, ktorá obsahuje derivatizačné činidlo. Hlavný cieľ derivatizácie je zvýšenie odozvy detektora pre sledovanú látku alebo zmena fyzikálnych a chemických vlastností separovaných látok, čo má za následok zmenu chromatografických vlastností.

Ďalšou technikou, pomocou ktorej možno znížiť medzu stanovenia je predkoncentračná technika. V súčasnosti sa najviac používajú "off alebo on line" predkoncentrácie a medzi hlané trendy v tejto oblasti patrí extrakcia pomocou imprintovaných polymérov a predkoncentrácia pomocou membránových systémov. Použitie týchto techník umožňuje stanoviť látky na úrovni ppt, prípadne i nižšie. V poslednej dobe sa objavujú práce, v ktorých sa opisuje ďalší spôsob možnosti predkoncentrácie stanovovanej zložky, ktorý je založený na princípe elektroforetických a chromatografických vlastností danej látky. Táto metóda je v literatúre známa ako elektrochromatografia a často sa používa aj pri separácii zložitých zmesí organických látok. Kombináciu chromatografických a elektroforetických vlastností možno využiť i pri príprave vzorky k analýze. Na vhodnej predkolónke je možné aplikovať potenciálny spád tak, aby napr. dochádzalo k zadržaniu stanovovanej zložky - jej elektroforetická rýchlosť bude opačného smeru a väčšia ako rýchlosť tejto látky v kolóne pri vypnutom potenciálnom spáde, čo má za následok jej hromadenie na hlave kolóny (možnosť predkoncentrácie). Po vypnutí potenciálneho spádu možno sledovanú látku vymyť z kolóny a kvantitatívne vyhodnotiť.

V prednáške budú prezentované niektoré analytické práce, v ktorých sa využili niektoré kombinácie selektív s cieľom získania ďalších nezávislých informácií o študovaných chemických zlúčeninách.

#### PP7

### UMELÁ CHÉMIA A DARWINOVA EVOLÚCIA

Vladimír Kvasnička

*Ústav aplikovanej informatiky FIIT STU*

*842 16 Bratislava a Ústav informatizácie, riadenia a matematiky FCHPT STU 812 37 Bratislava email: vladimir.kvasnicka@stuba.sk*

V súčasnej informatike pod pojmom "umelá chémia" rozumieme novú metaforu „prirodzeného počítania“, ktorá je založená na používaní molekúl – lineárnych reťazcov znakov. Medzi molekulami – reťazcami prebiehajú reakcie, ktoré sú špecifikované ako vzájomná modifikácia reťazcov znakov. V práci je prezentovaná moderná paradigma darwinovskej evolúcie, ktorá ju chápe ako univerzálny optimalizačný algoritmus, aplikovateľný nielen v biologických vedách, ale aj v rôznych oblastiach tak exaktných, ako aj sociálnych a behaviorálnych vied. V prednáške je prezentovaný zjednodušený model Darwinovej evolúcie na molekulárnej úrovni použitím metód umelej chémie. Chemický reaktor (chemostat) obsahuje molekuly, ktoré sú reprezentované pomocou reťazcov znakov, pričom tieto reťazce sú schopné replikácie s pravdepodobnosťou úmernou ich fitness. Proces replikácie nie je dokonale presný, v priebehu tohto procesu môžu sa vyskytovať sporadické mutácie, ktoré vytvárajú nové reťazce – potomkov, ktoré sa takmer neodlišujú od pôvodných rodičovských reťazcov. Dynamika tohto autoreplikačného systému je popísaná Eigenovými diferenciálnymi rovnicami. Tieto rovnice majú jednoznačné asymptotické riešenie – stabilný stav, ktorý obsahuje len reťazce s najväčšou rýchlostnou konštantou (fitness). Pripomeňme, že molekula – reťazec znakov reprezentuje riešenie daného (obvykle optimalizačného) problému. Rýchlostná konštanta replikácie (fitness) reťazca znakov je numericky určené pomocou "kvality" riešenia priradeného danému reťazcu. Táto teória poskytuje detailný pohľad na mechanizmus evolučných algoritmov, ktoré v súčasnosti patria medzi dôležité robustné numerické prostriedky umelej inteligencie a umelého života.

#### PP8

### „LAST REACTION HERO“.... HROZÍ KONIEC CHEMIKOV NA SLOVENSKU?

Lubomír Held, Ján Reguli

*Pedagogická fakulta Trnavskej univerzity, Priemyselná 4, 918 43 Trnava*

Klesajúci trend v počtoch absolventov chemických študijných programov (odborných i učiteľských) je z celospoločenského hľadiska alarmujúci. Cieľom

prednášky je preto podnietiť diskusiu o stave chemického vzdelávania. Porovnaním situácie u nás a vo svete sa autori snažia nájsť odpovede a ponúknuť riešenia na nasledujúce otázky:

Ako sa zmenili ciele vzdelávania na prelome tisícročí? Aké postavenie má prírodovedné a chemické vzdelávanie? Čo je cieľom predmetu chémie na základnej a strednej škole – pripravovať budúcich chemikov alebo pripravovať občanov na život? Aké schopnosti by mali nadobudnúť absolventi tohto predmetu? Prežije vôbec predmet chémie súčasnú školskú reformu? Nie je čas na integráciu prírodovedných predmetov v povinnom vzdelávaní? Ako nájsť vhodný model integrácie? Pomôžu nové „IKT“ zvýšiť úroveň štúdia? Ako sú na tom naši žiaci v schopnosti využívať svoje vedomosti? Dá sa dosiahnuť, aby rozumeli tomu, čo sa učia a vedeli to aj použiť? V čom sú iné krajiny, ktorých žiaci sa v medzinárodnom hodnotení prírodovednej gramotnosti umiestnili na popredných miestach?

Aké sú trendy v záujme o štúdium prírodných vied? Prežijú chemické vysoké školy (napriek ich nespornej kvalite) nezáujem „záujemcov o štúdium“?

Prečo chemici dovolili, že „chemická látka“ sa stala synonymum pre jed? Kedy aj naši vedci a výrobcovia pochopia potrebu komunikovať s verejnosťou? Aké zručnosti potrebujú vedci, aby ich komunikácia bola úspešná (t. j. ich názory boli vypočuté a oni súčasne spoznali názory verejnosti)? Prečo sa naši chemici nesnažia pomôcť učiteľom nasmerovať záujem žiakov na štúdium a kariéru v oblasti chémie? Prečo sú propagačné aktivity vysokých škôl neefektívne? Aké sú príklady aktivít, ktoré zlepšujú komunikáciu vedy s verejnosťou? Ako sa špičkoví vedci a priemyselné spoločnosti v zahraničí podieľajú na spolupráci so školami?

Zostanú na Slovensku nejakí (kvalifikovaní) učitelia, ak sa nezlepší ich odmeňovanie? Budú ešte chemici, ak nebudú učitelia chémie? Dokedy dovolíme, aby najnižšie nástupné platy absolventov vysokých škôl boli v školstve?

## PREDNÁŠKY - SEKCIA 1: ANALYTICKÁ A FYZIKÁLNA CHÉMIA

### 1P01 ON-LINE MERANIE VÝVOJA PLYNOV V BRIGGSOVEJ-RAUSCHEROVEJ A BELOUSOVOVEJ-ŽABOTINSKÉHO OSCILAČNEJ REAKCII

Erik Szabo, Peter Ševčík

*Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie,  
Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenských  
Mlynská dolina, 842 15 Bratislava*

Oscilačné reakcie prejavujú správanie takej komplexnosti, ktorá v sústavách navzájom nezávislých dejov nie je pozorovateľná a ich štúdium nepochybne zohráva dôležitú úlohu v našom chápaní javu komplexnosti ako takého.<sup>1</sup> Vývoj plynu z roztokov je sám o sebe častou príčinou oscilácií, hoci skôr fyzikálnej povahy, a štúdium chemických oscilácií sprevádzaných tvorbou plynu nám s veľkou pravdepodobnosťou môže poskytnúť nové poznatky o oboch.

Keďže práca s plynmi so sebou nesie značné množstvo praktických problémov a doposiaľ nebola žiadna plne automatická metóda izobarického merania ustálená ako konvenčná, sústredili sme sa predovšetkým na vývoj presnej metódy on-line záznamu objemov plynov vo vsádzkovom usporiadaní,<sup>2</sup> a to pomocou váženia kvapaliny vytlačenej plynom – od návrhu, cez testovanie a kalibráciu, až po protokol vyhodnocovania dát. Metóda bola následne použitá pre meranie vývoja plynov v modifikovanej Briggsovej-

Rauscherovej reakcii a v klasickej Belousovej-Žabotinského reakcii.

Výsledky pritom viedli nielen k poznatkom, na základe ktorých bolo možné značné zvýšenie reprodukovateľnosti realizácie modifikovanej BR reakcie, ale taktiež potvrdili výsledky napovedajúce možnosť supersaturácie v klasickej oscilačnej reakcii BŽ,<sup>3</sup> pričom výsledky získané za rôznych režimov miešania naznačili, že priamy kontakt BŽ oscilátora s väčším množstvom plynu, napríklad pri uvoľnení supersaturácie, môže priebeh tejto reakcie značne ovplyvniť.

*Táto práca bola podporená grantom UK/200/2009 a VEGA 1/0039/09.*

- [1] Epstein, I. R.; Pojman, J. A. *An Introduction to Nonlinear Chemical Dynamics*; Oxford University Press, Oxford, 1998.
- [2] Szabo, E.; Ševčík, P. *J. Phys. Chem. A* **113**, 3127 (2009).
- [3] Ševčík, P.; Mišicák, D.; Adamčíková, L. *J. Phys. Chem. A* **111**, 10050 (2007).

### 1P02 VLIV TEPLoty NA ADSORPCI CTAB NA UHLÍ

Roman Maršálek<sup>1</sup>, Boleslav Taraba<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Katedra chémie, Přírodovědecká fakulta OU, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava*

Byl sledován vliv teploty na adsorpční chování kationaktivního tenzidu, cetyltrimethylammonium bromidu (CTAB) z vodného prostředí na odlišných typech přírodního uhlí. S využitím vsádkové (batch)

aparatury byly proměřeny adsorpční izotermy vzorku černého (BC), hnědého (SB) a oxidačně alterovaného uhlí (BO) při teplotních úrovních 25, 40, 60 a 80 °C. Bylo prokázáno, že zjištěné adsorpční isotermy lze popsat pomocí Langmuirovy teorie monovrstevného pokrytí. Nalezené hodnoty „maximální“ adsorpční kapacity ( $a_m$ ) vykazovaly pro všechna sledovaná uhlí (mírný) nárůst s rostoucí teplotou, přičemž nejvýraznější imobilizační kapacita vůči CTAB byla zjištěna u vzorku oxidačně alterovaného uhlí BO s nejvyšším zastoupením kyslíkatých funkčních skupin. Pomocí Langmuirovy rovnice byly vypočteny adsorpční konstanty  $b$ , jejíž hodnoty se (obecně) ztotožňují s rovnovážnou konstantou adsorpčního procesu. Z teplotní závislosti vyčíslených konstant  $b$  pak byly pro jednotlivé vzorky vypočteny základní termodynamické veličiny jako (změna) entalpie  $\Delta H_{ads}$ , entropie  $\Delta S_{ads}$  respektive Gibbsovy energie  $\Delta G_{ads}$  adsorpčního procesu. Výsledky jsou shrnuty v následující tabulce:

	Teplota (K)	$a_m$ (mmol/g)	$b$	$\Delta H_{ads}$ (kJ/mol)	$\Delta S_{ads}$ (J/mol.K)	$\Delta G_{ads}$ (kJ/mol)
BO	298,15	1,26	12,1	-10,6	-14,6	-6,25
	313,15	1,37	10,5			-6,03
	333,15	1,42	7,97			-5,74
	353,15	1,54	6,30			-5,44
SB	298,15	1,14	4,12	-9,25	-19,2	-3,54
	313,15	1,24	3,48			-3,25
	333,15	1,35	2,93			-2,87
	353,15	1,49	2,27			-2,49
BC	298,15	1,00	1,70	-6,34	-16,9	-1,31
	313,15	1,10	1,48			-1,06
	333,15	1,22	1,31			-0,71
	353,15	1,32	1,13			-0,38

Z výsledkové tabulky je zřejmé, že adsorpční proces lze hodnotit jako exotermický ( $\Delta H_{ads} < 0$ ) a spontánní ( $\Delta G_{ads} < 0$ ). Pokles entropie pak odpovídá obecně předstávě o nárůstu „uspořádanosti“ soustavy v průběhu adsorpčního děje.

*Tato práce vznikla za podpory GAČR č. 105/07/P041 a GAAV č. IAA301870801.*

### 1P03 „KEYNOTE“ OXIDAČNĚ-REDUKČNÍ POTENCIÁL VE VZTAŽÍCH STRUKTURA-VLASTNOSTI, RESP. STRUKTURA-BIOLOGICKÁ AKTIVITA

Karel Nesměrák

*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta,  
Katedra analytické chemie,  
Albertov 6, 128 43 Praha 2, Česká republika, e-mail:  
nesmerak@natur.cuni.cz*

Metody analýzy kvantitativních vztahů mezi strukturou a vlastnostmi resp. strukturou a biologickou aktivitou (QSPR/QSAR) nacházejí své široké uplatnění v různých oblastech chemie, biologie i farmacie. Jako deskriptory strukturního uspořádání molekul lze v QSPR/QSAR kromě řady

substituentových a topologických konstant využít i fyzikálně-chemických konstant. Velmi výhodné se ukazuje použití konstant popisujících oxidačně-redukční vlastnosti molekuly (např. půlvolný potenciál), protože úzce souvisí s interakcemi látky s místem biologického účinku a tudíž mohou být tyto přímo korelovány s biologickými vlastnostmi [1]. Do příslušných vztahů je obvykle nutné zavést ještě veličiny charakterizující kinetiku transportu látky organismem (průnik biologickými membránami), typicky rozdělovací koeficient oktanol-voda.

Elektroanalytická chemie tak může v době, kdy část jejích úkolů převzaly spektrální a separační metody, nalézt v QSPR/QSAR širokou oblast působnosti. V příspěvku bude podán přehled teoretických východisek uplatnění elektrochemického potenciálu v těchto korelacích, doplněný vlastními výsledky získanými při studiu derivátů benzoxazinu [2] (včetně uplatnění netradičních deskriptorů struktury jako jsou SMILES [3]), tetrazolu, benzoxazolu, aj.

*Tato práce byla podpořena výzkumným záměrem MSM0021620857 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR.*

- [1] de Abreu F. C., de L. Ferraz P. A., Goulart M. O. F.: J. Braz. Chem. Soc. 13, 19 (2002)
- [2] Nesměrák K., Němec I., Štícha M., Waisser K., Palát K.: Electrochim. Acta 50, 1431 (2005)
- [3] Toropov A., Nesměrák K., Raška I., Waisser K., Palát K.: Comput. Biol. Chem. 30, 434 (2006)

### 1P04

#### POLYETYLÉN A DNA: PODOBNOSTI A ODLIŠNOSTI Z ICH MODELOVANIA

Tomáš Bleha

*Ústav polymérov SAV, 842 36 Bratislava*

Polyetylén (PE) a DNA sa v súčasnej makromolekulovej vede používajú ako vymedzenie dvoch extrémov. PE je štruktúrne najjednoduchší polymér, ktorý sa stal ako materiál so skupiny tzv. komoditných plastov bežnou súčasťou nášho života. Na druhej strane, komplexná chemická štruktúra dvojvláknovej DNA predurčuje túto makromolekulu na jej unikátne úlohy v živých organizmoch. V počiatkoch polymérnej chémie výskum prírodných a syntetických polymérov prebiehal spoločne, neskôr však búrlivý rozvoj molekulárnej biológie viedol k jej vyčleneniu sa od syntetickej polymérnej chémie. Rozširujúce sa rutinné využívanie mikromanipulácie s jednotlivými (single) makromolekulami napr. pomocou AFM techniky vedie v súčasnosti opäť k spoločnému pohľadu na vlastnosti syntetických a biologických polymérov. Molekulové modelovanie pomocou počítačových metód umožňuje identifikáciu nielen očakávaných veľkých rozdielov vo vlastnostiach makromolekúl PE a DNA, ale aj celého radu ich spoločných črt. Tento fakt sa v prezentácii bude ilustrovať na príkladoch ich atomistického a



hrubo-zrnneho modelovania. Pre PE sa uvedú výsledky modelovania reťazcov vnútri lamiel semikryštalického PE [1]. Rozoberú sa aj dôsledky konfor-mačnej tuhosti reťazcov na mechanické vlastnosti (bio)polymérov a ich sietí. Nakoniec sa bude venovať pozornosť dôležitému vplyvu geometrického obmedzenia DNA (napr. v kapside vírusu) na jej štruktúrnu organizáciu [2].

[1] Z. Špitalský, T. Bleha, *Macromol. Theory Simul.*, 10, 833-841 (2001)

[2] P. Cifra, Z. Benková, T. Bleha, *J. Phys. Chem. B* 113, 1843–1851 (2009)

#### 1P05

#### NMR SPECTROSCOPY OF GRAPE MUST, “BURČIAK”, “RAMPÁŠ” AND NEW WINE

M. Mazúr, K. Furdíková, L. Gaľa, M. Kaliňák and M. Valko

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

The must from vine grapes consists of several hundred compounds that are present at different concentrations. The major components are water and sugars (glucose and fructose). Minor components are represented by organic acids (e.g. acetic, citric, malic, shikimic, succinic, tartaric), amino acids (e.g. alanine, arginine, isoleucine, leucine, proline, valine) and phenolic compounds. Presented contribution describes the changes in chemical composition during the processing of grape to wine by high resolution NMR spectroscopy. A time evolution of these major and minor compounds in grape must samples, samples in fermentation (“burčiak” and “rampáš”) and new wine samples is monitored by NMR spectroscopy on a Varian INOVA 600 MHz NMR spectrometer, which is located at the department of NMR and Mass spectrometry, Faculty of Chemical and Food Technology, STU in Bratislava. The advantage of the <sup>1</sup>H NMR spectroscopy is the minimal sample preparation and the ability to follow the course of many components of wine simultaneously. This study indicates that during the processing of grapes to wine major and minor compounds varied significantly.

*This work was supported by Science and Technology Assistance Agency APVV-0488-07, APVV-0055-07, Slovak Grant Agency for Science VEGA 1/0575/08, VEGA 1/0018/09, Slovak State Program Project No. 2003SP200280203 (NMR measurements).*

#### 1P06

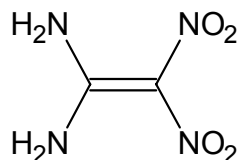
#### ELEKTROCHEMICKÉ STUDIUM INTRAMOLEKULÁRNEJ DEGRADACE NOVÉHO EXPLOZIVA 2,2-DINITROETHEN-1,1-DIAMINU

Ludmila Šimková<sup>1</sup>, František Liška<sup>2</sup>, Jiří Klíma<sup>1</sup>, Jiří Ludvík<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup> Pedagogická fakulta University Karlovy, M. D. Rettigové 4, CZ-116 39 Praha 1.

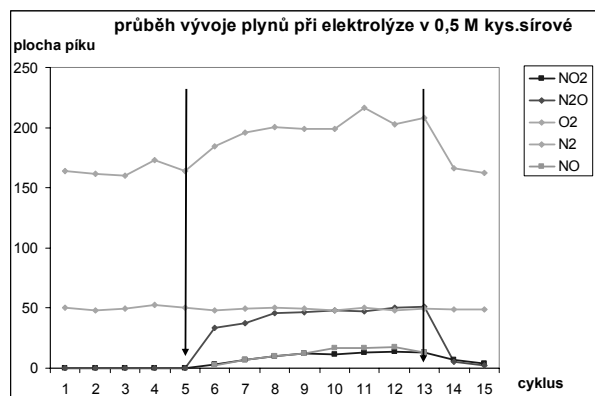
V rámci výzkumu intramolekulárních elektronových interakcí molekul s vícejadrovými redox centry byl pomocí elektrochemických technik studován i 2,2-dinitroethen-1,1-diamin (FOX-7) [1]. Struktura této molekuly je pozoruhodná především kombinací dvou geminálních snadno redukovatelných nitroskupin v sousedství dvou silně elektrondonorních aminů. V molekule této látky tak dochází ke stabilizaci elektronovou „push-pull“ delokalizací.



2,2-dinitroethen-1,1-diamin  
(FOX-7; DADNE; DANE)

Elektrochemická redukce ani oxidace dané látky dosud nebyla zkoumána. Ve vodných roztocích polarografická redukce vykazuje v závislosti na pH kolem 5 redukčních stupňů. Součet vln odpovídá 18 elektronům, tedy lze předpokládat redukcí až na ethan-1,2-diamin, který byl kvalitativně prokázán jako produkt redukce látky FOX-7 zinkem v kyselině chlorovodíkové.

Při reduktivní elektrolýze na velkoploché elektrodě se FOX-7 rozkládá, spotřeba elektronů je však výrazně menší (mezi 4–6 elektrony na molekulu), v roztoku zbylém po preparativní elektrolýze se však nepodařilo identifikovat žádný organický produkt. Proto byly pomocí kombinace elektrochemie/GC/MS analyzovány plynné produkty. Zatímco NH<sub>3</sub>, N<sub>2</sub>, NO, NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O byly prokázány (Obr. 1), CO<sub>2</sub> ani další těkavé produkty obsahující uhlík se prokázat nepodařilo. Uhlíkaté produkty zřejmě zůstávají po elektrolýze v roztoku jako anorganické ionty, které nejsou těkavé a ani nejdou vytřepat do organických rozpouštědel.



**Ob. 1:** Graf znázorňuje prúbeh vývoje plynů vznikajících během elektrolýzy FOX-7 v kys. sírové. Šipky v grafu ukazují, kdy byla spuštěna a kdy vypnuta elektrolýza.

Za finanční podporu autoři děkují grantu KONTAKT (MŠMT) č. ME 09 002.

- [1] Cibulka, R.; 1,1-diamino-2,2-dinitroethen, dinitromethan, syntézy a vlastnosti. Práce podle smlouvy č. 4621/2004/VÚPCH mezi Explosia, a.s. a VŠCHT 2005.

### 1P07 ŠTÚDIUM HYBRIDNÝCH MATERIÁLOV NA BÁZE MONTMORILLONITU A SUPRAMOLEKULOVÝCH KOMPLEXOV S FLUORESCENČNÝMI FARBIVAMI

Marián Matejdes<sup>1</sup>, Marián Janek<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina CH1, SK-842 15 Bratislava, Slovenská Republika

(matejdes@fns.uniba.sk)

<sup>2</sup>Technologický inštitút, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, SK-845 13 Bratislava, Slovenská Republika

Širokospektrálne využitie cyklodextrínov je výsledkom ich schopnosti špecificky adsorbovať vybrané typy molekúl v závislosti od ich chemickej štruktúry. Tvorbou host/guest komplexov fluorescenčného farbiva s cyklodextrínmi je možné zabezpečiť definované spektrálne správanie<sup>1</sup> vybraných fluorescenčných molekúl analogicky ako je tomu u kvantových bodov ktoré majú úzko-spektrálnu odozvu. Pre praktické aplikácie však nie je výhodné použitie týchto komplexov výlučne v kvapalných rozpúšťadlách ale hľadajú sa možnosti ich usporiadaného umiestnenia v tuhej fáze. Ako jedna z možností sa ponúka využitie medzivrstvových priestorov vrstevnatých silikátov s expandovateľnou štruktúrou, ktoré majú vynikajúce adsorpčné vlastnosti<sup>2</sup> a schopnosť tvorby tenkých samonosných vrstiev. Hlavným cieľom tejto práce je štúdium supramolekulových komplexov medzi  $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ -cyclodextrínmi (CD) a fluorescenčnými farbivami vo

vodnom prostredí, a následne ich využitie pri príprave hybridných materiálov na báze montmorillonitu. Nemenej dôležitou skutočnosťou je vplyv montmorillonitu na tvorbu host/guest komplexov v roztoku. Zmeny rovnovážnych konštánt týchto komplexov boli pozorované pomocou statickej fluorescenčnej spektrometrie. Samotné hodnoty rovnovážnych konštánt daných komplexov boli vyhodnotené podľa Benesi-Hildebrandovej metódy. Rozhodujúcim faktorom pri príprave hybridných tenkých filmov na báze montmorillonitu bola hodnota rovnovážnej konštanty. Samonosné filmy boli pripravené z nemodifikovaného a supramolekulovým komplexom modifikovaného Na-montmorillonitu. Vniknutie supramolekulových komplexov do medzivrstvia použitého vrstevnatého silikátu bolo pozorované pomocou röntgenovej difrakčnej spektrometrie. Pripravené tenké filmy boli následne charakterizované infračervenou (IČ) spektroskopiou a v ďalekej IČ oblasti metódou terahertzovej spektroskopie s časovým rozlíšením (THz-TDS). Získané výsledky umožnili sledovať zmeny spektier na základe podmienok prípravy nanokompozitných tenkých vrstiev, a zároveň určiť optimalizované podmienky procesu prípravy tenkých vrstiev s fluorescenčnou funkcionalitou.

*Podakovanie:* Táto práca bola finančne podporená APVV grantom č. 0491-07 a grantom Ministerstva školstva Slovenskej Republiky č. VEGA 1/4457/07.

- [1] A. Angelova, D. Ringard-Lefebvre, A. Baszkin, *J. Colloid Interface Sci.* **212**, 275 (1999).  
[2] A. Čeklovský, A. Czimerová, M. Pentrák, J. Bujdák, *J. Colloid Interface Sci.*, **324**, 240 (2008).

### 1P08 MOLECULAR DYNAMICS OF HAIRPIN RIBOZYME

Vojtěch Mlýnský<sup>1</sup>, Pavel Banáš<sup>1</sup>, Nils G. Walter<sup>2</sup>, Jiří Šponer<sup>1,3</sup>, and Michal Otyepka<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Department of Physical Chemistry, Faculty of Science, Palacky University Olomouc, tr. Svobody 26, 771 46 Olomouc, Czech Republic

<sup>2</sup>Department of Chemistry, Single Molecule Analysis Group, University of Michigan, 930 N. University Ave., Ann Arbor, MI 48109-1055, USA

<sup>3</sup>Institute of Biophysics, Academy of Sciences of the Czech Republic, Kralovopolska 135, 612 65 Brno, Czech Republic

To gain insight into active site behavior of the minimal self-cleaving hairpin ribozyme (HR), we have performed molecular dynamics (MD) simulations at 100-ns timescale of various HR forms. The hairpin ribozyme structures for MD simulations were derived from the junctionless ligated X-ray crystal construction [1] determined at 2.05 Å resolution. Biochemical and structural data have implicated the G8 and A38 bases as catalytic participants in cleavage and ligation

catalyzed by HR. The position of G8 near the reactive A-1(2'-OH) group suggests the possibility that deprotonated N1 acts as a general base [2]. The A38 has been proposed to act as the general acid, because the transition-state analog crystal structures place A38(N1) close to the 5'-oxygen leaving group [3]. Our simulations proved that the 2'-OMe group, used to gain X-ray structure of reaction state, distorts the active site. Deprotonated G8 also distorts the active site and could be excluded from participating in catalysis. A38H<sup>+</sup> form is the most consistent with high-resolution X-ray data and it's likely to be dominant protonation state of A38 under physiological conditions. The presented molecular dynamics simulations support the reaction mechanism where the non-bridging oxygen of the scissile phosphate acts as a general base accepting the A-1(2'-OH) proton, G8 helps to stabilize transitions states as well as an intermediate and A38H<sup>+</sup> acts as a general acid protonating leaving O5' alcoholate.

*This work was supported by grants from the Grant Agency of the Czech Republic (203/09/H046), the Academy of Sciences of the Czech Republic (IAA400040802 and IQS500040581) and the Czech Ministry of Education, Youth, and Sports (LC512 and MSM6198959216).*

- [1] Salter, J., Krucinska, J., Alam, S., Grum-Tokars, V., and Wedekind, J. E. 2006. Water in the active site of an all-RNA hairpin ribozyme and effects of Gua8 base variants on the geometry of phosphoryl transfer. *Biochemistry* **45**, 686-700.
- [2] Rupert, P. B., and Ferré-D'Amaré, A. R. 2001. Crystal structure of a hairpin ribozyme-inhibitor complex with implication for catalysis. *Nature* **410**, 780-86.
- [3] Ditzler, M.A., Šponer, J., and Walter N.G., 2009. Molecular dynamics suggest multifunctionality of an adenine imino group in acid-base catalysis of the hairpin ribozyme. *RNA* **15**, 560-75.

### 1P09 POROVNATELNOST EMPIRICKÝCH POTENCIÁLŮ A KVANTOVĚ MECHANICKÝCH VÝPOČTŮ

Marie Zgarbová<sup>1</sup>, Michal Otyepka<sup>1,2</sup>, Jirí Šponer<sup>1,2</sup> a Petr Jurečka<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Katedra fyzikální chemie, Univerzita Palackého v Olomouci, tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc

<sup>2</sup>Biofyzikální ústav AV ČR, Královopolská 135, 612 65 Brno

Nejčastěji používané empirické potenciály konstruuji celkovou interakční energii z několika složek, elektrostatické, disperzní, repulzní a někdy i polarizační. Vzhledem k empirickému charakteru potenciálu ale není jasné, jestli jsou tyto složky přímo srovnatelné s kvantově chemickými referenčními výpočty, tedy zda mají přímočarou fyzikální

interpretaci. Provedli jsme proto srovnání empirických výpočtů potenciálu Cornell a kol. (AMBER)<sup>1</sup> s přesnými kvantově mechanickými výpočty metodou DFT-SAPT<sup>2,3</sup> (Symmetry Adapted Perturbation Theory), která umožňuje rozklad celkové interakční energie na fyzikálně smysluplné komponenty. Studie byla provedena pro dimery uracilu a několik komplexů, reprezentujících aminokyselinové motivy v proteinech a empirická a neempirická data byla porovnávána v závislosti na mezimolekulární vzdálenosti. Z poměrů molekulově mechanických a kvantově mechanických složek interakční energie jsme vyvodili závěry, týkající se přesnosti jednotlivých komponent silového pole a možnosti využití těchto kvantově mechanických výpočtů pro zkvalitnění parametrizace silových polí.

*Práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM6198959216, grantu LC512 a 203/09/H046.*

- [1] Cornell, W. D.; Cieplak, P.; Bayly, C. I.; Gould, I. R.; Merz, K. M.; Ferguson, D. M.; Spellmeyer, D. C.; Fox, T.; Caldwell, J. W.; Kollman, P. A.: *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, *117*, 5179-5197.
- [2] Hesselmann, A.; Jansen, G.; Schutz, M.: *J. Chem. Phys.* **2005**, *122*, 14103.
- [3] Jeziorski, B.; Moszynski, R.; Szalewicz, K.: *Chem. Rev.* **1994**, *94*, 1887-1930.

### 1P10 TEORETICKÁ STUDIE HYPERPLOCHY POTENCIÁLNÍ ENERGIE KOMPLEXU INDOL·BENZEN

Tomáš Zelený<sup>1,2</sup>, Martin Pykal<sup>1</sup>, Pavel Hobza<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, tř. 17. listopadu 12, Olomouc, Česká republika. E-mail: tomas.zeleny@upol.cz

<sup>2</sup>Ústav organické chemie a biochemie, Akademie věd České republiky, Flemingovo nám. 2, Praha 6, Česká republika.

Metodou MD/Q (Molecular dynamics/quenching) empirickým potenciálem Amber Parm94 byly vyhledána všechna minima na hyperploše potenciální energie Van der Waalova komplexu indol·benzen. Struktury získané z MD/Q byly plně reoptimalizovány na ab initio úrovni (RI-TPSS-D/TZVPP) a vypočteny hodnoty jejich stabilizačních energií. Hodnoty stabilizačních energií byly pro nejstabilnější struktury T-tvar (TS) a patrovou strukturu (ST) přepočítány na úrovni CCSD(T)/CBS a předtím reoptimalizovány CP-MP2/cc-pVTZ (Counterpoise corrected gradient). Patrová struktura je stabilizována  $\pi\cdots\pi$  interakcí, struktura T-tvaru je stabilizována vodíkovou vazbou NH $\cdots\pi$  do  $\pi$  aromatického systému benzenu a je energeticky preferována. Z experimentu [1] je známa hodnota stabilizační enthalpie 5.2 kcal mol<sup>-1</sup> (1823  $\pm$  15 cm<sup>-1</sup>). Pro dvě nejstabilnější struktury (TS a ST) byly vypočteny termodynamické příspěvky k

enthalpii při různých teplotách pro porovnání s experimentem. Závěrem lze konstatovat, že při teplotě 130 – 200 K a vhodném poměru konformací ST a TS souhlasí vypočtená hodnota enthalpie s experimentálně zjištěnou hodnotou.

[1] Braun, J.; Neusser, H. J.; Hobza, P. *J. Phys. Chem. A* 2003, 107, 19, 3918.

### 1P11 VLIV EXPLICITNÍCH MODELŮ VOD NA STABILITU A DYNAMIKU CHIGNOLINU V MOLEKULÁRNĚ DYNAMICKÝCH SIMULACÍCH

Petra Florová, Petr Sklenovský a Michal Otyepka

*Katedra fyzikální chemie a Centrum biomolekul a komplexních molekulových systémů*

*Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, tř. 17. Listopadu 12, 77146 Olomouc*

V molekulárně dynamických (MD) simulacích existují dva přístupy reprezentace vody; implicitní a explicitní modely vody. Implicitní model popisuje vodu jako kontinuum o dané dielektrické konstantě, kdežto explicitní model popisuje molekulu vody na atomární úrovni.

Naše studie se zaměřila na porovnání vlivu nejčastěji používaných explicitních modelů vody (TIP3P, TIP4P, TIP5P a SPC/E) na stabilitu a dynamiku oligopeptidu v MD simulacích (AMBER, ff99). Jako studovaný peptid byl vybrán nejmenší známý protein stabilní v roztoku - chignolin, jehož vlastnosti jsou dobře popsány z experimentálních měření. Naše výsledky ukazují, že výběr modelu vody významně ovlivňuje stabilitu peptidu. Nejlepší shodu s experimentálními a teoretickými daty vykazaly modely TIP5P a SPC/E, zatímco použití TIP3P a TIP4P modelu silně podhodnocovalo stabilitu chignolinu.

*Práce vznikla za podpory grantů LC512, MSM6198959216 a 203/09/H046.*

### 1P12 „KEYNOTE“ MINIATURIZACE V ANALYTICKÝCH SEPARAČNÍCH METODÁCH

Pavel Coufal

*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Albertov 2030, 128 40 Praha, Česká republika*

Miniaturizace je trend dnešní doby. S miniaturizací se setkáváme každý den ve všech oblastech lidské činnosti. Miniaturizace, obecně, pomáhá lidem rozlišit nejmenší částice hmoty, manipulovat s těmito nanočásticemi v prostoru, číst nejrůznější informace v nich skryté a, v neposlední řadě, pomáhá urychlovat komunikaci mezi jednotlivými částmi našeho okolí. Dnes lze bez obav říci, že miniaturizace nezanedbatelně ovlivňuje vědecký výzkum, technický

a technologický pokrok, a jakoukoliv lidskou činnost, kterou se člověk rozhodne provádět.

Miniaturizace, již v našich rodných jazycích můžeme vyjádřit slovy zmenšovanie či zmenšování, ovlivňuje chemii, analytickou chemii a analytické separační metody především. Analytická chemie a analytické separační metody spolu s ní jsou pod neustálým tlakem analytických odborníků z praxe, kteří volají po lepších parametrech analytických metod v minulosti již vyvinutých či v současnosti právě vyvíjených. Tito praktičtí odborníci byli vyslyšeni a na jejich popud byly analytické separační metody miniaturizovány.

Analytičtí chemici volali a volají po vyšší citlivosti, lepší selektivitě, rychlejší analýze, malém vzorku, nízké spotřebě činidel, větší přesnosti a správnosti, zelenějším dopadu na životní prostředí a snížení ekonomických nákladů na každou jednu analýzu. Na základě těchto smysluplných a naléhavých požadavků analytické praxe byly vyzkoušeny, vyvíjeny, vyvinuty a optimalizovány slibné nové analytické separační metody, jako kapilární kapalinová chromatografie s náplňovými a monolitickými kolonami, kapilární elektroforéza a mikrofluidní čipové techniky, jimiž všemi [1-3] se zabývá tato přednáška.

*Autor děkuje za finanční podporu projektu GAČR 203/07/0392 Grantové agentury České republiky a výzkumnému záměru MSM0021620857 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.*

- [1] „Determination of new pyridoquinoline derivatives and their quantification in urine by capillary liquid chromatography“, J. Srbek, P. Coufal, E. Tesařová, Z. Bosáková, J. Suchánková, *Journal of Separation Science*, 26 (2003) 1582-1588.
- [2] „Separation of twenty underivatized essential amino acids by capillary zone electrophoresis with contactless conductivity detection“, P. Coufal, J. Zuska, T. van de Goor, V. Smith, B. Gaš, *Electrophoresis*, 24 (2003) 671-677.
- [3] „Chip-based nano-LC-MS/MS identification of proteins in complex biological samples using a novel polymer microfluidic device“, J. Srbek, J. Eickhoff, U. Effelsberg, K. Kraiczek, T. van de Goor, P. Coufal, *Journal of Separation Science*, 30 (2007) 2046-2052.

### 1P13 STRUCTURAL STUDY ON POLYPEPTIDES USING VIBRATIONAL CIRCULAR DICHROISM

Pavčina Novotná<sup>1</sup>, Marie Urbanová<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Department of Analytical Chemistry and*

<sup>2</sup>*Department of Physics and Measurements, Institute of Chemical Technology, Prague, Czech Republic*

Two synthetically prepared polypeptides, poly- $\gamma$ -benzyl-L-glutamate (PBLG) and poly- $\beta$ -benzyl-L-aspartate (PBLA), were chosen for studying structure and its variations by vibrational

circular dichroism spectroscopy (VCD). Their secondary structures and aggregation states were studied in organic solvents under different conditions, e.g. concentration and acidity. In this contribution, spectral regions of amide I, amide II and amide A were used.

PBLG and PBLA both exhibit the  $\alpha$ -helical conformation in several helicogenic solvents. However, their helices possess usually different sense of helicity and they also differ substantially in their stability.

The influence of aggregation of PBLG on VCD spectra was followed in several helicogenic solvents:  $\text{CDCl}_3$ ,  $\text{CHCl}_3$ , benzene- $d_6$ , nitrobenzene- $d_5$  and dimethylformamide. In the presence of 15 vol.% of TFA in  $\text{CHCl}_3$  solution, the change of  $\alpha$ -helical into polyproline II – like conformation and disruption of hydrogen bridges occurred. As for PBLA, the change of conformation was observed in less acidic solution; however, the aggregation study was limited because of its lower solubility.

A special type of aggregation state, a highly ordered structure of cholesteric liquid crystals, was observed for PBLG in benzene- $d_6$  for concentrations higher than  $50 \text{ g.l}^{-1}$ . In this case, the VCD signal is about 100 times stronger than for PBLG in  $\text{CHCl}_3$ .

#### 1P14

#### RŮZNÉ POSTUPY SORPCE HUMINOVÝCH KYSELIN NA JÍLOVÉ MINERÁLY VČETNĚ STUDIA VLASTNOSTÍ INTERKALÁTŮ METODAMI RTG DIFRAKCE, UV-VIS A IČ SPEKTROSKOPIE

Jiří Pavlovský, Martin Mucha

*Katedra analytické chemie a zkoušení materiálu, Fakulta metalurgie a materiálového inženýrství, VŠB-TU Ostrava, Studentská 1767, 708 33 Ostrava-Poruba, Česká republika, e-mail:*

[jiri.pavlovsky@vsb.cz](mailto:jiri.pavlovsky@vsb.cz)

Účelem bylo připravit interkaláty, které bude možné dále využívat na sorpci těžkých kovů a aniontů, jež budou odstraňovány z vodných roztoků. Byla prováděna sorpce huminových kyselin (HA) na jílové materiály (SWy-2, SAz-1, slévárenské jíly Sabenil C30 a Bentonit 75) pěti postupy pro pH 6. Bylo určeno množství nasorbovaných HA a jejich formy z pohledu interkalace. Postupem A bylo provedeno sycení ve formě vápenatého humátu koncentrace  $100 \text{ mg/l}$ . Byly připraveny i interkaláty postupem B (sycení jílu  $\text{CaCl}_2$  a následná interkalace sodného humátu na jíl), C (postup totožný s postupem A-sycení Na-HA  $\text{Ca}^{2+}$  ionty a poté silné okyselení HCl), D (přidání  $\text{CaCl}_2$  a sodného humátu zvláště k jílu) a F (přímé přidání sodného humátu k jílu). Sycení bylo provedeno 3x včetně promytí interkalátů  $\text{CaCl}_2$ , NaCl a demineralizovanou vodou. Pro uvedené postupy byly určeny UV-VIS metodou poměry E4/E6 (formy HA) a E3/E4 (velikost molekul HA). Bylo zjištěno, že u jílu

SWy-2 a SAz-1 se interkalují do struktury pro postup A jak HA, tak fulvové kyseliny (FA), pro ostatní jíly pravděpodobně jen FA. Pro postupy D a F se interkalují pravděpodobně pouze FA, málo pak HA. Kromě interkalace HA bude z velké části probíhat proces komplexace HA přes vápenatý kation na jíly.

*Autoři děkují Grantové agentuře České republiky, která institucionálně podpořila projekt GA ČR č. 104/08/P274.*

#### 1P15 „KEYNOTE“

#### MOŽNOSTI A MEZE KVANTITATIVNÍ ANALÝZY PRÁŠKOVOU RENTGENOVOU DIFRAKČÍ

David Havlíček

*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra anorganické chemie, Albertov 2030, 128 40 Praha, Česká republika*

Kvantitativní fázová analýza směsí tuhých látek představuje náročný úkol, jehož řešení se však spíše nežli analytičtí chemici věnují chemici anorganičtí, používající difraktometry převážně k jiným než analytickým účelům. V neposlední řadě je tento problém velmi aktuální také pro fyziky, kteří se zabývají především teoretickým základem metod kvantitativní analýzy pomocí práškové rentgenové difrakce.

Předkládaná přednáška nejprve představuje běžné difrakční metody z pohledu jejich využitelnosti pro kvantitativní fázovou analýzu. Je zde zmíněna dnes již spíše historická metoda Debye-Scherrerova, dále pak difraktometrické metody pracující s bodovým detektorem a různým geometrickým uspořádáním (Bragg-Brantanoovo uspořádání, metoda paralelního svazku, texturní goniometry apod.) a konečně pak difraktometry s pozičně citlivým detektorem. Právě na zobrazení celého difrakčního záznamu pomocí pozičně citlivého detektoru lze demonstrovat rozdíly v intenzitách (ze kterých jsou pak počítány obsahy fází) získané výše uvedenými difrakčními metodami.

V další části přednášky jsou diskutovány vlastní metody kvantitativní analýzy. Difraktometrická metoda totiž takřka vylučuje některé klasické přístupy, např. metodu kalibrační křivky, díky rozdílným absorpčním koeficientům každé z fází přítomných ve vzorku. Omezenou použitelnost má i metoda konstantního přídatku. Podstatná část výkladu je v této kapitole věnovaná tzv. metodě referenčních intenzitních konstant (RIR), jejíž použitelnost je pro kvantitativní analýzu práškovou rentgenovou difrakcí víceméně univerzální.

Závěrem je uveden příklad kvantitativního stanovení obsahu krystalické fáze chrysotilu v přírodním vzorku na klasickém difraktometru s bodovým detektorem. Je zde popsán způsob přípravy silně texturovaného vzorku převedením na tenkou vrstvu na povrchu skleněného filtru pomocí speciálního zařízení, získání

intenzit z difrakčného záznamu metódou paralelného svazku a vlastní kvantitatívni stanovení metódou referenčních intenzitních konstant.

*Autor děkuje za finanční podporu projektu výzkumnému záměru MSM0021620857 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.*

#### 1P16 PREPARATION AND MODIFICATION OF QUANTUM DOTS AS SELECTIVE PROBES IN BIOANALYSIS

Marcela Lišková<sup>1,2</sup>, Karel Klepárník<sup>1</sup>, Věra Hezinová<sup>1</sup>, Ivona Svobodová<sup>1</sup>, Jan Příkryl<sup>1,2</sup>, František Foret<sup>1</sup>, Pavel Pazdera<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Institute of Analytical Chemistry of the AS CR, v.v.i., Veveří 97, 602 00 Brno, Czech Republic*

<sup>2</sup> *Brno Masaryk University, Faculty of Science, Centre for Syntheses at Sustainable Conditions and their Management, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Czech Republic, e-mail: liskova@iach.cz*

Quantum dots (QD) show a great potential as photoluminescent probes at cellular level, including in vivo immunolabeling or cellular tracking. The main advantages of quantum dots, when compared with the conventional organic fluorescent dyes, are practically no photobleaching, wide excitation and narrow emission spectra and size dependent emission wavelength. Typical materials for the preparation of quantum dots are elements of II – VI or III – V group. We have prepared CdTe water soluble quantum dots of sizes 2 - 4,5 nm by the chemical reaction between CdCl<sub>2</sub> and NaHTe at the presence of 3-mercaptopropionic acid. Thus, the photoluminescence emission maxima reach the values 520 - 700 nm. The emission spectra are narrow with the bandwidth of about 58 nm at the half height of its intensity, while the excitation band lies in the range from 300 to 550 nm. There is a lot of simple conjugation techniques for linking of QD with biomolecules to use them as selective probes in immunolabeling. The results of the conjugation with functional biomolecules via zero-length cross-linkers, checked by capillary electrophoresis with LIF detection, will be presented. The potential of this kind of labeling for the single-cell analyses with LIF detection will be discussed.

*This work was supported by the Grant agency of Academy of Sciences of the Czech Republic (KAN400310651 and KJB400310709), Grant Agency of the Czech Republic (GA203/06/1680), Ministry of Education, Youth and Sports (LC06023) and AV0Z40310501.*

#### 1P17 VÝHODY VYUŽITÍ ULTRAZVUKU V ELEKTROCHEMII, FYZIKÁLNÍ MECHANIZMY A VHODNÉ EXPERIMENTÁLNÍ USPOŘÁDÁNÍ

Jiri Klima

*J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of ASCR, v.v.i., Dolejskova 3, 182 23 Prague 8, Czech Republic, jiri.klima@jh-inst.cas.cz*

Budou popsány možnosti, které nabízí použití ultrazvuku v elektrochemii a fyzikální základy možných mechanismů.

Diskutovány budou tři možné mechanismy:

akustické proudění (acoustic streaming) vyvolané radiačním tlakem

mikrostreaming a turbulence vyvolané kavitací

tvorba mikrostržky (microjets) při kolapsu kavitující bubliny v malé vzdálenosti od povrchu elektrody.

Nové efekty mohou přinést zejména mikrojety, které mohou nejen nejvíce snížit tloušťku difúzní vrstvy (až na 0.1 μm), ale navíc jsou schopné aktivovat povrch elektrody případně jej depasivovat odstraněním blokujících filmů.

Bude diskutována konstrukce experimentálního zařízení, ve kterém se efekt mikrojetů projeví v maximální míře.

*Autor děkuje za finanční podporu grantu KONTAKT (MŠMT) č. ME 09 002*

#### 1P18 ELEKTROCHEMICKÁ METODA PRO STANOVENÍ LÁTEK S THIOLOVOU A DITHIOLOVOU SKUPINOU

Petr Jakubec<sup>1</sup>, Jan Hrbáč<sup>1</sup>, Vladimír Halouzka<sup>1</sup>, Jana Skopalová<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Katedra fyzikální chemie, Univerzita Palackého, tř. 17. listopadu 12, Olomouc, 772 01*

<sup>2</sup> *Katedra analytické chemie, Univerzita Palackého, tř. 17. listopadu 12, Olomouc, 772 01*

Elektroda ze skelného uhlíku, modifikovaná polystyrenovým filmem obsahujícím komplex Co(CHBA)<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O (CHBA = cyklohexylbutyrát) je využitelná pro stanovení látek s thiolovou a dithiolovou skupinou pomocí katalytické stripping voltametrie. Metoda je citlivá jak na látky nízkomolekulární povahy (aminokyseliny typu cystein, homocystein), tak i oligopeptidy (glutathion) a látky vysokomolekulární povahy (proteiny). Komplex Co(CHBA)<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O v prostředí acetátového pufru (pH = 4,3) reaguje s látkami obsahujícími thiolové skupiny a vzniklý adukt lze redukovat při –850 mV vs. Ag/AgCl (akumulační krok, 90 s). Redukovaná forma komplexu je poté reoxidována v potenciálovém rozsahu –850 mV až 200 mV vs. Ag/AgCl metódou LSV (Linear Sweep Voltammetry, 50 mV/s). LSV pik

při -170 mV vs. Ag/AgCl je úměrný koncentraci thiolových skupin ve vzorku. Přídavkem uhlíkových nanotrubiček (MWCNT) do polymerního filmu lze dosáhnout zvýšení citlivosti metody. Elektroda reaguje na přítomnost látek s thiolovou skupinou v řádově mikromolárních koncentracích (od cca  $2 \cdot 10^{-6}$  mol dm<sup>-3</sup>) a lze ji regenerovat při potenciálu > 300 mV vs. Ag/AgCl (2 minuty v míchaném roztoku). Díky měření v katodické oblasti je metoda prostá interferencí askorbátu, urátu a acetaminofenu. Při měření není nutné odstraňovat kyslík.

#### 1P19

### INFLUENCE OF SURFACTANTS ON DEPOSITION PROCESS WHEN CADMIUM IS DETERMINED ON BORON DOPED DIAMOND ELECTRODE

P. Tomčík<sup>1,2</sup>, M. Rievaj<sup>1</sup>, D. Bustin<sup>1</sup>, R. G. Compton<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, SK – 812 37, Bratislava, Slovak Republic, E-mail:*

*peter.tomcik@stuba.sk*

<sup>2</sup>*Department of Chemistry, Faculty of Education, The Catholic University in Ružomberok, Námestie A. Hlinku 56/1, SK-034 01, Ružomberok, Slovak Republic*

<sup>3</sup>*Physical and Theoretical Chemistry Laboratory, University of Oxford, South Parks Road, Oxford OX1 3QZ, United Kingdom*

Mercury based electrodes are widely used for the detection of heavy metals applying anodic stripping voltammetry. However its usage is in a recent times diminishing due to apparent toxicity of electrode material and discouraging environmental legislation. A possible non-toxic alternation to mercury are solid electrode like bismuth film electrode, chemically modified electrodes, carbon paste electrodes, glassy carbon electrodes or gold fibre electrodes are now more frequently applied.

One bare electrode receiving considerable attention is boron doped diamond (BDD), which is extremely robust with a low level of background interference as well as an attractively wide potential window also towards the positive potentials in aqueous media [1].

In this contribution the deposition and determination of cadmium using boron doped diamond electrode is discussed. This mercury free approach is first investigated under silent conditions then with applying an acoustic field to improve the limit of detection. The deposition process is also studied in the presence of highly passivating surfactant Triton X-100. The reason of sensitivity loss and deformation of voltammetric stripping signal is investigated by atomic force microscopy. It was shown that hindered electrodeposition (nucleation and growth) occurs in the presence of surfactants [2].

*This work was supported by Slovak Research and Development Agency under the contract No: APVV-0057-06 and VEGA project No: 1/0066/09.*

[1] L. Codognoto, S.A.S. Machado, L.A. Avaca: *Diamond Related Mater.* **11**, 1670 (2002).

[2] C.E.Banks, M.E.Hyde, P.Tomčík, R. Jacobs, R.G.Compton: *Talanta* **62**, 279 (2004).

#### 1P20

### AAS FOR TRACE ANALYSIS OF METALS

Manová Alena, Beinrohr Ernest

*Institute of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, STU Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, e-mail:*

*alena.manova@stuba.sk*

Metal quantification at low concentration levels comprises one of the most important targets in analytical chemistry. Nowadays, trace metals are determined in a great variety of environmental (such as water, soils, sediments) samples. It is evident that despite recent advances in analytical instrumentation, the use separation and preconcentration procedures is still often necessary before the determination step.

Trace concentrations of metals are usually determined by atomic spectrometry, mostly by graphite furnace atomic absorption spectrometry (GF AAS) and mass spectrometry with inductively coupled plasma ionisation (ICP MS). The superior selectivity, sensitivity and broad availability of the AAS method makes it usually the choice No 1 when seeking for a method for trace concentrations. Electrochemical methods also facilitate trace analysis of metals but cannot compete spectrometric methods owing to lower selectivity, limited number of metals measured, laborious and tedious procedures.

*This work was supported by the Slovak Grant Agency VEGA (project No. 1/0500/08) and APVV (project No. 0057-06).*

#### 1P21

### FORENSIC IDENTIFICATION AND COMPARISON OF ADHESIVE TAPES BY MEANS OF INFRARED SPECTROSCOPY (FT-IR) AND PYROLYSIS-GAS CHROMATOGRAPHY-MASS SPECTROMETRY (PY-GC/MS)

Aleksandra Augustynek<sup>1</sup>, Jakub M. Milczarek<sup>2</sup>, Janina Zięba-Palus<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Jagiellonian University, Department of Analytical Chemistry, ul. R. Ingardena 3, 30-060 Kraków, Poland*

<sup>2</sup>*Institute of Forensic Research, ul. Westerplatte 9, 31-033 Kraków, Poland*

Adhesive tape is one of the most commonly used office and industrial article that facilitate daily lives.

Simultaneously, it can be used in crimes such as murders, rapes, burglaries and robberies, for gagging and encumbering of victims, to collage packages or threat letters and also as a part of charges.

The main goal of forensic investigation of this materials is to determine, whether the tape found at the crime scene or a victim and the tape collected from a suspect were previously making up one part, thus connect person with incident or eventually connect different crimes.

The aim of presented research was application of two methods: infrared spectroscopy and pyrolysis-gas chromatography-mass spectrometry to identification and comparison of the group of 50 different adhesive tapes.

Based on the obtained FT-IR spectra the group classification was performed. Afterwards, the possibility to differentiate samples within one group (the same IR spectra) was checked by means of Py-GC/MS. 50-100  $\mu\text{g}$  samples were pyrolysed at 750  $^{\circ}\text{C}$  for 20 s. Each sample was analysed three times.

Presented research proved effectiveness of both methods in identification of adhesive tapes. It was shown, that Py-GC/MS and FT-IR are complementary methods in case of analysis of adhesive tapes.

[1] J. Zięba-Palus, J.M. Milczarek, P. Kościelniak, *Problems of Forensic Sciences*, 2006, LXVII, 235-248

[2] J. Zięba-Palus, J.M. Milczarek, P. Kościelniak, *Chemical Analysis*, 2008, Vol. 53, 109-121

### 1P22 IN SILICO TEPELNÁ DENATURACE NEGLOBULÁRNÍHO PROTEINU P18INK4C

Petr Sklenovský, Michal Otyepka

*Katedra fyzikální chemie a Centrum biomolekul a komplexních molekulových systémů, Univerzita Palackého v Olomouci, tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc*

Ankyrin repeat proteiny (ARP) patří v přírodě k nejhodněji zastoupeným proteinům, které obsahují ve své struktuře opakující se strukturní jednotku. Složením čtyř až třiceti strukturních jednotek - tzv. ankyrinových (ANK) motivů do tandemu vzniká terciární struktura ARP mající několik charakteristických rysů. Struktura ARP je neglobulární, což vede k minimálnímu množství sekvencně vzdálených kontaktů. Ukazuje se, že dominantní roli ve stabilitě a skládání proteinů hrají zejména interakce mezi sousedními aminokyselinami. Proteiny obsahující menší množství ANK motivů (cca čtyři) se skládají obdobně jako většina globulárních proteinových domén („all-none“ mechanismus), avšak s rostoucím počtem motivů roste pravděpodobnost, že se ARP složí do nativní struktury přes jeden či více intermediátů. Významný vliv na mechanismus skládání ARP proteinů má rovněž distribuce vnitřní

stability jednotlivých ANK motivů, resp. kvalitativní zastoupení aminokyselinových zbytků v jednotlivých motivech.

Věnovali jsme se studiu mechanismu skládání ARP proteinu s pěti ANK motivy – p18<sup>INK4c</sup> (p18) pocházejícího z rodiny inhibitorů proteinových kináz prostřednictvím molekulově dynamické (MD) simulace. Provedli jsme celkem čtyři MD simulace za zvýšené teploty 498 K při *NVT* podmínkách v silovém poli AMBER *ff99*. Ukazuje se, že p18 kompletně denaturuje po 4 ns simulačního času. Nejdříve ztrácí svoji nativní strukturu první dva ANK motivy (ANK motivy I a II), zatímco ostatní motivy vydrží stabilní podstatně delší simulační čas. Klastrováním simulačních dat jsme zjistili, že populace struktury p18 s ANK motivy I a II rozbalenými a ostatními v nativní konformaci je natolik významná, že ji lze považovat za intermediát tepelné denaturace.

*Tato práce vznikla za podpory grantů LC512, MSM6198959216 a 203/09/H046.*

### 1P23 PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES OF BIOPERSISTENT NANOPARTICLES AND THEIR CONCEIVABLE INTERACTIONS WITH BIOMATRICES

Peter Šimon

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

Nanoscience and nanotechnology are broad and interdisciplinary areas of research and development growing explosively worldwide in the past few years. Without doubts, nanotechnology belongs to the most promising technologies of this century. Nanomaterials (NM) are utilized for a number of application areas, such as electronic components, clothes, paints, house-cleaning products, varnishes, environmental remediation technology, energy capture and storage technology, military technology etc. They are applied also in medical and cosmetic products as well as for agriculture and food [1].

Since NMs are applied worldwide, their safety, implications on human and environmental health and potential risks are under discussion where current opinions range from “completely harmless and safe” to “extremely hazardous”. The conflicting results in the literature about the nanotoxicity are due to the lack of standardized physicochemical characterisation of the different types of nanoparticles and even different manufactures or batches of the same engineered nanoparticle.

In this paper the conceivable interactions of insoluble biopersistent nanoparticles with food matrix and living systems following from their physicochemical properties are assessed. It is reasoned that adsorption



of species and agglomeration and ageing of nanoparticles are phenomena originating in the relaxation of surface free energy. Further it has been deduced that nanoscale materials have a unique ability to interact with proteins and other biopolymers. The deductions also underline the catalytic activity of nanoparticles, primarily in oxidative reactions which may lead to the formation of reactive oxygen species and to the oxidation stress. The ability of nanoparticles to act as nuclei or germs in the induced heterogeneous

crystallization is also considered [2]. The possibility of nanoparticle migration will be also evaluated [3].

- [1] Chaudhry Q., Aitken R., Scotter M., Blackburn J., Ross B., Boxall A., Castle L. & Watkins R., *Food Additives and Contaminants*, 25 (2008) 241-258.  
 [2] Šimon P. & Joner E., *J. Food Nutr.Res.*, 47 (2008) 51-59.  
 [3] Šimon P., Chaudhry Q. & Bakoš D., *J. Food Nutr.Res.*, 47 (2008) 105-113.

## PREDNÁŠKY - SEKCIA 2: ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA

### 2P01 TAVENINY ANORGANICKÝCH SOLÍ - POPOLUŠKA V PRIEMYSELE

Miroslav Boča

*Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK 45 36 Bratislava, Slovakia*

Príspevok je zameraný na pripomenutie a vyzdvihnutie dôležitosti chémie roztavených solí, pretože významná časť priemyslu je na nej závislá, čo bude dokumentované na vybraných príkladoch klasických priemyselných aplikáciách ako aj na príkladoch aplikácií, s ktorými sa počíta v blízkej budúcnosti. Je to využitie roztavených solí hlavne v energetickom sektore, ale aj v oblasti spracovania odpadu.

Klasické použitie roztavených solí sa týka hlavne metalurgického priemyslu. Najvýznamnejšími aplikáciami sú elektrolytická výroba hliníka, horčíka či titánu alebo metalotermická výroba tantalu a nióbu alebo zirkónu. K moderným aplikáciám patrí využitie roztavených anorganických solí v chladiacich okruhoch jadrových reaktorov alebo priamo ako rozpúšťadlá jadrového paliva, využitie v akumulátoroch energie (napríklad slnečnej) alebo pri metóde Molten Salts Oxidation, čo je spracovanie nebezpečného odpadu (biologického alebo vojenského) postupom alternatívnym k priamemu spaľovaniu.

Pripodobenie k známej rozprávkovej postave – Popoluške – odráža súčasný stav v tejto oblasti chémie.

### 2P02 FLUORIDOVÉ SYSTÉMY NA BÁZE ŽIARUVZDORNÝCH KOVŮV

Blanka Kubíková, Zuzana Netriová, Miroslav Boča

*Ústav anorganickej chémie SAV, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava*

Žiaruvzdorné kovy sa všeobecne vyznačujú vysokými teplotami topenia. Hlavný záujem o ne spočíva v ich využití ako konštrukčného materiálu pre vysokoteplotné aplikácie v oblastiach, kde oceľové zliatiny, ako i väčšina nežeľzných zliatin zlyháva.

Alkalické fluoridové taveniny na báze nióbu a tantalu boli navrhnuté ako elektrolyty pre elektrolytické pokovovanie týchto kovov, pretože ich zlúčeniny sa nedajú elektrolyticky vylučovať z vodného prostredia, vzhľadom na nízku hodnotu rozkladného napätia.

Poznatky o základných fyzikálnochemických vlastnostiach roztavených solí sú potrebné pre výpočet koncentrácií pri elektrotechnickom výskume taveninových elektrolytov a pri skúmaní kinetiky procesov v nich prebiehajúcich.

Príspevok je prehľadom štúdia viacerých fluoridových systémov na báze žiaruvzdorných kovov (niób, tantal) v sústavách s fluoridmi alkalických kovov, resp. príslušným oxidom žiaruvzdorného kovu. Predmetom štúdia sa stali nasledovné systémy: MF–K<sub>2</sub>NbF<sub>7</sub> (MF = LiF–NaF, LiF–KF, NaF–KF), KF–K<sub>2</sub>NbF<sub>7</sub>–Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, KF–K<sub>2</sub>TaF<sub>7</sub>–Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, pričom sa sledovali ich základné fyzikálno-chemické vlastnosti. Študoval sa aj vplyv kationu alkalického kovu na hustotu a objemové vlastnosti v sústavách typu MF–K<sub>2</sub>NbF<sub>7</sub>.

## 2P03

**SILICA COATED AND FUNCTIONALIZED  
MANGANESE PEROVSKITE  
NANOPARTICLES FOR BIOMEDICAL  
APPLICATIONS**

Ondřej Kaman<sup>1,2</sup>, Pavel Veverka<sup>1</sup>, Michal Kačenka<sup>1,2</sup>,  
Miroslav Maryško<sup>1</sup>, Miroslav Veverka<sup>1</sup>, Vít Herynek<sup>3</sup>,  
Jaroslav Kupčík<sup>4</sup>, Lukáš Falteisek<sup>5</sup>, Jan Černý<sup>5</sup>, Petr  
Kašpar<sup>6</sup>, Pavla Jendelová<sup>7</sup>, Veronika Grünwaldová<sup>8</sup>,  
Romain Ephère<sup>9</sup>, Emil Pollert<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Physics AS CR, v.v.i., Czech Republic*

<sup>2</sup>*Department of Inorganic Chemistry, Fac Sci, Charles  
Univ Prague, Czech Republic*

<sup>3</sup>*Institute of Clinical and Experimental Medicine,  
Czech Republic*

<sup>4</sup>*Institute of Inorganic Chemistry AS CR, v.v.i., Czech  
Republic*

<sup>5</sup>*Department of Cell Biology, Fac Sci, Charles Univ  
Prague, Czech Republic*

<sup>6</sup>*Department of Measurement, Fac Elect Engn, CTU,  
Czech Republic*

<sup>7</sup>*Institute of Experimental Medicine AS CR, v.v.i.,  
Czech Republic*

<sup>8</sup>*Zentiva a. s., Czech Republic*

<sup>9</sup>*Institut de Chimie de la Matière Condensée de  
Bordeaux CNRS/Université Bordeaux, France*

Magnetic nanoparticles of  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  phase possess tunable Curie temperature and exhibit high specific power losses in ac field thus providing unique material for magnetically induced hyperthermia. Moreover, the  $T_2$  relaxivity sharply exceeds the values reported for iron oxides nanoparticles thus indicating the potential for MRI.

The  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$  nanoparticles were prepared via sol-gel procedure followed by thermal and mechanical treatment. Their magnetic properties were studied in relation to composition, size of the particles and the morphology. The silica encapsulation and subsequent size fractionation provided colloiddally stable suspensions characterized by zeta potential and hydrodynamic size measurements, electron microscopy and IR spectroscopy. The stable products were further investigated by ac hysteresis loops, magnetic heating experiments in ac field and relaxometric studies. Another coating procedure involving the use of 3-aminopropyltriethoxysilane was optimized in order to enable functionalization of the coated particles or synthesis of covalently modified sublayers of the particle shell.

The viability tests necessary for potential use of silica coated particles were carried out on rat mesenchymal stem cells, human fibroblasts and HeLa cells. The internalization of the particles was confirmed by fluorescence microscopy of the cells incubated with silica coated particles with shell sublayer modified by fluorescein. Finally, magnetic cell labelling experiments revealed high contrasts even at low content of the agent.

## 2P04

**ŠTÚDIUM SÚSTAVY  $\text{Na}_3\text{AlF}_6\text{-FeF}_3$** 

František Šimko<sup>1</sup>, Ondrej Pritula<sup>1</sup>, Aydar  
Rakhmattulin<sup>2</sup> a Catherine Bessada<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Ústav anorganickej chémie, Slovenská academia  
vied, Dúbravská cesta 9, SK-845 36 Bratislava*

<sup>2</sup>*Conditions Extrêmes et Matériaux: Haute  
Température et Irradiation (CEMHTI), CNRS, 1D  
avenue de la Recherche Scientifique, 45071 Orléans  
CEDEX 2, France*

Témou práce bolo štúdium správania sa železa ako jednej z nečistôt v procese priemyselnej výroby hliníka. Nečistoty sa v priebehu elektrolýzy dostávajú do elektrolytu prostredníctvom primárneho  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , anódových materiálov, prímiesí, a nakoniec aj eróziou a koróziou častí zariadenia. Ich prítomnosť negatívne ovplyvňuje proces, a to tým, že znižujú čistotu vyrábaného hliníka a tiež majú nepriaznivý vplyv na operačné parametre elektrolýzy (znižujú prúdovú účinnosť procesu a tým aj výťažok hliníka)<sup>1-3</sup>. Cieľom práce bolo uskutočniť štúdium správania sa železa (vo forme  $\text{FeF}_3$ ) v elektrolyte na výrobu hliníka Hall-Héroultovým spôsobom. Reakcie medzi kryolitom, ako hlavnou zložkou elektrolytu a  $\text{FeF}_3$  sa študovali pomocou viacerých fyzikálnochemických a analytických metód. Podarilo sa identifikovať stabilné, neprchavé produkty reakcií z analýz prudko ochladených vzoriek, pomocou Rtg a neutrónovej difrakčnej analýzy. Určilo sa, že pri nižších koncentráciách  $\text{FeF}_3$  sa v skúmanej sústave objavujú tuhé roztoky „kryolitovej“ a so zvyšujúcou sa koncentráciou  $\text{FeF}_3$  aj tuhé roztoky „chilolitovej“ štruktúry sumárnych vzorcov,  $\text{Na}_3(\text{Al}_x\text{Fe}_y)\text{F}_6$  a  $\text{Na}_5(\text{Al}_x\text{Fe}_y)_3\text{F}_{14}$ , ( $x + y = 1$ ). Pri koncentráciách  $\text{FeF}_3$  nad 60 mól. % sa v sústave nachádza len jeden stabilný produkt reakcie, a to  $\text{NaFeF}_4$ . Pri meraniach úbytku váhy sa potvrdila prítomnosť prchavej zložky, vznikajúcej medzi reaktantami. Pomocou Rtg difrakčnej metódy a MAS NMR spektroskopie sa podarilo určiť, že ide o zlúčeninu  $\text{NaAlF}_4$ .

[1] Thonstad J., Fellner P., Haarberg G. M., Híveš J., Kvande H., Sterten A., Aluminium Electrolysis, Fundamentals of the Hall-Héroult Process, third ed., Aluminium Verlag, Düsseldorf, 2001.

[2] Grjotheim K., International Seminar on refining and Alloyng of Liquid Aluminium and Ferro-Alloys, August 26–28, Trondheim, Norway., Sterten A., Light Metals (1991) 445–452.

[3] Sterten A., Light Metals (1991) 445–452.

## 2P05

**PŘÍPRAVA STRUKTUROVANÝCH  
KATALYZÁTORŮ DEPOZICÍ PODVOJNÝCH  
VRSTEVNATÝCH HYDROXIDŮ NA KOVOVÝ  
NOSIČ**

František Kovanda<sup>1</sup>, David Koloušek<sup>1</sup>, Jana Gaálová<sup>2</sup>,  
Květa Jiráková<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav chemie pevných látek, Vysoká škola chemicko-  
technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6,  
Česká republika

<sup>2</sup>Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Rozvojová  
135, 165 02 Praha 6, Česká republika

Směsné oxidy připravené tepelným rozkladem podvojných vrstevnatých hydroxidů se často používají v heterogenní katalýze. Depozice prekurzorů na hliníkovou fólii s vrstvou Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> vytvořenou anodickou oxidací probíhala za hydrotermálních podmínek (140 °C) v roztocích dusičnanů Co, Cu, Mn a Ni o celkové koncentraci kationtů 0,1 mol/l a neutrálním pH [1]. Vzniklé podvojně vrstevnaté hydroxidy vytvořily vrstvy silně několik mikrometrů složené z tenkých destičkovitých krystalů orientovaných přibližně kolmo k povrchu nosiče. Stejnou morfologii vykazovaly také produkty kalcinované při 500 °C. Na povrchu nosiče lze předpokládat vznik podvojných vrstevnatých hydroxidů M<sup>II</sup>-Al (M<sup>II</sup> = Ni, Co, Cu), koncentrace Mn v nanosených vrstvách byla velmi nízká. V kalcinovaných produktech byly zjištěny oxidy typu NiO a spinely, avšak žádné samostatné fáze odpovídající oxidům Cu. K redukci složek obsahujících Ni a/nebo Co docházelo až při teplotách vyšších než 400 °C, což lze vysvětlit přítomností spinelových fází a vysokou strukturní uspořádaností vzniklých oxidů. U vzorků obsahujících Cu byla redukční maxima pozorována již při 250 – 300 °C, pravděpodobně v důsledku redukce amorfních oxidů mědi. Katalytická aktivita směsných oxidů připravených na nosiči Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Al byla ověřena při spalování těkavých organických látek.

Tato práce vznikla s finanční podporou GA ČR (104/07/1400 a 106/09/1664) a MŠMT ČR (MSM 6046137302).

[1] Chen H., Zhang F., Fu S., Duan X.: In situ microstructure control of oriented layered double hydroxide monolayer films with curved hexagonal crystals as superhydrophobic materials. Adv. Mater. 18 (2006), 3089-3093.

## 2P06

**NEW CARBOXYLATO COMPLEXES OF  
COPPER(II) WITH NICOTINAMIDE**

M. Koman, J. Moncol<sup>1</sup>, and M. Melník

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

The copper(II) carboxylates have been the subject of numerous investigations, especially with nitrogen donor ligands. 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.

The copper(II) carboxylates with nicotinamide (nia) have been prepared and characterized by x-ray structure analysis. The general molecule formulas of the Cu(II) complexes are [CuX<sub>2</sub>(nia)<sub>2</sub>] – (A), [CuX<sub>2</sub>(nia)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] – (B) and [CuX<sub>2</sub>(nia)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)] – (C) (X = bz – benzoate; 2-Brbz – 2-bromobenzoate; 2-Clbz – 2-chlorobenzoate; 2-Ibz – 2-iodobenzoate; 2-NO<sub>2</sub>bz – 2-nitrobenzoate; 3-NO<sub>2</sub>bz – 3-nitrobenzoate; 4-NO<sub>2</sub>bz – 4-nitrobenzoate; 5-Me-2-Tpc – 5-methyl-2-tiophenate).

Observed data are discussed and correlated with those of known Co(II), Ni(II) Mn(II) and Zn(II) complexes found in Cambridge Crystallographic Data Base. The general formula of these complexes is [MX<sub>2</sub>(nia)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (M = Co(II), Ni(II), Mn(II) and Zn(II)), the arrangement of central atoms is octahedral and ligands are coordinated in *trans*- positions, except for [Zn(bz)<sub>2</sub>(nia)<sub>2</sub>] complex where Zn(II) atom is also hexacoordinated, but the ligands are coordinated in *cis*- positions.

## 2P07

**STRUCTURAL VARIABILITY OF 3-NITRO  
AND 3,5-DINITRO BENZOATO  
COOPER (II) COMPLEXES WITH  
PYRIDYLMETHANOLS**

Jaroslava Maroszová<sup>1</sup>, Ján Moncol<sup>1</sup>, Zuzana  
Vasková<sup>1</sup>, Dušan Valigura<sup>1</sup>, Marian Koman<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Inorganic Chemistry, Slovak Technical  
University, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava,  
Slovakia

Seven Cu(II) complexes with pyridylmethanols as a neutral ligands have been prepared. Crystal structure of [Cu(3,5-(NO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>bz)(2-PM)<sub>2</sub>]<sup>+</sup>(3,5-(NO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>bz)<sup>-</sup> (1), [Cu(3-NO<sub>2</sub>bz)<sub>2</sub>(2PM)<sub>2</sub>] (2), [Cu<sub>2</sub>(μ-3,5-(NO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>bz)<sub>2</sub>(3,5-(NO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>bz)<sub>2</sub>(2-PM)<sub>2</sub>] (3), [Cu(3-NO<sub>2</sub>bz)<sub>2</sub>(μ-3-PM)<sub>2</sub>] (4), [Cu(3,5-(NO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>bz)<sub>2</sub>(μ-3-PM)<sub>2</sub>] (5), [Cu(3-NO<sub>2</sub>bz)<sub>2</sub>(μ-4-PM)<sub>2</sub>] (6), [Cu<sub>2</sub>(3,5-(NO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>bz)<sub>2</sub>(μ-4-PM)<sub>2</sub>(4-PM)<sub>2</sub>] (7) (2-PM = 2-pyridylmethanol, 3-PM = 3-pyridylmethanol, 4-PM = 4-pyridylmethanol, 3,5-(NO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>bz = 3,5-dinitrobenzoate, 3-NO<sub>2</sub>bz = 3-nitrobenzoate) has been solved by X-ray analysis. Three of them (complex 1, 4 and 5) have been already published [1-3].

Compounds 1, 2 are monomeric complexes with a tetragonal-pyramidal (1) and tetragonal-bipyramidal (2) coordination sphere around central atom. The coordination sphere around both Cu(II) atoms in dimeric complex 3 is tetragonal-pyramidal. In polymeric complex 4 and 5 is tetragonal-bipyramidal coordination sphere around both Cu(II) atoms and in similar polymeric complex 6 with 4-PM is coordination sphere around central atom also tetragonal-bipyramidal. 4-PM exists in this complex only as a bridging ligand. In dimeric complex 7, 4-PM exists as a terminal and also as a bridging ligand. Coordination sphere around both Cu<sup>2+</sup> ions in this complex is tetragonal-pyramidal.

*We thank Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of Slovak Republic for financial support (1/4454/07).*

- [1] J. Maroszova, P. Stachova, Z. Vaskova, D. Valigura, M. Koman *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online*, 62, m109, (2006).  
 [2] P. Stachova, D. Valigura, M. Koman, T. Glowiak, *Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online*, 61, m994, (2005).  
 [3] P. Stachova, M. Korabik, M. Koman, M. Melnik, J. Mrozinski, T. Glowiak, M. Mazur, D. Valigura, *Inorg. Chim. Acta*, 359, 1275, (2006).

## 2P08

### VLASTNOSTI NITROBENZOÁTOMEĎNATÝCH KOMPLEXOV S 2,6-PYRIDÍNDIMETANOLOM

Zuzana Vasková<sup>1</sup>, Jan Moncol<sup>1</sup>, Aleš Růžička<sup>2</sup>, Dušan Valigura<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Oddelenie anorganickej chémie, FCHPT, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, SK*

<sup>2</sup>*Katedra obecné a anorganickej chémie, FCHT, Univerzita Pardubice, nám. Čs legií 565, 532 10 Pardubice, CZ*

Meďnaté komplexy s aniónmi nitrobenzoových kyselín sa prejavili ako zaujímavý objekt výskumu z hľadiska koordinačnej chémie. Poznatky o nitrobenzoátomeďnatých komplexoch s pyridínmetanolmi [1, 2] podnietili potrebu systematicky preskúmať aj prípravu a vlastnosti komplexov s 2,6-pyridíndimetanolom. Výsledkom je sedem nových zlúčenín. Látky boli charakterizované elementárnou analýzou, elektrónovou, infračervenou a EPR spektroskopiou a RTG štruktúrnou analýzou im bola vyriešená kryštálová štruktúra.

Vznik uvedených komplexov možno sledovať v závislosti od podmienok prípravy. Vo vodnom prostredí a pri Cu : 2,6-pydimine = 1 : 2 vznikli so všetkými študovanými aniónmi produkty podobného zloženia: [Cu(2,6-pydimine)<sub>2</sub>](2-NO<sub>2</sub>bz)<sub>2</sub>·1/2H<sub>2</sub>O (**1**), [Cu(2,6-pydimine)<sub>2</sub>](3-NO<sub>2</sub>bz)<sub>2</sub>

(**2**), [Cu(2,6-pydimine)<sub>2</sub>](4-NO<sub>2</sub>bz)<sub>2</sub> (**3**), [Cu(2,6-pydimine)<sub>2</sub>](3,5-(NO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>bz)<sub>2</sub> (**4**) (2,6-pydimine = 2,6-pyridíndimetanol; 2-, 3-, 4-NO<sub>2</sub>bz, 3,5-(NO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>bz = 2-, 3-, 4-nitro-, 3,5-dinitro-benzoátový anión). Z vodného roztoku pri Cu : 2,6-pydimine = 1 : 1 sa získal trimerný komplex [Cu<sub>3</sub>(4-NO<sub>2</sub>bz)<sub>4</sub>(2,6-pydimine)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (**5**). V prípade komplexu [Cu(3,5-(NO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>bz)<sub>2</sub>(2,6-pydimine)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (**6**) sa dosiahla zriedkavá koordinácia iba jedného 2,6-pyridíndimetanolového ligandu na jeden atóm meďi v rámci monoméneho komplexu. Zmena rozpúšťadla z vody na acetonitril spôsobil vznik iónovej zlúčeniny netradičného zloženia: [Cu(2,6-pydimine)<sub>2</sub>]<sup>2+</sup>·[Cu(3,5-(NO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>bz)<sub>4</sub>]<sup>2-</sup>·2(ACN) (**7**), kde ACN je acetonitril.

*Podakovanie za financovanie výskumu patrí Ministerstvu školstva SR – VEGA grant 1/4454/07.*

- [1] Maroszová J., Stachová P., Vasková Z. et al.: *Acta Crystallogr.* E62, 2006, p. m109  
 [2] Stachová P., Korabik M., Koman M. et al.: *Inorg. Chim. Acta* 359, 2006, p. 1275

## 2P09

### STUDIUM SLABÝCH VODÍKOVÝCH VAZEB U NELINEÁRNÝCH OPTICKÝCH MATERIÁLŮ NA BÁZI SLOUČEN AMINOTRIAZOLŮ

Ivan Němec<sup>1</sup>, Irena Matulková<sup>2</sup>, Ivana Císařová<sup>1</sup>, Karel Teubner<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, katedra anorganické chemie, Hlavova 8, Praha 2, 128 40, Česká republika*

<sup>2</sup>*Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., oddělení fotochemie, spektroskopie a iontové chemie, Dolejškova 3, Praha 8, 182 23, Česká republika*

Jedním z klíčových typů intramolekulárních interakcí využívaných na poli krystalového inženýrství jsou vodíkové vazby, jež patří mezi interakce typu dipól - dipól. Schopnost silných („klasických“) vodíkových vazeb orientovat polarizovatelné organické molekuly v krystalových strukturách umožnila přípravu velkého množství nových materiálů pro nelineární optiku (NLO), které jsou díky necentrosymetrickému uspořádání vhodné pro generování druhé harmonické frekvence (SHG). Zvláštní pozornost v diskutované skupině materiálů zasluhují soli organických molekul s anorganickými i organickými kyselinami. Organické polarizovatelné kationty jsou zde nositeli NLO vlastností a aniontová část sloučenin přispívá především k teplotní a optické odolnosti krystalů.

Slabé vodíkové vazby, v čele s asi nejvíce studovanou interakcí C-H...O, jsou v posledních letech středem značného zájmu, který je spojen nejen s dlouho diskutovanými otázkami existence těchto interakcí, ale i s jejich vlivem na chemické a biologické procesy. Ukazuje se, že kontakty typu C-H...O jsou nejen důležitou sekundární interakcí, ale často mají i dominantní roli v procesech molekulárního rozpoznávání a konformace, při stabilizaci inkluzních

komplexů a dokonce i z hlediska aktivity biologických makromolekul.

V předkládaném příspěvku jsou prezentovány výsledky studia vodíkových vazeb (se zvláštní pozorností věnovanou interakcím typu C-H...O) u krystalických materiálů odvozených od sloučenin 3-amino-1,2,4-triazolu a 4-amino-1,2,4-triazolu pomocí metod RTG difrakce, vibrační spektroskopie a kvantově-chemických výpočtů.

*Práce vznikla za finanční podpory grantů GAČR 203/09/0878, GAUK 58608 a MŠMT ČR MSM0021620857.*

## 2P10 SUBSTITUČNÍ DERIVÁTY METALLAKARBORANŮ JAKO ÚČINNÉ INHIBITORY HIV-1 PROTEÁZY

Václav Šícha<sup>1</sup>, Jaromír Plešek<sup>1</sup>, Bohumír Grüner<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i., č.p. 1001, 250 68 Řež u Prahy, [sicha@iic.cas.cz](mailto:sicha@iic.cas.cz)

V rámci studia substitučních derivátů karboranů a metallakarboranů se ukázalo, že některé z těchto derivátů velmi silně a selektivně inhibují aktivitu významného virového enzymu, HIV-1 Proteázy.<sup>1</sup> Inhibice tohoto enzymu zabraňuje zranění viru HIV, původce onemocnění AIDS, a další šíření do hostitelských buněk. Pro účely dalšího studia mechanismu této inhibice byla syntetizována, charakterizována a dále biologicky testována celá řada nových látek.

V prvé řadě bylo využito unikátní reakce pro syntézu kobalt bisdikarbolidových sandwichů, substituovaných organickými řetězci i anorganickými klastry, při které lze použitím prakticky libovolného nukleofilního činidla otevřít dioxanový kruh, vázaný přes kyslík (oxonium) na atom boru jedné z klecí, a připojit tak požadovaný substituent. V prezentaci bude pozornost věnována především nedávno připraveným látkám, které nesou v molekule takto připojený nenabýlý karboranový, či iontový karbolidový fragment.<sup>2</sup>

Dále se podařilo nově připravit N-substitované nitril- a aminoderiváty kobalt bisdikarbolidového sandwiche, vhodné pro další exoskeletální modifikace.<sup>3</sup>

Naším cílem bylo připravit řadu strukturně odlišných látek, která by umožnila objasnění mechanismu inhibice HIV-1 Proteázy, znásobení účinnosti inhibitorů, stanovení jejich toxicity, definici jejich chování v roztoku nebo schopnosti viru vytvářet vůči těmto látkám resistantní mutanty. Testy těchto látek, které by měly tyto jevy ozřejmit, se zabývají kolegové z Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR a Virologického oddělení Univerzity v Heidelbergu. V tomto příspěvku budou uvedeny výsledky našeho stávajícího výzkumu.

*Děkujeme skupině doc. J. Konvalinky z UOCHB AV ČR, v.v.i. za testy inhibiční účinnosti. Tato práce byla podpořena z projektu GA AV ČR (Projekt IAAX00320901), Centra základního výzkumu LC 523 a Výzkumného záměru AV0Z40320502 od MŠMT a AV ČR.*

- [1] Cígler P., Kožíšek M., Řezáčová P., Brynda P., Otwinowski Z., Pokorná J., Plešek J., Grüner B., Dolečková L., Masa M., Sedláček J., Bodem J., Kraeusslich H-G., Kral V., Konvalinka J., *PNAS*, **2005**, *102*, 15394-15399.
- [2] Šícha V., Farras P., Štíbr B., Teixidor F., Grüner B., Viñas C., *J.ORGANOMET. CHEM.*, **2009**, Vol. 694, 11, 1599-1601.
- [3] Šícha V., Plešek J., Kvičalová M., Císařová I., Grüner B., *DALTON TRANS.*, **2009**, 5, 851-860.

## 2P11 NANOSCOPIC COBALT FERRITE PARTICLES BY SONOLYSIS OF METAL ACETYLACETONATE COMPLEXES

Petr Ostřížek<sup>1</sup>, Petr Bezdička<sup>2</sup>, Zdeněk Moravec<sup>1</sup>, Jiří Pinkas<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno

[jpinkas@chemi.muni.cz](mailto:jpinkas@chemi.muni.cz)

<sup>2</sup> Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i., Husinec-Řež 1001, 250 68 Řež

Previously we studied the preparation of Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanoparticles by sonolysis of 2,4-pentanedionato complexes, M(acac)<sub>n</sub>, M = Fe, Co. Now we continue this research with the preparation of mixed metal oxide CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>. Sonochemical decomposition of mixtures of M(acac)<sub>n</sub> by high intensity ultrasound lead to amorphous Co ferrite nanoparticles containing organic matrix. The sonochemical reactivity of precursors was: Co(acac)<sub>2</sub> > Fe(acac)<sub>3</sub> > Co(acac)<sub>3</sub>. The XRD data showed that phase-pure CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> were obtained for Co:Fe ratios of 1:1.3 to 1:2.0. Variable amounts of added water allowed control of the organics content and the BET surface area (up to 218 m<sup>2</sup> g<sup>-1</sup>). SEM was used to examine the particle shape, size, and size distribution. The organic groups present in the powders were identified by IR and MS as acetate groups. TEM study showed the amorphous state of the sonochemical oxide product and its crystallization above 300 °C in agreement with the results of TG/DSC. The HT-XRD also revealed the spinel crystallization on heating. A small particle size below 20 nm of the crystalline CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> is retained up to 600 °C. The delayed crystal growth is ascribed to the protective action of a thin surface layer of pyrolyzed organics.

*This research was supported by GD106/09/H035 and MSM0021622410.*

- [1] Pinkas, J.; Reichlova, V.; Zboril, R.; Moravec, Z.; Bezdička, P.; Matejkova, J. *Ultrasonics Sonochem.* **2008**, *15*, 257.
- [2] Gedanken, A. *Ultrasonics Sonochem.* **2004**, *11*, 47.
- [3] Mastai, Y.; Gedanken, A. in: Rao, C. N. R.; Mueller, A.; Cheetham, A. K. (Eds.), *The Chemistry of Nanomaterials*, Wiley-VCH, NY, **2004**, 113.

## 2P12

**NIEKOĽKO POZNÁMOK K OBSAHU POJMU A DEFINÍCII MATERIÁLOVEJ CHÉMIE**

Milan Drábik<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Ústav anorganickej chémie SAV, 842 36 Bratislava*

Slová „materiály“ a „chémia“ sú spájané len relatívne krátku dobu, avšak materiálová chémia (alebo chémia materiálov) je už považovaná za dôležitú časť chemických vied. Stretávame sa však pomerne často aj s nekritickým používaním uvedených slovných spojení. Tieto skutočnosti boli dôvodom realizácie projektu IUPACu zameraného na definovanie obsahu a predovšetkým pojmu materiálová chémia. Jeden z kľúčových výstupov projektu bol prezentovaný v májovo-júnovom čísle *Chemistry International* – bulletin IUPAC-u, v článku [1].

Článok na začiatku oboznamuje s rastom a pôvodom disciplíny nazývanej materiálová chémia, vrátane niekoľkých definícií materiálovej chémie. V ďalších častiach odpovedá na otázky „Čo je materiál?“, ale aj „Čo nie je materiálová chémia?“ Cenné sú taktiež encyklopedické definície pojmu materiál a ich prepojenie na aktuálnu koncepciu „inovatívnych vlastností“ ako ju chápe nová komplexná veda.

V ďalšej časti je materiálová chémia charakterizovaná prostredníctvom jej kľúčových aspektov a metodík, ktoré používa pre analýzu a charakterizáciu materiálov. Tu dostávame informáciu aj o „pracovnej náplni“ materiáloveho chemika - „**snaží sa manipulovať s procesmi syntézy tak, aby dosiahol / vyprodukoval žiadanú funkciu**“. Taktiež analyzuje doterajšie definície materiálovej chémie, ako aj akceptovaný význam slova materiály a predkladá aktuálnu pracovnú definíciu pojmu: **Materiálová chémia zahŕňa uplatnenie chémie pre návrh, syntézu, charakterizovanie, spracovanie, pochopenie a používanie materiálov, obzvlášť takých, ktoré majú užitočné, alebo potenciálne užitočné, fyzikálne vlastnosti.**

Autor tohto príspevku si dovoľuje predložiť preklad anglického originálu slovenskej a českej chemickej verejnosti, pričom považuje definíciu pojmu materiálová chémia za primerane autoritatívnu a výstižnú. Autor nepochybuje o potrebe spresňujúcej diskusie v odbornej chemickej verejnosti, ktorá vyústi do jednotného definovania a používania pojmu materiálová chémia v našich geografických a jazykových podmienkach.

- [1] P. Day, L. Interrante, A. West; **What Is "Materials Chemistry"?**; *Chemistry International*, 31, 3, 4 - 8 (2009). On line na: [http://www.iupac.org:80/publications/ci/2009/3103/1\\_day.html](http://www.iupac.org:80/publications/ci/2009/3103/1_day.html)

## 2P13

**NANOSTRUCTURED CERIA DOPED WITH METAL IONS OBTAINED BY THE REVERSE MICROEMULSION METHOD AS A CATALYST FOR VOCs OXIDATION**

*Małgorzata M. Zaitz, Katarzyna Furczoń, Marcin Molenda, Lucjan Chmielarz, Zofia Piwowarska, Barbara Dudek, Alicja Rafalska-Łasocha and Roman Dziembaj*

*Department of Chemical Technology, Faculty of Chemistry, Jagiellonian University, ul. R. Ingardena 3, 30-060 Kraków; Poland*

Regulation for emission of Volatile Organic Compounds (VOCs) are in the great interest of many researchers from catalysis groups. VOCs are emitted from many industrial processes, transportation vehicles and also from destruction of polymeric matrixes which can be found in constructing materials and households items. Limits for VOC emission are becoming more restricted each year.

Several techniques, including adsorption, high-temperature incineration and catalytic incineration, have been developed for the abatement of VOCs. Among these methods thermal and catalytic incineration of VOCs seems to be the most promising ones. The operating temperature of thermal incineration of VOCs usually exceeds 750°C and therefore, in this case higher consumption of fuel and formation of by-products (e.g. NO<sub>x</sub>) is expected. On the other hand, catalytic incineration can be performed at significantly lower temperatures (200-500°C) [1] and therefore, this method is receiving an increased attention due to energy saving potential as well as the limited formation of nitrogen oxides.

The series of nanometric ceria doped with Ag<sup>+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, Y<sup>3+</sup> and La<sup>3+</sup> systems was prepared using the reverse microemulsion method with different precipitation techniques [2]. The obtained materials were characterized with respect to their crystal structure (XRD), textural parameters (BET). Catalytic activity was tested in the process of incineration of methanol.

- [1] C.H. Wang, S.S. Lin, C.L. Chen, S.H. Weng., *Chemosphere*, 65 (2006) 503.
- [2] R. Dziembaj, L. Chmielarz, M. Molenda, M.M. Zaitz, M. Drozdek, B. Dudek, *Polish J. Environmental Studies* – in press.

**2P14****MONTMORILLONITE INTERCALATES WITH PROTONATED METHYLENE BLUE CATIONS**Z. Kliška<sup>1</sup>, P. Pustková<sup>1</sup>, P. Čapková, M. Dudová*VŠB-Technical University Ostrava, Czech Republic*

Using photometric method the equilibrium of methylene blue (MB) in acid aqueous solutions was studied and percentages of protonated dye cations (MBH<sup>2+</sup>) and other forms of methylene blue were calculated for various acid aqueous solutions. The methylene blue with different proportion of MB<sup>n+</sup>, MB<sub>n</sub><sup>n+</sup> and MBH<sup>2+</sup> cations present in acid aqueous solutions was intercalated into SAz – montmorillonite and adsorption curves of total dye adsorption were evaluated. For the determination of the total amount of MB dye in aqueous solutions the vis - photometry was used. Calibration curves were prepared for related acidity of aqueous dye solutions at wavelengths 660 nm (for MB<sup>n+</sup>) and 745 nm (for MBH<sup>2+</sup>). By this way two independent results for total dye concentration in aqueous solutions were obtained. It was found that adsorption curves determined in acid aqueous solutions differ from that one determined in neutral aqueous solution. The adsorption curves determined in acid aqueous solutions consist of two waves. Samples with adsorbed MB were also studied using X-ray powder diffraction, FTIR and SEM methods. It was also verified that the first wave on adsorption curve relates to ion exchange of MB ions with interlayer Ca<sup>2+</sup> in SAz-montmorillonite cations while the second wave relates to the adsorption of MB forms on the outer SAz surface. The high amount of MB adsorbed on outer surface is attributed above all to presence of double charge MBH<sup>2+</sup> cations. The stability of adsorbed MB was tested by sequential leaching of MB/montmorillonite in acid aqueous solutions.

**Keywords:** protonated methylene blue, intercalation, montmorillonite.

*The authors are grateful for support of Ministry of Education of the Czech Republic (project MSM 6198910016) and Grant Agency of the Czech Republic (project GAČR 205/08/0869).*

**2P15****ALKALICKÉ POLYMERNÍ MEMBRÁNY PRO ALKALICKOU ELEKTROLÝZU VODY**Jaromír Hnát<sup>1</sup>, Martin Paidar<sup>1</sup>, Karel Bouzek<sup>1</sup>, Jan Žitka<sup>2</sup> a Jan Schauer<sup>2</sup><sup>1</sup>Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika<sup>2</sup>Ústav makromolekulární chemie Akademie věd České republiky, v.v.i., Heyrovského náměstí 2, 162 06 Praha, Česká republika

Vodíková ekonomika je obecně přijímána jako jedna z představ o budoucím zásobování společnosti elektrickou energií. Vodík v tomto konceptu figuruje

jako nosič energie, který je možné využít k získání elektrické energie v době zvýšené energetické potřeby.

Alkalická elektrolyza vody představuje v současné době technologicky dobře zavedený proces, využívající jako elektrolytu 25 – 30 % roztok KOH. V alkalickém prostředí se elektrolyza vody provádí z důvodu nižší agresivity prostředí, ve srovnání s kyselým prostředím, a také proto, že není nutné používat platinové kovy jako katalyzátory elektrolytických reakcí, jako je tomu v případě kyselých elektrolytů vody. Alkalická elektrolyza vody však není doposud provozována s využitím pevného polymerního elektrolytu. Toto uspořádání by přineslo mnoho výhod a v konečném důsledku by vedlo k intenzifikaci této technologie. Přestože se dané problematice věnuje značné úsilí, nebyla dosud připravena stabilní anoxová membrána pro použití v membránovém alkalickém elektrolyzátoru vody.

U nově připravených heterogenních membrán byl ověřen vliv interakce polymerní matrice s anoxovými částicemi, stanovena iontově výměnná kapacita a iontová vodivost. U vybraných vzorků membrán byla ověřena jejich funkčnost v pracovním prostředí laboratorního elektrolyzátoru.

*Tato práce byla podporována EU v rámci projektu WELTEMP, číslo kontraktu 212903.*

**2P16****STANOVENIE DIELEKTRICKÝCH VLASTNOSTÍ SEÚD POMOCOU TERAHERTZOVEJ SPEKTROSKOPIE S ČASOVÝM ROZLIŠENÍM**Marián Janek<sup>1,2</sup>, Marián Matejdes<sup>2</sup>, Atilla Gaál<sup>3</sup>, Ignác Bugár<sup>4</sup>, Vojtech Szöcz<sup>5</sup>, Dušan Velič<sup>2,4</sup>, Juraj Darmo<sup>6</sup><sup>1</sup> Technologický inštitút, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, SK-845 13 Bratislava, Slovenská Republika, marian.janek@savba.sk<sup>2</sup> Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina CH1, SK-842 15 Bratislava, Slovenská Republika<sup>3</sup> Univerzita Komenského, Fakulta Matematiky, Fyziky a Informatiky, Katedra experimentálnej fyziky, Mlynská dolina F2, SK-842 48 Bratislava, Slovenská Republika<sup>4</sup> Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, SK-81219 Bratislava, Slovenská Republika<sup>5</sup> Chemický ústav, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina CH2, SK-84215 Bratislava, Slovenská Republika<sup>6</sup> Institute of Photonics, Technical University Wien, Gusshausstraße 27-29, A-1040 Wien, Austria

Terahertzová spektroskopia v časovej doméne (THz-TDS), využívajúca napr. optoelektronické spínače v kombinácii s femtosekundovým laserom, umožňuje nasadenie tejto techniky pri charakterizácii v ďalej

infračervenej oblasti dielektrických materiálov [1], polovodičov, tuhých látok napr. skiel ale aj organických zlúčenín ako polymérov a biomolekulárnych systémov[2]. Ďalšie možnosti intenzívneho nasadenia tejto techniky sú napríklad pre obranu proti terorizmu, topografického zobrazovania, kontrole objemových materiálov a detekcie chemických zlúčenín. Všetky aplikácie využívajú skutočnosť koherentnej detekcie elektromagnetického poľa v oblasti terahertzov, ktorá umožňuje vysokú citlivosť tejto techniky a časovú rozlíšiteľnosť fázovej informácie. Koherentná detekcia THz pulzov umožňuje výpočet dielektrických vlastností – frekvenčne závislého komplexného refrakčného indexu ( $\tilde{n}_s = n_s - i\kappa_s$ ) a hrúbky študovaného materiálu z jedného merania vzorky a pozadia použitím iterácie z fixného bodu [3].

Dielektrické vlastnosti slúd v ďalekej IČ oblasti boli stanovené pomocou THz-TDS meraní. Použitý optoelektronický generátor na báze nízkoteplotného GaAs v kombinácii s optoelektronickou detekciou signálu nám umožnili detekciu vlnočtov v ďalekej infračervenej oblasti od 30 do 200  $\text{cm}^{-1}$  ktorá zodpovedá frekvenciám ~0.9 až 6.0 THz. Skúmané vzorky boli vybrané tak aby sa líšili svojim kryštalochemickým zložením jednak v izomorfných substitúciách jednotlivých vrstiev ale aj v obsahu medzivrstvových katiónov. Medzivrstvové katióny boli ďalej jednak hydratované napríklad  $\text{Mg}^{2+}$  katión v prípade vermikulitu a dehydratované katióny napríklad  $\text{K}^+$  v prípade muskovitu. Pre tieto prírodné vrstevnaté materiály bola stanovená frekvenčná závislosť komplexného indexu lomu zahŕňajúca porovnanie reálnej časti indexu lomu a absorpčného indexu.

*Táto práca je finančne podporovaná APVV-0491-07 a vedeckou grantovou agentúrou VEGA číslo 1/4457/07.*

- [1] Dai J., Zhang J., Zhang W., Grischkowsky D., J. Opt. Soc. Am., 2004, B7, 1379-1386.  
 [2] Fischer B.M., Walther M., Jepsen P.U. *Phys. Med. Biol.*, 2002, 47, 3807.  
 [3] Whitayachumnankul W., Ferguson B., Rainsford T., Mickan S.P., Abbott D. *Electronics Letters*, 2005, 41, 800.

## 2P17 STUDIUM POLYMERNÍCH NANOTKANIN S ENKAPSULOVANÝMI A EXTERNĚ VÁZANÝMI FOTOSENSITIZERY

Mosinger Jiří<sup>1,2</sup>, Lang Kamil<sup>2</sup>, Kubát Pavel<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Hlavova 2030, 128 43 Praha 2, Česká republika*

<sup>2</sup>*Ústav anorganické chemie, vvi, AVČR, 250 68 Řež, Česká republika*

<sup>3</sup>*Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, vvi, AVČR, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Česká republika*

Fotoaktivní nanotkaniny tvořené polymerními nanovláknami (průměr vláken 100-250 nm) s enkapsulovanými či externě vázanými porfyrinoidními fotosensitizery jsou efektivními producenty singletového kyslíku ( $^1\text{O}_2$ ) během ozařování viditelným světlem. Nanotkaniny byly charakterizovány pomocí UV-VIS, fluorescenční a časově rozlišené spektroskopie. Analyzovány byly doby života singletových a tripletových stavů fotosensitizerů a fotogenerovaného  $^1\text{O}_2$ .

U nanotkanin obsahujících 2 enkapsulované porfyrinoidní fotosensitizery byl prokázán účinný nezářivý přenos energie mezi fotosensitizery. Doby života tripletových stavů u enkapsulovaných fotosensitizerů nejsou ovlivněny okolím nanovláken, na rozdíl od fotosensitizerů externě vázaných. Tripletové stavy fotosensitizerů v/nanovlákně jsou účinně zhaseny kyslíkem. V případě enkapsulovaných fotosensitizerů je nutnou podmínkou dostatečná difúze  $^3\text{O}_2$  polymerem. Doby života  $^1\text{O}_2$  jsou okolím nanovláken silně ovlivněny, to vypovídá o schopnosti  $^1\text{O}_2$  difundovat do okolí nanovláken i v případě enkapsulovaných fotosensitizerů. Zdokumentována byla rovněž zpožděná fluorescence fotosensitizeru závislá na koncentraci kyslíku, kdy dochází k repopulaci singletových stavů fotosensitizeru interakcí jeho tripletových stavů s  $^1\text{O}_2$ .

Schopnost nanotkanin s enkapsulovanými i externě vázanými fotosensitizery fotogenerovat  $^1\text{O}_2$  byla potvrzena fotooxidací anorganických a organických substrátů. Baktericidní efekt fotosensitizerem dopovaných nanotkanin byl prokázán na *Escherichia coli* a ukázal autodesinfikující účinky na površích nanotkanin ozařovaných viditelným světlem [1,2].

[1] Mosinger J., Jirsák O., Kubát P., Lang K., Mosinger B. Jr. (2007) Bactericidal Nanofabrics Based on Photosensitized Formation of Singlet Oxygen. *J Mater Chem* 17: 164–166.

[2] Mosinger J., Lang K., Kubát P., Sýkora J., Hof M., Plíštil L., Mosinger B. Jr. (2009) Photofunctional Polyurethane Nanofabrics Doped by Zinc Tetraphenylporphyrin and Zinc Phthalocyanine Photosensitizers. *J Fluores* DOI:10.1007/s10895-009-0464-0.



## 2P18 PŘÍPRAVA ANIONAKTIVNÍCH SORBENTŮ Z ODPADNÍCH MATERIÁLŮ – NOVÉ MOŽNOSTI V DEKONTAMINAČNÍCH POSTUPECH

Barbora Doušová<sup>1</sup>, Lucie Fuitová<sup>1</sup>, Lenka Herzogová<sup>1</sup>,  
David Koloušek<sup>1</sup>, Ivo Šafařík<sup>2</sup>, Tomáš Grygar<sup>3</sup>,  
Vladimír Machovič<sup>1</sup>, Miloslav Lhotka<sup>1</sup>, Jan Filip<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Vysoká škola chemicko-technologická v Praze,  
Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR

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

<sup>3</sup> Ústav anorganické chemie AVČR, v.v.i., 250 68 Řež,  
ČR

<sup>4</sup> Centrum výzkumu nanomateriálů, tř. Svobody 26,  
771 46 Olomouc, ČR

Oxoanionty arsenu, selenu a 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. 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. Jako velmi účinné se jeví odpadní precipitáty na bázi HFO s převahou ferryhydritu, které vznikají samovolně z důlních drenáží a/nebo řízeně při procesu čištění důlních vod a mají nanočásticový charakter (velikost částic < 50 nm,  $S_{\text{BET}} > 300 \text{ m}^2/\text{g}$ ). Zajímavou skupinu nových sorbentů představují modifikované aluminosilikáty, především pro snadnou dostupnost, výborné povrchové vlastnosti, stabilitu v prostředí a nízkou cenu. Adsorpční kapacity vrstevnatých jílových minerálů upravených ionty  $\text{Fe}^{2+/3+}$ ,  $\text{Al}^{3+}$  a  $\text{Mn}^{2+}$  dosahují za vhodných experimentálních podmínek sorpčních kapacit čistých HFO. Perspektivními, i když netradičními sorbenty se stávají upravené biologické materiály, například kvasinky nebo smrkové piliny. Jako nejefektivnější z ověřovaných modifikací se jeví povrchová úprava ionty Fe, ke kterým jsou anionické kontaminanty přirozeně afinitní.

Práce byly podporovány výzkumnými projekty AV ČR č. IAA 401250701 a MŠMT ČR č. 6046137302.

[1] 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.

[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] Šafaříková, M., Pona, B.M.R., Mosiniewicz-Szablewska, E., Weyda, F., Šafařík, I. (2008): Dyes adsorption on magnetically modified *Chlorella vulgaris* cells. Fresenius Env. Bull, Vol 17, 486-492.

## 2P19 IMOBILIZACE AKTIVNÍCH SUBSTANCÍ

Ivana Luštická\*, Eliška Leitmannová, Libor Červený

Ústav organické technologie, Fakulta chemické  
technologie,

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze,  
Technická 5, 166 28 Praha 6

Imobilizace aktivních substancí na rozličné nosičové materiály je hojně využívána v mnoha průmyslových odvětvích. Imobilizovat lze například farmaceutické, potravinářské či parfumářské substance nebo látky používané jako detergenty a insekticidy.

Kyselina alfa-naftyloctová a kyselina alfa-indoloctová jsou významnými regulátory růstu rostlin. Ukotvením obou těchto látek by bylo možno docílit delší doby jejich působení tak i vyšší stability obou aktivních substancí.

V této práci byl sledován průběh imobilizace obou výše zmíněných kyselin a srovnáván s imobilizací kyseliny benzoové. Jako nosičové materiály byly použity hydrotalcity a anorganická molekulová síta SBA-15, MCM-41 a silika. U výše zmíněných anorganických molekulových sít byla provedena i modifikace povrchu pomocí tzv. spacerů. Jako modifikátory byly použity (3-aminopropyl)-triethoxysilan, (3-chloropropyl)-triethylsilan a (3-glycidoxypropyl)-trimethoxysilan. Množství zachycené aktivní složky bylo sledováno pomocí UV/VIS spektrofotometrie. Dále bylo sledováno postupné uvolňování aktivních látek z dané matrice metodou disoluce.

Výsledná měření poskytují naději na budoucí využití imobilizace těchto látek.

## 2P20 PŘÍPRAVA NANOČÁSTIC STŘÍBRA MODIFIKOVANOU TOLLENSOVOU REAKCÍ

Libor Kvítek<sup>1</sup>, Miroslava Vandlíčková<sup>2</sup>, Petr Blažek<sup>1</sup>,  
Aleš Panáček<sup>1</sup>, Robert Pucek<sup>1</sup>, Taťjana Nevěčná<sup>1</sup>,  
Radek Zbořil<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta  
Univerzity Palackého v Olomouci, Tř. Svobody 26,  
771 46 Olomouc

<sup>2</sup> Katedra požiarneho inžinierstva, Fakulta špeciálneho  
inžinierstva Žilinskej univerzity v Žiline, Ul. 1. mája  
32, 01026 Žilina

Nanočástice stříbra nacházejí díky svým unikátním optickým, katalytickým a biologickým vlastnostem široké využití nejen ve výzkumných laboratořích, ale i v běžné lidské praxi. Příprava těchto nanočástic je

nejčastejši založena na redukcii rozpustné stříbrné soli vhodným redukčním činidlem. V případě modifikované Tollensovy reakce je amoniakální komplex stříbra  $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$  redukován vhodným cukrem.<sup>1</sup> Mimo standardní glukosu lze využít další redukující cukry – fruktosu, galaktosu, laktosu či maltosu. Reakce díky slabému redukčnímu činidlu běží měřitelnou rychlostí pouze v alkalickém prostředí, kde ovšem dochází při určité hodnotě pH k prudkému nárůstu velikosti připravovaných částic stříbra až k hodnotám stovek nm. Za tento nárůst je zodpovědná agregace primárních nanočástic stříbra vyvolaná vysokou koncentrací elektrolytů v reakčním systému. Studie provedená na základě předpokladů teorie DLVO, která je základní teorií stability koloidních disperzí, ukázala, že v případě nanočástic stříbra je hodnota kritické agregační koncentrace ovlivněna nejen typem protiiontu, ale i druhým (neaktivním) iontem příslušného elektrolytu. Tato závislost byla pozorována výhradně u jednomocného protiiontu  $\text{Na}^+$ , kdy se hodnoty kritických agregačních koncentrací pro  $\text{NaCl}$  a  $\text{NaNO}_3$  lišily více než třikrát. Toto odlišné působení elektrolytů může hrát zásadní roli v praktických aplikacích, kde dochází až již k cílené, tak nechtěné agregaci nanočástic.

*Práce byla finančně podpořena projekty MŠMT ČR č. MSM6198959218 MSM6198959223 a IM6198959201.*

[1] Kvítek L., Pucek R., Panáček A., et al. The influence of complexing agent concentration on particle size in the process of SERS active silver colloid synthesis. *J. Mat. Chem.*, 15, 1099-1105 (2005).

## 2P21 SYNTHESIS, STRUCTURE AND SUPRAMOLECULAR HYDROGEN-BONDING NETWORKS OF DIMERIC BENZOATOCOPPER(II) COMPLEXES WITH N-METHYLNICOTINAMIDE

Jan Moncol<sup>1</sup>, Zuzana Vasková<sup>1</sup>, Jozef Halaška<sup>1</sup>, Aleš Růžička<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Department of Inorganic Chemistry, Slovak Technical University, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovakia*

<sup>2</sup>*Department of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, nám. Cs. legií 565, Pardubice 532 10, Czech Republic*

The nicotinamide as ligand in transition metal complexes creates the hydrogen-bonding coordination networks through carboxamide group [1]. On the other hand only few papers report on transition metal complexes with N-methylnicotinamide (mna) as hydrogen-bonding linkage agent in supramolecular system [2].

Now we describe preparation, structural characterization, and supramolecular organization of nine paddle-wheel dimeric copper(II) complexes featuring N-methylnicotinamide  $[\text{Cu}_2(\text{RCOO})_4(\text{mna})_2]$  (RCOO = benzoate, 2-nitrobenzoate, 4-nitrobenzoate, 2-chlorbenzoate, 2-brombenzoate, 2-jodbenzoate, 2,3-dichlorbenzoate, 2,4-dichlorbenzoate or 2,5-dichlorbenzoate) and complex  $[\text{Cu}_2(4\text{-NO}_2\text{bz})_4(\text{mna})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  (4-NO<sub>2</sub>bz = 4-nitrobenzoate), which is first example, where N-methylnicotinamide is present as bridging ligand.

*We thank Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of Slovak Republic for financial support (1/4454/07).*

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

[2] Moncol, J.; Mudra, M.; Lönnecke, P.; Hewitt, M.; Valko, M.; Morris, H.; Svorec, J.; Melnik, M.; Mazur, M.; Koman, M. *Inorg. Chim. Acta*, **2007**, 360, 3213.

### PREDNÁŠKY - SEKCIA 3: ORGANICKÁ CHÉMIA A POLYMÉRY

#### 3P01

#### ÚLOHA TENZIDOV PRI PRÍPRAVE VODIVÝCH POLYMÉROV A KOMPOZITOV

Mária Omastová

Ústav polymérov, SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36  
Bratislava, Slovensko

Polypyrol (PPy) a polyanilín (PANI) boli pripravené chemickou oxidačnou polymerizáciou monoméru vo vodnom roztoku obsahujúcom oxidačné činidlo a rôzne typy tenzidov. Zistilo sa, že iba aniónové tenzidy sa počas syntézy zabudovávajú do polymérneho reťazca, čo bolo dokázané elementárnou analýzou, FTIR spektroskopiou a tiež štúdiom morfológie PPy a PANI [1]. Metódou röntgenovej fotoelektrónovej spektroskopie (XPS) sa zistilo, že pri nižšom obsahu tenzidu v polymerizačnom roztoku sa anióny tenzidu zabudujú do štruktúry PPy častíc ako ko-dopanty, zatiaľ čo pri vysokej koncentrácii sú anióny tenzidu prítomné v polyméroch ako ko-dopanty a aj ako tenzidy na povrchu častíc.

Získané poznatky o vplyve tenzidov na vlastnosti vodivých polymérov sme v ďalšej práci využili pri modifikácii rôznych substrátov vodivými polymérmi.

Modifikáciou SiC častíc polypyrolom v prítomnosti aniónového tenzidu sa pripravil časticový kompozit, ktorého merná elektrická vodivosť bola až o tri rády vyššia ako vodivosť častíc pokrytých iba polypyrolom [2].

Študovala sa modifikácia sodných a organomodifikovaných montmorillonitov (MMT) polypyrolom. Pri pokrývaní organomodifikovaných MMT častíc sa pri použití aniónového tenzidu počas polymerizácie výrazne zvýšila elektrická vodivosť týchto kompozitov v porovnaní s kompozitmi, ktoré sa pripravili vo vodnom roztoku metanolu. Polypyrol čiastočne interkaluje vrstvy organomodifikovaných MMT a lepšie pokrýva práve povrch organomodifikovaných, hydrofóbných MMT vrstiev ako vrstvy hydrofilných sodných typov MMT [3].

Zaujímavé výsledky sa dosiahli aj pri modifikovaní uhlíkových nanotrubičiek rôznymi typmi tenzidov.

Táto práca bola finančne podporená Vedeckou a grantovou agentúrou Ministerstva školstva SR a Slovenskej akadémie vied VEGA 2/7103/27.

- [1] M. Omastová, M. Trchová, J. Kovářová, J. Stejskal, *Synth. Met.* 138 (2003) 447.  
 [2] M. Mičušík, M. Omastová, K. Boukerma, A. Albouy, M.M. Chehimi, M. Trchová, P. Fedorko, *Polym. Engn. Sci.*, 47 (2007) 1198.  
 [3] M. Mravčáková, M. Omastová, K. Olejníková, B. Pukánszky, M. M. Chehimi, *Synth. Met.* 157 (2007) 347.

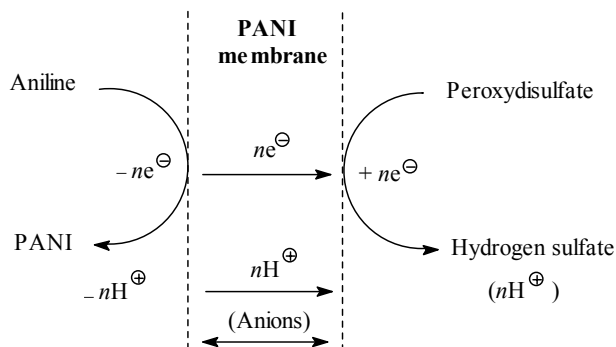
#### 3P02

#### A NEW APPROACH FOR THE SYNTHESIS OF POLYANILINE WITH SEPARATED REACTANTS

N. V. Blinova, M. Trchová, J. Stejskal

*Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of  
Sciences of the Czech Republic,  
Heyrovsky Sq. 2, CZ-162 06 Prague 6, Czech Republic*

A modification of polyaniline (PANI) synthesis consisting in separating aniline and oxidant solutions which meet only at the interface has been demonstrated. The principle of separated reactants has been applied to explain the mechanism of polymerization on membranes [1], in gelatin gels [2], and in modifying polystyrene latex with PANI. The concept of coupled PANI-assisted redox reaction by means of transport of electrons and protons through conducting PANI membrane produced at the interface of reactant phases in the beginning of reaction has been proposed. Owing to the electronic and ionic conductivity, PANI allows redox reactions indirectly, without physical contact redox agents by transferring electron and ions between reactants. This concept will be operative in all cases where aniline and oxidant molecules are separated in space by a body of polyaniline.



**Figure.** During the oxidation of aniline to PANI (left) with peroxydisulfate (right), the electrons are transferred from aniline molecules to oxidant molecules through the *conducting* PANI membrane. Protons accompany them at the same time in order to maintain the electroneutrality of the system.

- [1] Blinova N.V., Stejskal J., Trchová M., Čirić-Marjanović G., Sapurina I.: *J. Phys. Chem. B.* 111, 2440–2448 (2007).  
 [2] Blinova N.V., Trchová M., Stejskal J.: *Eur. Polym. J.* 45, 668–673 (2009).

**3P03****PEVNÉ FORMY MOLEKUL**

Bohumil Kratochvíl, Michaela Hájková, Michal Hušák

*Ústav chemie pevných látok, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6*

Skupenství není vlastností individuální molekuly, ale jejich velkého souboru. Pevné formy molekul jsou buď krystalické, semikrystalické nebo amorfni fáze. Z chemického, resp. fyzikálního hlediska se jedná o ansoolváty (nejčastěji anhydráty), stechiometrické solváty (hydráty), soli, kokrystaly a polymorfy všech těchto typů. U amorfni fází připadají v úvahu pouze ansoolváty a soli, protože obsah solventu je zde proměnný. Doposud nebyl popsán žádný amorfni kokrystal. Krystalizační potenciál některých molekul je obrovský, takže mohou tvořit až přes sto pevných forem (např. sulfathiazol). Z aplikačního hlediska (především farmacie) je podstatné, že jednotlivé pevné formy určité molekuly se liší svými vlastnostmi (zejména rychlostí rozpouštění). Vyhledání všech pevných forem je otázkou času, trpělivosti, peněz, experimentálního vtipu a štěstí. Zvláště u polymorfů může být situace velmi komplikovaná. Jako modelový příklad bude prezentován „screening“ pevných forem aktivní substance tropium chloridu (spasmolytikum, Interpharma s.r.o.), který byl zatím nalezen ve formě dvou polymorfů, methanol solvátu a aceton solvátu.

*Problematika byla řešena za podpory projektů NPV II 2B08021 a MSM6046137302 MŠMT ČR.*

**3P04****SOLVATOCHROMIE JAKO NÁSTROJ STUDIA SLOUČENIN S NELINEÁRNÍMI OPTICKÝMI VLASTNOSTMI**

Oldřich Pytela<sup>1</sup>, Filip Bureš<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup>*Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice,*

<sup>1</sup>*oldrich.pytela@upce.cz, <sup>2</sup>filip.bures@upce.cz*

Spektrální vlastnosti organických sloučenin A- $\pi$ -D typu jsou dány především jejich chemickou strukturou, ale mohou být ovlivněny i vnějšími faktory, mimo jiné použitým rozpouštědlem. Pro studium vlivu rozpouštědel byla změřena absorpční elektronová spektra 12 sloučenin A- $\pi$ -D typu s elektronakceptorními skupinami CN a elektrondonorními skupinami N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> ve 32 typově rozdílných rozpouštědlech a vyhodnocena vlnová délka nejdouhovlnnějšího pásu ve spektru  $\lambda_{\max}$ . Struktura studovaných sloučenin byla charakterizována 11 kvantově-chemickými charakteristikami. Matice hodnot  $1/\lambda_{\max}$  byla analyzována metodami s latentními proměnnými a následnou interpretací izolovaných vektorů lineární regresí. První latentní proměnná vysvětlila 79.7% a druhá 11.3% variability matice

hodnot  $1/\lambda_{\max}$  (celkem 91%). Analýza rozkladu odpovídajícího první latentní proměnné ukázala na vztah mezi velikostí kavity (charakterizovanou Hildebrandovým parametrem  $\delta_H$  a molárním objemem  $V_m$ ) a relativní permitivitou rozpouštědla (charakterizovanou funkcí  $(\epsilon-1)/(2\epsilon+1)$ ) ve vazbě na hodnotu  $E_{LUMO}$ , délku molekuly solutu a poměr šířky ku délce molekuly solutu. Analýza rozkladu odpovídající druhé latentní proměnné ukázala na vztah velikosti kavity a polarizability rozpouštědla (charakterizované funkcí  $(n^2-1)/(n^2+2)$ ) ve vazbě na dipólmoment vztažený na délku molekuly solutu, počet skupin N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> a poměr šířky ku délce molekuly solutu. Obecně vyšší polarita a větší kavita rozpouštědla způsobuje hypsochromní posun, větší polarizabilita rozpouštědla a větší délka i šířka molekuly solutu bathochromní posun.

[1] Bureš F., Pytela O., Diederich F. J.: Phys. Org. Chem. **2009**, 22, 155-162.

**3P05****TEORETICKÁ STUDIE NUKLEOFILNÍ AROMATICKÉ SUBSTITUCE NA 2,3,4,5,6-PENTAFLUORBIFENYLU**

Jaroslav Kvíčala, Michal Beneš, Oldřich Paleta

*Ústav organické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6*

Pentafluorbifenylová skupina je strukturálním fragmentem mnoha supramolekulárních systémů. Výhodným modelem pro predikci jejího chování je 2,3,4,5,6-pentafluorbifenylyl. Při studiu jeho reaktivity jsme zjistili, že vznikají výhradně produkty substituované v poloze 4. Pro lepší pochopení této reakce jsme se ji rozhodli studovat pomocí výpočetních metod.

Nukleofilní aromatická substituce probíhá zpravidla dvoukrokovým mechanismem přes Meisenheimerův komplex. Při teoretickém studiu substituce 2,3,4,5,6-pentafluorbifenylylu amoniakem DFT metodami jsme však lokální minima odpovídající intermediátům substituce na hyperploše potenciální energie nenalezli. Substituce v tomto případě probíhá jedнокrokově přes jediný tranzitní stav v analogii k analogickému teoretickému studiu substituce pentafluornitrobenzenu amoniakem [1.].

Teoretické studium substituce 2,3,4,5,6-pentafluorbifenylylu fluoridovým nebo hydroxidovým aniontem komplikuje nepřírodně vysoká reaktivita obnažených aniontů. Dříve publikovaná studie reakce polyfluorovaných aromátů s fluoridovým iontem tak vedla k odpovídajícím Meisenheimerovým komplexům jako jediným minimálním strukturám [2.]. Proto jsme pro studium substituce těmito ionty použili odpovídající lithné soli mikrosolvátované dvěma molekulami dimethyletheru. Na hyperploše potenciální energie jsme následně lokalizovali minima odpovídající koordinovaným eduktům a produktům i

tranzitní stav odpovídající jedнокrokové aromatické substituci.

Pro všechny tři studované případy jsme zjistili, že energie tranzitního stavu substituce v poloze 4 je o ca. 10 kJ/mol nižší než v poloze 3, což odpovídá více než 98% regioselektivitě ve shodě s experimentálními údaji.

[1] Tanaka K., Deguchi M., Iwata S.: *J. Chem. Res. (S)* **1999**, 528-529.

[2] Muir M., Baker J.: *J. Fluorine Chem.* **2005**, 126, 727-738.

### 3P06 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA SUBSTITUOVANÝCH INDOLIZIDINOLOV

Štefan Marchalín, Jozefína Žúžiová a Peter Šafář

*Oddelenie organickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika. E-mail: stefan.marchalin@stuba.sk*

Indolizidínový skelet súčasťou veľkého počtu prírodných zlúčenín, nachádzajúcich sa v rastlinnej a živočíšnej ríši, vykazujúcich široké spektrum biologickej aktivity. Medzi uvedenými zlúčeninami najvýznamnejšiu skupinu predstavujú polyhydroxyindolizidíny, z ktorých niektoré sú veľmi účinnými inhibítormi glykozidáz [1]. Pretože štúdium vzťahu medzi štruktúrou a biologickou aktivitou nie je u vyššie spomenutých prírodných látok ukončené, syntéza nových analógov týchto zlúčenín stereodivergentnými metódami zostáva aktuálnou výzvou pre organických chemikov. Náš syntetický prístup k substituovaným indolizidinolom využíva internú asymetrickú indukciu, pričom chiralita sa v molekule derivuje z vhodne zabudovaného stereogénneho centra. Kľúčovým krokom v syntéze cieľových zlúčenín-7-fenyl(etyl)indolizidín-8-olov je diastereoselektívna redukčná desulfurizácia (benzo)-tienoindolizidínov [2,3].

*Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0210-07 a grantom VEGA č. 1/0161/08.*

[1] Winchester, B. G. *Tetrahedron: Asymmetry* **2009**, 20, 645.

[2] Marchalín, Š.; Žúžiová, J.; Kadlečíková, K.; Šafář, P.; Baran, P.; Dalla, V.; Daich, A. *Tetrahedron Lett.* **2007**, 48, 697.

[3] Šafář, P.; Žúžiová, J.; Marchalín, Š.; Tóthová, E.; Prónayová, N.; Švorc, E.; Vrábel, V.; Daich, A. *Tetrahedron: Asymmetry* **2009**, 20, 626.

### 3P07 EFFICIENT SYNTHESIS AND CYTOTOXIC ACTIVITY OF SOME SYMMETRICAL DISULFIDES DERIVED FROM THE 4(1H)- QUINOLINONE SKELETON

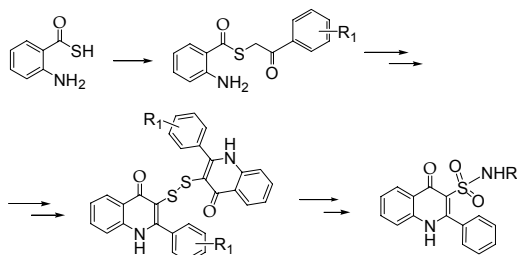
Miroslav Soural<sup>1</sup>, Jan Hlaváč<sup>1</sup>, Pavel Hradil<sup>1</sup>, Marián Hajdúch<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc, Czech Republic, Fax: +420585634405*

<sup>2</sup> *Laboratory of Experimental Medicine, Departments of Pediatrics and Oncology, Faculty of Medicine, Palacký University and Faculty Hospital in Olomouc, Puškinova 6, 775 20 Olomouc*

Phenacyl anthranilates were described as the suitable starting material for the simple preparation of 2-(substituted phenyl)-3-hydroxyquinolin-4(1H)-ones [1.]. When phenacylamides of anthranilic acid were used instead, the corresponding 2-(substituted phenyl)-3-aminoquinolin-4(1H)-ones were obtained [2.]. Recently, the derivatives of such substituted quinolin-4(1H)-ones became a focus of our interest as biologically promising compounds [3.].

In our present study, we describe the preparation of novel organic disulfides containing the 2-(substituted phenyl)-quinolin-4(1H)-one skeleton with use of the cyclization method mentioned above. The reaction sequence starts from thioanthranilic acid esterified with various bromoacetophenones. Cyclization of the resulting phenacyl thioanthranilates in trifluoroacetic acid afforded a mixture of 2-(substituted phenyl)-3-sulfanylquinolin-4(1H)-ones and 3,3'-disulfanediybis[2-(substituted phenyl)quinolin-4(1H)-ones]. Heating the mixture in *o*-xylene gave 3,3'-disulfanediybis[2-(substituted phenyl)quinolin-4(1H)-ones] of high purity. Also a simple method of preparation of 2-phenylquinolin-4(1H)-one-3-sulfonamides from the 3,3'-disulfanediybis[2-phenylquinolin-4(1H)-one] is described.



3,3'-Disulfanediybis[2-(substituted phenyl)quinolin-4(1H)-ones] exhibited significant *in vitro* cytotoxicity against various cancer cell lines including chemotherapy resistant subclones. Additionally, the activity against specific childhood cancers has been observed. The data obtained will be reported and discussed.

- [1] P. Hradil, J. Jirman, *Collect. Czech. Chem. Commun.* 60 (1995) 1357-1366.  
 [2] P. Hradil P., M. Grepl, J. Hlaváč, M. Sural, M. Maloň, V. Bertolasi, *J. Org. Chem.* 71 (2006) 819.  
 [3] P. Krejčí, P. Hradil, J. Hlaváč, M. Hajdúch, Patent WO 2008028427 (2008).

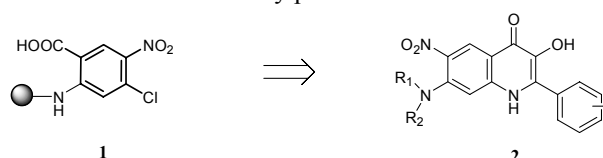
**3P08**  
**EFFICIENT SOLID-PHASE SYNTHESIS OF 6-NITRO-3-HYDROXY-4(1H)-QUINOLINONES WITH TWO DIVERSITY POSITIONS.**

Soňa Křupková, Miroslav Sural and Jan Hlaváč

*Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc, Czech Republic*

3-hydroxyquinolinones represent an interesting group of heterocyclic compounds. This azaanalogues of naturally occurring flavonoids have been intensively studied because of their possible biological activity. In previous studies we described significant cytotoxic and immunosuppressive effect of some 3-hydroxyquinolinones derivatives.<sup>1-3</sup>

In our current investigation we focused on the preparation of novel 6-nitro-2,7-substituted-3-hydroxy-4(1H)-quinolinones **2** with use of solid-phase synthesis. A well known method of preparation via the cyclization of phenacylanthranilates in acids was used. As the starting material served N-immobilized 4-chloro-5-nitroanthranilic acid **1** which after replacement of the chlorine atom with various amines and subsequent esterification with various bromoketones afforded substituted phenacylanthranilates. This precursors were cyclized by heating in acids to the corresponding hydroxyquinolinones. The developed pathway is a simple method facilitating synthesis of chemical library possessed of aimed structures with 2 diversity positions.



*Supported by grant of Ministry of Education, Youth and Sport of the Czech Republic No. MSM6198959216 and FM EEA/Norska (A/CZ0046/1/0022 and CZ0099).*

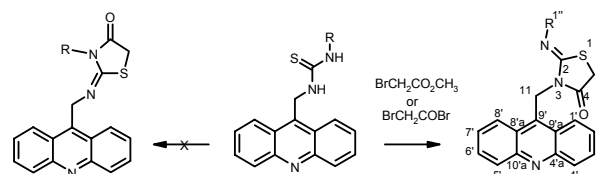
- [1] Hradil, P.; Krejčí, P.; Hlaváč, J.; Wiedermannová, I.; Lyčka, A.; Bertolasi, V.: *J. Heterocyclic Chem.* 2004, 41, 375-379.  
 [2] Sural, M.; Hlaváč, J.; Hradil, P.; Frysova, I.; Hajdúch, M.; Bertolasi, V.; Maloň, M.: *Eur. J. Med. Chem.* 2006, 41, 467-474.  
 [3] Krejčí, P.; Hradil, P.; Hlaváč, J.; Hajdúch, M.: Patent WO 2008028427

**3P09**  
**NOVÉ TIOMOČOVINY A TIOSEMIKARBAZIDY AKRIDÍNU A ICH CYKLIZAČNÉ REAKCIE**

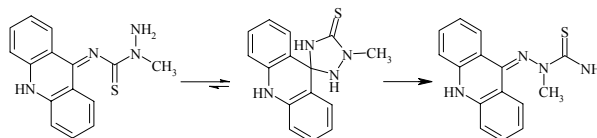
Ján Imrich, Mária Vilková, Jana Tomaščíková, Zdenka Bedlovičová, Eva Balentová, Karel D. Klika

*Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovenská republika*

Akridin-9-ylmetyltioamocoviny pripravené *in situ* spontánne poskytli nové spiro[dihydroakridín-9'[10'H],5-imidazolídín]-2-tióny. Tieto reagovali s bifunkčnými elektrofilmi (metylbrómacetát, brómacetilbromid) otvorením spirocyklu za vzniku jediného typu tiazolidínového produktu na rozdiel od akridin-9-yltioamocovín, ktoré dávali dva regioizoméne tiazolidínové produkty.



Akridin-9-ylizotiokyanát a akridin-9-ylhydrazín sme využili ako vhodné syntóny na prípravu nových tiosemikarbazidov, ktorá prebiehala regioselektívne za vzniku zmesi tiosemikarbazidov a ich spiro foriem, pričom spirocyklus sa otváral na opačný izomér.



Opačne substituované tiosemikarbazidy, karbazidy a izotiosemikarbazidy sa získali reakciou akridin-9-ylhydrazínu s izotiokyanátmi a ich následnou oxidáciou a metyláciou. S metyl brómoacetátom vznikli stabilné 1,3-tiazolidín-4-óny, naproti tomu, s brómoacetónitrilom primárne vzniklé cykly prešmykovali (Dimroth) na regioizoméne 1,3-tiazolidín-4-imíny.

*Podakovanie: VEGA 1/0476/08 a štátny program NMR.*

- [1] Balentová E., Imrich J., Bernát J., Suchá L., Vilková M., Prónayová N., Kristian P., Pihlaja K., Klika K. D.: *J. Heterocyclic Chem.* 43, 645 (2006).  
 [2] Klika K. D., Imrich J., Vilková M., Bernát J., Pihlaja K.: *J. Heterocyclic Chem.* 43, 739 (2006).  
 [3] Z. Fröhlichová, J. Tomaščíková, J. Imrich, P. Kristian, I. Danihel, S. Böhm, D. Sabolová, M. Kožurková, K.D. Klika: *Heterocycles* 77, 1019-1035 (2009)

## 3P10

## IONEXY JAKO IMOBILIZÁTORY PRO KATALYTICKÉ SYSTÉMY V ČISTŠÍCH SYNTÉZÁCH

Pavel Pazdera<sup>1</sup>, Barbora Andělová<sup>1</sup>, Vladimíra Datinská<sup>1</sup>, Marcela Chmielová<sup>1</sup>, Dana Němečková<sup>1</sup>, Jan Šimbera<sup>1,2</sup> a Karel Zelinka<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centrum pro syntézy za udržitelných podmínek a jejich management, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Česká republika

<sup>2</sup>Lučební závody Draslovka a.s. Kolín, Havlíčkova 605, 280 99 Kolín, Česká republika

Imobilizace katalytických systémů na organických nebo anorganických polymerech je jedním z významných trendů „chemie pro udržitelný rozvoj“, tzv. „čistší chemické produkce“ i „zelené chemie“ [1, 2]. Imobilizované katalyzátory (solid supported catalysts) mají podobně jako heterogenní katalyzátory výhodu snadné separace z reakčních směsí pro jejich opětovné použití v syntetických procesech, ale také výhody homogenních katalyzátorů. V případě imobilizovaných komplexů d-kovů proto, že tyto mají možnosti variability oxidačního stupně, počtu a typů ligandů. Pro vysokou aktivitu katalyzátoru je důležitá flexibilita aktivního centra, která závisí především na vzdálenosti páteře katalyzátoru a aktivního centra.

V příspěvku bude podán přehled v současnosti nejpoužívanějších ionexů z hlediska jejich struktury a možností imobilizovat snadno dostupné komplexy d-kovů, kvartérní amoniové soli a analoga 4-*N,N*-dimethylaminopyridinů jako levných a dostupných katalytických systémů pro organické syntézy. Dále budou na konkrétních příkladech nastíněny možnosti jejich syntetických aplikací.

[1] *Green Chemistry and Catalysis*, Sheldon R.A., Arends I., Hanefeld U., Wiley – VCh, Weinheim 2007.

[2] *Green Chemistry and Engineering*, Doble M., Kruthiventí A. K., Academic Press – Elsevier, Amsterdam 2007.

## 3P11

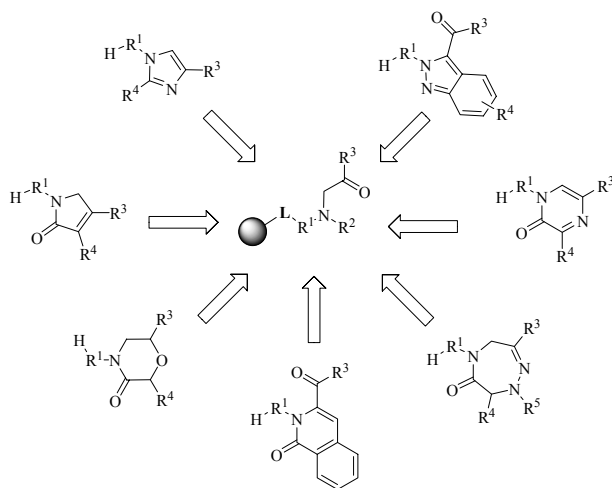
## SOLID-PHASE SYNTHESIS OF DIVERSE HETEROCYCLES FROM POLYMER-SUPPORTED AMINO KETONES

Naděžda Pudelová,<sup>1</sup> Isabelle Bouillon,<sup>2</sup> Jaroslav Zajíček,<sup>2</sup> Jan Kočí,<sup>2</sup> and Viktor Krchňák<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Current address: Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, Palacky University, Tr. Svobody 8, 771 46 Olomouc, Czech Republic

<sup>2</sup>Department of Chemistry and Biochemistry, 251 Nieuwland Science Center, University of Notre Dame, Notre Dame, Indiana 46556, USA

Corresponding author: vkrchnak@nd.edu



Polymer-supported amino ketones were prepared from resin-bound diamines/amino alcohols/ $\alpha$ -amino acids, and bromoketones/bromoacetates. Amino ketones were converted into several heterocyclic compounds. Different sizes of heterocycles (5-, 6-, and 7-membered rings) were synthesized including 1*H*-imidazoles [1], 2*H*-indazoles [2], pyrazin-2-ones, dihydro-triazepin-6-ones, isoquinolin-1-ones, morpholin-3-ones, and dihydro-pyrrol-2-ones. Choosing of efficient building blocks enabled to close a fused ring systems, namely 3,4-dihydropyrazino[1,2-*b*]indazoles [3], 3,5,8,9-tetrahydro-2*H*-imidazo[2,1-*d*][1,2,5]triazepines, and pyrazino[1,2-*b*]isoquinolinones.

Commercially available building blocks, mild reaction conditions and high purity of crude products enabled syntheses of combinatorial arrays of some of these heterocycles.

Supported by the Department of Chemistry and Biochemistry at the University of Notre Dame, the NIH (GM079576), and the Ministry of Education, Youth and Sport of the Czech Republic (MSM 6198959216).

[1] Kočí J.; Pudelová N.; Krchňák V. *J. Comb. Chem.* **2009**, *11*, 397-402

[2] Bouillon, I.; Zajíček, J.; Pudelová, N.; Krchňák, V. *J. Org. Chem.* **2008**, *73*, 9027-9032

[3] Pudelová, N.; Krchňák, V. *J. Comb. Chem.* **2009**, *11*, 370-374

### 3P12 OVĚŘENÍ VLASTNOSTÍ SMĚSNÝCH POLYMERŇNÍCH STABILIZÁTORŮ NA MODELOVÝCH POLYURETHANOVÝCH SYSTÉMECH

Luboš Prokúpek<sup>1</sup>, Tereza Titěrová<sup>1</sup>, Vladimír Špaček<sup>2</sup>,  
Miroslav Večeřa<sup>1</sup>, Jiří Podešva<sup>3</sup>, Jana Kovářová<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-  
technologická, Studentská 95, 53210 Pardubice;

<sup>2</sup>Synpo, a.s., S. K. Neumanna1316, 53207 Pardubice;

<sup>3</sup>Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i.,  
Heyrovského nám. 2, 16206 Praha 6

Každý polymerní materiál má velmi odlišnou vlastní schopnost odolávat oxidaci nebo působení UV – záření. Rozdíly ve stabilizaci proti tomuto procesu vychází nejen z mnoha typů chemické struktury polymerů, ale také z rozmanitosti výrobních postupů a morfologie (krystalinity, orientace apod.). Přídavek stabilizátorů je nejrozšířenější, nejvýhodnější a nejefektivnější používanou metodou pro stabilizaci polymerů. Značnou nevýhodou běžně používaných stabilizátorů (UV absorbérů, antioxidantů apod.) je, zvláště za zvýšených teplot, jejich tendence se odpařovat nebo se za určitých podmínek vymývat z polymerní matrice. V důsledku toho klesá jejich koncentrace a tím stabilizační účinek. Tomu lze zabránit syntézou polymerních antidegradantů, jejichž difúze v polymerní matici je podstatně pomalejší a tenze par prakticky nulová.

Cílem této práce bylo studium vlastností syntetizovaných polymerních směsných stabilizátorů, které jsou tvořeny termooxidačním a UV stabilizátorem, jež jsou připojeny pomocí distančního bočního řetězce na polybutadienový řetězec v různých poměrech<sup>1</sup>. Vzniklý polymerní stabilizátor byl poté zpracován do substrátů, kterými jsou modelové polyurethanové systémy na bázi dvou a vícefunkčních isokyanátů. U jednotlivých systémů byly stanoveny gelovou permeační chromatografií (GPC) molekulové hmotnosti. Teplota skelného přechodu byla měřena pomocí diferenciální skenovací kalorimetrie (DSC) a stabilizační účinek proti UV záření byl testován v QUV panelu. Dále byla stanovena reakční kinetika u systému s dvoufunkčním isokyanátem (toluen-diisokyanát – TDI).

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR č. 203/07/0987.*

[1] Podešva J., Kovářová J.: J. Appl. Polym. Sci. 87, 885 (2003).

### 3P13 VYSOCE VĚTVENÉ POLYIMIDY NA BÁZI TRIS(2-AMINOETHYL)AMINU

Petr Sysel, Martina Traxmandlová, Evgenia Minko

Ústav polymerů, Vysoká škola chemicko-  
technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká  
republika; Petr.Sysel@vscht.cz

Lineární aromatické polyimidy jsou ceněny pro svou celkovou odolnost v širokém teplotním rozmezí (– 150 až 200 °C). Nacházejí využití v podobě tenkých vrstev v (mikro)elektronice, leteckém průmyslu a také jako membrány v separačních technologiích. Určitý posun ve škále vlastností, a tudíž i potenciálních vlastností, přinášejí vysoce větvené aromatické polyimidy. Vysoce větvené polymery se vyznačují vysokým stupněm větvení, specifickou hierarchií řetězců a velkým počtem koncových funkčních skupin. Pro přípravu vysoce větvených polyimidů se využívají monomery typu A<sub>2</sub> a B<sub>3</sub> (A<sub>2</sub> bývá převážně aromatický dianhydrid a B<sub>3</sub> aromatický triamin). Velká část aromatických polyimidů je v důsledku rigidity řetězců a jejich vzájemných interakcí nerozpustná a netavitelná, což ztěžuje jejich zpracovatelnost. Proto jsou aromatické lineární i vysoce větvené polyimidy připravovány ve dvou stupních. V prvním kroku se připraví z anhydridu a aminu prekurzor (polyamidkarboxylová kyselina), který se obvykle termicky transformuje na polyimid. Existuje předpoklad, že využitím alifatických komponent by mohla být ovlivněna zpracovatelnost i některé vlastnosti produktů.

V této práci byly využity jako monomery tris(2-aminoethyl)amin a dianhydrid kyseliny 3,3',4,4'-benzofenontetrakarboxylové v molárním poměru 1:1 a 1:2. Připravené prekurzory, resp. produkty byly charakterizovány viskozimetricky, gelovou permeační chromatografií, IČ spektroskopii, dynamicko-mechanickou analýzou a termogravimetricky.

*Tato práce byla podpořena projekty MSM 6046137302 a GA ČR 104/09/1357.*

### 3P14 INICIÁTORY PRE KATIONOVÚ POLYMERIZÁCIU CYKLICKÝCH IMINO ÉTEROV

Jozef Lustoň, Juraj Kronek,

Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied,  
Dúbravská cesta 9, 84236 Bratislava, Slovensko,  
E-mail: Jozef.Luston@savba.sk

Metódy, spôsob, druh iniciátora, polarita prostredia a ďalšie faktory ovplyvňujú kationovú polymerizáciu a zvlášť polymerizáciu cyklických imino éterov a vplývajú na kontrolu polymerizácie. Strata kontroly nad polymerizáciou môže viesť k nežiadúcim vedľajším reakciám alebo ku kumulácii reakčného tepla s patričnými následkami.



Pri iniciácii polymerizácie 2-oxazolínov rozličnými iniciátormi sa predpokladá priebeh iniciácie naviazaním iniciátora na monomer, pričom pri reakcii vzniká alebo kovalentná alebo iónová častica.

Budú sa diskutovať rôzne spôsoby iniciácie.

### 3P15

#### OPTIMALIZACE BARVENÍ CELULÓZOVÝCH MATERIÁLŮ KYPOVÝMI BARVIVY

Michal Černý, Zdeňka Blechová, Ladislav Burgert, Lucia Křištofiková

*Univerzita Pardubice, Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Studentská 95, Pardubice 532 10, michal.cerny@upce.cz*

Díky výborným stálostem vybarvení celulózového materiálu za mokra i na světle patří kypová barviva k velmi důležité třídě textilních barviv. Výborné stálosti vybarvení souvisí s nerozpustností pigmentu barviva ve vodě. Z důvodu nerozpustnosti barviva je při barvení barvivo nejdříve zredukováno na svou leukoformu, která je již ve vodní barvicí lázni rozpustná a velmi dobře vytahuje na vlákno. Poté je barvivo na vláknech reoxidováno [1]. Redukce a následné barvení jsou procesy technologicky značně náročné na dodržení podmínek barvení [2]. Míra redukce kypového barviva je charakterizována oxidačně-redukčním potenciálem kypového barviva (leukopotenciál), který se stanovuje potenciometrickou titrací [3]. Vlastní kinetika redukce se poté sleduje spektrofotometricky pomocí odlišného viditelného spektra pigmentu barviva a jeho leukoformy.

Tyto 2 parametry byly stanoveny u barviv známých strukturálních vzorců a colorindexových názvů: C. I. Vat Red 10, C. I. Vat Red 13, C. I. Vat Red 14 a C. I. Vat Red 32. Byl sledován vliv struktury barviva na schopnost jejich redukce a vliv reakčních podmínek na redukci ( $pH$ , teplota, redukční činidlo).

Hodnoty leukopotenciálů převážně s teplotou rostly, stejně tak i rychlost redukce. Kinetika redukce je však závislá na dispergaci pigmentů barviva ve vodné barvicí lázni. Z tohoto důvodu nejsou výsledky kinetiky redukce zcela jednoznačné.

- [1] Hladík V. a kol. *Textilní barvířství*, SNTL Praha (1982), s. 70, 142  
 [2] Krejčí, F. a kol. *Koloristika II*, Vysoká škola chemicko-technologická v Pardubicích (1985) s. 41 – 45  
 [3] Peters, R.H. *Textile chemistry III.*, Elsevier scientific publishing company (1975), s. 473 – 493

### 3P16

#### OPTIMALIZACE PODMÍNEK VYTVRZOVÁNÍ POLYMERNÍCH NOSIČŮ IDENTIFIKAČNÍCH TĚLÍSEK PRO VÝBUŠINY

Ladislav Svoboda<sup>1</sup>, Miroslav Večeřa<sup>1</sup>, Luboš Prokůpek<sup>1</sup>, Miroslav Štanc<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Univerzita Pardubice - Fakulta chemicko-technologická, Studentská 573, 532 10 Pardubice*  
<sup>2</sup>*Explosia a.s., VÚPCH Pardubice- Semtín*

V dnešní době vyvstává z několika důvodů nutnost označit výbušiny jednoznačným identifikačním kódem. Pro identifikaci se využívají dva typy značkování: předvýbuchové a povýbuchové. Tato práce se zabývá výběrem a optimalizací podmínek přípravy povýbuchových tělísek respektive polymerních nosičů identifikačních tělísek [IT] s využitím dynamické mechanické analýzy připravených vzorků. Z důvodu tepelného namáhání byly vybrány speciální tepelně odolné pryskyřice na bázi epoxidové pryskyřice kyanátového typu v kombinaci se standardní epoxidovou pryskyřicí a bromovanou epoxidovou pryskyřicí. Byl studován vliv identifikačních tělísek na vytvrzovací charakteristiky polymerního nosiče, byla prováděna optimalizace teplotních křivek vytvrzování s následným měřením tepelné odolnosti připravené kompozice. Následně byly provedeny zkoušky dohledání IT po výbuchu.

Z výsledků měření je patrný nezanedbatelný katalytický účinek IT na vytvrzovací reakce epoxidových pryskyřic. Dále byl zoptimalizován proces vytvrzování polymerního nosiče v závislosti na typu IT typu použitých pryskyřic. Bylo potvrzeno, že polymerní nosiče na bázi epoxidové pryskyřice kyanátového typu mohou být v praxi využity ke značkování výbušin.

**Klíčová slova:** Identifikační tělíska ve výbušninách, epoxidová pryskyřice, dynamická mechanická analýza

*Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky za finanční podporu při vypracování této práce v rámci projektu MSM 0021627501 a VÚPCH Pardubice.*

### 3P17

#### POTLAČ POLYETYLÉNTEREFTALÁTOVÝCH TEXTÍLIÍ ZA ÚČELOM ZLEPŠENIA BARIÉROVÝCH VLASTNOSTÍ

Silvia Podobeková<sup>1</sup>, Anna Ujhelyiová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav polymérnych materiálov, Oddelenie vlákien a textilu, Radlinského 9, 812 37 Bratislava 1, Slovensko, silvia.podobekova@stuba.sk*

Modifikovaním povrchov textilných materiálov rôznymi fyzikálnymi a chemickými postupmi sa cielene menia niektoré funkčné vlastnosti povrchov a tým sa zvyšujú možnosti širšieho využitia vlákniťých

materiálov. Potlačovanie vláknitých materiálov pigmentmi je technologický postup, ktorý vyžaduje okrem pigmentov celý rad textilných pomocných prostriedkov, aby sa dosiahol požadovaný trvalý efekt. Farebné pigmenty sa môžu využiť pri povrchových úpravách na aktivovanie antimikrobiálnych, elektrických, magnetických, bariérových vlastností [1]. V ostatnom období sa veľká pozornosť venuje bariérovým vlastnostiam textílií voči UV žiareniu. Bariérové vlastnosti textílií voči UV žiareniu z hľadiska ochrany zdravia je možné definovať ako odolnosť textilných materiálov voči prieniku UV žiarenia na pokožku človeka [2]. Aby mali textílie vhodné bariérové vlastnosti, ktoré sa od nich vyžadujú, je potrebné do nich aplikovať látky zabezpečujúce ochrannú funkciu voči UV žiareniu.

V našom príspevku sa zaoberáme v prvom rade výberom vhodného fixačného činidla pri procese potlače textílií, v závislosti od adhézie pigmentu na textílie a testovaním UV ochrany upravených materiálov potlačených TiO<sub>2</sub> pigmentom (Hombitec S-100).

*Tento príspevok vznikol s podporou agentúry VEGA pri MŠ SR, číslo projektu 1/0406/08.*

[1] Kokubo T., Matsushita T., Takadama H.: Titania-based bioactive materials, *Journal of European Ceramic Society*, 27, 2007, p. 1553-1558

[2] Jin M., Zhang X., Emeline A.V., Numata T., Murakami T., Fujishima A.: Surface Modification of Natural Rubber by TiO<sub>2</sub> Film, *Surface and Coatings Technology* 202, 2008, p. 1364-1370

### 3P18 TERMORESPONSIVNÍ POLYMERNÍ MICELY JAKO POTENCIÁLNÍ RADIOFARMAKA

Martin Hrubý<sup>1</sup>, Čestmír Koňák,<sup>1</sup> Jan Kučka,<sup>2</sup> Miroslav Vetrík,<sup>2</sup> Sergey K. Filippov,<sup>1</sup> Karel Ulbrich,<sup>1</sup> Ondřej Lebeda<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika; e-mail: mhruby@centrum.cz

<sup>2</sup>Ústav jaderné fyziky AV ČR, v.v.i., 250 68 Řež, Česká republika

Polymerní micely s termoresponsivním jádrem a hydrofilním obalem představují slibné polymerní nosiče pro směrování protinádorových léčiv, protože vykazují silné pasivní hromadění v tkáni pevných nádorů EPR efektem. Pro EPR efekt je rozhodující dostatečně vysoká molekulová hmotnost konjugátu; aby se však polymerní nosič vylučoval z organismu ledvinami, je třeba, aby jeho molekulová hmotnost byla pod renálním prahem [cca 40–45 kDa pro (meth)akrylamidové polymery]. Právě micelární nosiče umožňují díky rovnováze unimer-micela dosáhnout zároveň dostatečně vysoké zdánlivé molekulové hmotnosti (micela) i vyloučitelnosti (unimer). Pokud není nerozpustný blok tvořící jádro

micely hydrofóbní, ale je termoresponsivní, výrazně se tím zjednoduší příprava micel na prosté ohřátí vodného roztoku (výhodně zejména pro radiodiagnostiku s relativně krátkým poločasem rozpadu). Přestože existuje řada prací popisujících termoresponsivní polymerní micely jako nosiče chemických léčiv, údaje o jejich použití jakožto radiofarmak dosud chybí.

V příspěvku budou prezentovány dva nové typy termoresponsivních polymerních nosičů radionuklidů: nosič na bázi roubovaného kopolymeru poly[N-isopropylakrylamid – graft – N-(2-hydroxypropylmethakrylamidu) s N-glykosylaminovou hydrolytický labilní vazbou mezi základním polymerem a polymerními rouby a nosič na bázi poly[2-methyl-2-oxazolin – block – (2-isopropyl-2-oxazolin – co – 2-butyl-2-oxazolin) – block – 2-methyl-2-oxazolinu].

*Tato práce vznikla za podpory grantu AV ČR č. KAN 200200651 a programu výzkumných center MŠMT ČR č. 1M0505/4635608802.*

### 3P19 HYBRIDNÍ KOPOLYMERY OBSAHUJÍCÍ COILED COIL MOTIV PRO ŘÍZENOU DOPRAVU A SMĚROVÁNÍ LÉČIV

Michal Pechar<sup>1</sup>, Robert Pola<sup>1</sup>, Libor Kostka<sup>1</sup>, Karel Ulbrich<sup>1</sup>,

Lucie Bednárová<sup>2</sup>, Petr Maloň<sup>2</sup>, Vlastimil Král<sup>3</sup>, Irena Siegllová<sup>3</sup>, Milan Fábry<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Ústav makromolekulární chemie, AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, Praha 6

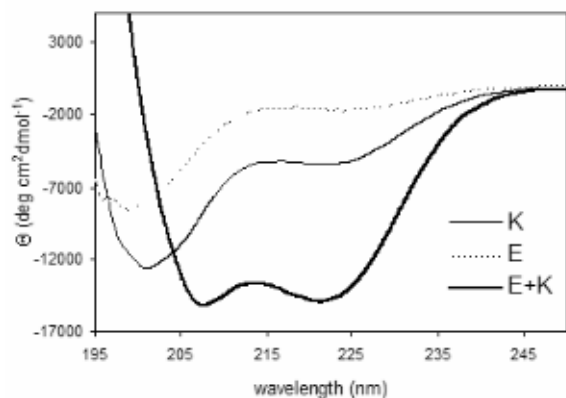
<sup>2</sup>Ústav organické chemie a biochemie, AV ČR, v.v.i., Flemingovo nám. 2, Praha 6

<sup>3</sup>Ústav molekulární genetiky, AV ČR, v.v.i., Flemingovo nám. 2, Praha 6

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. Hybridní kopolymery obsahující jak syntetické tak přírodní polymery (proteiny, peptidy, nukleové kyseliny) mohou vytvářet nadmolekulární struktury schopné reagovat na vnější stimuly (pH, teplota).

Navrhli jsme a na pevné fázi připravili peptidy o délce 21-28 aminokyselin, které ve vodném roztoku asociují za vzniku „coiled coil“ heterodimerů složených ze dvou  $\alpha$ -helixů. Zatímco jednotlivé peptidy zaujímají 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 a izotermální titrační kalorimetrie. Peptidy tvořící „coiled coil“ dimer obsahují tři nebo čtyři heptády VAALEKE (peptid E) a VAALKEK (peptid K). N-Konce obou peptidů jsou zakončeny N-acetylcysteinem navázaným přes krátkou

tetraethylenglykolovou spojku. Sulfanylová skupina cysteinu slouží k navázání peptidů na syntetické kopolymery na bázi *N*-(2-hydroxypropyl)methakrylamidu či poly-(ethylenglykolu) obsahující maleimidové skupiny. Předpokládáme, že polymer nesoucí jeden z peptidů se bude nekovalentně vázat k rekombinantnímu proteinu obsahujícímu druhý peptid za vzniku „coiled coil“ heterodimeru. Tato strategie umožňuje nový nedestruktivní způsob připojení biologicky aktivních proteinů (pro směřování, diagnostiku či terapii) na syntetické polymerní nosiče.



**Obr. 1** CD spektra peptidů E, K a jejich ekvimolární směsi při koncentraci 0.2 g/l v PBS pufru, pH 7.4. Minimum při 222 nm signalizuje přítomnost  $\alpha$ -helixu. Poměr hodnot molární elipticity při 222 nm a 208 nm blízký jedné je typický pro „coiled coil“ uspořádání.

*Autoři děkují Grantové agentuře České republiky (grant 203/08/0543) a Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy (grant IM4635608802), za jejichž podpory tato práce vznikla.*

- [1] J. Yang, C. Xu, C. Wang and J. Kopeček, *Biomacromolecules*, 7, (2006) 1187  
 [2] M. Pechar, P. Kopečková, L. Joss and J. Kopeček, *Macromol. Biosci.*, 2, (2002) 199

### 3P20 VÝVOJ SAMOSEKVESTRUJÍCÍCH BIODEGRADABILNÍCH TENZIDŮ

Monika Horáková, Alena Hýbnerová, Ladislav Burgert, Jitka Kunstová, Gabriela Krylová

*Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice  
 Horakova.Moni@seznam.cz*

V této práci jsou testovány vlastnosti tzv. samosekvestrujících tenzidů, což jsou povrchově aktivní látky, které mají schopnost snižovat povrchové napětí kapalin. V námi zkoumaných tenzidech je spojovacím můstkem mezi polární částí (sekvestrující) a nepolární částí molekuly je v jednom případě vazba

amidová a ve druhém vazba esterová. Vlastnosti těchto sloučenin byly hodnoceny na základě stanovení poklesu povrchového napětí jejich vodných roztoků při 20 °C, sekvestrační kapacitou vůči  $\text{Ca}^{2+}$  iontům při 20 °C a 90 °C, výsledky opakovaného praní v tvrdé vodě 22°dH, kdy tyto látky byly součástí modelových detergentů a biologické odbouratelnosti tzv. biodegradability. Vedle plnění výše uvedených aplikačních vlastností je nutné se při vývoji tenzidů řídit nařízením, které bylo schváleno Evropským parlamentem dne 31.3.2004 s platností od 8.10.2005. Nařízení má název: Regulation (EC) No. 648/2004 of the European Parliament and of the Council of 31 March 2004 on Detergents. Základním ustanovením tohoto nařízení je, že nově vyvíjené tenzidy musí vykazovat 60% biodegradabilitu během 28 dnů inkubace při zkouškách založených na produkci  $\text{CO}_2$ . Sloučeniny s amidovou vazbou prozatím vykazují podle tohoto ustanovení 46 až 54% biodegradability. Ovšem u vzorků s esterovou vazbou leží hranice biologické odbouratelnosti mezi 24 až 33%, takže bude potřeba pokračovat v dalším vývoji.

*Práce byla provedena za finanční podpory projektu MŠMT ČR VZ 00216 27501*

### 3P21 SYNTECKÝ FIBRONEKTIN MIMETICKÝ LIGAND PRO INTEGRINY ZPROSTŘEDKOVANOU ADHEZI BUNĚK NA BIOMATERIÁLY

Vladimír Proks<sup>1</sup>, František Rypáček<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v. v. i. Heyrovského nám. 2, Praha 6, 162 06  
 proks@imc.cas.cz*

Vytvoření vhodné povrchové modifikace biomateriálu pro buněčnou adhezi je jedním z klíčových momentů nejen při přípravě biodegradovatelných materiálů pro tkáňové náhrady, ale i pro studie buněčných kultur *in vitro*. Syntetické materiály umožňují efektivní buněčnou adhezi prostřednictvím  $\alpha 5\beta 1$  integrinových receptorů buněk pouze v případě, kdy z fibronektinu odvozené peptidové sekvence RGDS a PHSRN jsou umístěny v patřičné vzdálenosti vůči sobě<sup>1</sup> a zároveň adhezivní motivy musí být seskupeny v doménách umožňujících integrinové klastrování<sup>2</sup>. V předkládaném příspěvku je diskutována příprava umělého dendritického ligandu mimikujícího 9. a 10. globuli typu III domény fibronektinu založeném na lyzinovém jádře a hydrofilních polyamidických spojkách mezi jádrem a RGDS, PHSRN peptidovými motivy (schéma 1).

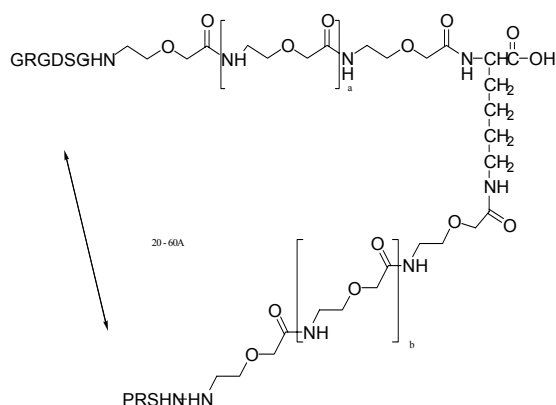


Schéma 1. Dendritický fibronektin mimetický ligand

Následná imobilizace dendritického ligandu na povrch biomateriálu má pak umožnit selektivní buněčnou adhezi pomocí  $\alpha 5\beta 1$  integrinového receptoru.

*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] Petrie T.A., Capadona J.R., Reyes C.D., García A.J.: *Biomaterials* 27, 5459 (2006)  
 [2] Calvalcanti-Adam E.A., Micoulet A., Blümmel J., Auernheimer J., Kessler H., Spart J.: *European Journal of the Cell Biology*, 85, 219 (2006)

### 3P22

#### INFRARED SPECTRA MEASURED DURING POLYMER WEATHERING EVALUATED BY FACTOR ANALYSIS

Ivana Šeděnková, Miroslava Trchová, Jan Pilař

*Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Heyrovsky Sq. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic*

One of the limiting factors in polypropylene (PP) applications is degradation during outdoor exposure to atmospheric oxygen and pollutants in combination with solar UV-vis irradiation. Therefore, the UV absorbers and stabilizers are used to extend PP's lifetime. A practical and widely used tool to study the degradation processes during aging and influence of additives on them is infrared spectroscopy. In this study, the weathering of PP was followed by the attenuated total reflectance infrared (ATR IR) spectroscopy. Pristine PP and PP modified with stabilizing additives were compared. The series of spectra measured for each material were treated by factor analysis (FA) [1]. Factor analysis applied on a suitable series of data can extract and highlight the essential information covered in it. In this case, the results of FA helped us to understand the main processes involved in the degradation. The presentation is focused on the advances and limitation of FA applied on this problem. The possibility to

recognize the artifacts and distortions introduced by ATR IR method is illustrated. The potentiality to describe and predict the evolution of degradation will be discussed.

- [1] Henry E.R., Hofrichter J., Singular value decomposition: Application to analysis of experimental data, *Methods in Enzymology*, 210, 129-192, 1992.

### 3P23

#### CHARAKTERIZACE AKRYLÁTOVÝCH DISPERZÍ METODOU A4F-MALS

Miroslav Večeřa<sup>1</sup>, Luboš Prokůpek<sup>1</sup>, Ladislav Svoboda<sup>1</sup>, Petr Lebeda<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Univerzita Pardubice – Fakulta chemicko-technologická, Studentská 573, 532 10 Pardubice*  
<sup>2</sup>*SYNPO, a.s. SK. Neumanna 1623, 530 02 Pardubice*

Bylo připraveno 68 kopolymerních akrylátových disperzí semikontinuální emulzní polymerací na bázi methylmethakrylátu, methylakrylátu, butylakrylátu, 2-ethylhexylakrylátu a styrenu. Připravené latexy byly charakterizovány stanovením obsahu sušiny a stanovením zdánlivé viskozity Brookfield.

U připravených latexů byly stanoveny: molární hmotnost, index polydisperzity a velikost částic metodou A4F-MALS. Byl sledován vliv změny technologických podmínek přípravy akrylátových disperzí na průměrnou molární hmotnost a velikost částic.

Mění se poměr monomerů MMA - BA v reakční směsi ovlivňuje výslednou průměrnou molární hmotnost. S rostoucím zastoupením BA roste průměrná molární hmotnost latexu. Stejný jev je možné pozorovat u měnicích se poměrů monomerů MMA – MA a MMA – 2-EHA. Při změně poměru STY - BA se projevuje růst molární hmotnosti s rostoucím obsahem BA ve směsi. V případě STY – MMA s rostoucím obsahem MMA klesá molární hmotnost. Dále byl sledován vliv koncentrace emulgátoru na výslednou molární hmotnost připravených akrylátových disperzí. U monomerů MMA – BA v poměru 50:50 bylo zjištěno, že s rostoucím množstvím emulgátoru klesá molární hmotnost připravených latexů. S rostoucí koncentrací emulgátoru v reakční směsi se snižovala velikost částic připravených akrylátových disperzí. Se zvyšováním koncentrace iniciátoru molární hmotnost rostla.

Práce potvrzuje vhodnost metody A4F-MALS pro stanovení molárních hmotností i pro stanovení velikostí částic disperzí.

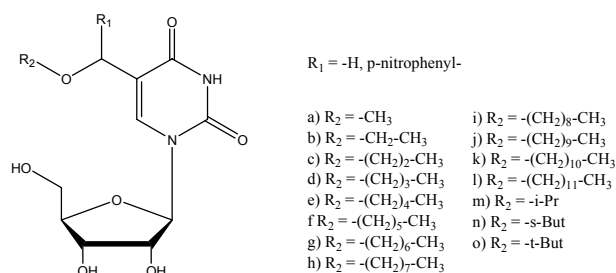
**Klíčová slova:** emulzní polymerace, akrylátové disperze, A4F (Asymetrical flow field fractionation), MALS (Multiple angle light scattering).

## 3P24

## SYNTHESIS OF 5-MODIFIED URIDINE ANALOGUES AND STUDY OF THEIR CYTOTOXIC ACTIVITY

Lucie Brulíková<sup>1</sup>, Jan Hlaváč<sup>1</sup>Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, Palacký University Tr. Svobody 8, 771 46 Olomouc, Czech republic

Our interest has been aimed at the 5 position of pyrimidine nucleobases and discovery of new anticancer agent. A series of uridine analogues modified at the 5-position by either 5-alkoxymethyl or 5-[alkoxy-(4-nitrophenyl)-methyl] moiety were synthesized (Scheme 1). Firstly, we have focused on the synthesis of 5-[alkoxy-(4-nitrophenyl)-methyl]-uridines with the alkyl chain lengths C<sub>6</sub>-C<sub>9</sub>. Nucleosides were formed as a mixture of two diastereoisomers that have been separated and tested for their cytotoxic activity in vitro against different cancer cell lines. Relationships between structure and above mentioned activity were studied. Cytotoxic activity has been slightly increased in some cases by the transformation of bases to nucleosides. Furthermore, we have found growing tendency of cytotoxic activity with the growing length of alkyl chain. Subsequently, we have modified the 5 position of uridine by 5-alkoxymethyl moiety and relationships between structure and cytotoxic activity will be studied. With respect to the mentioned growing tendency of anticancer activity of 5-[alkoxy-(4-nitrophenyl)-methyl]-uridines the derivatives with longer chain seem to be promising in future biological activity studies.



Scheme 1: Structure of prepared nucleosides.

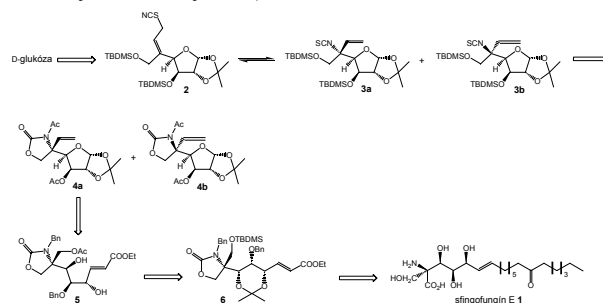
Supported by grant MŠM 6198959216

## 3P25

## STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA VYSOKOFUNKCIONALIZOVANÉHO PREKURZORA POLÁRNEJ ČASTI (-)-SFINGOFUNGÍNU E

Jana Raschmanová<sup>1</sup>, Michaela Slaninková<sup>1</sup>, Miroslava Martinková<sup>1</sup>, Jozef Gonda<sup>1</sup>, Juraj Kuchár<sup>2</sup><sup>1</sup>Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra Organickej chémie, Moyzesova 11, Košice, Slovenská republika<sup>2</sup>Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra Anorganickej chémie, Moyzesova 11, Košice, Slovenská republika

Sfingofungín E **1**, ako neproteinogénna  $\alpha$ -substituovaná  $\alpha$ -aminokyselina, bol prvýkrát izolovaný firmou Merck v roku 1992 z fermentačnej zmesi *Paecilomyces variotii*.<sup>1a</sup> Okrem fungicídneho a imunosupresívneho účinku sa **1** vyznačuje aj významnou inhibičnou aktivitou voči serínalmitoyltransferáze.<sup>1b</sup> V predkladanej práci je popísaná stereokontrolovaná syntéza vysokofunkcionalizovaného prekurzora polárnej časti **1**. D-Glukóza, ako východisková látka pre syntézu, bola sekvenciou reakčných krokov modifikovaná na (Z)-alyltiokyanát **2** (usporiadanie substituentov na dvojitej väzbe stanovené pomocou NOE). Zodpovedajúci rodnid **2** poskytol *aza*-Claisenovým prešmykom neseparovateľnú zmes izotiokyanátov **3a** a **3b** (**3a**:**3b**=2:1, stanovené pomocou <sup>1</sup>H NMR spektier), ktorá bola vzájomnou premenou funkčných skupín transformovaná na separovateľné, bis(acetylované) deriváty **4a** a **4b**. Absolútna konfigurácia na novovybudovanom kvarternom stereocente (uhlík C-5) u majoritného stereoizoméru **4a** bola stanovená pomocou kryštalografickej analýzy ako *S*. Cyklický karbamát **4a** bol prostredníctvom dvoch syntetických operácií modifikovaný na (*E*)- $\alpha,\beta$ -nenасыtený ester **5**. Príslušný ester **5** bol prevedený na vysokofunkcionalizovaný prekurzor **6** polárnej časti sfingofungínu E **1** sekvenciou troch reakčných krokov (protektia voľných hydroxylových skupín, deacteylácia a silylácia).



Tento príspevok vznikol s podporou Grantovej agentúry (No. 1/0100/09 a No. 1/0281/08) Ministerstva školstva Slovenskej republiky, Agentúry na podporu výskumu a vývoja (APVV 20-038405) Slovenskej republiky a Vnútrošného vedeckého grantového systému Prírodovedeckej fakulty UPJŠ (VVGs PF 25/2009/CH).

- [1] a) Horn, W. S.; Smith, J. L.; Bills, G. F.; Raghoobar, S. L.; Helms, G. L.; Kurta, M. B.; Marrinan, J. A.; Frommer, B. R.; Thornton, R. A.; Mandala, S. M. *J. Antibiot.* **1992**, *45*, 1692-1696,  
 b) Oishi, T.; Ando, K.; Inomiya, K.; Sato, H.; Iida, M.; Chida, N. *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2002**, *75*, 1927-1947.

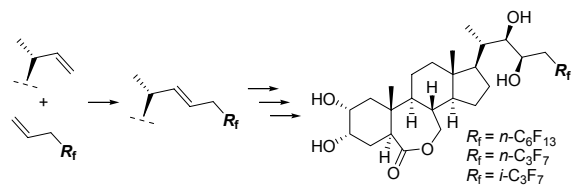
### 3P26 PERFLUOROALKYLATION VIA CROSS-METATHESIS AND ITS APPLICATION IN A SYNTHESIS OF BIOLOGICAL ACTIVE COMPOUNDS

B. Eignerová,<sup>1,2</sup> M. Dračínský,<sup>2</sup> M. Buděšínský,<sup>2</sup> and M. Kotora<sup>1,2\*</sup>

<sup>1</sup>Department of Organic and Nuclear Chemistry, Faculty of Science, Charles University, Hlavova 2030, 128 43 Prague 2, Czech Republic. <sup>2</sup>Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Flemingovo n. 2, 166 10 Prague 6, Czech Republic.  
 e-mail: eignerova@uochb.cas.cz;  
 kotora@natur.cuni.cz

A number of compounds with attached perfluoroalkylated chains exhibit interesting biological properties. Therefore, it is of general synthetic interest to develop a new methodology that would enable to introduce perfluoroalkyl groups into various molecules under mild reaction conditions. Recently, we have developed a new methodology, which is based on a ruthenium catalysed cross-metathesis of terminal olefines with perfluoroalkylated propenes.<sup>1</sup>

This methodology was used in a synthesis of fluorinated analogues of brassinolides. The main aim was to synthesize brassinosteroids with improved biological activities and higher metabolic stability enabling longer-term effects at target plants. During our project three new brassinosteroids were prepared in 13 steps from commercially available starting material using the cross-metathesis of terminal alkenes with perfluoroalkylated propenes as a key step.<sup>2</sup> Subsequently, the prepared brassinosteroids were tested for biological activities, e.g. GABA<sub>A</sub> activity, cytotoxicity, and brassinolide activity.



- [1] Eignerová, B.; Dračínský, M.; Kotora, M. *Eur. J. Org. Chem.* **2008**, 4493–4499.  
 [2] Eignerová, B.; Slavíková, B.; Buděšínský, M.; Dračínský, M.; Klepetářová, B.; Štastná, E.; Kotora, M. *J. Med. Chem.* **2009**, manuscript accepted.

### 3P27 MOLEKULÁRNÍ ELEKTROCHEMIE – VHODNÝ PROSTŘEDEK KE STUDIU ELEKTRONOVÉ STRUKTURY A REAKTIVITY FISCHEROVÝCH AMINOKARBENŮ CHROMU A ŽELEZA

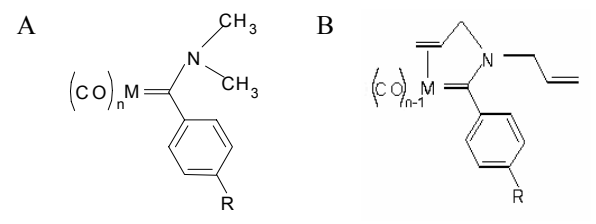
Jiří Ludvík<sup>1</sup>, Irena Hoskovcová<sup>2</sup>, Stanislav Záliš<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup> Ústav anorganické chemie VŠCHT Praha, Technická 5, CZ-166 28 Praha 6.

Pro charakterizaci oxidovatelnosti, resp. redukovatelnosti organických a organometalických molekul, pro zjištění příslušných mechanismů redox reakcí včetně zachycení meziproductů a pro získání experimentálních dat týkajících se rozložení elektronů v molekule, jejich delokalizace a umístění reakčních center, se velmi dobře hodí komplexní elektrochemický přístup.

V tomto příspěvku byly takto prostudovány dvě série nově syntetizovaných Fischerových aminokarbenů chromu a železa – cheláty (B) a non-cheláty (A), různě substituované v para poloze na aromatickém jádru – viz obr., jež jsou potenciálními homogenními



n = 5 for Cr  
 n = 4 for Fe

R = OCH<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>, H, Cl,  
 COOCH<sub>3</sub>, CF<sub>3</sub>

katalyzátory.

Nejprve byly v bezvodém prostředí proměřeny oxidační a redukční potenciály a získaná data byla zpracována pomocí LFER (Linear Free Energy Relationship). Tento Hammettovský přístup umožnil lokalizovat na molekule redukční a oxidační centrum (LUMO a HOMO), zjistit rozdíl jejich energií (analogie spektroskopického energetického rozdílu HOMO-LUMO) a formulovat pravidla, podle kterých se různá struktura a substituce odráží na redox vlastnostech dané série molekul. Na základě rozdílů ve směrnících závislosti  $E_{1/2}$  na hodnotách  $\sigma_p$  (tzv. reakční konstanty  $\rho$ ) byly diskutovány (a následně potvrzeny NMR spektry) též sterické efekty ovlivňující míru intramolekulární elektronové komunikace (elektronové delokalizace) na ligandu.

Bylo porovnáno chování karbenů Cr a Fe (lišících se počtem karbonylových ligandů). Přes značné rozdíly měly obě série jedno společné – extrémně nízký redukční potenciál u p-COOCH<sub>3</sub> derivátu, který nebyl v korelaci s ostatními substitučními deriváty. Tato anomálie byla interpretována jako důsledek zapojení

se karbonylového substituentu v para poloze do delokalizovaného systému zahrnující aromát a azomethinovou, resp. karbenovou vazbu. Toto bylo potvrzeno kvantovými výpočty (Gaussian 03 / B3LYP).

*Tento projekt je podporován GA AVČR, grantem č. IAA 400400813.*

### 3P28 ELECTROOXIDATION BEHAVIOR OF SUBSTITUTED $CB_{11}H_{12}^-$ ANIONS IN LIQUID $SO_2$ AND HAMMETT EQUATION

Abdul Wahab<sup>1,2</sup>, Michal Valasek<sup>2</sup>, Stursa Jan<sup>2</sup>,  
Josef Michl<sup>2</sup>, Jiri Klima<sup>1</sup>, and Jiri Ludvik<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>J. Heyrovsky' Institute of Physical Chemistry,  
Academy of Sciences of the Czech Republic,  
Dolejškova 3, 18223 Prague 8, Czech Republic.

<sup>2</sup>Institute of Organic Chemistry and Biochemistry,  
Academy of Sciences of the Czech Republic, 166 10  
Prague 6, Czech Republic.

Icosahedral closo-carborane anions  $CB_{11}H_{12}^-$  and their derivatives are extremely stable and largely regarded as aromatic.<sup>1</sup> Because of their diverse applications, currently icosahedral carboranes have attracted considerable interest. The preliminary electrochemical studies reveal interesting redox behavior.<sup>2,3</sup> Here, a systematic investigation has been made towards understanding the electrooxidation reactions of substituted  $CB_{11}H_{12}^-$  anions as well as substituent effects. We have synthesized several series of carboranes with different substituents in vertex 1 and 12 (Chart 1) possessing five-fold symmetry using modified or known procedures. The electrochemical measurements were carried out employing cyclic voltammetry in dried liquid  $SO_2$ . The electrochemical data were explained in terms of Hammett equation. All the carborane anions exhibit a completely reversible one-electron oxidation over the studied scan rates

except a series containing I in vertex 12, which behaves irreversibly. The measured half-wave potentials ( $E_{1/2}$ ) are linearly proportional to the substituent Hammett constants. The observed correlation confirms that  $CB_{11}$  cage is aromatic like benzene although three-dimensional. The different slopes (called reaction constants) indicate different susceptibility of the substituents in various positions towards electrochemical oxidation.

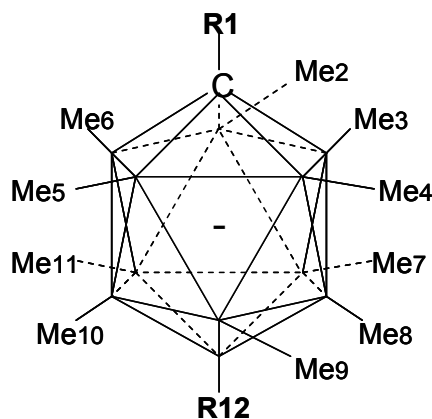


Chart 1. Vertex numbering for different substituents in  $CB_{11}$  icosahedral cage (R = H, Me, Et,

Pr, Bu, Hex, COOH, COOMe, Br, I, B(OH)<sub>2</sub>, C≡C-  
 $CB_{11}Me_{11}$ )

*Project No. LC-510 (Ministry of the Education, Youth  
and Sports of the Czech Republic).*

*\*corresponding author*

- [1] Korbe, S.; Schreiber, P. J.; Michl, J. *Chem. Rev.* **2006**, 106, 5208.
- [2] King, B. T.; Korbe, S.; Schreiber, P. J.; Clayton, J.; Adriana Nemcova, A.; Havlas, Z.; Vyakaranam, K.; Fete, M. G.; Zharov, I.; Ceremuga, J.; Michl, J. *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, 129, 12960.
- [3] Eriksson, L.; Vyakaranam, K.; Ludvik, L.; Michl, J. *J. Org. Chem.* **2007**, 72, 2351.

## PREDNÁŠKY - SEKCIA 4: VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE

### 4P01 CITIES: EVROPSKÝ PROJEKT PRO UČITELE CHÉMIE STŘEDNÍCH ŠKOL

Hana Čtrnáctová<sup>1</sup>, Pavel Drašar<sup>2</sup>, Eva Stratilová  
Urválková<sup>1</sup>, Jiří Zajíček

<sup>1</sup>Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze,  
Albertov 6, 128 43 Praha 2, ČR

<sup>3</sup>VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR

<sup>7</sup>MSŠCh, Křemencova 12, 116 28 Praha 1, ČR

V programu Socrates/Comenius byl v letech 2006-09 realizován evropský projekt CITIES – Chemistry and

Industry for Teachers in European Schools. Projekt, který řešilo 10 institucí ze šesti evropských zemí, si kladl za cíl připravit a ověřit moduly, přispívající ke zvýšení zajímavosti a atraktivnosti výuky chemie na středních školách. Hlavním řešitelem projektu v ČR byla ČSCH, na řešení participovala Přírodovědecká fakulta UK a Masarykova střední škola chemická.

Řešení projektu probíhalo souběžně v pěti základních modulech [1]. Řešitelé v ČR se zaměřili především na řešení modulu 4: „Chemie-jak ji oživit“, dále modulu 1: „Rámec Evropy“, seznamujícího učitele se základními informacemi o deklaracích EU v oblasti vzdělávání s důrazem na chemii a chemický průmysl, a modulu 5: „Evropa-odborně vzdělávací aréna“, věnovanému odbornému chemickému vzdělávání v Evropě s důrazem na praxi, mobilitu a uplatnění středoškoláků.

V modulu 4 jsme se zaměřili na experimentální výuku chemie. Byly připraveny a ověřeny pokusy z oblasti potravinové a forenzní chemie a chemie každodenního života. Důraz byl kladen především na zajímavé praktické aplikace chemických poznatků [2]. V dalších dvou modulech pak byly připravovány informační materiály pro středoškolské učitele.

Připravené a ověřené materiály jsou součástí webových stránek – významného výstupu projektu [3] k volnému použití pro zájemce z řad učitelů chemie EU.

- [1] Čtrnáctová, H. et al.: Evropský projekt CITIES – modul výchovy a vzdělávání. *Chemické listy*, roč. 102, č. 8, 2008.
- [2] Čtrnáctová, H., Šulcová, R., Böhmová, H., Stratilová Urválková, E.: Aplikace užití chemie pro chemické vzdělávání prostřednictvím evropského projektu CITIES. In: *Súčasnosť a perspektívy didaktiky chemie II*. Banská Bystrica: UMB, FPV 2009
- [3] CITIES: *Vítejte v CITIES*. [online]. [cit. 2009-06-20]. Dostupné z <http://cities.eu.org/>

#### 4P02

#### CITIES: MEZINÁRODNÍ WEBOVÁ PREZENTACE PROJEKTU

Eva Stratilová Urválková, Hana Čtrnáctová, Šárka Matoušková

*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra učitelství a didaktiky chemie, Albertov 6, 128 43 Praha 2, Česká republika*

Evropský projekt CITIES zahájený na podzim roku 2006 připravuje a ověřuje moduly, které mají zatraktivnit výuku chemie na středních školách [1,2]. Projekt se snaží představit moderní chemické aplikace a témata v takové podobě, která je srozumitelná učitelům a zároveň dostatečně přístupná středoškolským žákům.

Webová stránka <http://cities.eu.org/> prezentuje a poskytuje veškerý vytvořený materiál v rámci projektu, který je v současné době chystán v pěti jazykových mutacích (a některé části v dalších třech jazycích) [3]. Na stránkách CITIES lze nalézt, kde se chemické výdobytky projevují v každodenním životě, rozsah a náplň chemického a s ním spojeného průmyslu, profily významných chemických společností v jednotlivých zemích včetně virtuální prohlídky podniku a profily lidí, kteří v chemickém průmyslu pracují – jejich uplatnění a zkušenosti. Učitelé navíc na stránkách získají tři sady atraktivních experimentů, model „cestovního chemického kufříku“ s jednoduchými experimenty a korespondující prezentací, náměty, rady a kontakty pro uskutečnění exkurzí do chemických podniků. Všechny tyto produkty projektu se snaží učitelům poskytnout materiály, které jejich žáky přesvědčí o nezbytnosti chemie v moderní společnosti, pomohou zatraktivnit

výuku chemie a ukázat její projevy v každodenním životě. Nejvyšším cílem je přesvědčit žáky o nepostradatelnosti chemie, a aby pochopili, jak je chemie pro náš život důležitá, šifili dál mezi své vrstevníky.

- [1] Čtrnáctová, H. et al.: Evropský projekt CITIES – modul výchovy a vzdělávání. *Chem. Listy* 101, s. 341, 2007.
- [2] Čtrnáctová, H., Šulcová, R., Böhmová, H., Stratilová Urválková, E.: Aplikace užití chemie pro chemické vzdělávání prostřednictvím evropského projektu CITIES. In: *Súčasnosť a perspektívy didaktiky chemie II*. Banská Bystrica: UMB, FPV 2009.
- [3] CITIES: *Vítejte v CITIES*. [online]. [cit. 2009-06-20]. Dostupné z <http://cities.eu.org/>

#### 4P03

#### CITIES: MATERIÁLY PRO ZAJÍMAVÉ EXPERIMENTÁLNÍ ČINNOSTI

Renata Šulcová, Hana Böhmová, Eva Stratilová Urválková, Barbora Zákostelná

*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra učitelství a didaktiky chemie, Albertov 6, 128 43 Praha 2, Česká republika*

Spoluřešitelé mezinárodního projektu CITIES z několika evropských zemí se v modulu „Chemie – jak ji oživit“ autorsky podíleli na námětech, výběru, modifikaci i realizaci zajímavých experimentů pro laboratorní semináře, určené především učitelům chemie na středních školách. Tito pak svým žákům mohou zpřístupňovat chemii jako poutavou a živou disciplínu [1].

Náš tým na Přírodovědecké fakultě UK vyvíjel a zorganizoval dva běhy praktických seminářů pro učitele. V roce 2008 byly pro účastníky vytvořeny praktické návody k experimentům vycházejícím z rozmanitých aplikací v chemickém průmyslu, které propojují výuku s celospolečenským významem chemie a navíc tak reagují na nevhodně pojaté průmyslové aplikace chemie ve výuce, pod názvem „Zajímavé chemické experimenty s látkami každodenního života“. V roce 2009 byla další ověřovaná oblastí forenzní chemie, opět doplněná praktickými návody pro učitele, pod názvem „Chemik detektivem“. Pojetí jednotlivých experimentů bylo propojeno s teorií tak, aby byl vytvořen smysluplný celek [2].

Cílem naší skupiny bylo uvést soubory pokusů týkajících se látek a postupů běžných v každodenní praxi, např. obalů, plastů, potravin, biopaliv a dále detekce krve, otisků, oxidujících látek apod. Proto jsme zpracovaly texty i fotodokumentaci k praktickému ověření experimentů [3], publikace „Zajímavé experimenty z chemie kolem nás“ je dosud v tisku. Materiály jsou k dispozici též na webových stránkách: <http://www.natur.cuni.cz/~kudch/main/JPD3/>.



- [1] Böhmová, H., Stratilová Urválková, E., Pisková, D., Šulcová, R.: Aplikovaná chemie v kurzech celoživotního vzdělávání. In: *Current Trends in Chemical Curricula - Současné trendy v obsahu chemického vzdělávání*. Praha: UK v Praze, PČF 2008.
- [2] Čtrnáctová, H., Šulcová, R., Böhmová, H., Stratilová Urválková, E.: Aplikace užité chemie pro chemické vzdělávání prostřednictvím evropského projektu CITIES. In: *Súčasnosť a perspektívy didaktiky chemie II*. Banská Bystrica: UMB, FPV 2009.
- [3] Böhmová, H., Stratilová Urválková, E., Šulcová, R.: Chemistry for Society: New Emphasis in Education. In: *Problems of Education in the 21<sup>st</sup> century*. Vol. 11, 2009: Trends and problems in science and technology education. Lithuania.
- [1] Čtrnáctová, H., Šulcová, R., Böhmová, H., Stratilová Urválková, E.: Aplikace užité chemie pro chemické vzdělávání prostřednictvím evropského projektu CITIES. In: *Súčasnosť a perspektívy didaktiky chemie II*. Banská Bystrica: UMB, FPV 2009.
- [2] Bader, A. et al.: *Chemik detektivem – forenzní chemie*. Praha: UK, PČF 2009.
- [3] Böhmová H., Stratilová Urválková, E., Pisková, D., Šulcová, R.: *Zajímavé chemické experimenty s látkami každodenního života*. Praha: UK, PČF 2008.

**4P04****CITIES: AKTUALITY PRO UČITELE V CHEMICKÉM VZDĚLÁVÁNÍ**

Hana Böhmová, Hana Čtrnáctová, Renata Šulcová, Eva Stratilová Urválková

*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra učitelství a didaktiky chemie, Albertov 6, 128 43 Praha 2, Česká republika*

Evropský projekt CITIES [1] přináší praktické aplikace chemických poznatků spojené se zajímavými způsoby výuky, aby se školní chemické vzdělávání stalo pro žáky zajímavějším a atraktivnějším. Jednou z jeho částí jsou praktické kurzy pro učitele chemie - *Atraktivní experimenty*. Tým řešitelů CITIES sestavil tři tematicky zaměřené kurzy: Ravioli, Forenzní chemie [2] a Každodenní chemie [3].

Na našem pracovišti probíhaly na jaře 2008 kurzy ověřování experimentů z oblasti chemie každodenního života, reflektujících aktuální otázky, např. recyklace odpadů, alternativní pohonné hmoty nebo experimentů, seznamujících se vznikem běžných syntetických produktů, např. umělé pryskyřice, polyamidová vlákna, obaly. V r. 2009 byla ověřována oblast forenzní chemie, kterou představovaly experimenty týkající se způsobů detekce otisků prstů, zjišťování stop, odhalování přítomnosti krve a zjišťování oxidujících látek při žhářství.

V r. 2008 se kurzů zúčastnilo třicet vyučujících, o rok později dokonce čtyřicet. Učitelé chemie se do ověřování sami aktivně zapojili, když doplňovali návody a formulovali své připomínky na základě vlastních praktických zkušeností. Účastníci na závěr vyplňovali evaluační dotazník, jehož vyhodnocení prokázalo, že nabízený typ seminářů přináší učitelům mnoho nových podnětů pro žáky i pro výuku chemie.

Učitelé obdrželi tištěné materiály s fotodokumentací provedení a výsledků pokusů [2, 3], které jsou k dispozici i na webové stránce: <http://www.natur.cuni.cz/~kudch/main/JPD3/> a <http://cities.eu.org>.

**4P05****HODNOCENÍ V CHEMII JAKO SOUČÁST NOVÉ STÁTNÍ MATURETY V ČR**

Marie Vasileská

*Centrum pro zjišťování výsledků vzdělávání (CERMAT), Jeruzalémská 12, 110 00 Praha 1, ČR, [vasileska@cermat.cz](mailto:vasileska@cermat.cz)*

V návaznosti na probíhající legislativní změny vyplývající ze schválení tzv. školského zákona a v souladu s požadavky Evropské unie vznikla v našem školství potřeba zajistit průhledné, vypovídající a vzájemně měřitelné výsledky vzdělávání. Od 1. ledna 2006 bylo vytvořeno Centrum pro zjišťování výsledků vzdělávání (označení CERMAT) jako samostatná státní instituce, která bude mít tuto oblast ve své kompetenci. MŠMT ČR si je vědomo velké závažnosti řešení problematiky a proto prostřednictvím skupiny regionálního školství předložilo do ESF – SP KVALITA I projekt s názvem: Vytvoření systému externího monitorování a hodnocení včetně zřízení Centra pro zjišťování výsledků vzdělávání (včetně informační a poradenské činnosti).

CERMAT má jako základ pro splnění své nové funkce k dispozici výsledky všech šetření, která proběhla v letech 2001-2009 na celostátním vzorku žáků v rámci cyklu programů Krok za krokem k nové maturitě, dále výsledky z výzkumných šetření probíhajících v letech 2004-2007 v 9. třídách a v 5. třídách.

Naznačená problematika si vyžaduje okamžité řešení některých úkolů tak, jak jsou uvedeny v Katalogu chemie pro maturitní zkoušku v roce 2010. Kromě informací o nové koncepci zkoušky je uvedeno i velké množství příkladů testových úloh, které ověřují očekávané znalosti a dovednosti žáků ve třech kategoriích: (1) znalost s porozuměním, (2) aplikace poznatků a řešení problémů a (3) práce s informacemi.

- [1] Vasileská, M., Marvánová, H.: Rukověť autora testových úloh II. díl: CHEMIE, CERMAT, Praha 2006
- [2] Katalog požadavků zkoušek společné části maturitní zkoušky platný od školního roku 2009/2010 CHEMIE (Schválilo MŠMT 11. 3. 2008 pod č.j. 3249/2008-2/CERMAT) (autorský kolektiv)

pro chemii: Vasileská, M., Čtrnáctová, H., Kolář, K.; odborná a didaktická recenze pro chemii: Lichtenberg, K., Kratochvilová, V., dále odborní pracovníci VÚP a NÚOV)

[3] www.ceremat.cz

#### 4P06

### VPLYV NEVERBÁLNYCH PROSTRIEDKOV V ZADANÍ CHEMICKEJ VÝPOČTOVEJ ÚLOHY NA VÝBER SPÔSOBU JEJ RIEŠENIA

Beata Vranovičová

*Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie, Nám. J. Herdu 2, 91701 Trnava, e-mail beata.vranovicova@ucm.sk*

Výpočtovými úlohami označujeme také úlohy, kde študenti zo známych hodnôt veličín získavajú operáciami matematickej povahy hľadané hodnoty veličín. Za riešenie výpočtovej úlohy považujeme činnosť, ktorú je treba vykonať od zadania výpočtovej úlohy k získaniu výsledku. Najčastejšie používanými spôsobmi riešenia výpočtových úloh v chémii sú aritmetický, algebraický a grafický. Výpočty v chémii patria medzi najnáročnejšie a najmenej obľúbené učivo chémie na školách a je dôležité neustále hľadať cesty na zvýšenie účinnosti ich výučby. Jedným z možných prostriedkov, ktorý môže prispieť k zlepšeniu v tejto oblasti je tiež používanie vhodných učebných úloh, ktoré by vo svojom zadaní obsahovali rôzne neverbálne prostriedky (napríklad tabuľku, schému, graf, model alebo obrázkov reality). Zaraďovanie neverbálnych prvkov do učebných úloh svoje opodstatnenie má, pretože môže byť pre študentov prípravou na zvládnutie a promptnejšie pochopenie toho, čo sa od nich žiada. Častou príčinou neúspešnosti riešenia výpočtových úloh je, že študent zabudne vzorec potrebný na výpočet. Vhodne použitý neverbálny prostriedok v zadaní úlohy by mu mohol pomôcť správne vyriešiť úlohu bez použitia vzorca (pomocou úvahy, úmery) alebo sa na vzorec rozpoznať.

*Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. VVCE-0004-07.*

- [1] Čtrnáctová, H. 2001. Acquisition of theoretical and practical skills by solving of educational tasks. In: Proceedings of the 6th ECRICE and the 2nd ECCE. Aveiro, Universidade de Aveiro, 6 p.
- [2] Solárová, M., Švec, V., Jodas, B. 2001. Výpočtový vzorec ve výuce chemie a jeho reflexe žákem. Metody tvořivého učitele - Pedagogická orientace č.3, s.55-60. 2001.
- [3] Haláková, Z., Prokša, M., Žotaniová, K. 2004. Efektivnost' použitia prvkov vizualizácie v učebných úlohách z chémie. Chemické rozhľady. Iuventa Bratislava, roč. 5, 2004. č.4, s. 246-252, ISBN 1335-8391.

#### 4P07

### ZÁKLADNÍ LABORATOŘE PRO STŘEDOŠKOLSKÉ STUDENTY

D. Sýkorová, O. Smrčková

*Ústav anorganické chémie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, e-mail:*

*Dagmar.Sykorova@vscht.cz*

Střední školy většinou nemají dostatečné vybavení pro výuku praktické chemie – laboratoře, které by měly být nedílnou součástí výuky chemie, jsou povinné dle osnov pro SŠ. Pro zlepšení tohoto stavu a zároveň jako popularizaci chemie a odstranění negativního pohledu společnosti na chemii nabízíme středním školám laboratorní cvičení v posluchačských laboratořích VŠCHT.

Laboratoře jsou koncipovány tak, aby nejen vhodně doplnily látku probíranou v hodinách chemie, ale i dále rozvíjely zájem studentů při praktickém ověření nabytých znalostí. Studenti jsou poučeni o bezpečnosti práce v laboratoři, pod vedením pedagogů VŠCHT samostatně provádějí jednotlivé úkoly, výsledky zpracují do protokolu, hodnotí je přítomný středoškolský učitel. Pro všechny práce jsou připraveny podrobné návody. Jednotlivá laboratorní cvičení jsou organizována pro skupiny 10-15 studentů, rozsah je 4 hodiny a probíhají v dopoledních i odpoledních hodinách.

Program laboratoří zahrnuje laboratorní výpočty, nácvik základních laboratorních dovedností jako jsou vážení, filtrace, zahřívání, odpařování, sušení, destilace, příprava roztoků, dělení směsí na základě fyzikálních a chemických vlastností složek a další. Následují tématicky zaměřené práce z anorganické i organické chemie, např. neutralizace, reakce vybraných prvků a jejich sloučenin (Cu, Fe, halogenidů, organických sloučenin atd.), reakce běžných oxidačních a redukčních činidel, kvalitativní analytické reakce kationtů a aniontů, odměrná analýza.

*Tento projekt je podporován Rozvojovým programem MŠMT č. 21/8.*

#### 4P08

### AKO PRACOVAŤ S TALENTOVANOU MLÁDEŽOU?

Eva Kostolányiová<sup>1</sup>, Katarína Javorová<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Pedagogická fakulta TU, Priemysel'ná 4, Trnava 91843, Slovenská republika,*

<sup>2</sup>*Prírodovedecká fakulta UK, Mlynská dolina, Bratislava 84215, Slovenská republika*

Nadanie a talent sú často skloňované slová, keď sa hovorí o predpokladoch úspechu. Ale na to, aby sa nadanie a talent žiaka dokázali prejaviti', je potrebné ich rozvíjať už od začiatkov jeho štúdia. Náš príspevok sa zaoberá možnosťami rozvíjania talentov žiakov v oblasti chémie, poukazuje na možnosti vyhľadávania talentovaných a nadaných žiakov v

školách, rozvíjania ich tvorivých odbornoteoretických vedomostí a odbornopraktických schopností, a taktiež poukazuje na spôsoby, ako vytvárať trvalý pozitívny vzťah žiakov k chémii, ako viesť žiakov k samostatnej tvorivej činnosti, upevňovať ich záujem o sebazvedelávanie.

**4P09****VZNIK A ČINNOSŤ SLOVENSKO-  
PODKARPATSKORUSKEJ ODBOČKY ČSSCH  
(PRÍPRAVA CHEMICKÉHO ZJAZDU, KTORÝ  
SA MAL KONAŤ V BRATISLAVE)**

Jozef Čársky

*Ústav lekárskej chémie, biochémie a klinickej  
biochémie LF UK v Bratislave*

Výbor Československej spoločnosti chemickej v Prahe sa r. 1928 rozhodol vytvoriť novú štruktúru Spoločnosti, zloženú z troch odbočiek: českej so sídlom v Prahe, moravsko-sliezskej so sídlom v Brne a slovensko-podkarpatskoruskej so sídlom v Bratislave. Prípravnými prácami založenia bratislavskej odbočky boli poverení Ing. J. Pitra a Ing. S. Kopal. Ustanovujúca schôdza sa konala 30. 11. 1929 v prednáškovej sieni Poľnohospodárskeho múzea v Bratislave za účasti 30 záujemcov, na ktorej sa vypracovali stanovy a bol zvolený prípravný výbor na čele s predsedom Ing. B. Nejedlým (vládny radca generálneho finančného riaditeľa) a podpredsedom prof. MUDr. J. Buchtalom (prednosta Ústavu pre lekársku chémiu LF UK). Následne na ustanovujúcom Valnom zhromaždení (12. 1. 1930), za účasti zástupcov Ústredného výboru ČsSCh bol potvrdený vo funkcii predseda i podpredseda, zvolení boli ďalší členovia výboru odbočky a zástupcovia do Ústredného výboru Spoločnosti. V júni 1935 na zjazde ČsSCh v Brne sa rozhodlo, že nasledujúce celoštátne stretnutie chemikov sa bude konať v Bratislave (24.-26. 9. 1938), s organizačným zabezpečením bratislavskej odbočky na čele s jej novým predsedom prof. J. Buchtalom. Aj keď boli vykonané všetky prípravné práce a konkretizovaný program zjazdu, vrátane vydania slávnostného čísla *Chemických listov* s prácami, ktoré sa týkali chémie a chemického priemyslu na Slovensku, zjazd sa nekonal v dôsledku známych spoločensko-politických udalostí. Odchodom väčšiny členov výboru i členov odbočky zo Slovenska bola zastavená roku 1938 jej činnosť.

**4P10****HISTÓRIA TRADIČNÝCH ZJAZDOV  
SLOVENSKÝCH A ČESKÝCH CHEMIKOV  
V BANSKEJ ŠTIAVNICI**

Jozef Čársky<sup>1</sup>, Michal Uher<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Ústav lekárskej chémie, biochémie a klinickej  
biochémie LF UK Bratislava*

<sup>2</sup>*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU  
Bratislava*

Mimoriadny význam Banskej Štiavnice v dlhodobej histórii chémie na Slovensku, spojenej s činnosťou slávnej Baníckej a lesníckej akadémie, zrejme motivovalo k tomu, aby tu v roku 1921 vznikla Vyššia priemyselná škola chemická, ako prvá špecializovaná stredná škola na Slovensku. Z iniciatívy jej profesorov - E. Besedu a Ing. S. Stankovianskeho, a prof. SVŠT v Bratislave Ing. J. Gašperika bol založený v r. 1940 Spolok chemikov Slovákov so sídlom v Banskej Štiavnici, ako pokračovanie organizovanej činnosti chemikov po zastavení pôsobenia bratislavskej odbočky ČsSCh (r. 1938). V povojnovom období už r. 1945 sa uskutočnilo Valné zhromaždenie Spolku, na ktorom sa do programu zakotvila angažovanosť v industrializácii Slovenska a výstavbe ústavov Odboru chemicko-technologického inžinierstva SVŠT. Spolok obnovil kontakty s ČsSCh, rozšírila sa členská základňa (465 členov plus kolektívne členstvo 19 chemických podnikov). Mimoriadnym úspechom bolo vydávanie odborného časopisu *Chemické zvesti* (od r. 1947). V r. 1949 sa uskutočnil zjazd Spolku v Banskej Štiavnici za účasti delegátov ČsSCh, kde sa prezentovali snahy o zjednotenie týchto spoločností, ktoré boli zavŕšené na celoštátnom zjazde v Brne r. 1950. V ďalšom období sa pravidelné zjazdy chemikov v Banskej Štiavnici stali celoštátnymi, s účasťou aj zahraničných odborníkov. V ich histórii treba spomenúť zjazd v r. 1959, ktorého sa zúčastnilo 1100 chemikov. Ďalšie zjazdy sa už konali striedavo, v rôznych mestách republiky.

**4P11****HISTORICAL OUTLINE OF SLOVAK  
ALCHEMY**

Miloš Jesenský

*Kysucké múzeum v Čadci*

Alchemy was a pre-scientific discipline pursuing the change or transmutation of metals and preparation of a „universal remedy“ called panaceum. It focused on 8 essential issues as follows: 1. Alcahest preparation. 2. Separation of so called spirit of the world. 3. Quintessence. 4. Aurum potable. 5. Elixir of life. 6. Preparation of arcanes. 7. Palingenesis. 8. Homunculus.

The beginnings of alchemy on the territory of Slovakia, as known up to this time, are illustrated by the reports from the 15<sup>th</sup> and 16<sup>th</sup> centuries, saying that alchemy

was conducted in the Carthusian monasteries in the Spiš region.

#### 4P12

### NOVÉ MOŽNOSTI LICENCOVÁNÍ ELEKTRONICKÝCH VÝUKOVÝCH MATERIÁLŮ – LICENCE CREATIVE COMMONS

Jiří Jiráč<sup>1</sup>, Eva Dibuszová<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Laboratoř informatiky a chemie, Fakulta chemické technologie

<sup>2</sup>Vydavatelství VŠCHT Praha, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28, Praha 6

Podíl elektronických výukových materiálů neustále vzrůstá, přičemž snadnost, s jakou je lze získat a opětovně využít (a zneužít) s sebou nese několik problematických momentů – jak při jejich tvorbě, tak při publikování. Pokud chtěl tvůrce materiálu využít obrázky, schémata nebo texty získané na Internetu, v podstatě měl pouze jedinou možnost – kontaktovat autora nebo vydavatele a vyžádat si svolení k použití. Na druhou stranu, rozhodl-li se autor publikovat svoje dílo volně, ale chtěl by např. aby ho mohl využít kdokoli za předpokladu, že ocituje autora, neměl žádné nástroje, jak toto specifikovat. Silná poptávka po řešení těchto úskalí vedla k vytvoření licencí „Creative Commons“.

Licence Creative Commons je soubor veřejných licencí, které přinášejí nové možnosti v oblasti publikování autorských děl: posilují pozici autora při rozhodování za jakých podmínek bude dílo veřejně zpřístupněno. Licence Creative Commons fungují na jednoduchém principu: autor jejich prostřednictvím plošně uzavírá se všemi potenciálními uživateli díla smlouvu, na základě které jim poskytuje některá svá práva k dílu a jiná si vyhrazuje. Creative Commons nejsou popřením klasického pojetí copyrightu, ale jeho nadstavbou. Vycházejí z autorského zákona, který je upravuje jako licenční smlouvy (§ 46-55 AutZ) [1]. Licence je zavedena už ve více jak 40 zemích, v ČR byla oficiálně uvedena 16. dubna 2009.

Hlavním rysem je její mezinárodní srozumitelnost a snadnost, jak lze velmi snadno specifikovat práva a povinnosti uživatele, např. pomocí piktogramů. Další elegantní vlastností je modularizace – ze 4 základních licenčních podmínek lze poskládat celkem 6 hlavních kombinací lišících se restriktivností. Internetové vyhledávače (např. Google) se již připravují na vyhledávání podle typu licence, výsledky hledání tak je možné filtrovat i podle tohoto kritéria.

[1] Licence Creative Commons. [online]. 2009

Available from www:

<http://www.creativecommons.cz/>

#### 4P13

### ESO – JEDNOTNÝ CELOŠKOLNÍ ROZCESTNÍK ELEKTRONICKÝCH STUDIJNÍCH MATERIÁLŮ VŠCHT PRAHA

Jiří Znamenáček<sup>1</sup>, Michal Božoň<sup>1</sup>, Bedřich Košata<sup>1</sup>

<sup>1</sup>VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika

Se vzrůstající dostupností rychlého internetu a levných počítačů se čím dál tím více vyplatí přednášejícím i studentům poskytovat a získávat výukové podklady v elektronické formě. Zatímco studenti navštěvující příslušnou přednášku se o umístění materiálů na stránkách přednášejícího či ústavu snadno dozví, všem ostatním, které by dostupný materiál mohl též zajímat, je jeho existence vcelku spolehlivě utajena.

Vedeni naznačenou logikou jsme se po pilotním projektu portálu *Elektronických studijních opor*, jehož správa byla v kompetenci vydavatelství VŠCHT Praha (jakožto největšího producenta elektronických výukových materiálů), pokusili vyrobít celoškolské řešení, které by autorům materiálů maximálně usnadnilo jejich opatření vhodnými metadaty (jméno autora, název materiálu, typ materiálu, podklad pro daný předmět, klíčová slova...) a uveřejnění v takové podobě, která bude zájemcům snadno dostupná a použitelná. Výsledkem je nová podoba portálu ESO volně přístupná na adrese <http://eso.vscht.cz>, která nabízí správcům jednotlivých ústavů snadnou údržbu jimi spravovaných materiálů a studentům i všem ostatním zájemcům jejich přívětivé a jednotné vyhledávání, ať už podle vybraných kritérií (autor, předmět...) či plnotextovým prohledáváním přes dostupná metadata.

#### 4P14

### PROGRAMOVANÁ UČEBNICE ELEKTROANALYTICKÝCH METOD

Jitka Součková, Lukáš Müller, Jana Skopalová

*Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého, tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc*

V rámci modernizace a inovace výuky praktického předmětu Pokročilá analytická chemie se zaměřením na elektrochemii byla vytvořena interaktivní elektronická programovaná učebnice, která by měla sloužit studentům tohoto předmětu jako doporučená studijní literatura. Učební texty jsou zaměřeny na teoretické základy průtokové chronopotenciometrie a voltametrie, moderních elektroanalytických technik využívaných v praxi.

Učebnice je díky principům programovaného učení<sup>1</sup> vhodným vyučovacím prostředkem při samostudiu ale také při přípravě na laboratorní cvičení. Programovaný text by měl sloužit nejen studentům k důkladnému a správnému pochopení a zvládnutí dané problematiky, ale je využitelný i v kurzech dalšího vzdělávání učitelů, kteří s programovaným učením mnohdy nemají žádné zkušenosti.

V prezentovaném posteru budou uvedeny ukázky vytvořeného učebního textu ke kapitolám coulometrické a voltametrové techniky. Dále zde budou diskutovány výhody a nevýhody používání této kurikulární podpory v rámci přípravy na praktické cvičení.

*Autoři děkují Marku Fešarovi za vytvoření prostředí výukového programu a Marcelu Vrbasovi za tvorbu grafiky k tomuto programu. Grantu MŠMT NPV II č. 2E08021 a FRVŠ 2212/2009 za finanční podporu.*

[1] Nováková, M.: Programované učení z hlediska didaktiky. Praha: SPN, 1969. CO A KDE HLEDAJÍ UCHAZEČI O STUDIUM NA VŠCHT PRAHA

#### 4P15 ÚSTAV ANORGANICKÉ CHEMIE, VYSOKÁ ŠKOLA CHEMICKO-TECHNOLOGICKÁ V PRAZE

Vratislav Flenr

Na statisticky významném souboru 600 studentů nastupujícího (1.) ročníku 2008/09

byl proveden anonymní a elektronicky vyplňovaný sběr dat zaměřený na to:

Jaké informace o VŠCHT uchazeči přednostně hledali před podáním přihlášky ke studiu.

Z jakého zdroje uchazeči získali informace, které je vedly k podání přihlášky? Který ze zdrojů je nejužitečnější?

Jaké je srovnání www stránek a tištěných materiálů VŠCHT Praha.

Důvody pro studium na VŠCHT.

Výsledky někdy potvrzují očekávání (bod 2. a 3.), jindy možná překvapí.

#### 4P16 CELOŽIVOTNÍ VZDĚLÁVÁNÍ NA VŠCHT PRAHA

Iva Dudková<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*VŠCHT Praha, Technická 5, Praha 6, 166 28, Česká Republika*

Celoživotní vzdělávání (CŽV) ve smyslu dalšího vzdělávání dospělých hraje zejména v dnešní době velmi významnou roli na trhu práce. Celoživotní vzdělávání mimo rámec prezenčního resp. distančního vzdělávání je nedílnou součástí vzdělávacích aktivit VŠCHT Praha a je poskytováno všemi 4 fakultami formou krátkodobých, střednědobých i dlouhodobých

kurzů. Kurzy jsou strukturovány podle potřeb pro specialisty, nižší management, střední management se zaměřením na prohloubení odborných znalostí v profesi, aktuality v chemicko-technologických oborech, v oblastech ochrany životního prostředí, čištění vod a zpracování odpadů, využívání informačních a komunikačních technologií, chemie a analýzy potravin, potravinářské technologie, mikrobiologie, biochemie, normy a legislativu EU v příslušném oboru a další. Kromě standardní nabídky kurzů ČZV nabízí VŠCHT Praha zároveň možnost přípravy kurzů pro firmy „šitých na míru“. Prostřednictvím kurzů celoživotního vzdělávání je rozvíjena další kvalifikace a vzdělání absolventů škol, zaměstnanců firem, pracovníků státní správy a dalších zájemců s cílem usnadnit či zlepšit jejich postavení na trhu práce. Cílem celoživotního učení není vzdělávat, ale rozvíjet člověka ke zvýšení jeho potenciálu nejen v pracovním životě.

#### 4P17 CHEMISCHES ZENTRALBLATT – HISTORICKÁ SOUČASNOST

Jaroslav Šilhánek

*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 16628 Praha 6, Česká republika.*

Pro většinu současné generace chemiků je název *Chemisches Zentralblatt* dávnou historií, pokud o něm vůbec ještě slyšeli. Tento první a dlouhou dobu dominantní a velmi ceněný referátový časopis skončil v r.1969 po 139 letech existence a postupně byl přesunut z dostupných regálů knihoven do depositářů, pokud vůbec nebyl zlikvidován. Je proto nepochybně překvapující, že tento časopis byl institucí *FIZ Chemie Berlin* za podpory Německé chemické společnosti kompletně digitalizován a v současné době je dispozici jako elektronická verze<sup>1</sup>. Hlavním a nezpochybnitelným důvodem pro tento krok je skutečnost, že pokud by k němu nedošlo, byl by tento materiál, shrnující oněch 139 let historie chemie, nenávratně odsouzen k chátrání v depositářích jen jako historická záležitost. V elektronické verzi se tak otevírá snadný přístup k výsledkům chemického bádání za větší část 19. století a právě pro svou snadnost nejenom pro historická bádání, ale i jako užitečný zdroj informací pro současný chemický výzkum. Referát bude demonstrovat především způsoby práce s tímto zdrojem, a to jak na příkladech z historie, tak i jako nástroj současné praxe.

[1] <http://www.fiz-chemie.de/en/home/products-services/chemical-data/chemistry-since-1830.html>

## PREDNÁŠKY - SEKCIA 5: POTRAVINÁRSTVO, ŽIVOTNÉ PROSTREDIE A BIOTECHNOLÓGIA

### 5P01

#### FYTOTOXICITA A GENOTOXICITA CHRÓMU A NIKLU

Agáta Fargašová

*Katedra ekoszológie na fyziotaktiky, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava*

V práci sa hodnotil inhibičný účinok Cr(III), Cr(VI) a Ni na rast, produkciu biomasy a obsah vody v koreňoch a výhonkoch horčice bielej (*Sinapis alba* L.). Na základe IC ( $IC_{25}$ ,  $IC_{50}$ ,  $IC_{75}$ ) hodnôt pre inhibíciu rastu boli zostavené nasledovné inhibičné rady: koreň: Cr(VI)  $\geq$  Ni(II)  $\gg$  Cr(III); výhonky: Ni(II) > Cr(VI)  $\gg$  Cr(III). Kovy redukovali viac rast koreňov ako výhonkov a produkcia čerstvej biomasy (FM) bola redukovaná viac ako produkcia sušiny (DM). Produkcia FM bola redukovaná viac v koreňoch ako vo výhonkoch. Toto indikuje redukciju príjmu vody a problém s jej transportom cez rastlinu.

Genotoxicita sa hodnotila skúškou simultánnej fytoxicity a mutagenity na *Vicia sativa* L. var. Klára, na základe ktorej sa dá zostaviť pre inhibíciu rastu postupnosť: koreň: Ni(II) > Cr(VI) > Cr(III); výhonok: Ni(II) > Cr(VI)  $\geq$  Cr(III). Všetky kovy v testovaných koncentráciách preukazne zvyšovali výskyt chromozómových aberácií v koreňových špičkách *V. sativa*. Maximum aberácií sa objavovalo v prítomnosti Cr(VI) a ich výskyt klesal v poradí Cr(VI) > Ni(II) > Cr(III). Genotoxické účinky kovov sa hodnotili aj analýzou frekvencie výskytu mikrojadier v peľových tetradách rastlín *Tradescantia*. Žiadny z testovaných kovov preukazne nestimuloval frekvenciu výskytu mikrojadier a genotoxický účinok kovov sa znižoval v poradí Cr(VI)  $\geq$  Ni(II) > Cr(III).

### 5P02

#### ARSENIC CONTAMINATION OF SURFACE AND GROUND WATERS AT THE LUBIETOVÁ DEPOSIT (CENTRAL SLOVAKIA)

Daniela Borošová<sup>1</sup>, Iveta Nagyová<sup>2</sup>, Zuzana Melichová<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Regional Authority of Public Health, Cesta k nemocnici 1, 975 56 Banská Bystrica, Slovakia*

<sup>2</sup> *Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Matej Bel University, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica, Slovakia*

Lubietová deposits belong to numerous regions of Slovakia which are contaminated by mining dumps. The most important As source at the dump-fields is tetrahedrite. The weathering of the As minerals (their oxidation) cause modification of native As and As(III)

to As(V) containing compounds of arsenic acid. The arsenic acid is water soluble, but only rarely migrates on greater distances, because quickly reacts with heavy metals and As is fixed in form of various arsenates. As(III) is in the weathering zone much more mobile as As(V). In oxidation conditions of the Lubietová dump-fields markedly prevail As(V).

The aim of this work was to monitor releasing of arsenic into ground and surface water. Water samples were taken in 1-month intervals from March 2008 to July 2009 from Podlipa and Svätodušná dump-fields. The method of hydrid generation atomic absorption spectrometry was used for the arsenic determination. Analysis were carried out on the device Perkin Elmer 4100 ZL with hydrid unit FIAS 100. Results obtained showed that the As concentrations were depend on the year period (rainfall, snow melting, drought). The maximal total As concentration at dump-field Podlipa was  $(2,8 \pm 0,4) \mu\text{g dm}^{-3}$  and at the dump field Svätodušná was  $(108 \pm 6) \mu\text{g dm}^{-3}$ . Our results are in good agreements with results published previously [1].

*This work was supported by the Slovak Grant Agency VEGA, grant No. 1/0789/08.*

[1] Andráš, P., Lichý, A., Rusková, J., Matúšková, L.: Heavy metal contamination of the landscape at the Lubietová deposit (Slovakia). Proceedings of World Academy of Science, Engineering and Technology, 34, Venice, Italy, 2008, s. 97-100. ISSN 2070 – 3740

### 5P03

#### THE EFFECT OF ARSENIC AND SELENIUM ON THE GROWTH AND CHLOROPHYLL PRODUCTION OF *DESMODESMUS* *QUADRICAUDA* AND *PSEUDOKIRCHNERIELLA SUBCAPITATA*

Zuzana Kramarová and Agáta Fargašová

*Department of Ecosozology and Physiotactics, Faculty of Natural Sciences of Comenius University in Bratislava, Mlynská dolina B-2,842 15 Bratislava, Slovak Republic, kramarovaz@fns.uniba.sk, fargasova@fns.uniba.sk*

In most photosynthetic organisms, inorganic arsenic and selenium might inhibit photosynthesis and cellular growth. The toxic effect of As(III), As(V), Se(IV) and Se(VI) on freshwater microscopic algae *Desmodesmus quadricauda* and *Pseudokirchneriella subcapitata* was investigated. Determination of growth inhibition and chlorophyll *a* and *b* production, expressed as  $EC_{50}$ , was used to assess the toxic effect. The test duration was 14 days. The experiments were carried out in growth medium with low phosphate and sulfate concentration. As(III) caused greater growth inhibition of *D. quadricauda* and *P. subcapitata* than As(V) (there was no growth inhibition even at concentration of 100  $\mu\text{g/l}$ ). Se(IV) and Se(VI) were more toxic than

arsenic to both algae. Se(VI) was the most toxic of all compounds tested. The EC<sub>50</sub> values of chlorophyll production correspond well with those obtained for growth inhibition. Because of the lack of inhibitory effect on algal growth, chlorophyll production was not assessed in case of As(V). Chlorophyll *b* production was more sensitive to arsenic and selenium exposition than chlorophyll *a* by *P. subcapitata*. The following order can be arranged on the basis of the obtained EC<sub>50</sub> values for growth inhibition and chlorophyll production: Se(VI)>>Se(IV)>As(III)>>As(V).

*The study was supported by the Scientific Grant Agency, grant No.1/4361/07 and by the Grant of Comenius University No. UK/357/2009.*

#### 5P04

### OMEZENÍ RŮSTU BAKTERIÍ NA TEXTILÍCH A OCHRANA ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ

Alžběta Petráková<sup>1</sup>, Eliška Chrpová<sup>2</sup>, Hana Ledererová<sup>3</sup>

<sup>1</sup> TU Liberec, Katedra textilních technologií; Studentská 2, Liberec 46117, ČR

<sup>2</sup> TU Liberec, Katedra textilních technologií; Studentská 2, Liberec 46117, ČR

<sup>3</sup> TU Liberec, Katedra textilních technologií; Studentská 2, Liberec 46117, ČR

Rozšíření patogenů v našem okolí vede k hledání cest k jejich eliminaci. Hlavním cílem výzkumu je zamezit jejich vzniku a šíření na textiliích – délkových i plošných. Ve struktuře textilií se nejčastěji vyskytují bakterie a plísně. Zde se nabízí hned několik možností jak změnit podmínky vhodné k jejich vzniku a existenci. Hlavním cílem je použít takové úpravy, které nepoškozují přírodu ani zdraví člověka. Najít taková řešení, která zabrání množení bakterií a zároveň umožní hojení ran. Možností je hned několik, a to například zabránit zachycení mikroorganismu v povrchu textilie, odstranit mikroorganismy z povrchu textilie, vytvořit takové složení vlákna či vytvořit takovou strukturu textilie, které znemožní zachycení i růst mikroorganismů, apod. V současnosti se používají prostředky jakými jsou chitosan a ionty stříbra, prostředky u jejichž aplikací se prokázal vhodný účinek k zabránění vzniku a růstu mikroorganismů. Bakterie jsou buď ochromeny snížením činnosti enzymů, čímž se zabrání jejich růstu nebo zabity. Na textilní fakultě se tato problematika řeší již několik let z různých úhlů pohledu – zásahem do struktury polymeru, nánosem přípravku na povrch textilie, strukturou textilie apod. Jedná se o řešení základní volby a to vhodné textilie s účinnou úpravou. Metody řešení budou v následujícím textu podrobně zmíněny a uvedeny na příkladech.

[1] Šilhánková, L.: Mikrobiologie pro potravináře a biotechnologie, Academia, Praha 2002, ISBN 80-200-1024-6

[2] Penzová, D.: Porovnání průkaznosti použitých metodik hodnocení biostatistických úprav, diplomová práce TU, Liberec 2005

#### 5P05

### STUDIUM INTERAKCE SANGUINARINU S Na<sup>+</sup>/K<sup>+</sup>-ATPÁZOU METODAMI FLUORESCENČNÍ SPEKTROSKOPIE

Martin Kubala<sup>1</sup>, Marika Janovská<sup>1</sup>, Vilím Šimánek<sup>2</sup>, Jitka Ulrichová<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci

<sup>2</sup> Lékařská fakulta Univerzity Palackého v Olomouci

Kvartérní benzo[*c*]fenanthridinový alkaloid sanguinarin se vyskytuje v rostlinách čeledi *Fumariaceae*, *Papaveraceae*, *Ranunculaceae* a *Rutaceae*. Vykazuje široké spektrum biologických aktivit, mj. protizánětlivé a antimikrobiální účinky, na druhé straně je považován za jednu z toxických složek semen rostlin rodu *Argemone*.

Molekulární mechanismus působení sanguinarinu není dosud detailně objasněn. Jeho pochopení komplikuje fakt, že za fyziologického pH forma kvartérního kationtu (SG<sup>+</sup>) je v rovnováze s neutrální formou tzv. pseudobází (SGOH). *In vitro* sanguinarin interaguje s mnoha enzymy a je jejich nekompetitivním inhibitorem. V živém organismu je sanguinarin metabolizován na dihydrosanguinarin (DHSG).

Všechny tyto formy vykazují intenzivní autofluorescenci. Fluorescenční spektroskopie je vhodným nástrojem pro zkoumání molekulárních interakcí jednotlivých forem sanguinarinu. Naše experimenty ukázaly, že excitační a emisní spektrum SGOH vykazuje maxima na 327 nm a 418 nm, zatímco spektra SG<sup>+</sup> na 475 nm a 590 nm, a DHSG na 327 nm a 446 nm. Jednotlivé formy lze tedy snadno spektrálně identifikovat a detailní analýzou vybraných spektrálních oblastí pak charakterizovat chování vybrané formy.

Fluorescenční charakteristiky mohou při interakci s bílkovinou vykazovat změny v závislosti (i) na polaritě prostředí a (ii) na interakci s funkčními skupinami aminokyselin. Tato studie ukázala, že fluorescence SG<sup>+</sup> a DHSG je závislá polaritě rozpouštědla, zatímco fluorescence SGOH na tomto parametru nezávisí. V protickém prostředí vykazoval SGOH citlivost pouze na přítomnost –SH skupiny v cysteinu, v aprotickém pak také na přítomnost glutamátu a lysinu. SG<sup>+</sup> reagoval v protickém prostředí kromě cysteinu také s glutamátem a tyrosinem, v aprotickém pouze s argininem. DHSG interagoval pouze s cysteinem.

Tyto analýzy nám pomohly při studiu interakce sanguinarinu s Na<sup>+</sup>/K<sup>+</sup>-ATPázou. Inhibice aktivity Na<sup>+</sup>/K<sup>+</sup>-ATPázy sanguinarinem může být odpovědná za jeho biologické účinky. Ukazuje se, že obě formy SGOH a SG<sup>+</sup> se váží na Na<sup>+</sup>/K<sup>+</sup>-ATPázu, spektrální

posuny však indikují, že každá forma se váže na jiné vazebné místo enzymu. Naproti tomu jsme neprokázali žádnou interakci  $\text{Na}^+/\text{K}^+$ -ATPázy s DHSG. Pokud tedy dochází k ovlivnění metabolismu po požití sanguinarinu mechanismem, který zahrnuje inhibici  $\text{Na}^+/\text{K}^+$ -ATPázy, pak k tomu musí docházet před redukcí kvartérní formy na DHSG v trávicím ústrojí.

*Tato práce vznikla za podpory grantů GACR 203/07/0564, 525/07/0871 a 303/07/0915, a výzkumných záměrů Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky MSM 6198959215 a MSM 6198959216.*

[1] Janovská, M. et al. Fluorescence of sanguinarine: fundamental characteristics and analysis of interconversion between various forms. Anal. Bioanal. Chem., in press.

### 5P06

#### KATALYZÁTORY NA BÁZI METALOPORFYRINŮ – NÁSTROJ K MODELOVÁNÍ PŮSOBENÍ VYBRANÝCH ENZYMŮ

Pavel Zachař, Vladimír Král

*Vysoká škola chemicko technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6, Pavel.Zachar@vscht.cz*

Enzymy jsou složeny z bílkovinné části – apoenzymu a části nebílkovinné – kofaktoru, který je přenašečem atomů nebo elektronů při příslušné katalytické reakci. Kofaktor má často strukturu metaloporfyrinu, substituovaného tetrapyrrolového makrocyklu – porfyrinu s centrálně vázaným kovem. Mezi enzymy tohoto typu patří především hemoproteiny obsahující jako prostetickou skupinu hem - porfyrin s centrálním atomem  $\text{Fe}^{2+}$  - zajišťující přenos kyslíku. Sem patří vedle hemoglobinu a myoglobinu skupina enzymů označovaných jako cytochromy. Příbuzné látky souborně označované „cytochrom P 450“ zajišťují oxidačními pochody v játrech odbourávání (hydroxylaci, dealkylaci, dehalogenaci, deaminaci aj.) endogenních (steroidy, prostaglandiny aj.), ale zejména exogenních látek (léky). Vedle metaloporfyrinů s atomem Fe existují metaloporfyriny s jinými kovy, např. chlorofyl ( $\text{Mg}^{2+}$ ) a vitamin B 12 (Co), které zajišťují další reakce.

Modelování působení enzymů pomocí syntetických metaloporfyrinů a využití katalytických schopností těchto látek patří mezi úkoly laboratoře molekulárního rozpoznávání ústavu analytické chemie VŠCHT. V této laboratoři byly připraveny sloučeniny, kde základní porfyrinový skelet byl modifikován různými substituenty a jako centrální kovové atomy byly použity ionty Fe(III), Mn(II), Mn(III), Co(II), Co(III) nebo Zn(II). Namísto bílkovinné složky byly metaloporfyriny zakotveny na aminopropylsilikagelu nebo aminomethyl substituované Merrifieldově pryskyřici. Tyto katalyzátory byly použity pro studium oxidačních reakcí některých průmyslově významných

látek ( $\alpha$  olefiny) a látek biologicky významných (steroidy) a degradace důležitých xenobiotik (triazinové herbicidy). Byla studována aktivita použitých katalyzátorů a mechanismus jejich působení. Reakční směsi byly analyzovány metodou GC MS.

*Tato práce vznikla za podpory grantu KAN 200100801 AV ČR a výzkumného záměru MSM 6046137303*

### 5P07

#### USPOŘÁDÁNÍ KULTIVAČNÍHO PROCESU PRO PRODUKCI BUTANOLU

J. Lipovský, M. Linhová, P. Fribert, P. Patáková, M. Rychtera, K. Melzoch

*Ústav kvasné chemie a bioinženýrství, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Tel. +420 220 445 016, fax. +420 220 445 051, e-mail: jakub.lipovsky@vscht.cz*

Produkce 1-butanolu bakteriemi rodu *Clostridium* se v dnešní době, díky možnému využití biobutanolu jako aditiva do fosilních paliv, těší obnovenému zájmu. V současnosti se výzkum zaměřuje na použití levných substrátů, které primárně nejsou potravinářskou surovinou[1]. Tyto suroviny je nutné předupravit hydrolyzou po níž hydrolyzáty obsahují jako hlavní zdroj uhlíku glukosu a proto je výhodné použití glukosového modelového média (TYA) pro studium butanolové fermentace.

Pro měření základních charakteristik procesu je vhodné vsádkové uspořádání, které je však omezeno produktivitou butanolu menší než  $0,5 \text{ g.l}^{-1}.\text{h}^{-1}$  z důvodu zejména nízké koncentrace buněk[2]. Dalšími nevýhodami použití vsádky jsou substrátová a produktová inhibice a také vysoká koncentrace zbytkového substrátu při počáteční koncentraci substrátu vyšší než  $70 \text{ g.l}^{-1}$ . Nevýhody vsádkového uspořádání částečně eliminuje přítokovaný proces (fed-batch). Tento proces je stejně jako vsádkové uspořádání omezen hromaděním butanolu, potažmo jeho toxicitou k produkčnímu kmenu a dosahuje produktivity butanolu okolo  $1,2 \text{ g.l}^{-1}.\text{h}^{-1}$ . V posledních letech bylo provedeno mnoho studií zabývajících se integrací kultivace se separací produktů, tyto techniky využívají kontinuálního uspořádání procesu s imobilizovanými buňkami nebo s recyklem buněk společně s on-line separací produktu. Tyto procesy mohou vykazovat produktivitu butanolu vyšší než  $4 \text{ g.l}^{-1}.\text{h}^{-1}$ [3].

[1] Qureshi N., Saha B. C., Hector R. E., Hughes S. R., Cotta M. A.: Biomass Bioenergy 32, 168 (2008).

[2] Ezeji T. C., Qureshi N., Blaschek H. P.: Curr. Opin. Biotechnol. 18, 220 (2007).

[3] Quershi N., Lai L. L., Blaschek H. P.: Food Bioprod. Process. 82, 164 (2004).



## 5P08

## OPTIMALIZACE STRIPOVÁNÍ PLYNEM PŘI SEPARACI 1-BUTANOLU Z KULTIVAČNÍHO MEDIA BĚHEM FERMENTAČNÍHO PROCESU

P. Fribert, J. Lipovský, M. Linhová, P. Patáková, M. Rychtera, K. Melzoch

Ústav kvasné chemie a bioinženýrství, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Tel. +420 220 444 127, fax. +420 220 445 051, e-mail: petr.fribert@vscht.cz

Mikrobní produkce 1-butanolu z odpadních sacharidických substrátů je jednou z možností výroby tzv. biopaliv druhé generace. Avšak tolerance k 1-butanolu je kritickým faktorem ovlivňujícím schopnost mikroorganismů produkovat 1-butanol v ekonomicky přijatelných koncentracích. Nynější kmeny rodu *Clostridium* nejsou schopny růst při koncentracích 1-butanolu vyšších než 2 %<sup>[1]</sup>, a proto jsou v současné době vyvíjeny moderní způsoby výroby, spojující produkci a separaci 1-butanolu v jednom systému, které mohou zlepšit ekonomickou bilanci produkce. K preferovaným technikám izolace 1-butanolu z kultivačního média patří metoda stripování plynem, která umožňuje selektivní separaci těkavých látek z kapalné fáze v průběhu kultivace.<sup>[2]</sup>

V této práci byl 1-butanol, produkován bakteriemi *Clostridium pasteurianum* v pětilitrovém laboratorním fermentoru, separován stripováním dusíkem. Stripování probíhalo v uzavřené soustavě s recirkulací stripovacího plynu. Vystripovaný 1-butanol byl z nosného plynu vymražován v kondenzátoru při teplotě -4 °C. S klesající koncentrací 1-butanolu v mediu klesala rychlost jeho separace od 0,9 g/l/h při 8 g/l po 0,2 g/l/h při 2 g/l. Během stripování bylo dosaženo až jedenáctinásobného zakonzentrování 1-butanolu na 47 g/l.

[1] KNOSHAUG, E.P.; ZHANG, M. Butanol Tolerance in a Selection of Microorganisms. *Appl Biochem Biotechnol*, **2009**, *153*, 13-20.

[2] EZEJI, T.C.; KARACHER, P.M.; QURESHI, N.; BLASCHEK, H.P. Improving performance of a gas stripping-based recovery system to remove butanol from *Clostridium beijerinckii* fermentation. *Bioprocess and biosystems engineering*, **2005**, *27* (3), 207-214.

## 5P09

SLEDOVÁNÍ MORFOLOGICKÝCH A FYZIOLOGICKÝCH ZMĚN U BAKTERIÍ RODU *CLOSTRIDIUM* S VYUŽITÍM PRŮTOKOVÉ CYTOMETRIE

Michaela Linhová, Petra Patáková, Petr Fribert, Jakub Lipovský, Mojmír Rychtera, Karel Melzoch

Ústav kvasné chemie a bioinženýrství, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika

Solventogenní klostridie jsou charakteristické počáteční fází produkce kyselin s následujícím posunem k produkci převážně rozpouštědel. V průběhu tohoto přechodu metabolismu dochází k množství různých fyziologických a morfoloogických změn (mezi nimi také k přestavbě buněčné stěny<sup>1</sup> a ke sporulaci). Během produkce rozpouštědel se buňka snaží adaptovat na vnější prostředí modifikací buněčné stěny na chemicky odolnější, při čemž dochází ke ztrátě schopnosti zadržovat Gramovo barvivo a tím ke změně v označení z G<sup>+</sup> na G<sup>-</sup> bakterie. Rod *Clostridium* patří mezi bakterie, které jsou obtížně klasifikovatelné klasickým Gramovým barvením<sup>2</sup>. Nejen pro tento případ existuje fluorescenční alternativa tohoto barvení v podobě značení hexidíum jodidem, který selektivně značí nukleové kyseliny G<sup>+</sup> bakterií, zatímco přes chemicky odolnější stěnu G<sup>-</sup> bakterií neprochází<sup>3</sup>.

V této práci bylo využito fluorescenčního značení hexidíum jodidem a rhodaminem 123 k rozpoznání počátku produkce butanolu u bakterií druhu *Clostridium pasteurianum*. Byly provedeny kultivace v RCM mediu, kde kultura nesporulovala a neprodukovala rozpouštědla a v TYA mediu, kde docházelo k produkci rozpouštědel. Intenzita fluorescence po značení hexidíum jodidem odpovídala v případě, kdy kultura neprodukovala rozpouštědla, G<sup>+</sup> bakteriím (testováno pro *Bacillus megatherium*), naopak pokud produkovala rozpouštědla docházelo k poklesu intenzity fluorescence s produkcí butanolu na hodnoty G<sup>-</sup> bakterií (testováno pro *Escherichia coli*). Zavedená metoda sledování změny buněčné stěny fluorescenčním značením bakterií *C. pasteurianum* v závislosti na produkci rozpouštědel byla dále vyzkoušena na buňkách z přítokovaných kultivací v biorektoru.

[1] S. W. Jones, C. J. Paredes, B. Tracy, N. Cheng, R. Sillers, R. S. Sanger, E. T. Papoutsakis, The Transcriptional Program Underlying the Physiology of Clostridial Sporulation, *Genome Biology* **9**, 2008

[2] D. J. Mason, S. Shanmuganathan, F. C. Mortimer, V. A. Gant, A Fluorescent Gram Stain for Flow Cytometry and Epifluorescence Microscopy, *Applied and Environmental Microbiology* **64**, 1998

[3] R. P. Haughland, Molecular Probes, Handbook of Fluorescent Probes and Research Chemicals, 7. vydání, Molecular Probes, Eugene, Oregon, 1999

## 5P10 SLOVAK AND SOUTH AFRICAN MEAD

Daniela Smogrovicová<sup>1</sup>, Pavol Nadasky<sup>1</sup>, B. S. Wilhelmi<sup>2</sup>, R. Tandlich<sup>3</sup>, R. Morrison<sup>2</sup>, G. Cambray<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinskeho 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic

<sup>2</sup>Faculty of Science, Rhodes University, P.O. Box 94, Grahamstown 6140, South Africa

<sup>3</sup>Faculty of Pharmacy, Rhodes University, P.O. Box 94, Grahamstown 6140, South Africa

<sup>4</sup>Makana Meadery, PostNet Suite #90, Private Bag 1672, Grahamstown 6140, South Africa  
e-mail: daniela.smogrovicova@stuba.sk

Honey, produced by bees from floral nectar or honey dew, has been used for centuries for the production of honey wine (mead) or honey beer. In Eastern Europe, different meads are recognized depending upon the rate of dilution of honey with water; various spices like hop, nutmeg, etc., can also be added. In many places in Africa and South America, tropical honey, which is very liquid and speedy to ferment, is not eaten but drunk.

This contribution summarises basic analytical parameters of Slovak and South African meads. In three types of Slovak and two African meads, free SO<sub>2</sub>, total SO<sub>2</sub>, titratable acidity, volatile acidity, ethanol content, residual sugars, extract, protein content and total polyphenols were measured. The ethanol concentration of Slovak meads varied from 13.26 to 13.56 % v/v, residual sugars in dependence of mead style from 136.6 to 199.6 g/l. In African meads, the average ethanol concentration was 11.97 % and the residual sugar content was 72.1 g/l. The residual sugar content of Slovak meads was significantly higher in all types of meads than that of African meads.

The titratable acidity of African meads was slightly higher than that of Slovak meads. However, the volatile acidity was lower in African meads (0.75 and 0.79 g/l of acetic acid equivalent) than in Slovak meads, which varied between 0.99 and 1.49 g/l. African meads had considerably higher sulfite levels than Slovak meads. The total SO<sub>2</sub> content was 184.1 and 190.1 mg/l in African meads, and ranged only from 35.6 to 41.6 mg/l in Slovak meads. A similar situation was observed with the free SO<sub>2</sub> content. All meads fell within the allowed limits of the sulfite concentration and volatile acidity. The extract and protein content were higher in all Slovak meads. African meads' total polyphenol content was similar to that of Slovak meads and varied between 177.4 and 241.4 mg/l of gallic acid equivalents (GAE).

*The work was supported by the Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic, Project No. 1/0786/08, and the Slovak Research and Development Agency, Project No. SK-*

*ZA-0010-07 as part of the Slovak – South African Science and Technology Cooperation.*

## 5P11 IMMOBILIZATION OF ENZYMES ON SUPERPARAMAGNETIC NANOPARTICLES

Ludmila Zajoncová<sup>1</sup>, Michaela Pečová<sup>1</sup>, Marek Šebela<sup>1</sup>, Zdenka Marková<sup>2</sup>, Radek Zbořil<sup>2</sup>, Kateřina Kluchová<sup>2</sup>, Jan Čuda<sup>2</sup> and Dalibor Jančík<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Biochemistry, Faculty of Science, Palacký University, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, Czech Republic

<sup>2</sup>Centre for Nanomaterial Research, Palacký University, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, Czech Republic

Enzymes are catalysts bearing some excellent properties such as high activity, selectivity and specificity, that may permit to perform the most complex chemical processes under the most being experimental and environmental conditions. Soluble enzymes have to be immobilized to be reused for long times in industrial reactors and some other critical enzyme properties have to be improved like stability, activity, easy separation from reaction mixture, inhibition by reaction product. Enzymes have long been used in industry as catalysts for catabolic processes or for the production of specific chemical enantiomers [1]. Recently, a growing interest has been shown in using nanoparticles as ideal solid support to achieve enzyme immobilization in order to increase enzyme stability.

Superparamagnetic maghemite nanoparticles were prepared by a one-step thermal decomposition of iron(II) acetate in air at 400 °C [2] and magnetite was isolated from magnetotactic bacteria. Magnetic nanoparticles were coated by chitosan providing free amino and hydroxy groups on their surface. Bovine trypsin and  $\alpha$ -amylase were chemical modified by cyclodextrins [3] and were covalently immobilized onto magnetic carriers via carbodiimide as a coupling agent. Improved properties of immobilized modified enzymes were characterized by determining kinetic parameters and morphological properties of the nanoparticles were characterized by TEM.

*This work was supported by the grant MSM 6198959216 from the Ministry of Education, Youth and Sports, Czech Republic.*

- [1] Johnson A.K., Zawadzka A.M., Deobald L.A., Crawford R.L., Paszczynski A.J.: *J. Nanopart. Res.* 10, 1009 (2008).
- [2] Kluchova K., Zboril R., Tucek J., Pecova M., Zajoncova L., Safarik I., Mashlan M., Markova I., Jancik D., Sebela M., Bartonkova H., Bellesi V., Novak P., Petridis D.: *Biomaterials* 30, 2855 (2009).

[3] Sebela M., Stosova T., Havlis J., Wielsch N., Thomas H., Zdrahal Z., Shevchenko A.: *Proteomics* 6, 2959 (2006).

#### 5P12

### TŘIDĚNÍ KVĚTOVÝCH A VČELÍCH PYLŮ: VYUŽITÍ SPEKTROSKOPICKÝCH A STATISTICKÝCH METOD

Andriy Synytsya<sup>1</sup>, Alla Synytsya<sup>2</sup>, Roman Bleha<sup>1</sup>, Jan Brindza<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Ústav chemie a technologie sacharidů, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika

<sup>2</sup>Ústav analytické chemie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika

<sup>3</sup>Institut ochrany biodiverzity a biologické bezpečnosti, Fakulta agrobiologie a potravinových zdrojů, SZU, Třída A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, Slovenská republika

Včelí (obnožkový) pyl se skládá ze směsi květového pylu z nektarem a včelími výměšky. Tento produkt včelařství je zajímavý pro výrobu potravinových doplňků díky přítomnosti směsi biologicky aktivních látek (bílkovin, aminokyselin, vitaminů, polyfenolů apod.) Barva je důležitá vlastnost včelího pylu protože je markérem barviv (chromoforů). Mezi typickými chromofory pylů patří flavonoidy a karotenoidy. Barviva včelího pylu jsou zdrojem žlutého zbarvení včelího vosku a jantarového zbarvení medu. Složení a zbarvení včelích pylů se významně liší podle botanického původu, což vede k nutnosti jejich účinné identifikaci a třídění. Spektroskopické (FTIR, FT Ramanova, FT NIR a difúzně reflektanční VIS) a statistické (shluková analýza, PCA) metody byly použité pro analýzu souboru květových a včelích pylů. Barevné vlastnosti vzorků (parametry  $L^*a^*b^*$  prostoru) byli stanovené na základě naměřených VIS spekter. Pomocí analýzy vibračních spekter se podařilo oddělit shluky květových a obnožkových pylů. Srovnání barvy a VIS spekter vedlo k rozdělení souborů vzorků podle odlišného zbarvení, které je určeno složením a poměrem barviv. Přítomnost nektaru a včelích výměšek ovlivňovala vjem barvy, což vedlo k rozdělení skupin květových a včelích pylů stejného druhu. Kombinace spektroskopických a statistických metod přispěla k lepšímu rozdělení souboru květových a včelích pylů, což má význam pro hodnocení jejich kvality a potenciálního využití.

Práce vznikla za podporou projektů MŠMT ČR č. 6046137305 a 6046137307.

#### 5P13

### TRENDY V BALENÍ POTRAVIN

Stanislav Sekretár, Kristína Hovančíková, Štefan Schmidt

Oddelenie potravinárskej technológie FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava,

V poslednej dobe boli v balení potravín zavedené mnohé inovácie [1]. Začalo sa používať tzv. *inteligentné balenie potravín*, kde sa uplatňujú vlastnosti špeciálnych obalových materiálov (pre mikrovlnný ohrev, pre mrazené výrobky, mikroporézne, antiseptické, s tepelnou kompenzáciou a iné) v kombinácii s rôznymi typmi indikátorov ako sú indikátory čerstvosti, tepelnej histórie obalu, prítomnosti mikroorganizmov, O<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> a iné. Rozšírilo sa aj *aktívne balenie*, ktoré využíva vytvorenú kryptoklímu (modifikácia atmosféry, lapače plynov, vlhkosti, antimikrobiálne činidlá) v uzavretom obale na predĺženie trvanlivosti balených potravín. Zavedlo sa označovanie niektorých informácií (typ obalového materiálu, ekologická produkcia, recyklácia) *značkami* priamo na obale, pribudli upozornenia o rizikových obsahových zložkách (alergény) a nutričné informácie. Miesto čiarového kódu EAN nastupuje *kód RFID*, ktorý sa z výrobku dá snímať z väčšej vzdialenosti, čím sa výrazne urýchľuje manipulácia s tovarom. V oblasti *recyklácie* sú novinkou viackomponentné (papier, plast) rozoberateľné obaly určené pre separovaný zber a obaly s prídavkom urýchľovačov rozkladu určené pre rýchlejšie kompostovanie na skládkach. Používanie pevnejších plastov znižuje hmotnosť obalov a používanie jedlých obalov (škrobové obaly, črievka) znižuje množstvo odpadov.

Podakovanie: Táto práca bola podporená grantom APVV-0310-06 a grantom VEGA 1/0746/08.

[1] Ahvenainen, R. (editor): *Novel food packaging techniques*. CRC Press, New York 2003, 590 s.

#### 5P14

### SELEKTIVNÍ EXTRAKCE VYBRANÝCH KAROTENOIDŮ

Barbora Hrvolová, Jiří Kalina

KF,PřF, Ostravská universita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava 1, ČR B.Hrvolova@seznam.cz

Každoročně se v určitých oblastech České republiky pořádají rozsáhlé akce na likvidaci křídlatky (*Reynoutria spp.*). Letos se podobný projekt plánuje v Moravskoslezském kraji<sup>[1]</sup>. Připravované akce mají však pouze jeden cíl, likvidaci bez následného využití.

Cílem této práce bylo stanovit obsah luteinu a zeaxantinu v křídlatce a navrhnout metodiku pro izolaci karotenoidů a jejich selektivní extrakci s cílem získat extrakt čistého luteinu a zeaxantinu.

Bylo nutné nalézt postup pro odstranění fenolických látek, odstranění zelených barviv – chlorofylů a separaci složek. Výsledná metodika pro izolaci karotenoidů se skládá ze tří fází přípravných a jedné fáze separační. Přípravné fáze zahrnují:

ultrazvukovou extrakci ve vodě,  
ultrazvukovou extrakci v metanolu,  
saponifikaci.

Separační fáze spočívá v oddělení karotenoidů od saponifikovaného extraktu pigmentů. Následně jsme vytvořili metodiku pro selektivní extrakci karotenoidů, jež byla založena na rozdílné polaritě těchto karotenoidů. Kontrolu správnosti jednotlivých kroků jsme prováděli pomocí absorpčního spektrofotometru UV550 (Unicam, GB) a HPLC systému (TSP Analytical, USA).

Zjistili jsme, že křídlatka obsahuje až 8 x větší množství luteinu (cca 800 µg/g f.w.) než je uváděno u jiných rostlin<sup>[2]-[3]</sup>. Selektivní extrakci karotenoidů jsme dosáhli výnosu 16,7 µg/g f.w. luteinu a 5,6 µg/g f.w. zeaxantinu. Následující experimenty jsou vedeny za účelem zvýšení dosaženého výnosu.

*Tato práce byla vypracována v rámci projektu MŠMT NPVII („INTERVIRON“, 2B06068).*

- [1] <http://www.life-moravka.cz>, staženo 2. 11. 2008  
[2] Plazaola J., Hernández A., Artetxe U., Becerril J., *Physiologia plantarum* 116, 121–126, (2002)  
[3] Rosevear M. J., Young A. J., Johnson G. N., *Functional Ecology* 15, 474-480, (2001)

## 5P15 TRANS FATTY ACID CONTENT IN SLOVAK MARGARINES

Štefan Schmidt, František Kreps, Zlatica Kohajdová, Stanislav Sekretár

*Faculty of Chemical and Food Technology – Institute of Biotechnology and Food Science  
Slovak University of Technology, Bratislava*

The natural trans fat is found in ruminant fat as a result of polyunsaturated fatty acids isomerization by rumen bacteria in ruminants. They range in level from 1 to 8 % (as percent of total fat) in dairy products and red meats. The other source of trans fatty acids occurs during partial hydrogenation of vegetable oils. Levels of trans fat of up to 45 % have been reported in products containing hydrogenated vegetable oils. During the deodorization step of vegetable oils, trans levels of approx. 3 % are generally produced originating from isomerization of linoleic and linolenic acids. Trans 18:1 isomers represent over 80 % and 90 % of total trans fats in ruminant fats and partially hydrogenated vegetable oils.

Functional margarines have following characteristics: products containing ingredients that provide health benefits, margarine fortified with essential oils, cholesterol lowering spreads with sterols, margarine fortified with calcium and vitamins.

Requirements for modern trans free margarines are carry out in a new set of Palma Bratislava products (Veto original, Veto balance with fiber, low energy Veto fit and Veto family with nine vitamins). The content of trans fatty acids for all mentioned products is below 1 percent, Veto fit below 0.5 percent.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-0310-06” and by the grant VEGA 1/0746/08.*

## PREDNÁŠKY - SEKCIA 6: CHEMPROGRESS

### 6P01 COPYROLYSIS AND COCRACKING OF OIL FRACTIONS WITH POLYMERIC WASTES BY CHEMICAL RECYCLING

M. Bajus, B. Mlynková

*Slovak University of Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Department of Petroleum Technology and Petrochemistry, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic  
Corresponding author: martin.bajus@stuba.sk*

The second generation of biofuels processes should differ from the first in a) utilizing the whole plant as a

feedstock and b) use of “non-food” perennial crops (woody biomass and tall grasses) and lignocellulosic residues and wastes. Possible options for the conversion of these lignocellulosic plant materials include: thermal cracking, catalytic cracking, pyrolysis, carbonisation, catalytic reforming, steam reforming, gasification, Fischer-Tropsch synthesis, hydro-dehydrogenisation, hydrocracking, hydrorefining and decarboxylation. The main goal of biorafinery is to produce high-value low-volume chemicals (levoglucosan) and low-value high-volume fuels with a series of unit operations.

Thermal processes must be included among the attractive basic recycling technology for polymers for which thermal cracking and pyrolysis enable the conversion of polymer materials into fuels, monomers and other valuable products. The subject of the research were the thermal and catalytic processes for the production of motor fuels from polymer material

from industrial material or municipal trash sources turning it into sulfur free, nonaromatic and ecological fuel via chemical recycling to replace fossil fuels mainly from oil sources. The key is the liquefaction of polymer materials to oil/waxes that can be distilled to provide gasoline, diesel fuels and heating oils that can be used directly or after hydrotreating.

We found a way, how incorporate polymer waste into conventional liquid steam cracking feedstocks. Polyalkene oils and waxes decompose during copyrolysis. Amount of desired alkenes (ethylene, propene) increases or is slightly less in dependence on polymer type. Mixture of waxes in heavy naphtha (10-20% mass) exhibits short tendency to coking. Feedstock and chemical recycling of polyalkenes oils and waxes via copyrolysis is a very promising method treatment of polymer waste.

We have developed Deep Scavenger Steam Cracking process or Steam Cracking Activation process (DSSC/SCA) for thermal cracking of used tyres and rubber waste, that works in a flow reactor. Basically, we received three fractions from the thermal cracking of used tyres-gases, liquid oils (d, l- limonene) and solid residues (coke, carbon, steel).

*We would like to thank the VEGA Scientific Grant Agency of the Slovak Republic, for financial support of this research through the Research Project No. 1/0012/09.*

#### 6P02 MATEMATICKÝ MODEL PYROLÝZY UHLOVODÍKŮ S AUTOMATICKÝM GENEROVÁNÍM SÍTĚ REAKCÍ

Petr Zámostný, Adam Karaba, Zdeněk Bělohav

*Ústav organické technologie, VŠCHT Praha,  
Technická 5, 166 28 Praha 6*

Pyrolýza patří mezi nejdůležitější chemické procesy, které mají průmyslové uplatnění. Matematické modely pyrolýzy jsou proto vyvíjeny na pracovištích po celém světě již po dlouhou dobu. Mechanistické modely se opírají o popis mechanismu pyrolýzních reakcí a značnou překážkou v jejich tvorbě mechanistických modelů proto představuje extrémní počet složek reakčního systému a chemických reakcí. Jelikož však lze probíhající reakce poměrně snadno kategorizovat a zobecnit několika pravidly, které specifikují obecné struktury podléhající reakcím, strukturní vlivy na reakce a změny ve strukturách reakcemi způsobené, je možné generovat mechanismus pyrolýzy předložené chemické látky automaticky počítačovým programem.

Vytvořený počítačový program je schopen na základě předložené struktury chemické látky navrhnout chemické reakce, kterým daná látka může podléhat za pyrolýzních podmínek a umožňuje redukovat počet reakcí podle jejich relativní významnosti. Poté generuje rovnice matematického modelu takového reakčního systému. Pro odhadování celkové aktivity

radikálů v reakční směsi byla rovněž navržena metoda pracující na základě znalosti struktur chemických látek.

Výsledky simulací byly porovnány s experimentálními daty. V této práci byl používán zjednodušený model laboratorního pyrolýzního reaktoru pro nějž byla k dispozici experimentální data, ale síť reakcí může být použita obecně v jakémkoliv typu modelu. Metoda odhadování reaktivity radikálů byla ověřena na porovnání měřené a simulované závislosti konverze na struktuře.

#### 6P03 MOŽNOSTI ZPRACOVÁNÍ SMĚSNÝCH ODPADNÍCH PLASTŮ JAKO ALTERNATIVNÍ PALIVO

J. Lederer<sup>1</sup>, F. Nečesaný<sup>2</sup>, V. Veselý<sup>3</sup>, J. Kukačka<sup>4</sup>

<sup>1</sup>VUAnCh

<sup>2</sup>UNIPETROL RPA

<sup>3</sup>UCHP AV ČR

<sup>4</sup>DEKONTA

V České republice se vyprodukuje ročně přibližně 200 tisíc tun směsných odpadních plastů jako produktů separace komunálního odpadu. V principu tento materiál představuje vysokoenergetický (a přitom nízkopopelnatý) zdroj tepla popř. chemikálií. Z hlediska legislativy je chemické recyklaci dávána přednost, ovšem pro řadu technologických a ekonomických potíží se tento způsob dosud masivně nevyužívá. Naproti tomu energetické využití - postupy označované jako WASTE TO ENERGY- jsou technicky schůdnější a bližší realizaci. Přichází v úvahu tři principiálně odlišné technologie - spalování, zplyňování kyslíkovou-parní směsí a zplyňování vzduchem. Tyto postupy byly experimentálně prověřeny se shodným reálným plastovým odpadem a lze je porovnat technologicky i energeticky. Především se zohledňuje praktická využitelnost (realizovatelnost postupů v ČR). Zplyňování kyslíkovou-parní směsí je nejčistější způsob využití chemické energie odpadních plastů, je ovšem zatížena nutností výstavby nákladné jednotky na separaci vzduchu (ASU). Tím je dána prakticky neschůdnost tohoto postupu jako odpadářské technologie. Zplyňování vzduchem tuto obtíž nemá, vznikající zplodiny (to je nízko energetický plyn a dehty) tento postup rovněž problematizuje. Oxidativní zplyňovací technologie - totiž přímé spalování v přebytku vzduchu je naopak výhodné, pokud se vyřeší čištění spalin od persistentních látek. To se v popisované technologii podařilo kombinací úpravy paliva a způsobu spalování včetně systému čištění spalin.

**6P04****EKONOMICKÉ ASPEKTY RECYKLACE POLYETYLENTEREFTALÁTU**

Václav Veselý<sup>1</sup>, Jiří Hanika<sup>1</sup>, Jaromír Lederer<sup>2</sup>,  
František Nečesaný<sup>3</sup> a Vratislav Tukač<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Rozvojová  
135, 165 02 Praha 6, vesely@icpf.cas.cz

<sup>2</sup> VÚAnCH Ústí n.L.

<sup>3</sup> Unipetrol Litvínov

<sup>4</sup> VŠCHT Praha

PET láhve se stávají fenomén odpadních plastů a to proto že jsou tyto obaly široce používané, veřejnosti známé a jsou často medializované. Stejně populární je pak téma recyklace. Tyto metody recyklace můžeme dělit na fyzikální, chemické a energetické využití. Použitá metoda recyklace je pak poplatná ekonomice. Cena obchodovatelné komodity

( drcené PET láhve ) je dána stávající technologií recyklace a tou je fyzikální přepracování. Výsledkem této recyklace je v mnoha případech komposit ( technické rouno, textilie a nebo stavební materiál ). Chemické způsoby recyklace jsou v současné době nerentabilní.

Odhadem kolem 40% veškerého polyesteru je využito v textilním průmyslu. Ten také produkuje komposit. Tento recyklovatelný materiál je pak možné energeticky využít např. oxidačním spalováním.

V práci jsme studovali vliv přídavku polyesteru k palivu a můžeme experimentálně prokázat závislost tvorby persistentních látek (polychlorované dioxiny a furany; PCDD/F) na přídavku PET. Tento negativní efekt je třeba eliminovat. V technické praxi se většinou využívá adsorpčních metod.

Porovnáme-li cenu MJ energie získané spalováním polyesteru s cenou odpovídajícího uhlí je cena tepla získaného spálením PET 10x vyšší. Nebo naopak, rentabilitu spalování plastů lze obecně hledat tam, kde se cena 1 tuny těchto plastů bude pohybovat do 600 Kč/tunu.

**6P05****FROM STRUCTURAL BIOLOGY TO THE DRUGS AGAINST INFLAMMATORY BOWL DISEASES**

R. Dvorsky<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Max-Planck Institute for Molecular Physiology,  
Dortmund, Germany

<sup>2</sup>Giliani S.p.A, Milano, Italy

To attract the attention of not only audience at lectures and talks, it is quite common practise to emphasize the importance of studied system by its involvement in diseases. It touches hidden conviction that once the key biological processes are characterised and understood, the development of appropriate drug against the disease is straightforward. Unfortunately, this is not true. How complicated and complex is the

road from basic ideas to usable medicament will be demonstrated on the development of drug against inflammatory bowel diseases. At the beginning the aim was clear and target processes – signalling of Rac1 GTPase[1] and glucocorticoid receptors[2] – identified. What followed is the content of presented work.

[1] Tiede, I., Fritz, G., Strand, S., Poppe, D., Dvorsky, R., Strand, D., Lehr, H.A., Wirtz, S., Becker, C., Atreya, R., Mudter, J., Hildner, K., Bartsch, B., Holtmann, M., Blumberg, R., Walczak, H., Iven, H., Galle, P.R., Ahmadian, M.R., Neurath, M.F., (2003) CD28-dependent Rac1 activation is the molecular target of azathioprine in primary human CD4+ T lymphocytes. *J. Clin. Invest.* 111, 1133-1145.

[2] Löwenberg, M., Verhaar, A.P., van den Brink, G.R., Hommes, D.W., (2007) Glucocorticoid signalling: a nongenomic mechanism for T-cell immunosuppression. *13,158-163.*

**6P06****ZELENÁ CHÉMIA – ÁNO ČI NIE ?**

Viktor Milata

*Oddelenie organickej chémie, Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika, viktor.milata@stuba.sk, tel. 5932 5148*

Chémia zažíva ťažké časy. Zatiaľ čo spoločnosť pokračuje v požiadavkách na väčšie množstvá viac sofistikovaných chemických produktov, stretávame sa na druhej strane so zvýšeným stupňom nedôvery a strachu, hlavne so zreteľom na priemysel produkujúci tieto látky. Netreba zabúdať na to, že v dvadsiatom storočí vzrástla nielen populácia na svete z 1,6 na 6 miliárd, ale aj životné požiadavky o takmer 60 %. Chémia hrá a neustále bude zohrávať základnú úlohu v takmer každom aspekte modernej spoločnosti, tak ako rastú a budú rásť požiadavky na chemický priemysel aj v rozvojových krajinách v snahe dosiahnuť úroveň západných krajín v starostlivosti o zdravie, potravu, príbytok, dopravu a spotrebný tovar.

**Green Chemistry** je koncept, ktorý sa usiluje pomôcť chemikom zvýšiť environmentálnu produkciu, bezpečnosť chemických procesov a znížiť nebezpečenstvo pre ľudstvo a životné prostredie spôsobované chemickými produktami. Dôležité súčasti a metódy akými sú atomárna-prímárna ekonomika, minimalizácia odpadov, zníženie spotreby materiálov, energií, nebezpečenstva a hazardu patria k základom Green Chemistry<sup>1</sup>.

**Projekt** neustáleho avšak **udržateľného rozvoja** globálnej spoločnosti by nemal byť kompromisným k potrebám budúcej generácie. Je komplementárny

k projektu Green Chemistry, ktorý sa pokúša pripraviť zlúčeniny a chemickú výrobu samotnú neškodnou cestou a teda zanechať planétu nepoškodenú ďalším generáciám.

*Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore Agentúry pre podpory vedy a výskumu APVV-0055-07, 0446-07 a VEGA 1/0225/08.*

[1] Clark J., Macquarrie D.: Handbook of Green Chemistry and Technology, Blackell Science, Oxford, 2002, ISBN 0-632-05715-7.

## 6P07 BIOPALIVÁ A ICH PERSPEKTÍVY

Ján Cvengroš<sup>1</sup>, Jozef Mikulec<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava*

<sup>2</sup> *Slovnaft VÚRUP, a.s., Vlčie hrdlo, 820 03 Bratislava*

Biopalivá pre dopravu majú význam z viacerých príčin, ako je ochrana životného prostredia a možné dopady na klimatické pomery, znižujúce sa dostupné zásoby fosílnych palív, zníženie závislosti na dovoze ropy a pod. Doprava v EU produkuje 21 % emisií skleníkových plynov, z toho 90 % je z cestnej dopravy. Cieľ EU je nahradiť do roku 2020 10 % zo spotreby palív v doprave alternatívnymi palivami, čo vyžaduje 15 % ornej pôdy v EU. Kvapalné palivá pre dopravu, založené jednak na rastlinných olejoch (FAME), jednak na cukrovej repe, cukrovej trstine a na škrobových poľnohospodárskych produktoch ako sú zrniny a strukoviny (bioetanol) – tzv. biopalivá 1. generácie – majú limitované zdroje a nemôžu kapacitne nahradiť fosílnu palivá. Palivá 2. generácie, vyrábané progresívnymi technológiami z lignocelulózovej biomasy z lesníckych a poľnohospodárskych odpadov, rýchlorastúcich drevín a pod., majú výhodnejšiu uhlíkovú bilanciu, nižšiu energetickú náročnosť a vyšší produkčný potenciál. Komerencializácia týchto postupov sa očakáva v horizonte 5 až 10 rokov. V práci sú identifikované zdroje pre palivá 2. generácie, diskutované dostupné technológie na ich produkciu, ich obmedzenia v súčasnosti (infraštruktúra, logistika a pod.), a tiež možné opatrenia na zvýšenie energetickej účinnosti súčasných biopalív s využitím ladom ležiacej pôdy, aplikáciou sofistikovaných technológií, zvýšením výnosov aplikáciou génového inžinierstva, využívaním nepotravinárskych artiklov, opotrebovaných fritovacích olejov a pod.).

## 6P08 VLIV PROVOZNÝCH PARAMETRŮ NA VÝKON PALIVOVÝCH ČLÁNKŮ

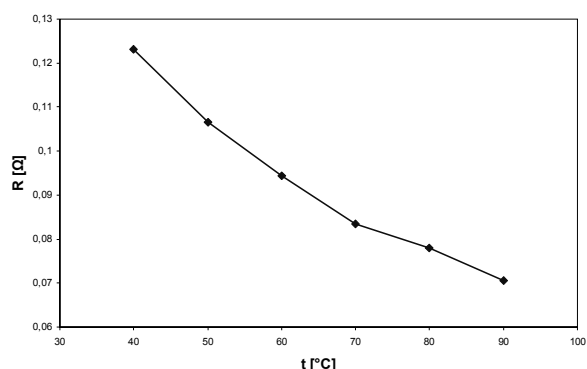
Jakub Mališ, Martin Paidar

*Ústav anorganické technológie, Fakulta chemické technológie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR, e-mail: jakub.malis@vscht.cz*

V posledných letech probíhá intenzivní vývoj palivových článků jako alternativních zdrojů energie pro mobilní aplikace. V automobilovém průmyslu mohou nahradit klasické vznětové a zážehové motory. U osobní elektroniky se může jednat o náhradu akumulátorů a baterií.

V této práci jsme zkoumali membránové palivové články, pro které je hlavním parametrem provozní teplota. Dále pak složení vstupních plynů, jejich průtok a tlak. Vodivost v současné době používaných perfluorovaných membrán je silně závislá na obsahu vody, tyto membrány jsou v suchém stavu prakticky nevodivé. Z konstrukčního hlediska je velmi důležité dosažení kvalitního třífázového rozhraní, kde mohou reakce probíhat za optimálních podmínek. Kinetiku elektrochemických reakcí a odpor membrány lze ovlivnit provozní teplotou. Kvalitu třífázového kontaktu a transportu reaktantů lze ovlivnit velikostí přitlaku. Malý přitlak způsobuje velký odpor systému vlivem nedokonalého kontaktu. Naopak příliš velký přitlak má za následek zborcení struktury elektrod, kdy dojde ke zhoršení transportu reaktantů v systému. Z těchto důvodů je nutné hledat optimální velikost přitlaku.

Rychlost transportu reaktantů a velikost odporu systému lze zjistit z výkonové křivky a impedančního spektra. Výkonová křivka byla naměřena pomocí elektronické zátěže, do které je přiváděn elektrický proud generovaný palivovým článkem. Pomocí impedanční spektroskopie byla naměřena impedanční spektra, ze kterých lze zjistit velikost odporů jednotlivých komponent a kvalitu třífázového kontaktu.



**Obr. 1.** Pokles odporu palivového článku v závislosti na stoupající teplotě, při  $j = 0,2857 \text{ A/cm}^2$

Porovnáním výsledků výkonových křivek a impedanční spektroskopie lze pracovat na zlepšení

jednotlivých komponent dôležitých pro provoz palivového článku.

*Tato práce vznikla za finanční podpory Grantové agentury ČR v rámci řešení projektu číslo 203/08/0465.*

#### 6P09

### KONVERZIA VÁKUOVÉHO ZVÝŠKU NA JEDNOTKE LC-FINING V RAFINÉRII SLOVNAFT

Vdovjak Ladislav

*Slovnaft a.s. Bratislava Slovenská republika*

Prezentácia opisuje významnú úlohu výrobnjej jednotky Hydrokrak ťažkých zvyškov (VJ RHC - Resid HydroCracking Unit) pri spracovaní vákuového zvyšku v a.s. Slovnaft procesom LC-FINING. Výrobnja jednotka RHC je v rámci a.s. Slovnaft súčasťou prevádzky Krakovania ťažkých zvyškov. Hlavným cieľom prevádzky je krakovanie vákuového zvyšku na vákuové destiláty (VAD-R), ktoré po hydrogenácii s primárnymi VAD na výrobnjej jednotke VGH tvoria surovinu na výrobu autobenzínov vo výrobnjej jednotke FCC.

Prezentácia stručne informuje o používanej technológii, zariadení, o vyrábaných polotovaroch, ich výťažnosti, kvalite a možnosti ďalšieho použitia. V závere poukazuje na špecifické prevádzkové problémy pri spracovaní ťažkých zvyškov procesom LC-FINING a o možnostiach ich riešenia. Prílohu tvoria fotografie stavu zariadenia po cca 6 -8 mesačnom chode.

#### 6P10

### SYNTHESIS AND APPLICATION OF BENZOTHIAZOLYLTHIO-SUBSTITUTED ALKYLAMINOPROPENE

*Magdaléna Štolcová and Milan Hronec*

*Department of Organic Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, Bratislava*

#### Introduction

A large number of benzothiazole derivatives are regarded products in industrial and medicinal applications. Several benzothiazole derivatives are produced and used as vulcanization accelerators in rubber goods manufacture [1]. In previous papers, A. V. Chapman [2] and our research group [3] reported that during the analyses of some samples of *N*-alkyl-2-benzothiazolesulfenamides (*I*) dissolved in acetone, a slow reaction between *I* and acetone was observed already at ambient temperature. <sup>13</sup>C NMR spectroscopic studies proved the formation of 2'-benzothiazolythiopropene-2-one (*II*), 1-(2'-benzothiazolythio)-2-morpholinoprop-1-ene (*III*) and 1,1-bis-(2'-benzothiazolythio)-2-alkylaminoprop-1-ene (*IV*).

In the present contribution synthesis and application of benzothiazolythio-substituted alkylaminopropene were studied by direct sulfenylation reaction of acetone with benzothiazolesulfenamides. The idea was to enlighten the influence of the properties of the sulfenyating agent on the reaction course and concentrate in details to the products yields. Our attention was focused also to the preparation of the mentioned substituted-alkylaminopropene from 2-mercaptobenzothiazole and the corresponding amine directly in acetone.

#### Experimental

The reaction of *I* with acetone was performed under reflux at atmospheric pressure or in a Teflon lined steel reactor working under autogenic pressure. The reaction of *V* with amine in acetone at the presence of oxygen in the range of 0.8 – 1.0 MPa was performed in a steel reactor. The reaction products were analyzed by HPLC, NMR, MS, FT IR and elemental analysis methods. Curing tests were performed for natural rubber on a Brabender Plasticorder. The cure curves were measured using a Monsanto Rheometer 100 S at 150°C.

#### Results

The reactions of benzothiazolesulfenamide derivatives with acetone yielding 1,1-bis-(2'-benzothiazolythio)-2-aminoderivative of 1-propene (*IVa-e*), 1-(2'-benzothiazolythio)-2-morpholinoprop-1-ene (*IIIa*) and 2'-benzothiazolythiopropene-2-one (*II*) are studied in the temperature range of 56 -110°C and in the presence of a small amount of water. In the studied one-pot reaction, acetone is serving both, as reactant and reaction medium. The reaction rates of various derivatives of *Ia-e* with acetone are different. Reaction of acetone with 2-(morpholiniothio)benzothiazole proceeds by sufficient rate under reflux of acetone at 56°C. After 60 min, compounds *II* and *IIIa* were produced in a high concentration. Utilization of sulfenamides bearing hydrogen atom in the -SNH-group leads to an excellent yield of *IVb-e*. The reaction rate is strongly dependent on the steric hindrance of the nitrogen atom of sulfenamides. The highest yield of *IV* is attained in the temperature range 70 - 90°C. For the sulfenylation reaction, mainly with less reactive sulfenamides (*Ic-e*), the presence of a low amount of water plays a very important role. It probably enhances the active proton of mobility of the acetone. of and Products *IVa-e* can be produced from *V* and the corresponding amine directly in acetone by catalytic reaction. 1-Bis-(2'-benzothiazolythio)-2-*tert*-butylamineprop-1-ene has been proved to be an accelerator of sulfur curing of rubber composites with high processing safety.

[1] Craine, L., Raban, M.: *Rev.* 89 (1989) 689-712.

[2] Chapman, A.V.: *J. Nat. Rubb. Res.* 5 (1990) 259-267.

[3] Štolcová, M., Kaszonyi, A., Liptaj, T., Hronec, M.: *J. Chromatogr.*, 847 (1999) 351-358.



## 6P11 SYNTEZA VYBRANÝCH AMINOETHERŮ V PLYNNÉ FÁZI

Martin Zapletal<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav organické technologie, VŠCHT Praha

Bis-(*N,N*-dimethyl-2-aminoethyl)ether (BDMAEE) je známý katalyzátor využívaný při syntéze polyurethanů. Tento ether je možno připravovat více způsoby, jedním z možných je přímá etherifikace *N,N*-dimethyl-*N*-(2-hydroxyethyl)aminu (DMAE) v plynné fázi na heterogenních kyselých katalyzátorech. Jako katalyzátory připadají v úvahu např. zeolity, amorfni alumosilikáty, alumina a další. Jak bylo zjištěno během této práce, zeolity jsou naprosto nevhodné z důvodu zanedbatelného výtěžku BDMAEE, stejně jako amorfni alumosilikáty. Nicméně ani na  $\gamma$ -alumině výtěžky nepřesahují 20%. Nedílnou součástí této práce byla identifikace vedlejších produktů a studium chemismu jejich vzniku.

Druhou modelovou reakcí je intramolekulární etherifikace *N,N*-bis(2-hydroxyethyl)methylaminu s cílem získat 4-methylmorfolin (NMM), který se používá např. při výrobě *N*-methylmorfolin-*N*-oxidu, rozpouštědla při výrobě viskózných vláken. Narozdíl od syntézy BDMAEE zde bylo dosaženo mnohem lepších výtěžků NMM. I zde byly identifikovány vedlejší produkty a studován chemismus jejich vzniku.

## 6P12 MACHINA - CENTRUM PRE MATERIÁLY, VRSTVY A SYSTÉMY PRE APLIKÁCIE A CHEMICKÉ PROCESY V EXTRÉMNYCH PODMIEŇKACH

Pavol Šajgalík, Miroslav Boča

*Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK 45 36 Bratislava, Slovakia*

Projekt, ktorý je financovaný z prostriedkov štrukturálnych fondov EÚ, združuje štyri inštitúcie: Ústav anorganickej chémie SAV (žiadateľ), Ústav polymérov SAV, Chemický ústav SAV a Slovenskú technickú univerzitu (Fakulta chemickej a potravinárskej technológie).

Cieľom realizácie projektu je výrazné posilnenie konkurencieschopnosti materiálového výskumu na Slovensku s excelentnými pracoviskami podobného zamerania v zahraničí. Vytvorené centrum, bude vybavené špičkovými vedeckými prístrojmi ako aj modernými informačnými a komunikačnými technológiami, čo umožní zvýšiť úroveň výskumu v chémii materiálov v Bratislavskom kraji. Jednotlivé laboratória CE MACHINA budú dostupné relatívne veľkému počtu odborníkov ako aj študentov, plánovaných je minimálne 1000 osôb.

Integráciou vedeckých tímov do centra excelentnosti za využitia medzinárodnej praxe a skúseností zo

zahraničia budú vytvorené tri laboratória ktoré sa budú zaoberať vývojom a charakterizáciou materiálov pre aplikácie v extrémnych podmienkach. Predovšetkým pôjde o Laboratórium pre anorganické keramické (nano-) kompozity, v ktorom bude okrem pokročilých keramických materiálov zastúpený aj výskum prírodných (nano-) materiálov na báze vrstevnatých kremičitanov, korózia špeciálnych anorganických materiálov (ÚACH) a povrchové úpravy materiálov pre špeciálne účely (FCHPT). Ďalším v poradí je Laboratórium pre vývoj materiálov na báze polymérov pre progresívne aplikácie zaoberajúce sa výskumom materiálov s polymérovou maticou, špeciálnymi polymérnymi a biopolymérnymi materiálmi s dosahom až do medicínskej diagnostiky (ÚPo), ako aj Laboratórium pre prípravu biopalivových článkov s využitím nanoštruktúr (CHÚ). Doplňenie prístrojovej bázy špičkových pracovísk konzorcia a ich prepojenie v spoločnom informačnom priestore dáva záruku úspešnej realizácie nielen vedeckej ale aj pedagogickej a popularizačnej časti projektu.

## 6P13 KOMPLEXNÍ DYNAMICKÝ MODEL PROCESŮ PROBÍHAJÍCÍCH U POVRCHU KATODICKY CHRÁNĚNÉ KOVOVÉ KONSTRUKCE ULOŽENÉ V PŮDĚ

Roman Kodým<sup>1</sup>, Petr Klein<sup>1</sup>, Karel Bouzek<sup>1</sup>, Pavel Novák<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6

<sup>1</sup>Ústav anorganické technologie, <sup>2</sup>Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství

Koroze kovových konstrukcí uložených v půdě (ropovody, plynovody) představuje technicky významný problém. Hlavními důvody jsou především jejich nákladná výstavba a vážná bezpečnostní rizika spojená s jejich možným selháním. K omezení korozní rychlosti těchto zařízení v místech s narušenou ochrannou izolací se široce využívá účinků katodické ochrany (KO). Tato metoda se zakládá na katodické polarizaci kovu např. prostřednictvím vnějšího zdroje proudu. Princip KO se nejčastěji vysvětluje na základě posunu ochranného oxidačně-redukčního potenciálu do oblasti termodynamické stability kovu. Tento přístup však vede k použití nepřiměřeně silné katodické polarizace a k s tím spojeným negativním důsledkům. Působením KO však může v půdě v okolí chráněného povrchu kovu docházet k zásadním změnám složení půdního roztoku, a to především k nárůstu pH. V důsledku těchto změn následně dochází k modifikaci mechanismu rozpouštění vlastního kovu a významnému zpomalení koroze, či tvorbě pasivní vrstvy. Proces KO je evidentně mnohem složitější. Lepší porozumění účinkům KO je tudíž nezbytné k docílení jejího efektivnějšího využívání. V praxi je velmi obtížné studovat uvedené jevy experimentálně. Matematické modelování pak představuje vhodný alternativní přístup.

V rámci této práce je prezentován matematický model procesů probíhajících v půdě v okolí katodicky chráněné poruchy v ochranném plášti kovového potrubí. Model postihuje migračně-difúzní transport iontů a základní neutralizační rovnováhy probíhající v půdě. Výsledky modelu potvrzují výše zmíněné předpoklady o změně složení půdního prostředí vlivem KO.

#### 6P14 MĚŘENÍ A VYHODNOCOVÁNÍ DYNAMICKÉ ADSORPCE TĚŽKÝCH KOVŮ NA PŘÍRODNÍCH SORBENTECH S OBSAHEM HUMINOVÝCH LÁTEK

Ladislav Kudrlička, Jana Kolesárová a Josef Kozler

Výzkumný ústav anorganické chemie, Revoluční 84,  
400 01 Ústí nad Labem  
ladislav.kudrlicka@vuanch.cz

Na procesu separace těžkých kovů (TK) z vod přírodními sorbenty s obsahem huminových látek v dynamickém uspořádání má z probíhajících fyzikálně-chemických dějů majoritní podíl iontově-výměnná adsorpce iontů TK z vod za ionty Ca+Mg matrice sorbentu.

Experimentální práce měření dynamické adsorpce (DA) byly vedeny v izotermních kolonových aparaturách s dělenou náplní sorbentu. Koncentrace TK na výtoky kolon byly stanoveny metodou OES-ICP. Eventuální oscilace koncentrací při vzorkování byly eliminovány odběrem směsných vzorků. Iontově-výměnný charakter procesu byl ověřován bilancováním TK, adsorbovaných z vod, oproti Ca+Mg, vytěsněných ze sorbentu.

K matematickému popisu DA byla zvolena Bohartova a Adamsova rovnice průnikové křivky [1,2]:

$$t = \frac{N_0}{c_0 v} h - \frac{I}{k_a c_0} \ln \left( \frac{c_0}{c_t} - I \right), \quad (1)$$

kde konstanty  $k_a$  (rychlostní konstanta) a  $N_0$  (objemová adsorpční kapacita náplně) byly vypočteny nelineární regresi experimentálních dat  $[t_i, c_i]$  v intervalu koncentrací  $0 < c_t < 0,2 c_0$  na výtoky kolon délky  $h$  s povrchovým hydraulickým zatížením  $v$ .

Aproximace experimentálních dat průnikovou křivkou na zvoleném pracovním intervalu byla posuzována hodnotou koeficientu determinace  $R^2$ . Verifikace aproximace byla provedena srovnáním množství zachycených TK zjištěného z analýz směsných vzorků a vypočteného numerickou integrací z rovnice (1).

Analytické tvary rovnice (1), při vhodně zvolených okrajových podmínkách  $c_0$  a  $v$ , umožňují modelovat dobu provozu adsorpčního reaktoru do limitní průnikové koncentrace TK v odtoku.

Poznatky z vyhodnocování měření DA budou využity při sestavování koncepce návrhu adsorpčního reaktoru – permeabilní reaktivní bariéry v provozním měřítku.

[1] TUČEK, F., CHUDOBA, J., KONÍČEK, Z. Základní procesy a výpočty v technologii vody. Praha: SNTL/ALFA, 1988.

[2] BOHART, G. S., ADAMS, E. Q. J. Amer. Chem. Soc. 1920, roč. 42, č. 523.

[3] MARHOL, M. Měniče iontů v chemii a radiochemii. Praha: ACADEMIA, 1976.

#### 6P15 CHEMICAL ANALYSIS AND SURFACE INVESTIGATION OF PYROLYTIC BORON NITRIDE (PBN)

A. Vincze<sup>1,2</sup>, A. Šatka<sup>1,2</sup>, D. Haško<sup>1,2</sup>, M. Janek<sup>3,4</sup>, V. Danielik<sup>5</sup>, F. Uherek<sup>1,2</sup>, J. Matuška<sup>6</sup>

<sup>1</sup> International Laser Centre, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava 4, Slovakia

<sup>2</sup> Department of Microelectronics, Slovak University of Technology, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovakia

<sup>3</sup> Institute of Technology, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 13 Bratislava, Slovakia

<sup>4</sup> Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovakia

<sup>5</sup> Department of Inorganic Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia

<sup>6</sup> Phostec, s.r.o., Fraňa Kráľa 41, 966 81 Žarnovica, Slovakia

E-mail: vincze@ilc.sk

Pyrolytic boron nitride (PBN) is chemically stable and non toxic compound. Its excellent physical and chemical properties like high chemical resistance and strength at high temperatures gives us the possibility to use it for chemically inert crucibles for the crystal growth in MBE, and other high temperature applications and in the semiconductor electronics industry.

Whilst BN can be formed also by pressing/sintering methods with usual industrial purity, the high purity pyrolytic PBN material is formed by a vapour deposition process. The thermal conductivity of PBN is very good and has a high degree of anisotropy between “a” and the “c” direction by approximately 20 times as a result of laminar structure [1]. Also electrical resistivity of PBN is high and anisotropic. In this respect, PBN is very different from graphite which is a good electrical conductor. The production CVD process at high temperatures under reduced pressure enables the preparation of PBN with low levels of impurities [2].

The possibility for PBN preparation are several from several different reactions and different chemicals collected by Schumacher [3]. This review was directed toward synthesis of cubic phase BN (cBN). The use of boron chloride with ammonia is only one of the possibilities for synthesis, which was used for PBN samples preparation in this contribution.

This work was supported by the Slovak Grant Agency contract VEGA 1/0787/09, by grant of Slovak

*Research and Development Agency VMSP P-0051-07 under the frame of Centre of Excellence CENAMOST (VVCE 0049-07) and CE ASFEU NanoNET with ITMS 26240120010.*

- [1] <http://www.microsi.com/pbn/crucibles.htm>  
 [2] [http://www.morgantechnicalceramics.com/mtc\\_materials/pyrolytic\\_boron\\_nitride.htm](http://www.morgantechnicalceramics.com/mtc_materials/pyrolytic_boron_nitride.htm)  
 [3] A. Schumacher, Untersuchungen zur Synthese von c-BN-Schichten mit ECWR-PACVD und Boran-Ammonia als Eduktmaterial, Dissertation „Doktor der Naturwissenschaften“, Universität Kaiserslautern (2000)

### 6P16

#### **POLYETHYLENE MEMBRANES TREATED BY ARGON BARRIER DISCHARGE PLASMA**

Igor Novák<sup>1</sup>, Galina K. Elyashevich<sup>2</sup>, Ivan Chodák<sup>1</sup>, Marian Števiar<sup>1</sup>, Angela Kleinová<sup>1</sup>, Vladimír Pollák<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, 842 36 Bratislava, Slovak Republic*

<sup>2</sup>*Institute of Macromolecular Compound, Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russian Federation*

High-density polyethylene (HDPE) was pre-treated by surface barrier discharge plasma in argon [1]. The significant increase of the surface energy and its polar component of HDPE modified by argon barrier plasma was found. The peel strength of HDPE modified by discharge plasma to polyacrylate increased six times. The ATR-FTIR spectra of HDPE modified by barrier plasma in argon confirmed the presence of the oxygen-based groups. The morphology of the film surface was changed after argon plasma irradiation. The changes of surface porosity were affected by thermal effect of barrier plasma on the surface of polymer.

*The research was supported by Scientific Agency of the Slovak Ministry of Education and Slovak Academy of Sciences, project VEGA, No. 2/7103/27, and project APVV 99-035004.*

- [1] Novák I., Elyashevich G. K., Chodák I., Olifirenko A. S., Števiar M., Špírková M., Saprykina N., Vlasova E., Kleinová A.: Polymer matrix of polyethylene porous film functionalized by electrical discharge plasma. *Eur. Polym. J.* 44, 2702-2707 (2008).

### 6P17

#### **USE OF DISCRETE EVENT SYSTEMS AS MEANS OF BUILDING COMPUTER MODELS OF BATCH PLANTS**

V. Hanta, J. Poživil

*Institute of Chemical Technology, Department of Computer and Control Engineering, Technická 5, 166 28 Praha 6, Czech Republic*

Building simulation models is a modern method of investigation of manufacturing systems. Computer models have a number of advantages in comparison with mathematical models. A mathematical model can be built so that it is complicated and thus unsolvable or solvable but not in accordance with the facts. On the other hand a computer model built in visualized and animated interface of a simulation program as an image of a real-life system always gives results.

Batch chemical plants can be modelled with advantage as discrete event systems. This approach enables to model them as dynamical systems that go through important time points of the course of manufacture – discrete events only. The course of manufacture itself between these events is not essential. Advantages of building such a model are shown on an example of batch production of ferrous chloride for pharmaceutical purposes. Simulation and optimization experiments with the computer model enable:

to identify internal contradictions of manufacturing method in the service manual,

to suggest modifications of processing of some batches so that the requirements of the service manual are kept, to carry out different operations with different processing times in some apparatuses by steps,

to allocate workers to different operations in the same apparatuses in different numbers and with different qualifications,

to itemize operations so that workers operate them only in case of need,

to set up different types of shift operation and quantify the optimum numbers of workers.

The contribution furthermore deals with possibilities of use of discrete and continuous simulation elements, compares them with each other and analyzes their advantages and disadvantages. Simulation experiments run on the model built in the environment of the Witness PwE program.

*The work has been supported by the fund No. MSM 6046137306 of Ministry of Education of the Czech Republic. This support is very gratefully acknowledged.*

- [1] Hanta V., Poživil J.: Modelling of Ferrous Chloride Production for Needs of its Improvement and Optimization. 59. zjazd chemikov, 2.-6.9.2007, Tatranské Matliare, Slovakia. *ChemZi* 3, 1, 257-258 (2007), ISSN 1336-7242

- [2] Hanta V., Poživil J.: Use of Manpower and Calendar Time in Discrete Event System Model of a Pharmaceutical Batch Line. 36th International Conference of Slovak Society of Chemical Engineering, Tatranské Matliare, Slovakia, 25.-29.5.2009. Proceedings of the 36th International Conference of Slovak Society of Chemical Engineering SSCHE 2009, 208p/1-9. ISBN: 978-80-227-3072-3

**6P18****FUNCTIONAL MATERIALS IN HEALTH SERVICE INSTITUTIONS**

Benčíková Eleonóra<sup>1</sup>, Berešík Marián<sup>2</sup>, Ondrášiková Katarína<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Special Engineering University of Žilina, Ul. 1 mája 32, 010 26 Žilina,

*E.Bencikova@fsi.uniza.sk*

<sup>2</sup>Clinic AIM, ÚVN SNP Ružomberok-FH, Generála Miloša Vesela 21, 034 26 Ružomberok,

<sup>3</sup>Department of Clinical Microbiology, ÚVN SNP Ružomberok-FH, Generála Miloša Vesela 21, 034 26 Ružomberok

In last ten years there is a new trend in the development of innovative materials from environmentally acceptable sources (polypropylene (PP), bamboo (BF), polylactid (PLA)). The high degree of actuality is in the waste volume decreasing from production and consumption due its recycling. From this point of view the waste generally is not only an unacceptable source of pollution, but when it is properly recycled it can also be of economically significant source. This is because a lot of waste in fact we can use as a secondary source of raw materials for industrial production. Dealing with waste from health service institutions always brings certain health risk. This risk is based on the unknown content of this waste, which can contain various health hazardous and toxic substances. The aim is to design new environment friendly products for health service institutions, where are included and accepted the ecological conditions of the environment and to provide financially economic process.

This contribution deals with the implementation of innovative materials in health service institutions supporting the environmental safety at the assessment of specific waste and reduce the threat to health hazards.

- [1] BENČÍKOVÁ, E., Jambrich, M.: Polymers fibrous materials from renewable sources raw materials. In: Plasty a kaučuk, FT UTB Zlín, 9-10, 2008, ISSN 0322-7340, 300-302.
- [2] Benčíková, E., Jambrich, M., Balogová, J., Ravas, R., Vnenčáková, j.: Eco-polymer Materials from PP, Poly(lactic ACID) and Bamboo Fibres, september 1-4,2008, Olomouc / In: Chemické listy. - ISSN 0009-2770. - Vol. 102, No.8(2008), 648-649.

**6P19****KATALYTICKÁ OXIDÁCIA CYKLOHEXYLAMÍNU**

Karol Rakottyay, Alexander Kaszonyi

*Oddelenie organickej technológie, Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie, FCHPT, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, e-mail: karol.rakottyay@stuba.sk*

Kaprolaktám v chemickom priemysle je jedným z najviac používaných medziproduktov. Svetová produkcia, asi 3 mil. ton/rok sa spotrebuje ako monomér pre výrobu Nylonu- 6 a iných plastických hmôt. Najpoužívanejší prekurzor kaprolaktámu je cyklohexanón, ktorý sa vyrába z benzénu hydrogenáciou na cyklohexán a následnou oxidáciou. Reakciou cyklohexanónu s hydroxylaminovými soľami pri teplote 85 °C sa tvorí cyklohexanónoxím, ktorý podlieha Beckmanovmu prešmyku za vzniku 7-členného kruhu  $\epsilon$ -kaprolaktámu. V súčasnosti sa viac ako 95 % kaprolaktámu vyrába Beckmanovým prešmykom [1].

Výroba kaprolaktámu za posledné roky vzrástla len mierne, svetový trh je nasýtený a preto vývoj výroby  $\epsilon$ -kaprolaktámu smeruje nielen k zvýšeniu kvality finálneho produktu, ale aj k výťažnosti výrobného procesu. Na výrobu  $\epsilon$ -kaprolaktámu boli vypracované viaceré výrobné postupy, avšak vo väčšine prípadov sa jedná o mnohostupňové syntézy, pri ktorých sa produkuje množstvo odpadových organických aj anorganických zlúčenín. Napr. ak sa na oximáciu použije síran hydroxylamínu, na 1 kg  $\epsilon$ -kaprolaktámu odpadá viac ako 4 kg síranu amónneho[2]. Keďže výroba kaprolaktámu je spojená s množstvom vedľajších produktov, je v záujme výrobcov znižovať produkciu týchto, väčšinou nežiaducich vedľajších látok.

Oxidácia cyklohexylamínu v parnej fáze na cyklohexanónoxím je jednostupňová reakcia s malou spotrebou energie a minimálnymi nákladmi. Hlavný problém tejto cesty spočíva vo vzniku Schiffovej bázy, ktorá ľahko vzniká pri reakcii ako vedľajší produkt.

Cieľom práce preto bolo hľadať vhodný katalyzátor pre jednostupňovú oxidáciu cyklohexylamínu na cyklohexanón oxím, ďalej štúdium vplyvu spôsobu prípravy a štruktúry katalyzátora na oxidáciu cyklohexylamínu.

- [1] H.A.Wittcoff, B.G. Reuben, J.S. Plotkin, -Ind. Org. Chemicals, John Wiley&Sons, (2004) 235.
- [2] Kirk-Othmer, Encyclopedia of chemical technology, vol.4 (1992) 830

## 6P20 GAS-PHASE EPOXIDATION OF PROPYLENE

Blažej Horváth and Milan Hronec

*Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic*

Propylene oxide (PO) manufacture, just after polymerization, is the second largest consumer of propylene, with an annual production rate exceeding 5 megatonnes. Traditional processes, based either on chlorhydrines or organic peroxides, are using equimolar amounts of “oxygen-transfer” agents, ending up finally in a waste or by-product stream. Thus, using the chlorhydrine or organic peroxide technologies, most widespread in industrial practice, cca. 3 tons of byproducts are formed per ton of PO. As a consequence, along with the recycling problems, insertion of a “cheap” oxygen atom into the propylene molecule increases its price nearly 3-fold [1]. Among the liquid-phase processes the hydrogen peroxide route, exploiting titanosilicate catalysts [2], has been introduced in industrial practice [3].

The basic aim of the research was to use the nanostructured iron oxide material as a mild oxidative catalyst, able to selectively epoxidize olefins (in contrast with bulk metal oxides which lead to radical reaction mechanism and combustion).

We have studied the gas-phase epoxidation of propylene to propylene oxide exploiting nitrous oxide as an oxidant. The purpose of the present work was to understand the formation of iron oxide nanoparticles

on mesoporous silica matrix, as well as on halide-based supports to set the parameters of the preparation which influence their diameter and distribution and understand the mechanism of their stabilization on the surface. These materials exhibit improved catalytic activity in the epoxidation of propylene using nitrous oxide as an oxidant, exhibiting progressive increase in PO yield upon reactivation.

Using the halide-modified iron-containing catalysts at a reaction temperature 320 °C, in spite of a drop in the PO yield after 30 min TOS we did not observe dramatic coking – the catalysts remained white after 8 h of time on stream (TOS). Moreover, a sharp drop in PO yield occurred in the first hour of TOS. After this period the formation of PO reached a steady-state level, and was only slowly decreasing. In further experiments a reactivation step was inserted after each 35 minutes of TOS. The reactivation step consisted of switching the reactor inlet to air, increase of the temperature to 550 °C, cooling back to 320 °C and switching the reactor inlet to N<sub>2</sub>O (duration 60 min in total). After 5 min of equilibration propylene was introduced to the inlet gas.

- [1] H. Wittcoff, B. Reuben: Industrial organic chemicals, John Wiley & Sons (1996) 149.
- [2] C. Perego, A. Carati, P. Ingallina, M.A. Mantegazza, G. Belussi, Appl. Catal. A 221 (2001) 63.
- [3] M. McCoy, Chem. Eng. News 79 (2001) 19.

## PREDNÁŠKY- CENA SHIMADZU 2009

### STANOVENIE STOPOVÝCH KONCENTRÁCIÍ ORTUTI TECHNIKOU ETAAS PO ELEKTROCHEMICKÉJ ÚPRAVE VZORKY

Čacho František<sup>1</sup>, Manová Alena<sup>1</sup>, Beinrohr Ernest<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU Bratislava 1, Radlinského 9

V laboratórnej praxi sa bežne na stanovenie stopových koncentrácií ortuti využívajú jednocelové analyzátory pracujúce s technikou studených pár (napríklad prístroj AMA 254 od firmy Altec, ČR s udávaným orientačným detekčným limitom 0,01 ng Hg).

Témou tejto práce bolo vyvinúť metodiku na priame stanovenie stopových koncentrácií ortuti v kvapalných vzorkách technikou atómovej absorpčnej spektrometrie s elektrotermickou atomizáciou.

Na začiatok sme využili známy a aj našimi meraniami potvrdený fakt, že ortuť je možné stanoviť aj ETAAS technikou, avšak jedine v analyticky čistej matrici (voda s kyselinou dusičnou) a za použitia vhodného

modifikátora [1]. Ďalším krokom teda bolo navrhnuť taký predseparačný krok ktorým by bolo možné vo vzorkách vôd vymeniť reálnu maticu za ideálnu, analyticky čistú a to bez strát ortuti. Na zmenu matrice z reálnej na modelovú sme využili možnosti ktoré poskytuje elektrochemická prekoncentrácia s použitím prietokového systému, ktorá navyše poskytuje svojou vysokou prekoncentračnou účinnosťou aj výrazné zníženie detekčného limitu stanovenia samotnej ortuti.

Ako elektrochemická prekoncentračná jednotka bol použitý elektrochemický prietokový analyzátor EcaFlow (model GLP 150, Istran, Bratislava) s dvojelektrodovou prekoncentračnou prietokovou celou. Ako pracovná elektróda bola použitá elektróda z drveného RVC uhlíku, ktorého povrch bol upravený elektrochemicky vylúčenou vrstvou zlata. Na meranie roztokov po prekoncentracii ortuti bol použitý atómový absorpčný spektrometer Shimadzu AA-6300 s elektrotermickým atomizátorom GFA-EX7i. Všetky kroky samotnej elektrochemickej prekoncentracie ako aj všetky parametre pre ETAAS boli optimalizované. Nahromadenie ortuti sa vykonávalo vkladáním konštantného napätia -1000 mV na pracovnú elektródu a optimálna hodnota rozpúšťacieho prúdu bola 120 µA. Nahromadenie ortuti prebiehalo z elektrolytu 0,1

mol/l HCl a následné rozpúšťanie po on-line výmene elektrolytu do roztoku 0,1 mol/l HNO<sub>3</sub>. Vykonali sme kompletnú validáciu stanovenia ortuti samotnou technikou ETAAS a aj čiastočnú validáciu stanovenia ortuti technikou ETAAS po elektrochemickej prekoncentracii.

Pre on-line spojenie elektrochemickej prekoncentracie a ETAAS sme stanovili detekčné limity, medze stanovenia a lineárne rozsahy pre objemy vzorky 1 ml, 5 ml a 10 ml. Tak isto sme vyjadrili zhodnosť, presnosť a správnosť pre stanovenie ortuti uvedeným on-line spojením. Pre spotrebu vzorky 5 ml je medza detekcie rovná hodnote 0,05 µg.dm<sup>-3</sup> pričom zhodnosť je na úrovni RSD = 4,6 %. V súčasnosti ukončujeme validáciu pre túto aplikáciu.

[1] Yu Jimmy C., et al.: Spectrochimica Acta Part B 55 (2000) 395-402

#### PRESSURISED FLUID AND ULTRASONIC EXTRACTION METHODS FOR ANALYSIS OF PLANT ANTIOXIDANTS AND THEIR ANTIOXIDANT CAPACITY

Petr Dobiáš, Petra Pavlíková, Martin Adam, Karel Ventura

*Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Nám. Čs. legií 565, Pardubice, Czech Republic  
E-mail: peejay1@seznam.cz*

The analytical method based on the high-performance liquid chromatography coupled with UV detection (HPLC/UV) for determination of selected antioxidants (i.e. esculetin, scopoletin, 7-hydroxycoumarin, rutin, xanthotoxin, 5-methoxypsoralen and quercetin) in plant material was developed. Pressurised fluid extraction (PFE) and ultrasonic extraction (USE) methods for the isolation of these compounds from ten real plant samples were used. Both extraction methods were optimised and compared to each other. For proposed HPLC/UV method the LOQ values (limit of quantification) in the range from 22.7 (xanthotoxin) to 97.2 ng.mL<sup>-1</sup> (rutin) were obtained. For all extracts the antioxidant capacity based on the reduction of free 2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl radical (DPPH) was also determined. Results ranged from 82.04 to 94.43 % of DPPH radical inhibition for PFE method and from 76.01 to 89.94 % in the case of USE method.

#### STANOVENÍ ULTRASTOPOVÝCH KONCENTRACÍ ARSENU A SELENU V PITNÝCH VODÁCH METODOU ECHG-QFAAS

Jakub Hraníček, Václav Červený, Petr Rychlovský

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

Elektrochemické generování těkavých sloučenin (EcHG) je alternativní metodou k dnes běžně používanému chemickému generování. Jednou z hlavních výhod elektrochemického generování je využití elektrického proudu pro redukci analytu v prostředí velmi čistých minerálních kyselin místo chemického redukčního činidla. Tím je výrazně snížena možnost kontaminace vzorku, což vede ke snížení meze detekce. Proto lze elektrochemické generování využít ke stanovení ultrastopových koncentrací hydridotvorných prvků. Důležitou součástí aparatury pro elektrochemické generování je elektrolytická průtoková cela [1,2]. Vhodnou konstrukcí této cely lze dosáhnout maximální účinnosti generování.

Hlavním cílem předkládané práce bylo vyvinutí metody stanovení stopových koncentrací arsenu a selenu v pitných vodách využitím elektrochemického generování příslušných hydridů. Součástí práce byla konstrukce vhodné miniaturní elektrolytické průtokové cely, její optimalizace a následně optimalizace celé aparatury. Z několika konstrukcí elektrolytických cel bylo vybráno tubulární uspořádání. Tato konstrukce umožňuje díky velkému katodovému povrchu dosáhnout vysoké účinnosti generování hydridů. Za optimálních pracovních podmínek (průtoková rychlost elektrolytu a nosného plynu, generační proud aj.) byly proměřeny základní charakteristiky stanovení a spolehlivost metody ověřena referenčním materiálem (NIST 1643e). Pro selen bylo dosaženo citlivosti stanovení 7,60×10<sup>-3</sup> dm<sup>3</sup> µg<sup>-1</sup> a mez detekce 0,40 µg dm<sup>-3</sup>. Ještě lepších hodnot bylo dosaženo pro arsen. Využití tubulární elektrolytické cely významně přispělo ke snížení detekčních limitů stanovení arsenu a selenu v pitných vodách.

*Autoři děkují rozvojovému projektu MŠMT ČR (RP 14/63) a výzkumnému projektu (MSM0021620857) za finanční podporu.*

[1] Šíma J., Rychlovský P.: Chem. Listy 92, 676 (1998)

[2] Hraníček J., Červený V., Rychlovský P.: Chem. Listy 102, 200 (2008)

## MOŽNOSTI VYUŽITÍ STACIONÁRNÍCH FÁZÍ NA BÁZI OXIDU ZIRKONIČITÉHO VE FARMACEUTICKÉ ANALÝZE

Peter Kalafut, Radim Kučera, Jiří Klimeš

Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta  
v Hradci Králové, Heyrovského 1203, CZ-500 05  
Hradec Králové; e-mail: peter.kalafut@faf.cuni.cz

Fyzikálně-chemické vlastnosti příbuzných látek, vyskytujících se jako nečistoty v léčivu, bývají často velmi podobné léčivu vlastnímu. Proto je nezbytné vyvíjet nové separační metody, které mají dostatečnou selektivitu i pro hodnocení komplikovaných směsí. Díky řadě pozitivních chromatografických vlastností (vysoká chemická a teplotní stabilita, jedinečný typ retence kombinující reverzně-fázový a iontově-výměnný mechanismus) jsou v poslední době intenzivně studovány stacionární fáze odvozeny od oxidu zirkoničitého[1,2]. V práci jsme se zaměřili na jejich uplatnění při analýze polosyntetického námelového alkaloidu methylergometrinu – léčiva běžně využívaného jako uterotonika – a jeho deseti lékopisných nečistot. Příbuzné látky se vyznačují specifickým rysem, že se v převážné míře jedná o dvojice parentní látka – epimer. Struktura všech analytů vychází z heterocyklu se dvěma různě bazickými atomy dusíku, přičemž dvě nečistoty obsahují navíc karboxylovou skupinu. Především pro úspěšnou separaci epimerů a diastereomerů se ukazuje být nejvhodnějším prostředím alkalické pH, což při použití zirkoniových kolon nevede k problémům se životností sorbentu. Dosažená separace zejména u některých epimerů je ve srovnání s lékopisnou metodou na silikagelu mnohem kvalitnější. Všechny dosavadní výsledky potvrzují oprávněnost ve využití zirkoniových stacionárních fází v kontrole léčiv jako přinejmenším rovnocenné alternativy ke kolonám silikagelovým.

- [1] J. Nawrocki, C. Dunlap, A. McCormick, P.W. Carr, *J. Chromatogr. A*, 1028, 1-30, (2004)  
[2] J. Nawrocki, C. Dunlap, J. Li, J. Zhao, C.J. McNeff, A. McCormick, P.W. Carr, *J. Chromatogr. A*, 1028, 31-62, (2004)

## PROTEIN-PROTEINOVÉ INTERAKCE POHLEDEM HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE

Kateřina Pešlová, Petr Novák, Tomáš Obšil, Miroslav Šulc

Mikrobiologický ústav AVČR v.v.i., Vítězská 1083,  
142 20 Praha, Přírodovědecká fakulta UK, Albertov  
2030, 128 40 Praha, peslova@biomed.cas.cz

Protein-proteinové interakce jsou jedním z pilířů biologických procesů v každé živé buňce. Proteiny 14-3-3 se podílejí na širokém okruhu regulačních procesů (signální dráhy buněčného cyklu, apoptosy nebo transkripce) díky interakcím se zde zúčastněnými proteiny. Interakce jsou podmíněny

nejprve *in vivo* seskupením 14-3-3 do dimeru a následným rozpoznáním fosforylovaného vazebného motivu klientního proteinu.

Na rozdíl od NMR technik, biokonjugační reakce umožňují mapovat nekovalentní interakce mezi proteiny ve vodných roztocích za fyziologických podmínek. Vytvořením nové kovalentní vazby mezi oběma reagujícími partnery tuto interakci fixují ve stavu, který může být dále studován hmotnostní spektrometrií (MS).

Pomocí tohoto přístupu jsme upřesnili polohu aminokyselin účastnících se interakcí mezi podjednotkami dimeru lidského regulačního proteinu 14-3-3 a zmapovali jsme interakce flexibilních C- a N-terminálních oblastí, které nemohou být zachyceny ve strukturních modelech vzniklých na základě dat rentgenostrukturní analýzy. Dále jsme zmapovali interakce proteinu 14-3-3 s difosforylovanou regulační doménou tyrosinhydroxylasy (TH1R) pomocí LC FT-ICR MS. Naše výsledky podporují vyšší afinitu proteinu 14-3-3 k fosforylovanému substrátu (s nefosforylovaným analogem TH1R nevznikaly žádné heterodimery) a naznačují, že interakce se substrátem se účastní také N-terminální oblast 14-3-3, jinak působící při vzniku homodimeru 14-3-3.

Tato práce vznikla za podpory GAUK (258179), MŠMT (LC07017) a EC MTKD-CT-2004-014407.

## DETERMINATION OF DOPAMINE AND ITS METABOLITES BY LC-ESI-MS/MS IN RAT BRAIN MICRODIALYSIS SAMPLES

Lukáš Rambousek, Syslová Kamila, Petr Kačer

Institute of Chemical Technology, Technická 5, 166 28  
Prague 6, rambousek@biomed.cas.cz

A liquid chromatography–electrospray ionization tandem mass spectrometry method has been developed to perform the determination of dopamine (DA), 3,4-dihydroxyphenylacetic acid (DOPAC) and homovanillic acid (HVA) in rat brain microdialysis samples. The HPLC system was directly coupled to the triple quadrupole mass spectrometer equipped with an electrospray ion source operated in the alternating ionization mode. The multiple reaction monitoring mode (MRM) was used for its extremely high degree of selectivity and the stable-isotope-dilution assay for its high precision of quantification.

Hydrochloric acid was added to the withdrawn sample in order to stabilize dopamine by transforming it to a more stable form of dopamine hydrochloride. The internal standard of dopamine hydrochloride-d4 (1 PG) was added to the sample, which was immediately frozen at -80 °C and submitted to the lyophilization. The lyophilized residue was dissolved in 50 µl of methanol and analyzed by LC-ESI-MS/MS.

Using this methodology the basal levels of DA, DOPAC and HVA could be measured consistently in *in vivo* microdialysis perfusion samples in rat brain.

The aim of the preclinical study was shown, if rat pups prenatally exposed to MA have changes in dopamine and its metabolites levels in Nc. Accumbens after the administration of low challenge dose of MA in adulthood.

#### **INSTRUMENTAL AND EXPERIMENTAL PARAMETERS IMPORTANT FOR CHIRAL ANALYSIS BY THE KINETIC METHOD**

Václav Ranc, Vladimír Halvíček, Petr Bednář and Karel Lemr

<sup>1</sup>*Department of Analytical Chemistry, Palacky University, Svobody 8, CZ- 77146, Olomouc, Czech Republic*

<sup>2</sup>*Academy of Sciences of the Czech Republic, Institute of Microbiology, Videnska 1083, CZ-14220 Prague 4, Czech Republic*  
vasekranc@mac.com

Next to separation techniques, Cooks' kinetic method represents a potentially strong alternative to perform chiral analysis. This method is based on the different dissociation of diastereoisomeric clusters.

This work is focused on the study of selected instrumental and experimental parameters. The influence of ion source was evaluated for electrospray and nano-electrospray. The nano-electrospray provides a possibility to analyze samples with more complex matrix, but on the other hand, nano-electrospray is not easy to operate and is far less robust. Further, the processes of dissociation of diastereoisomers in collision cell (QToF) and ion trap (LCQ) were compared. Unwanted fragments that complicate enantiomeric ratio determination were observed for collision cell fragmentation. In the case of real samples, matrix can play an important role, e.g. the presence of magnesium in a matrix led to formation of unwanted clusters that lower the sensitivity of the method and also can in some cases mimic the presence of one of the enantiomers. Finally, the competition of enantiomers in the process of target clusters formation was also observed. The obtained knowledge is important for development of new applications of the kinetic method.

- [1] Ranc, V.; Bednar, P.; Hlavicek, V.; Lemr, K., Nanoelectrospray versus electrospray in chiral analysis by the kinetic method. *Collect. Czech. Chem. Commun.* 2009, 74, 10.
- [2] Ranc, V.; Havlicek, V.; Bednar, P.; Lemr, K., Magnesium interference and different efficiencies of diastereoisomeric cluster formation in phenylalanine enantiomeric discrimination by the kinetic method. *Int. J. Mass Spectrom.* 2009, 280 (1-3), 213-217.
- [3] Ranc, V.; Havlicek, V.; Bednar, P.; Lemr, K., Nano-desorption electrospray and kinetic method in chiral analysis of drugs in whole human blood

samples. *Eur. J. Mass Spectrom.* 2008, 14 (6), 411-417.

#### **SUPRAMOLECULAR RECOGNITION OF STEROIDS FROM BIOLOGICAL FLUIDS**

Júlia Ričanyová<sup>1</sup>, Renata Gadzala-Kopciuch<sup>2</sup>, Katarína Reiffová<sup>1</sup>, Boguslaw Buszewski<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Department of Analytical Chemistry, Institute of Chemistry, Pavol Jozef Šafárik University, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovakia*

<sup>2</sup>*Chair of Environmental Chemistry and Bioanalytics, Faculty of Chemistry, Nicolaus Copernicus University, 7 Gagarin St, 87-100 Torun, Poland*

Steroid hormones are important in controlling of physiological functions as a part of the endocrine, neural and immune systems. Attention of scientists is paid to steroids as substances of positive and negative clinical significance in the human body. Choice of selective method for their isolation and preconcentration from complicated biological matrixes such should be ground of complex determination. The solid-phase extraction (SPE) is high recovery, enhanced reproducibility and automation capability preparation technique. Typical sorbents for SPE are not selective, a large amount of matrix interferences are extracted simultaneously with the target analyte. Good solution is application of „fingerprint adsorbents“ like molecularly imprinted polymers (MIPs). The molecular imprinting is a technique for creating three-dimensional networks complementary to the structure of a template molecule in the shape and functional group arrangements. In this work the combination of novel technique molecularly imprinted solid-phase extraction - MISPE based on MIPs was successfully applied for selective preconcentration of testosterone, progesterone, 17 $\beta$ -estradiol, estrone and estriol from biological fluids. MISPE method was followed by high-performance liquid chromatography (HPLC) in combination with selective spectrophotometric UV, diode array and CoolArray electrochemical detector as one of the most sensitive, selective and applicable technique for ng level determination of steroids.

*This work was supported by Visegrad Fund Grant, Socrates Erasmus and VEGA 1/4461/07.*



## PREPARATIVE ISOTACHOPHORESIS AS A SAMPLE PRETREATMENT TECHNIQUE FOR MASS SPECTROMETRY

Andrea Staňová, Jozef Marák, Soňa Žakovičová and Dušan Kaniansky

*Department of Analytical Chemistry, Faculty of Natural Science, Comenius University, Mlynská Dolina CH-2, SK-842 15 Bratislava, Slovak Republic, e-mail: stanova@fns.uniba.sk*

Analytically interesting compounds, e.g. drugs and their metabolites, are usually present in biological samples at (ultra)trace concentration levels. Analyses of biological samples represent the challenge for the analysts due to their complex character consisting of several hundreds of different constituents having wide span of chemical/biological properties and concentrations. Preparative isotachopheresis (pITP) can be used as sample pretreatment technique for the samples of biological origin. pITP provides the possibility not only to separate the ionogenic compounds but also to isolate them into the discrete fractions. Fractions can be analyzed i) directly by ordinary separation technique ii) via the coupling of identification powerful detection system with powerful separation technique iii) via direct injection to MS system. It is possible to inject higher amount of multicomponent samples and to isolate several analyte fractions due to the high load capacity and concentrating power of isotachopheresis. Another advantage is the possibility to inject low sample volumes, what is important in the cases when only limited sample volumes are available. Mass spectrometric detection provides an excellent selectivity while keeping the sufficient detection sensitivity.

This work is showing high potential and compatibility of preparative isotachopheresis as the sample pretreatment technique before several modes of mass spectrometric analysis.

## MATRICE NA BÁZE UHLÍKA V HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRII SEKUNDÁRNYCH IÓNOV PRI ANALÝZE MAKROMOLEKÚL

Monika Stupavská<sup>a</sup>, Monika Aranyosiová<sup>a,b</sup>, Dušan Velič<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>*Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava*

<sup>b</sup>*Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava  
stupavska@fns.uniba.sk*

Hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov (Secondary Ion Mass Spectrometry, SIMS) je metóda

na analýzu chemického zloženia rôznych typov povrchov, s vysokou citlivosťou s hodnotou až do ppb [1].

Metóda SIMS je založená na bombardovaní povrchu vzorky iónmi s energiou 25 keV. Výsledkom je emisia atómov, molekúl a klastrov z povrchu. Pre SIMS analýzu sú dôležité ionizované častice - sekundárne ióny, ktoré sú analyzované na základe doby letu (Time of Flight, ToF). Avšak množstvo sekundárnych iónov, ktoré je vyrazené z povrchu - iónový výťažok, extrémne závisí na chemickom prostredí - matici. Teda maticový efekt predstavuje množstvo prekážok pri kvantifikácii SIMS analýz, ale vytvára aj možnosť zvyšovania iónových výťažkov prostredníctvom modifikácie chemického prostredia [2].

Výskum bol zameraný na aplikáciu zlúčenín na báze uhlíka – fullerénu, uhlíkových nanorúrok a pyrolytického grafitu, ako vrstiev efektívne transportujúcich energiu v procese tvorby sekundárnych iónov pri SIMS analýze vysokohmotnostného oligosacharidu β-cyklodextrínu. Maticové vrstvy zabezpečili pozitívnu modifikáciu chemického prostredia, došlo k výraznému zvýšeniu iónového výťažku analyzovaného β – cyklodextrínu. Teóriu maticových vrstiev podporili aj merania SEM a AFM, kde sa potvrdilo štruktúrne usporiadanie molekúl matrice na povrchu, čo je jeden z faktorov, ktoré zodpovedajú za spôsob transportu energie v bulku vzorky.

Moderné prístupy k riešeniu problémov maticového efektu v SIMS formou modifikácie chemického prostredia predstavujú nový pohľad na uplatnenie SIMS ako nového snímacieho nástroja, predovšetkým v oblasti biológie a medicíny, kde možno pozorovať vzrastajúci záujem o skúmanie priestorového usporiadania biomolekúl priamo na biologických tkanivách.

*Táto práca vznikla za podpory grantov UK/207/2008 a APVV-0491-07.*

- [1] Vickermann J., Briggs D.: *ToF – SIMS: Surface analysis by mass spectrometry*. Charlesworth group, Huddersfield 2001  
[2] L. Adriaensen et al.: *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 19 (2005) 1017

## POSTERY - SEKCIA 1: ANALYTICKÁ A FYZIKÁLNÁ CHÉMIA

1Po01

### KONKURENČNÍ ADSORPCE TĚŽKÝCH KOVŮ NA ALTEROVANÉM UHLÍ

Lucie Ruppenthalová, Roman Maršálek<sup>1</sup><sup>1</sup>Ostravská Univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 03

Cílem této práce bylo postihnout konkurenční chování iontů těžkých kovů při jejich adsorpci z vodných roztoků na oxidačně alterovaném uhlí (velikost zrn 0,25 – 0,8 mm). Experiment byl proveden ve vsádkovém uspořádání (batch). Ke 100 ml roztoku dusičnanu sledovaného kovu o výchozích koncentracích (0,1-10 mmol.l<sup>-1</sup>) byl přidán 1 ml 200 mmol.l<sup>-1</sup> zásobního roztoku dusičnanu konkurenčního kovu (kovů) a 1 g sorbentu (kontaktní doba 24 hodin).

Po filtraci byla stanovena rovnovážná koncentrace sledovaného kovu a byly sestaveny adsorpční isotermy. Sorpční maximum bylo vyhodnoceno pomocí Langmuirovy adsorpční teorie. Jakým způsobem ovlivňuje přítomnost dalšího kovu adsorpční maximum pro sledovaný kov je shrnuto v tabulce 1.

Tabulka 1: Změny adsorpčních maxim sledovaných kovů po přidavku iontů konkurenčních kovů.

Sledovaný kov	Pb <sup>2+</sup>	Cu <sup>2+</sup>	Konkurenční kov		Pb <sup>2+</sup> , Cd <sup>2+</sup>	Pb <sup>2+</sup> , Cu <sup>2+</sup>
			Cd <sup>2+</sup>	Cu <sup>2+</sup> , Cd <sup>2+</sup>		
Pb		+ 14,25%	+ 12,5%	+ 6,5%		
Cu	- 42%		+ 10,5%		- 37%	
Cd	- 31%	- 7%				- 64%

Z tabulky je patrné, že ionty mědi a kadmia „podporují“ adsorpci olova. Naopak přítomnost olova snižuje adsorpční maxima pro měď i kadmium. Při porovnání mědi a kadmia, dochází k přednostní adsorpci mědi. Dá se tedy shrnout, že sledované kovy se sorbují v následujícím pořadí Pb > Cu > Cd. Na tuto posloupnost má pravděpodobně vliv specifický charakter iontu kovu a jeho hydratace ve vodném roztoku.

1Po02

### POUŽITELNOST IMPLICITNÍHO MODELU ROZPOUŠTĚDLA PŘI MODELOVÁNÍ SOLVATAČE POSTRANNÍCH ZBYTKŮ V PROTEINECH

Pavel Polcr<sup>1</sup>, Petr Jurečka<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Katedra fyzikální chemie PřF UP Olomouc<sup>2</sup>UOCHB AVČR

Ke kvantově chemickým výpočtům v rozpouštědlech jsou běžně používány tzv. implicitní modely. Interakce s rozpouštědlem je v nich většinou popsána pomocí čtyř složek, elektrostatické, repulzní, disperzní a

hydrofobní. Hlavní pozornost je vždy věnována elektrostatickému příspěvku, protože bývá dominantní. Ostatní složky solvatace jsou ale v literatuře diskutovány jen zřídka[1] a studie, které by ukazovaly jejich vliv na celkové hydratační energie, prakticky neexistují. Rozhodli jsme se prozkoumat, jak dobře simulují implicitní rozpouštědla interakci molekuly s okolím.

Jako model jsme zvolili postranní zbytky aminokyselin zanořené do hydrofobního jádra nepolárního proteinu. Implicitní rozpouštědla jsou totiž často používána pro zjednodušené odhady interakce molekul s proteiny či k odhadu hydrofobicity, přičemž nejčastější volbou modelového rozpouštědla je diethylether ( $\epsilon \sim 4$ ). Z databáze nejbližších kontaktů v aminokyselinách[2] jsme vybrali několik desítek postranních řetězců. Jejich interakci s okolím jsme vypočítali jednak metodou SAPT (Symmetry Adapted Perturbation Theory), která zde slouží jako referenční, a také pomocí implicitního solvatačního modelu. Z porovnání obou modelů plyne, že jednotlivé složky implicitního solvatačního modelu se významně liší od reference, přičemž relativní odchylka závisí na mezimolekulové vzdálenosti. Pro každou složku je závislost na vzdálenosti jiná, což může komplikovat výběr optimálních poloměrů pro implicitní model. Alespoň pro méně polární interakce ale výsledky s referenčními údaji poměrně dobře korelují.

[1] Curutchet C., Orozco M., Luque FJ., Tomasi J., JCC, 27, 1769 (2006)

[2] Singh J &amp; Thornton J M (1992). Atlas of Protein Side-Chain Interactions, Vols. I &amp; II, IRL press, Oxford.

1Po03

### VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ NITRODERIVÁTŮ AROMATICKÝCH UHLOVODÍKŮ NA THILOVOU VRSTVOU MODIFIKOVANÉ VISÍCÍ RTUŤOVÉ KAPKOVÉ ELEKTRODĚ

Vlastimil Vyskočil, Vít Prchal, Aleš Daňhel, Jiří Barek

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta,

Katedra analytické chemie,

UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí,

Hlavova 2030/8, CZ 12843 Praha 2,

Česká republika, vyskocil@natur.cuni.cz

Do životního prostředí je v současnosti uvolňováno široké spektrum látek, pro než jsou charakteristické rozmanité biologické účinky a kterým nebyla věnována zejména v minulosti větší pozornost. Nitroderiváty aromatických uhlovodíků patří dnes k nejvíce sledovaným polutantům životního prostředí – je prokázáno, že tyto látky mohou při kontaktu s organismem zvýšit riziko nádorového onemocnění [1]. Snadná elektrochemická redukovatelnost nitroskupiny, vázané na aromatickým

jádře, umožňuje ke stanovení úspěšně využít elektrochemických metod [2]. Cílem této práce bylo voltametrické stanovení vybraných nitroderivátů aromatických uhlovodíků a studování možnosti zlepšení jejich voltametrické detekce pomocí chemické modifikace (thiolovou vrstvou [3]) visící rtuťové kapkové elektrody (HMDE). Zkoumané modelové látky byly 1-nitrobenzen, 1-nitronaftalen, 2-nitrofluoren, 9-nitroanthracen, 2-nitrofenol a 4-nitrofenol; jako modelový zástupce nitroderivátů alifatických uhlovodíků byl pro srovnání zvolen nitromethan. U vybraných sloučenin je analytická odezva při použití techniky diferenční pulsní voltametrie na HMDE velmi podobná (píky se většinou překrývají, nejsou rozdělené) a stanovení těchto látek vedle sebe je složité, ne-li nemožné. Změny elektrochemického chování zkoumaných sloučenin pomocí modifikace pracovní elektrody (jako modifikátor byl zvolen oktanthiol [3]) tak vedou ke změně analytické odezvy látek (potlačení píku, posunutí polohy píku), čímž se detekce těchto látek ve směsi může stát jednodušší a levnější, při dosažení podobných mezí detekce jako při použití chromatografických metod.

*Tato práce byla finančně podpořena Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (projekty LC 06035, MSM 0021620857 a RP 14/63).*

- [1] Perrini G., Tomasello M., Librando V., Minniti Z.: *Ann. Chim.* **95**, 567 (2005).  
 [2] Vyskočil V., Berek J.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* **39**, (2009), v tisku.  
 [3] Carrillo I., Quintana M. C., Esteva A. M., Hernandez L., Hernandez P.: *Electroanalysis* **20**, 2614 (2008).

#### 1Po04 SURPASS FOR SOLID POLYMER SURFACE ANALYSIS

Z. Kolská<sup>1</sup>, T. Luxbacher<sup>2</sup>, M. Vilimovská<sup>3</sup>, K. Voldřich<sup>3</sup>, P. Slepíčka<sup>4</sup>, V. Švorčík<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Department of Chemistry, J. E. Purkyně University, 40096 Ústí nad Labem, České mládeže 8, Czech Republic, zdenka.kolska@ujep.cz, tel: +420 475 283 382*

<sup>2</sup>*Anton Paar GmbH, Anton-Paar-Strasse 20, 8054 Graz, Austria*

<sup>3</sup>*Anton Paar, organizační složka, Bělohorská 85, 16900 Praha 6, Czech Republic*

<sup>4</sup>*Department of Solid State Engineering, Institute of Chemical Technology, Technická 5, 16628 Praha, Czech Republic*

The SurPASS instrument is an electrokinetic analyzer for the investigation of the zeta potential ( $\zeta$ -potential) of macroscopic solids based on the streaming potential and streaming current method. The  $\zeta$ -potential is related to the surface charge at a solid/liquid interface. This characteristic is a powerful indicator for the

surface chemistry. It can distinguish between different polymers, as well as between the pristine and surface-modified polymer films. Also changes between the “pure” polymer surface (pristine or modified e.g. by plasma) and polymers with sputtered metal layers are indicated by the SurPASS. This research of such behaviour is important in the field of physics, chemistry, electronics and material science, or even of biology and medicine [1]. For many purposes, like biosensors, biology and medicine we need to investigate the dependence of the electrokinetic potential in aqueous solution as a function of pH, which is also possible by the SurPASS [2]. Other applications cover the characterization of polymer surface modified by grafted chemical compounds [2] or the behaviour of semiconductor surfaces [3].

Due to these advantages mentioned above the  $\zeta$ -potential measurement is used as one of methods for our sample characterization. We present results for pristine PET polymer films, polymers modified by Ar-plasma and both types of polymers with sputtered Au layers.

*This work was supported by the grants of Ministry of Education of CR-Centralized Research project C31/2009 and LC 06041 and by the GACR projects Nos. 106/09/0125 and 106/09/P046.*

- [1] P. Slepíčka, Z. Kolská, J. Náhlík, V. Hnatowicz, V. Švorčík, *Surf. Interf. Anal.*, in press.  
 [2] R. Zimmermann, O. Birkert, G. Gauglitz, C. Werner, *Chemphyschem* **2003**, *4*, 513.  
 [3] C. Bellmann, M. Gernert, A. Caspari, *Electrokinetic Investigation of Wafer Surfaces*, Anton Paar GmbH, Graz, **2008**, report information.

#### 1Po05 STANOVENÍ ULTRASTOPOVÝCH KONCENTRACÍ ARSENU A SELENU V PITNÝCH VODÁCH METODOU ECHG-QFAAS

Jakub Hraníček, Václav Červený, Petr Rychlovský

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

Elektrochemické generování těkavých sloučenin (EcHG) je alternativní metodou k dnes běžně používanému chemickému generování. Jednou z hlavních výhod elektrochemického generování je využití elektrického proudu pro redukci analytu v prostředí velmi čistých minerálních kyselin místo chemického redukčního činidla. Tím je výrazně snížena možnost kontaminace vzorku, což vede ke snížení meze detekce. Proto lze elektrochemické generování využít ke stanovení ultrastopových koncentrací hydridotvorných prvků. Důležitou součástí aparatury pro elektrochemické generování je elektrolytická průtoková cela [1,2]. Vhodnou

konstrukci této cely lze dosáhnout maximální účinnosti generování.

Hlavním cílem předkládané práce bylo vyvinutí metody stanovení stopových koncentrací arsenu a selenu v pitných vodách využitím elektrochemického generování příslušných hydridů. Součástí práce byla konstrukce vhodné miniaturní elektrolytické průtokové cely, její optimalizace a následně optimalizace celé aparatury. Z několika konstrukcí elektrolytických cel bylo vybráno tubulární uspořádání. Tato konstrukce umožňuje díky velkému katodovému povrchu dosáhnout vysoké účinnosti generování hydridů. Za optimálních pracovních podmínek (průtoková rychlost elektrolytu a nosného plynu, generační proud aj.) byly proměřeny základní charakteristiky stanovení a spolehlivost metody ověřena referenčním materiálem (NIST 1643e). Pro selen bylo dosaženo citlivosti stanovení  $7,60 \times 10^{-3} \text{ dm}^3 \mu\text{g}^{-1}$  a mez detekce  $0,40 \mu\text{g dm}^{-3}$ . Ještě lepších hodnot bylo dosaženo pro arsen. Využití tubulární elektrolytické cely významně přispělo ke snížení detekčních limitů stanovení arsenu a selenu v pitných vodách.

*Autoři děkují rozvojovému projektu MŠMT ČR (RP 14/63) a výzkumnému projektu (MSM0021620857) za finanční podporu.*

- [1] Šíma J., Rychlovský P.: Chem. Listy 92, 676 (1998)  
 [2] Hraniček J., Červený V., Rychlovský P.: Chem. Listy 102, 200 (2008)

#### **1P006 OPTIMALIZÁCIA VÄZBOVÝCH PODMIENOK MITOCHONDRIÁLNEHO TELOMÉROVÉHO PROTEÍNU A TELOMÉROVÉHO OLIGONUKLEOTIDU**

E. Smreková<sup>1</sup>, K. Višacká<sup>2</sup>, Ľ. Tomáška<sup>2</sup>, J. Nosek<sup>3</sup> a I. Valent<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie  
 Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského,  
 Mlynská dolina CH-1, 842 15 Bratislava, Slovenská  
 republika

<sup>2</sup>Katedra genetiky, Prírodovedecká fakulta, Univerzita  
 Komenského, Mlynská dolina B-1, 842 15 Bratislava,  
 Slovenská republika

<sup>3</sup>Katedra biochémie Prírodovedecká fakulta,  
 Univerzita Komenského, Mlynská dolina CH-1, 842 15  
 Bratislava, Slovenská republika

Jedným z esenciálnych genetických komponentov, ktoré regulujú vyššiu štruktúru DNA, dostupnosť k DNA modifikujúcim komplexom a faktorom ovplyňujúcim génovú expresiu daného organizmu je SSB proteín (single stranded DNA biniding protein) v kvasinke *Candida parapsilosis* mtTBP (mitochondrial telomere binding protein). Ukázalo sa, že mtTBP viaže stohovacou interakciou jednovláknovú DNA, preferenčne 5' koniec jednovláknového telomérového zvyšku lineárnej

mitochondriálnej DNA (mtDNA) kvasinky *Candida parapsilosis* [1]. Pre charakterizáciu DNA-väzbových vlastností mtTBP sme skúmali interakciu prirodzeného typu mtTBP (wt mtTBP) s poslednými 51 nukleotidmi (TEL51) 5' konca jednovláknového telomérového zvyšku lineárnej mtDNA kvasinky *Candida parapsilosis*. Väzba DNA s proteínom bola sledovaná pomocou metódy fluorescenčného zhasňania, vzhľadom na stohovacu interakciu tryptofánového zvyšku (Trp), ktorý sa nachádza vo väzbovom mieste proteínu s polynukleotidom DNA (TEL51), preferenčne s tymínovou bázou [2] použitím spektrofotometra FloroLog FL3-11. Pozorovali sme 30-45 % zhasňanie fluorescenčného signálu v emisnom maxime Trp v 343 nm po 60 min inkubácií so substrátom TEL51 v pomere  $[\text{DNA}]/[\text{mtTBP}] = 0.6$  v koncentrácii wt mtTBP  $3 \times 10^{-7}$  M.

Experiment bol prevedený v teplotnom rozmedzí 20°C až 40°C. Pri 25°C sme sledovali vplyv iónovej sily monovalentných (NaCl) a divalentých iónov  $\text{MgCl}_2$  od  $10^{-5}$  M až do 10 M na asociáciu proteínu s oligonukleotidom TEL51 [3]. Pomocou závislosti proteínovej hustoty v pomere ku koncentrácii oligonuklotidu a dĺžky inkubačného času v intervale od 0-90 min sme stanovili optimálne podmienky väzby wt mtTBP a TEL51.

Budúce experimenty by sa mali zamerať na stanovenie optimálneho pH, asociačných konštánt. Zároveň je vhodné optimalizovať aj podmienky pre mutantný typ proteínu mtTBP<sup>W61L</sup>, ktorý neobsahuje tryptofán v aktívnom mieste väzby s mtDNA.

*Táto práca je podporovaná grantom Howard Hughes Medical Institute (55005622).*

- [1] Tomaska et al. *J Biol Chem.* 1997, 272(5):3049-3056.  
 [2] Khamis et al. *J Biol Chem.* 1987, 262(23):10938-10945.  
 [3] Lohman et al. *Annu. Rev. Biochem.*, 1994, 63:527-570.

**1Po07****IDENTIFICATION OF PHASE II SILYBIN METABOLITES BY HPLC WITH UV DETECTION AND BY LC-MS**

Petra Jančová<sup>1</sup>, Eva Anzenbacherová<sup>1</sup>, Michal Šiller<sup>2</sup>, Vladimír Křen<sup>3</sup>, Pavel Anzenbacher<sup>2</sup>, Vilím Šimánek<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Medical Chemistry and Biochemistry, Faculty of Medicine and Dentistry, Palacky University, Hnevotinska 3, 775 15 Olomouc, Czech Republic.

<sup>2</sup> Department of Pharmacology, Faculty of Medicine and Dentistry, Palacky University, Hnevotinska 3, 775 15 Olomouc, Czech Republic.

<sup>3</sup> Laboratory of Biotransformation, Institute of Microbiology, Academy of Sciences of Czech Republic, Videnska 1083, 142 20 Praha 4, Czech Republic.

A flavonolignan silybin is an important hepatoprotective drug, the main component of silymarin, extract from seeds of *Silybum marianum*. Silybin is a mixture of two diastereomers A and B in approximately 1:1 proportion.

The aim of this study was to develop an analytical method for confirmation of the presence of silybin diastereomers and their phase II metabolites in biological samples (plasma, urine). Plasma samples were deproteinated; urine samples were purified and preconcentrated by solid phase extraction (SPE) using Oasis MCX (Mixed-Mode Cation-eXchange) cartridges and subsequently analyzed by HPLC system Shimadzu Class VP (Kyoto, Japan) with UV detection. Compounds were separated on a Merck RP-18e (5 µm) LiChrospher 100 column in an gradient mode. Samples containing purported metabolites of silybin were also subjected to (-)ESI-MS-MS analysis on an ion trap mass spectrometer LCQ (Thermo Fisher, Waltham, MA, USA).

In this study, the 7-O-β-D-glucuronides of A and B silybin diastereomers in the plasma samples as well as in the urine; and silybin B-20-O-β-D-glucuronide in the plasma samples were identified by HPLC. Moreover MS analysis confirmed a presence of monoglucuronides and monosulfate of silybin as main metabolites in humans.

*Support from MSM6198959216 project is gratefully acknowledged.*

**1Po08****STANOVENÍ INDEXU PI<sub>50</sub> NOVÝCH INHIBITORŮ CHOLINESTERÁZ**

Šárka Štěpánková<sup>1</sup>, Patrik Pařík<sup>2</sup>, Markéta Kovářová<sup>3</sup> a Karel Komers<sup>3</sup>

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

<sup>2</sup> Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice

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

Cholinesterázy jsou enzymy patřící do skupiny serinových hydroláz. U obratlovců jsou přítomny 2 typy – acetylcholinesteráza (ACHE) a butyrylcholinesteráza (BCHE). ACHE je enzym odbourávající acetylcholin v centrálním nervovém systému, zatímco na periférii převládá BCHE. Zvýšená aktivita těchto enzymů může způsobovat poruchy v přenosu nervových impulsů v cholinergním nervovém systému a je pravděpodobně také jednou z příčin rozvoje Alzheimerovy choroby. Standardní přístup při léčbě Alzheimerovy choroby představují inhibitory cholinesteráz, protože zablokováním cholinesteráz se zvýší množství acetylcholinu schopného vazby na cholinergní receptory [1].

Cílem této práce bylo nalézt vhodný inhibitor cholinesteráz. Jako potenciální inhibitory byly testovány látky s imidazolovým a imidazolinovým kruhem. Ke stanovení indexu pI<sub>50</sub> byla použita spektrofotometrická Ellmanova metoda [2].

Bylo prokázáno, že testované látky jsou účinnými inhibitory cholinesteráz.

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

[1] Giacobini E. (ed.): Cholinesterases and Cholinesterase Inhibitors. Martin Dunitz Ltd. London, 2000.

[2] Zdražilová P., Štěpánková Š., Komers K., Ventura K., Čegan A.: Half-inhibition concentrations of new cholinesterase inhibitors. Z. Naturforsch., 59c, 2004, 293-296.

**1Po09****ENANTIOSEPARATION OF SOME PHYTOALEXINS**

Ján Petrovaj<sup>1</sup>, Taťána Gondová<sup>1</sup>, Peter Kutschy<sup>2</sup>, Aneta Salayová<sup>2</sup>, Daniel W. Armstrong<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Department of Analytical Chemistry, Faculty of Science, P. J. Šafárik University, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovak Republic*

<sup>2</sup>*Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, P. J. Šafárik University, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovak Republic*

<sup>3</sup>*Department of Chemistry and Biochemistry, University of Texas at Arlington, TX 76019 USA*

Enantiomers separation can be carried out by various stereoselective separation methods. Chromatographic techniques, especially chiral high-performance liquid chromatography (HPLC) have been used extensively due to great variety of stationary and mobile phases.

The macrocyclic glycopeptides are often applied chiral selectors that have been used for numbers of separations due to they complementary enantioselectivity that allows separation of different chiral compounds [1].

Phytoalexins are low molecular weight secondary metabolites produced de novo by plants (family *Cruciferae*, e.g. cabbage, radish, broccoli, mustard, etc.) in response to several forms of stress, including microbial attack. These compounds are of great interest in their biological activity, including antibacterial, antitumor and cancer chemoprotective properties [2].

Chiral HPLC separation on teicoplanin based stationary phase (Chirobiotic T) was used for the analysis of some biological active cruciferous phytoalexins. The chiral recognition was studied in all three separation modes, normal phase, reversed-phase and polar organic separation modes. The elution order of the enantiomers was determined.

*This work was supported by the VEGA 1/4461/07, by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-0514-06 and No. APVV SK-UA 0002-07.*

- [1] Armstrong D. W., Tang Y., Chen S., Zhou Z., Bagwill C.: *Anal. Chem.* 66, 1473, 1994  
 [2] Monde K., Harada N., Takasugi M., Kutschy P., Suchý M., Dzurilla M.: *J. Nat. Prod.* 63, 1312, 2000

**1Po10****ŠTÚDIUM CYKLODEXTRÍNOVÝCH VRSTIEV NA POVRCHU PODPORENÉ HMOTNOSTNOU SPEKTROMETRIOU SEKUNDÁRNYCH IÓNOV**

Ladislav Rábara<sup>1</sup>, Monika Aranyosiová<sup>2,3</sup>, Dušan Velic<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup>*Univerzita sv. Cyrila a Metoda, Fakulta prírodných vied, nám. J. Herdu 2, 917 01 Trnava, SK*

<sup>2</sup>*Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, SK*

<sup>3</sup>*Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, SK*

*ladislav.rabara@ucm.sk*

V tomto príspevku sú porovnávané samoposkladané monomolekulové vrstvy [1] (angl. self-assembled monolayers, SAM) vytvárané z monotiolovaného  $\beta$ -cyklodextrínu (bCD1S) k lineárnym tioalkánom. Význam týchto monovrstiev je najmä v príprave a štúdiu modelových matric pre nanotechnológie, ale aj pre štúdiu modifikovaných povrchov pre senzorové aplikácie, pre modifikáciu povrchových vlastností materiálov apod.

Cyklodextrínové monovrstvy sú zaujímavé svojimi hydrofilno-hydrofóbnymi vlastnosťami, vďaka ktorým umožňujú látkam nepolárneho charakteru rozpustnosť v polárnych prostrediach. Táto schopnosť môže byť využitá aj pre komplexáciu na povrchu, kedy je cyklodextrín ako hostiteľská molekula rovnomerne usporiadaná na povrchu vo forme monomolekulej matrice. Takto modifikované povrchy sú veľmi užitočné najmä pre separačné analytické metódy.

Molekuly lineárnych tioalkánov sú usporiadané ( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ )R30° na Au(111), pričom obsadenosť povrchu závisí predovšetkým od koncentrácie tioalkánu v roztoku a času prípravy SAM. Molekula bCD1S má vonkajší priemer 15,3 Å [2], takže svojím objemom zaberá oveľa väčšiu časť povrchu ako molekula tioalkánu. Tento fakt sa potvrdil technikou ToF-SIMS, kde sa v hmotnostných spektrách nameral mnohonásobne vyšší počet zhlukov atómov zlata s vyšším počtom pochádzajúcich z povrchu bez adsorbátov v porovnaní s [3]. Tieto spektrá ďalej ukázali značné rozdielnosti vo fragmentácii molekuly.

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

- [1] Ulmanm A.: *An introduction to ultrathin organic films: from Langmuir-Blogget to self-assembly*, Academic Press, Boston, 1991  
 [2] Szejtli J.: *Introduction and general overview of cyclodextrin chemistry*. *Chem. Rev.* 98, 1998, 1743-1753  
 [3] Shröder M., Sohn S., Arlinghaus H. F.: *Investigation of secondary cluster ion emission from self-assembled monolayers of alkanethiols on gold*. *Appl. Surf. Science* 231-232, 2004, 164-168

**1Po11****PREPARATION AND APPLICATION OF CARBON NANOTUBES MODIFIED PARAFFIN IMPREGNATED GRAPHITE AND GLASSY CARBON ELECTRODE FOR DC VOLTAMMETRIC DETERMINATION OF LEAD**

Silvia Stefanova, Lubomir Pikna

*Department of Chemistry, Faculty of Metallurgy, Technical University of Kosice, Letná 9, 04200 Kosice, Slovakia, silvia.stefanova@tuke.sk*

In recent years, carbon nanotubes have become an ideal electrode material and have been widely used for electrochemical reactions owing to their super characteristics of chemical stability, low mass density, low resistivity and large surface area [1,2].

A multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) – modified paraffin impregnated graphite electrode (PIGE) and glassy carbon (GC) electrode were employed for the determination of lead. The optimisation of MWCNT/PIGE and MWCNT/GC electrode was carried out altering ultrasonication parameters (ultrasonication time, ultrasound generator performance and dispersing agent). The preparation of modified electrodes was investigated. Results showed, that the most electrochemically sensitive MWCNT/GC electrode was sonicated for 30 min. and most sensitive MWCNT/PIGE for 20 min., both using ethanol/water solution as dispersing agent, ultrasound generator performance was 100%. Both electrodes were successfully applicable to analysis of lead performed by DC voltammetry. The peak current was proportional to the concentration of lead (II) over a range  $1 \cdot 10^{-5} - 5 \cdot 10^{-5} \text{ mol dm}^{-3}$  for MWCNT/PIGE and also MWCNT/GC electrode. In addition, the modified electrodes possess promising advantages as good reproducibility and easy surface regeneration.

*This work was supported by VEGA grant no. 1/0459/08, VEGA grant no. 1/0461/08 and APVV grant no. 20-009404.*

- [1] Wang J., Lin Y., *Trends in Analytical Chemistry*, 27, 619-626, 2008  
 [2] Deng P.-H., Fei J.-J., Zhang J., Li J.-N., *Microchimica Acta*, 165, 211-216, 2009

**1Po12****ŠTÚDIUM ENVIRONMENTÁLNE VÝZNAMNÝCH VLASTNOSTÍ POĽNOHOSPODÁRSKÝCH PÔD**

Eva Kucanová<sup>1</sup>, Dagmar Remeteiová<sup>1</sup>, Radoslav Rusnák<sup>1</sup>, Vojtech Dirner<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Technická univerzita v Košiciach, Hutnícka fakulta, Katedra chémie, Letná 9, 042 00 Košice, Slovensko*

<sup>2</sup> *Technická univerzita v Ostrave, Hornicko-geologická fakulta, Institut environmentálneho inžinýrství, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava-Poruba, Česká republika*

Pôda je veľmi významnou tuhou environmentálnou vzorkou, nakoľko je vystavená vstupu rizikových látok do svojho systému a zároveň je aj vstupom týchto látok do biologického reťazca. Mobilizácia, resp. imobilizácia rizikových látok v pôde závisí od mnohých faktorov. Naše štúdium je zamerané na stanovenie tých environmentálne významných vlastností poľnohospodárskych pôd z okolia oceliarskeho závodu U.S. Steel Košice, ktoré výrazne ovplyvňujú spôsob viazania sa rizikových kovov v pôdach tým aj ich pohyblivosť v pôdnom systéme. V rámci štúdia boli sledované a stanovené nasledujúce vlastnosti matrixu pôdnych vzoriek: mineralogické zloženie matrixu a asociácia vybraných rizikových prvkov (Cu, Pb, Ni) so zistenými minerálnymi formami získané z výsledkov semikvantitatívnej práškovej XRD analýzy a SEM-EDS analýzy, celkový obsah anorganicky (TIC) a organicky viazaného uhlíka (TOC) a celkový obsah matrixových prvkov získaný z výsledkov WD XRF analýzy. Ďalej boli stanovené vlastnosti ovplyvňujúce mobilitu rizikových prvkov akými sú aktívna (pH/H<sub>2</sub>O) a výmenná (pH/KCl) pôdna reakcia, kationová sorpčná kapacita a nasýtenosť sorpčného komplexu. V poslednej etape štúdia sme sa zamerali na stanovenie obsahu vybraných rizikových prvkov vo formách (frakciách) pohyblivých za rozdielnych pôdnych podmienok aplikáciou frakcionačnej analýzy s využitím jednokrakovej extrakcie na izoláciu týchto foriem a metódy FAAS na stanovenie obsahov prvkov v extraktoch.

*Práca vznikla za podpory grantových projektov VEGA č. 1/0461/08 a 1/0459/08 a slovensko-maďarského projektu SK-HU-0012-08.*

**1Po13****KVANTITATÍVNE STANOVENIE BÁRIA A MOLYBDÉNU V MONOKRYŠTÁLE WOLFRAMANU OLOVNATÉHO**

Terézia Vojtylová

*FZÚ AV ČR, v.v.i., Na Slovance 2, 182 21 Praha 8, ČR, vojtyl@fzu.cz*

Monokryštály PbWO<sub>4</sub> sú aktívne skúmané pre použitie vo vysoko energetickej fyzike ako energetické a fotonové kalorimetre, či scintilačné detektory v LHC

experimentoch v CERN-e. Využíva sa ich vlastnosti mať veľmi krátku dobu ( $\sim 2$  nm) vyhasinania modrej luminiscencie pri 410 nm a taktiež ich vysokej hustoty ( $8.3 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ). Okrem modrej luminiscencie je popísaná zelená luminiscencia monokryštálov pri 500 nm s pomalým časom vyhasinania. Táto vlastnosť sa dá využiť napríklad v medicínskych zobrazovacích technikách, v kontrolných priemyselných systémoch. Aplikácia však vyžaduje zreteľne vyšší svetelný tok, ktorý sa dá dosiahnuť dopovaním monokryštálu molybdénom (Mo) a báriom (Ba) [1,2].

Kvantitatívne stanovenie jednotlivých spoludopantov v monokryštále je sťažené zložitou maticou, ktorú treba rozložiť, tak aby jednotlivé prímiesy boli stanoviteľné. Vzorka sa rozkladá pomocou roztoku hydroxidu sodného a roztok sa stabilizuje kyselinou citrónovou. Pre kvantifikáciu Mo vo vzorke bolo zvolené spektrofotometrické stanovenie s použitím thiokyanatanu amónneho a meranie absorpcie vzniknutého žltého komplexu  $\text{MoO}(\text{SCN})_5$  [3]. Množstvo Ba sa stanovilo nepriamo, tak že sa do roztoku vzorky pridal roztok molybdénanu amónneho až do kvantitatívneho vyzrážania Ba ako  $\text{BaMoO}_4$ . Odfiltrovaná premytá zrazenina sa rozpustila pomocou kyseliny chlorovodíkovej a Mo v roztoku sa stanovil fotometricky s thiokyanatanom. Množstvo Ba sa vypočítalo zo stanoveného množstva Mo.

Použitie atómovej absorpčnej spektrometrie je v tomto prípade nevhodné z dôvodu prítomnosti solí. Znižovala by sa reprodukovateľnosť meraní z dôvodu kryštalizácie solí v prístrojovom systéme. Touto fotometrickou metódou sme reprodukovateľne stanovovali vo vzorkách monokryštálov množstvá 100-1000ppm Ba a Mo.

- [1] P. Bohacek, M. Nikl, N. Solovieva, B. Trunda, *Radiation Measurements*, 38, 363-365, (2004)  
 [2] J. A. Mares, A. Beitlerova, P. Bohacek, M. Nikl, N. Solovieva, C.D' Ambrosio, *Physica Status Solidi (c)*, 2, 73-76, (2005)  
 [3] A. Dragomirecký, V. Mayer, J. Michal, K. Řeřicha, *Průručka anorganické kolorimetrické analýzy*, SNTL, Praha 1963

#### 1Po14 VPLYV PERTURBANTOV NA NEKATALYZOVANÚ OSCILAČNÚ REAKCIU PYROKATECHOLU S BROMIČNANOM

Oľga Grančičová<sup>1</sup>, Anna Olexová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, Bratislava

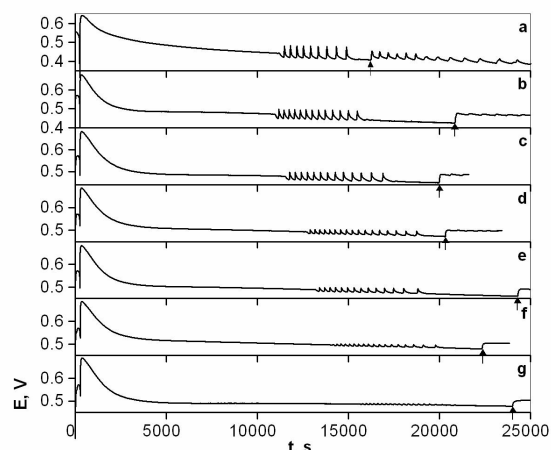
Jedným z medziproduktov reakcie fenolu s bromičnanom v kyslom prostredí je 1,2-dihydroxybenzén (pyrokatechol), o ktorom sa dlho predpokladalo [1], že sa pri jeho oxidácii neobjavujú oscilácie, pretože vzniká stabilný o-benzochinón. Ukázalo [2,3] sa však, že pri vhodnej voľbe

koncentrácií reaktantov aj tento substrát vykazuje oscilácie, či už v prítomnosti katalyzátora alebo bez neho. K objasneniu mechanizmu oscilačného chovania systému môže prispieť štúdium vplyvu rôznych perturbantov:

a) vplyv rastúcej koncentrácie aniónového surfaktantu (SDS) sa prejavil na oscilačných parametroch: na miernom raste indukčnej periódy oscilácií, postupnom poklese amplitúdy oscilácií až do ich úplného vymiznutia. V zmenách oscilačných parametrov sa odráža solubilizácia produktov bromácie pyrokatecholu a 1,2-benzochinónu v micely, inhibícia bromácie aromatického substrátu v dôsledku solubilizácie brómu a katalytický vplyv nabitého povrchu micely.

b) tert-butanol mení relatívnu permitivitu prostredia, pôsobí ako lapač OH a Br radikálov a tvorí s vodou tzv. typicky vodné rozpúšťadlá, v ktorých nevodná zložka ovplyvňuje 3D-štruktúru vody. Jeho rastúca koncentrácia sa prejavuje na dynamike oscilácií.

c) koncentrácia kyseliny rozhoduje o tom, za akých podmienok sa oscilácie objavujú: v intervale  $0.6\text{-}0.9 \text{ mol dm}^{-3}$  vzniknú oscilácie len v nemiešanom systéme, kým pri vyšších koncentráciách aj v miešanom.



Časová závislosť redox potenciálu miešaného

(50 rpm) systému  $4.3 \times 10^{-2} \text{ mol dm}^{-3}$  pyrokatechol +  $7.8 \times 10^{-2} \text{ mol dm}^{-3} \text{ NaBrO}_3$  pre rôzne koncentrácie SDS: a – 0, b –  $2 \times 10^{-2}$ , c –  $5 \times 10^{-2}$ , d –  $8 \times 10^{-2}$ , e –  $9 \times 10^{-2}$ , f –  $1 \times 10^{-1}$ , g –  $1.3 \times 10^{-1}$ ;  $[\text{H}_2\text{SO}_4] = 1.3 \text{ mol dm}^{-3}$ . Šípka označuje koniec miešania. Táto práca vznikla za podpory grantu Vega MŠ SR č. 1/0039/09

- [1] M. Orbán, E. Körös, *React. Kinet. Catal. Lett.* 8, 273 (1978).  
 [2] M. Harati, J. Wang, *Z. Phys. Chem.* 222, 997 (2008).  
 [3] M. Harati, J. Wang, *J. Phys. Chem. A* 112, 4241 (2008).



**1Po15****SPIN TRAPPING OF SO<sub>4</sub><sup>-</sup> RADICALS; AN ALTERNATIVE ASSAY FOR RADICAL SCAVENGING CAPACITY DETERMINATION IN DIMETHYLSULFOXIDE**

Michal Zalibera<sup>1</sup>, Peter Rapta<sup>1</sup>, Andrej Staško<sup>1</sup>, Lucia Brindzová<sup>2</sup>, Vlasta Brezová<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics*

<sup>2</sup> *Institute of Biochemistry, Nutrition and Health Protection, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava*

Thermal decomposition of potassium persulfate (K<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>8</sub>) was studied in detail by the EPR spin trapping technique in dimethylsulfoxide (DMSO), employing 5,5'-dimethyl-1-pyrroline-N-oxide (DMPO), 5-ethoxycarbonyl-5-methyl-1-pyrroline-N-oxide (EMPO) and 5-(diisopropoxyphosphoryl)-5-methyl-1-pyrroline-N-oxide (DIPPMPO) as spin traps. DMPO and/or its derivatives exclusively trapped the primary formed SO<sub>4</sub><sup>-</sup> radical anions producing stable spin adducts with half-lives exceeding two hours at room temperature. High-resolution EPR spectra of these adducts showed unusually rich hyperfine structure due to the interaction of the unpaired electron with all magnetically active nuclei of the spin trap moiety. In contrast to aprotic DMSO solvent, DMPO-OH adducts dominated in mixed DMSO/water solutions with water content higher than 50 %. The thermal decomposition of K<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>8</sub> in DMSO represents an effective source of free radicals for the radical scavenging capacity (RSC) determination assay, applicable to hydrophilic as well as hydrophobic antioxidants. Efficiency of the assay is demonstrated with a series of cereal samples.

- [1] M. Zalibera, P. Rapta, A. Staško, L. Brindzová, V. Brezová, Thermal generation of stable SO<sub>4</sub><sup>-</sup> spin trap adducts with super-hyperfine structure in their EPR spectra: An alternative EPR spin trapping assay for radical scavenging capacity determination in dimethylsulfoxide, *Free. Radic. Res.*, 43 (2009) 457-469
- [2] L. Brindzová, M. Zalibera, P. Šimon, M. Čertík, M. Takácsová, A. Mikulajová, L. Mikušová, P. Rapta, Screening of cereal varieties for antioxidant and radical scavenging properties applying various spectroscopic and thermoanalytical methods, *Int. J. Food Sci. Technol.*, 44 (2009) 784-791

**1Po16****OPTICAL EMISSION SPECTROSCOPY OF HIGH-POWER LASER-INDUCED DIELECTRIC BREAKDOWN IN MOLECULAR GASES AND THEIR MIXTURES: INVESTIGATION OF EARLY STAGES OF PLASMA CHEMICAL REACTIONS IN PLANETARY ATMOSPHERES**

Jaroslav Cihelka<sup>1,2</sup>, Dagmar Babánková<sup>1,2</sup>, Irena Matulková<sup>1</sup>, Kristýna Sovová<sup>1</sup> and Libor Juha<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Prague 8, Czech Republic*

<sup>2</sup> *Institute of Physics, Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., Na Slovance 2, 182 23 Prague 8, Czech Republic*

The main goal of this work lies in the laboratory simulation of chemical consequences of the high-energy-density processes (such as high-velocity impact of an extraterrestrial body, lightning, etc.) occurring in early Earth's atmosphere, which could lead to organic compounds generated from simple molecular gases [1]. Large-scale plasma was created in molecular gases (CH<sub>4</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, D<sub>2</sub>O) and their mixtures by high-power laser-induced dielectric breakdown (LIDB). Compositions of the mixtures used are those suggested for the early Earth's atmosphere. Time-integrated as well as time-resolved optical emission spectra [2,3] emitted from the laser spark have been measured and analyzed. For example, the spectra of the plasma generated in the CH<sub>4</sub>-N<sub>2</sub>-D<sub>2</sub>O mixture are dominated by emission of C<sub>2</sub> and CN radicals. These species seem to be precursors of stable products as acetylene and hydrogen cyanide. Gas chromatographic (GC) signals indicate in the strongly reduced mixture also some other hydrocarbons in a low concentration. The GC peaks were assigned to ethene, propene, propyne and allene. The knowledge about the low-molecular products is very important for understanding the laser-plasma initiated formation mechanisms of larger organic molecules, such as amino acids, nucleic acid bases, sugars, etc., and investigation of the origin of their homochirality, which is typical for biological matter.

*This work financially supported by the Ministry of Education, Youth and Sports (grants COST MP0702, LC510, LC528, and LA08024), Academy of Sciences of the Czech Republic (IAAX00100903) and the Grant Agency of the Czech Republic (grant No. 203/06/1278).*

- [1] Babánková D., Civiš S., Juha L.: Chemical consequences of laser-induced breakdown in molecular gases, *Progress in Quantum Electronics* 30, 75-88 (2006) and references cited therein.
- [2] Babánková D., Civiš S., Juha L., Bittner M., Cihelka J., Pfeifer M., Skála J., Bartnik A., Fiedorowicz H., Mikolajczyk J., Šedivcová T.: Optical and x-ray emission spectroscopy of high-

power laser-induced dielectric breakdown in molecular gases and their mixtures, *Journal of Physical Chemistry A* 110, 12113-12120 (2006).

- [3] Civiš S., Babánková D., Cihelka J., Sazama P., Juha L.: Spectroscopic investigation of high-power laser-induced dielectric breakdown in gas mixtures containing carbon monoxide, *Journal of Physical Chemistry A* 112, 7162-7169 (2008).

#### 1Po17

### THIS WORK WAS SUPPORTED BY THE MINISTRY OF EDUCATION, YOUTH AND SPORTS (COST MP0702), THE GRANT AGENCY OF TRANSFORM INFRARED EMISSION SPECTROSCOPY OF IMINE RADICAL GENERATED BY HOLLOW CATHODE DISCHARGE

Irena Matulková<sup>1</sup>, Jaroslav Cihelka<sup>1,2</sup> and Petr Kubelík<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> *J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Prague 8, Czech Republic*  
<sup>2</sup> *Institute of Physics, Academy of Sciences of the Czech Republic v.v.i., Na Slovance 2, 182 21 Prague 8, Czech Republic*

It is important to understand the dynamics and reactivity of reaction intermediates like free radicals in order to understand many atmospheric reactions. Especially, the imine specie,  $\text{NH}\cdot$ , is an extensively studied free radical of fundamental importance because it acts as an intermediate in the formation of atmospheric ammonia by a sequence of hydrogenation reactions. The imine radical was first detected in 1893 by Eder through the observation of the  $\text{A}^3\Pi - \text{X}^3\Sigma^-$  transition near 336 nm [1]. The hollow cathode discharge was used for the study of emission rotational-vibrational bands of  $\text{NH}\cdot$  in the ground electronic state for the first time in 1982 [2]. Our research was motivated by the simulation of reactions in the gas phase using electric discharges. Relatively low pressures and temperatures in our experimental arrangement simulate the processes which take place in upper levels of planetary atmospheres during the impacts of space bodies.

Rotational-vibrational bands of the imine free radical (NH) or (ND) in the ground  $\text{X}^3\Sigma^-$  electronic state have been observed by the time resolved Fourier transform spectroscopy [3]. The time resolved FT spectra were measured using Bruker IFS 120 HR spectrometer in the 1923 - 3571  $\text{cm}^{-1}$  spectral region with a microsecond time scale and the spectral resolution of 0.02  $\text{cm}^{-1}$ . The imine radical was produced under two experimental conditions in a pulsed discharge of pure hydrogen or deuterium with nitrogen or ammonia and helium mixtures. We observed the spectra with fundamental and hot bands up to the rotational-vibrational transition 5-4 in the both experiments with  $^1\text{H}$ . The spectra of discharge in the presence of  $^2\text{H}$

contained also the fundamental and hot band up to rotational-vibrational transition 4-3.

This time resolved measurement is suitable for a studying high resolved spectra of unstable species in the gas phase. These experimental results are useful for an elucidation of the gas phase reaction and relaxation mechanisms.

*This work was supported by the Ministry of Education, Youth and Sports (COST MP0702), the Grant Agency of the Academy of Sciences of the Czech Republic (IAA400400705) and the grand agency Academy of Sciences of the Czech Republic (KAN 100500652).*

- [1] R.S. Ram, P.F. Bernath and K.H. Hinkle, *J. Chem. Phys.*, 110, 5557-5563 (1999)  
 [2] D.A. Ramsay and P.J. Sarre, *J. Mol. Spectrosc.*, 93, 445-446 (1982)  
 [3] K. Kawaguchi, Y. Hama and S. Nishida, *J. Mol. Spectrosc.*, 232, 1-13 (2005)

#### 1Po18

### STANOVENÍ CHARAKTERISTIK KOMPLEXU $\text{Ca}_2\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3$ NA ZÁKLADĚ VYHODNOCENÍ FLUORESCENČNÍCH SPEKTER ZÍSKANÝCH POMOCÍ TRLFS

Alena Zavadilová, Dušan Vopálka, Marcela Žáková

*Katedra jaderné chemie, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha 1*

Metodika časově rozlišené laserové fluorescenční spektroskopie (TRLFS) umožňuje přímo studovat formy uranu. V této práci jsme se soustředili na studium molekulární formy  $\text{Ca}_2\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3$ , která se významně vyskytuje v přírodních vodách s pH v intervalu 7-8. Jako excitační zdroj fluorescence byl použit přeladitelný laserový systém založený na výbojkově čerpaném Q-spínaném Nd:YAG laseru. Délka impulzu je 4 ns, opakovací frekvence byla 10 Hz. Pro excitaci byla použita čtvrtá harmonická frekvence 266 nm ze základní vlnové délky 1064 nm. Měření byla provedena při teplotě studovaného roztoku v rozsahu 13 - 20°C. Emitovaná fluorescence byla detekována pomocí monochromátoru a zobrazovacího spektrografu. Těžiště práce spočívalo ve vyhodnocení celkových intenzit fluorescenčních signálů odpovídajících sledované formě pro soubory roztoků, jejichž složení se lišilo zejména v obsahu vápníku. Pomocí originální metody vyhodnocení, která byla opřena o speciální výpočty v prostředí PHREEQC (s použitím databáze HATCHES distribuované NEA v Paříži) byla pro dvě různé teploty určena rovnovážná konstanta reakce pro vznik komplexu vztažená na nulovou iontovou sílu. Následně byly potom určeny dva parametry: konstanta stability komplexu  $\text{Ca}_2\text{UO}_2(\text{CO}_3)_3$  pro vztažnou teplotu 25°C ( $\log K^0 = 30,1 \pm 0,3$ ) a standardní reakční entalpie ( $\Delta H^0 = 179,3 \text{ kJ mol}^{-1}$ ), jejíž stanovení nebylo pro studovaný komplex dosud publikováno.

### 1Po19 INFLUENCING OF PROPERTIES OF MIXED OXIDE CATALYSTS BY IONIZING RADIATION

Daniel Kobliha, Milan Pospíšil, Viliam Múčka

Czech Technical University in Prague, Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, Břehová 7, Praha 1, 115 19

The selected physico-chemical properties and the catalytic activity of NiO-TiO<sub>2</sub> catalysts containing variable ratio of both components were studied. The series of 15 samples of NiO-TiO<sub>2</sub> mixed catalysts with various composition in the range 0-100 wt.% of both components were prepared.

The catalytic activity of all samples was measured by the decomposition of the aqueous solution of hydrogen peroxide (1.2 mol/l) at different temperatures (25-40°C).

The catalytic activity was also tested on samples pre-irradiated with gamma-rays of <sup>60</sup>Co and 4.5 MeV accelerated electrons (D = 1 MGy) [1]. The catalytic activity of all the samples non-monotonously decreased with decreasing content of nickel oxide, while the catalytic activity of samples containing the maximum of titanium oxide was not measurable [2]. The irradiation of samples containing 20% and 40% of titanium oxide caused significant decrease of the specific catalytic activity.

The catalytic activity was also measured in samples after implantation of nitrogen ions under the vacuum (N<sup>+</sup>, N<sub>2</sub><sup>+</sup>, 90 keV). The ion implantation of samples containing pure or higher amount of nickel oxide led to increase of the catalytic activity compared to the non-implanted samples.

[1] Múčka V., Podlaha J., Silber R.: *Radiat. Phys. Chem.*, 59, 2000, 467

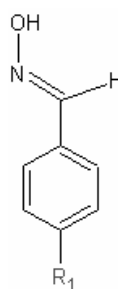
[2] Pospíšil M., Cabiari J.: *Collect. Czech. Chem. Commun.*, 39, 1974, 3056

### 1Po20 ELEKTROCHEMICKÁ REDUKCE AROMATICKÝCH ALDOXIMŮ A KETOXIMŮ V BEZVODÉM DIMETHYLFORMAMIDU

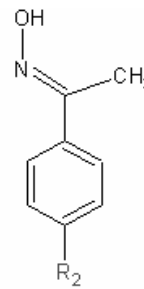
Radana Kociánová, Jiří Ludvík

Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AVČR, v.v.i., Dolejškova 3, CZ-182 23 Praha 8

Karbonylová skupina a její deriváty (oximy, iminy, hydrazony) jsou vhodná elektrochemicky aktivní centra pro výzkum intramolekulárních elektronových interakcí molekul s více redox centry pomocí elektrochemických technik. Jako výchozí modelové látky byly využity dvě série aromatických aldoximů a ketoximů s různými substituenty v para poloze na benzenovém jádře.



Aldoxim



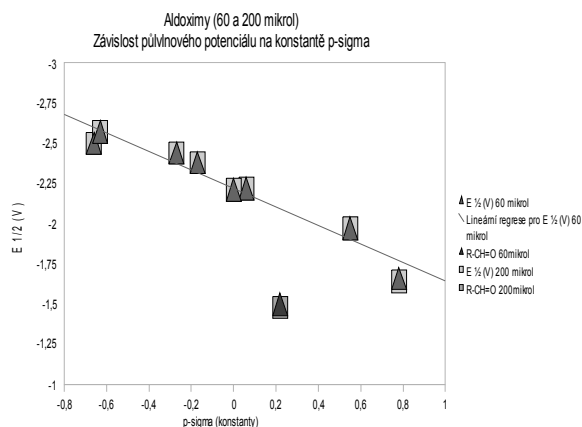
Ketoxim

R<sub>1</sub> = F, NH<sub>2</sub>, NO<sub>2</sub>, CF<sub>3</sub>, N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, H, OCH<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>, CH=O

R<sub>2</sub> = F, NH<sub>2</sub>, NO<sub>2</sub>, CF<sub>3</sub>, I, OH, Br, Cl, H, OCH<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>, CN

Na základě vyhodnocení polarografických experimentů a křivek cyklické voltametrie na visící rtuťové kapce a jejich porovnání s experimenty ve vodných roztocích bylo možné formulovat základní redukční mechanismus.

K interpretaci výsledků byl použit přístup LFER (Linear Free Energy Relationship), který ukázal, že vliv substituentů na redox potenciál se řídí Hammettovskou konstantou sigma, tedy korelace je lineární. Byla však pozorována výjimka z této závislosti, kdy v případě aldehydickej skupiny (CH=O) v para poloze vůči skupině CH=N-OH byl zjištěn výrazně nižší redukční potenciál (Obr. 1). Toto zjištění znamená, že rozložení elektronů v molekule této látky se zásadně odlišuje od ostatních látek série, orbital LUMO je lokalizován v jiné části molekuly a tedy redukce probíhá jiným mechanismem.



Na základě údajů v literatuře o zvláštním chování diacetylbenzenu ve vodném prostředí se zdá, že dvě karbonylová redox centra v para poloze vůči sobě na aromatickém jádře spolu intramolekulárně silně interagují, vzniká rozsáhlejší delokalizovaný systém, který se projeví snadnější redukcí. Dosud však tento jev nebyl pozorován u nesymetrické molekuly, navíc v bezvodém prostředí. Toto chování se zdá být obecné

a bude dále zkoumáno, do jaké míry platí i u dalších analogických sloučenin.

*Za finanční podporu autoři děkují grantu KONTAKT (MŠMT) č. ME 09 002.*

### 1Po21 PŘÍPRAVA NANOČÁSTIC STŘÍBRA V KOMPLEXOTVORNÉM PROSTŘEDÍ

Petr Slovák, Libor Kvítek

*Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta  
Univerzity Palackého v Olomouci,  
Tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc*

Nanočástice stříbra představují jeden z aplikačně nejvýznamnějších materiálů v oblasti nanotechnologií. Jejich příprava je nejčastěji založena na redukci roztoku stříbrné soli vhodným redukčním činidlem. Vazba kationtu  $\text{Ag}^+$  do komplexní sloučeniny poskytuje další proměnnou využitelnou v rámci redukčních metod při řízení velikosti a morfologie vznikajících nanočástic stříbra. Modifikovaná Tollensova reakce, kdy je komplexní kation  $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$  redukován redukujícím cukrem, představuje typický případ využití tvorby komplexní sloučeniny v oblasti přípravy nanočástic stříbra.<sup>2</sup> Možnosti využití dalších ligandů jako  $\text{SO}_3^{2-}$ ,  $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$  a  $\text{CN}^-$  při přípravě nanočástic stříbra s cílem řízení jejich velikosti se stalo hlavním cílem této práce. Vzhledem ke stabilitě vznikajících komplexních sloučenin se stříbrem bylo nutno použít silné redukční činidlo –  $\text{NaBH}_4$ , které jediné umožnilo redukovat i tak pevnou komplexní sloučeninu, jakou je  $[\text{Ag}(\text{CN})_2]$ . Uvedenou metodou se tak podařilo připravit nanočástice stříbra o velikosti 30 – 50 nm v závislosti na použitém ligandu. Pro ligand  $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$  byly získány částice o průměrné velikosti 30 nm, pro  $\text{SO}_3^{2-}$  45 nm a pro  $\text{CN}^-$  50 nm. Provedená studie tak prokázala závislost velikosti připravených nanočástic stříbra na stabilitě redukované komplexní sloučeniny. Výsledky ukazují na spojitost mezi stabilitou komplexní sloučeniny a velikostí vznikajících nanočástic stříbra, ovšem celý děj je zřejmě dále komplikován nábojem redukováného komplexního iontu.

*Práce byla finančně podpořena projekty MŠMT ČR č. MSM6198959218 a 1M6198959201.*

[1] Kvítek L., Pucek R., Panáček A., et al. The influence of complexing agent concentration on particle size in the process of SERS active silver colloid synthesis. *J. Mat. Chem.*, **15**, 1099-1105 (2005).

### 1Po22 THE ROLE OF POLYMER–WATER INTERACTIONS IN TEMPERATURE TRANSITIONS OF POLYETHERS

Adriana Šturcová, Jiří Dybal, Pavel Schmidt

*Institute of Macromolecular Chemistry Academy of  
Sciences of the Czech Republic, v.v.i., Heyrovského  
nám 2, Prague, Czech Republic*

Water solutions of three tri-block copolymers of poly(ethylene oxide) – poly(propylene oxide) – poly(ethylene oxide) with commercial name Pluronics have been studied by Raman spectroscopy, attenuated total reflectance Fourier transform infra-red (ATR FTIR) and near-infrared (NIR) spectroscopy and density functional theory (DFT).

The Pluronic macromolecules (PE6200, PE6400 and F68) associate into micelles. In the case of the main deformation bands of the water bound to the polymer chains, neither the wavenumber shifts with temperature nor its relative intensities display sudden changes that would correspond to the steep wavenumber shifts observed for the bending of the  $\text{CH}_3$  groups of the poly(propylene oxide) segment upon micellisation<sup>1</sup>. However, the hydroxyl stretching region was more informative – in Raman spectra, showed difference between individual Pluronics already at temperatures below the critical micelle temperature. Corresponding region in ATR FTIR spectra was interpreted in terms of water coordination types – their quantitative representation was found to be dependent on the polymer chain and temperature, which may reflect differences in the microstructure of micelles formed by the three different Pluronic copolymers.

[1] Schmidt, P.; Dybal, J. and Šturcová, A. *Vibrat. Spectrosc.* **2009**, in press, doi: 10.1016/j.vibspec.2008.12.003

### 1Po23 VALIDACE HPLC METODY STANOVENÍ METANEFRINŮ V PLAZMĚ

Alice Vránková, Tereza Škrámlíková, Jiří Widimský jr., Jan Škrha, Zdena Jůzová<sup>1</sup>

*<sup>1</sup>Laboratoř endokrinologie a metabolismu ÚKBLD  
a III. Interní kliniky, 1. lékařská fakulta UK Praha,  
Kateřinská 32, 128 08 Praha 2, Česká Republika*

Účelem studie byla validace metody stanovení metanefrinu (MN) a normetanefrinu (NMN) z plazmy pomocí HPLC s elektrochemickou detekcí (HPLC-ED).

Vzhledem k tomu, že významně zvýšené hladiny NMN a MN v plazmě ukazují na přítomnost nádoru chromafinních buněk feochromocytomu (FEO)<sup>1</sup>, bylo rovněž nutné posoudit schopnost metody správně zařadit pacienty (s FEO, bez FEO) a určit koncentrační hranici, nad níž se nacházejí pacienti s FEO.

Metoda stanovení metanefrinů z plazmy HPLC-ED byla zvalidována z důvodu využití pro stanovení v klinické praxi. Validace zahrnovala stanovení opakovatelnosti, správnosti a zároveň byla ověřena způsobilost metody kontrolou kalibrační přímky. Tím byla stanovena linearita a citlivost metody vyjádřená mezi detekce (LOD) a mezi stanovitelnosti (LOQ). Rovněž byla posouzena schopnost metody správně zařadit pacienty (s FEO, bez FEO) ověřením diagnostické senzitivity a specificity. Výsledky stanovení byly porovnány s jinou dostupnou metodou, která rovněž interpretuje výsledky vzhledem k přítomnosti či nepřítomnosti FEO. Srovnávaná metoda stanovuje volné catecholaminy v moči pomocí HPLC s fluorescenční detekcí (HPLC-FLD).

K určení koncentrační hranice, nad níž se nacházejí pacienti s FEO byly analyzovány tři skupiny dobrovolníků, zdraví pacienti s normotenzí, pacienti s hypertenzí a pacienti s FEO.

Variační koeficient opakovatelnosti (CV) nepřesáhl u žádného z analytů 6,9%, v případě měření reprodukovatelnosti 13%. Správnost (výťažnost) metody se v blízkosti koncentrační hranice pohybuje okolo 96%. Koeficient determinace 0,99 pro oba analyty ukazuje na vynikající linearitu v oblasti koncentrací od 0 až po více než dvacetinásobek koncentrační hranice. LOD byla pro NMN určena 150 pmol. l<sup>-1</sup>, pro MN 320 pmol. l<sup>-1</sup>, LOQ pro NMN 500 pmol. l<sup>-1</sup>, pro MN 1,1 nmol. l<sup>-1</sup>. Stanovením 42 pacientů jsme určili 100% senzitivitu i specificitu metody. V porovnání se stanovením volných katacholaminů z moči metodou HPLC-FLD, má stanovení metanefrinů v plazmě vyšší specificitu, protože všichni pacienti bez FEO byli metodou správně zařazeni jako negativní, na rozdíl od srovnávané metody. Koncentrační hranice mezi zdravými a pacienty s nádorem byla upřesněna zařazením skupiny hypertoniků do testování, protože mírně zvyšují hraniční koncentraci a tím se zabrání vzniku falešně pozitivních výsledků.

- [1] Eisenhofer G., Walther M. M., Huynh T. T., Li S. T., Bornstein S. R., Vortmeyer A., Mannelli M., Goldstein D. S., Linehan W. M., Lenders J. W. M., Pacák K.: *J. Clin. Endocrinol. Metab.* 86, 1999 (2001).

#### 1Po24

### FTIR SPEKTROMETRIA – METÓDA NA STANOVENIE STUPŇA SUBSTITÚCIE PEKTÍNŮVÝCH DERIVÁTŮV

Vlasta Sasinková, Anna Malovíková

*Chemický ústav, Centrum glykomiky, SAV, Dúbravská cesta 9, SK-845 38 Bratislava, Slovensko*

Pripravila sa séria metylesterifikovaných citrusových pektínov (pektáty a pektináty draselné) so stupňom esterifikácie DE 0 – 90 % [1], ako aj séria benzylesterifikovaných citrusových pektínov (pektáty

a pektináty sodné) s DE 0 – 70 % [2]. Zmerali sa FTIR spektrá pripravených esterov na spektrofotometri Nicolet 6700 v oblasti 4000 cm<sup>-1</sup> – 400 cm<sup>-1</sup>. Pre meranie spektier sa využila ATR technika (príslušenstvo Smart Orbit s diamantovým kryštálom).

V nameraných spektrách sa kvantifikovali vibrácie C=O skupín esterov v oblasti ~ 1740 cm<sup>-1</sup> a karboxylátových aniónov COO<sup>-</sup> v oblasti ~ 1600 cm<sup>-1</sup> resp. 1400 cm<sup>-1</sup>. Z pomeru vibračných pásov esterovej a karboxylátovej skupiny sa zhotovila kalibračná krivka pre metyl- resp. benzylestery pektínu ako závislosť tohto pomeru od stupňa esterifikácie pripravených derivátov stanoveného chemickou metódou [3].

Výsledky získané touto metódou môžu slúžiť na rýchle stanovenie stupňa substitúcie pektínových esterov, pričom významná je tiež skutočnosť, že na zmeranie spektier je potrebné malé množstvo vzorky v porovnaní s množstvom potrebným na stanovenie DE chemickou metódou.

- [1] Malovíková A., Kohn R.: *Collect. Czechoslov. Chem. Commun.* 47, 702-708 (1982).  
 [2] Pappas Ch.S., Malovíková A., Hromádková Z., Tarantilis P.A., Ebringerová A., Polissiou M.G.: *Carbohydr. Polym.* 56, 465-469 (2004).  
 [3] Tibenský V., Rosík J., Zitko V.: *Nahrung* 7, 321-325 (1963).

#### 1Po25

### DETERMINATION OF CRITICAL MICELLE CONCENTRATION IN HYALURONAN-SURFACTANT SYSTEM

Jitka Krouská<sup>1</sup>, Tereza Halasová<sup>1</sup>, Filip Mravec<sup>2</sup>, Miloslav Pekař<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Physical and Applied Chemistry, Purkyňova 118, 612 00 Brno, e-mail: xckrouska@fch.vutbr.cz*

<sup>2</sup>*CPN, spol. s r.o., 561 02 Dolní Dobrouč 401, e-mail: mravec@fch.vubr.cz*

This work focuses on the determination of critical micelle concentration (CMC) of nonionic surfactants in the presence of negatively charged biopolymer sodium hyalurate. The selected surfactants were saccharide derivatives: octyl glucopyranoside, dodecyl maltoside and sucrose monolaurate. All the samples were prepared in 0.15 mol·l<sup>-1</sup> NaCl solution to simulate the physiological environment. The micellization process was studied using two standard methods: surface tension measurement and fluorescence probe techniques. Surface tension was measured by a platinum ring method. Pyrene and Nile red were used as the fluorescence probes.

The results from tensiometry showed only slight dependency of CMC on added hyaluronan. This can be a result of weak interactions of surfactant hydrophobic tails with hyaluronan hydrophilic patches or surfactant

polar heads with hydroxyl or carboxyl groups on hyaluronan by H-bonds.

The fluorescence study showed that the surfactant aggregates formed on hyaluronan serve as the solubilizing domains for the non-polar species. Hence, this characteristic behaviour can be used in the field of study of targeted drug delivery systems.

*This work was supported by CPN, Ltd., Czech government – projects Nr. OC08004, MSM0021630501 and Cost Action D43.*

**1Po26**  
**SOLUBILITY OF LIGNITIC AND SOIL HUMIC ACID IN WATER AND IN SOLUTIONS OF DIFFERENT SALTS**

Eva Čechová, Martina Klučáková

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry  
 Institute of Physical and Applied Chemistry,  
 Purkyňova 118, 612 00, Brno, e-mail:  
 xcechova@fch.vutbr.cz*

In the presented study, we focus on the solubility and dissociation of humic acids (HAs) in water and in salts aqueous solution. HAs play very important role in environment, where their function and mobility depend on solubility therefore we would like to shed light on their behaviour in soils and natural water. In general, solubility of HAs is dependent on pH, ionic strength and nature of electrolyte ions.

Investigated HAs originated from both lignitic and soil sources and one of them was plasma pre-treated. Thus, the dissociation mechanism deduced in [1] was proved experimentally for HAs partial dissolution in water and in salt aqueous solutions which have different ionic strengths. The kinetics of the HAs dissociation was studied in the next step. All kinds of HAs were characterized by useful methods and proper solubility was studied by potentiometry, conductometry and UV-VIS spectroscopy.

Obtained experimental data were compared with previously suggested model assuming multi-step mechanism of humic acid interaction with water [1, 2]. The behaviour of all samples under this study corresponded to such a multi-step mechanism. It was confirmed that degree of HAs dissociation in aqueous solution decreases with their increasing contents as well as in the aqueous solutions of salts with increasing ionic strength.

[1] Klučáková M., Pekař M. Solubility and Dissociation of Lignitic Humic Acids in Water Suspensions. *Colloids and Surfaces, A: Physicochemical and Engineering Aspects* 2005, Vol. 252, No. 2-3, p. 157-164. ISSN 0927-7757.

[2] Klučáková, M. Pekař, M.: Behaviour of partially soluble humic acid in aqueous suspension. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and engineering aspect*, 2008, vol. 318, 2008, ISSN 0927-7757.

**1Po27**  
**STANOVENÍ 1-NITROPYRENU, 1-AMINOPYRENU A 1-HYDROXYPYRENU VYSOKOÚČINNOU KAPALINOVOU CHROMATOGRÁFIÍ S ELEKTROCHEMICKOU DETEKCIÍ**

Oksana Yosypchuk a Jiří Barek

*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta,  
 Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř  
 elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 43  
 Praha 2.*

Polycyklické aromatické uhlovodíky (PAH) a jejich hydroxy, nitro (NPAH) a aminoderiváty, z nichž řada jsou prokázané či podezřelé chemické karcinogeny, patří ke značně rozšířeným polutantům životního i pracovního prostředí. Vzhledem k mimořádné škodlivosti řady látek z této skupiny je třeba jejich monitorování v životním prostředí věnovat zvýšenou pozornost [1].

Ve vzorcích částic, které jsou emitovány naftovými motory, bylo určeno více než padesát NPAH, přičemž převládající sloučeninou je 1-nitropyren [2]. Do organismu vstupuje zpravidla dýchacími či trávicími cestami, může však být snadno a rychle absorbován i kůží. Jeho metabolity 1-aminopyren a 1-hydroxyopyren jsou rovněž známé svými karcinogenními účinky a byly nalezeny jak v moči laboratorních zvířat i lidí [3].

Všechny tři stanovované látky obsahují redukující se resp. oxidující se funkční skupiny, proto je možno k jejich stanovení použít moderní elektrochemické metody, jako je např. diferenční pulsní voltametrie. Pro tyto účely byla jako stacionární pracovní elektroda použita borem dopovaná diamantová filmová elektroda (BDDFE), která patří mezi nejnovější typy elektrod a odpovídá konceptu tzv. zelené analytické chemie.

Vzhledem k tomu, že v literatuře doposud nebyla nalezena zmínka o stanovení 1-nitropyrenu, 1-aminopyrenu ani 1-hydroxyopyrenu na BDDFE, byla v předpokládané studii věnována pozornost detekci těchto látek na základě jejich oxidace resp. redukce na jediné pracovní elektrodě, a to na BDDFE. Stanovované látky byly analyzovány každá zvlášť i ve směsi nejdříve vsádkovým způsobem pomocí DPV na BDDFE, pak i s předběžnou separací pomocí vysokoúčinné kapalinové chromatografie s elektrochemickou detekcí na BDDFE v uspořádání wall-jet a thin-layer.

*Tato práce byla finančně podporována Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy (projekt LC 06035 a MSM 0021620857 a RP 14/63).*

[1] Barek, J.; Bencko, V.; Cvačka, J.; Mejstřík, V.; Slámová, A.; Švagrová, I., Zima, J.: *Chem. Listy* 91, 871 (1997).

[2] Barek, J.; Bencko, V.; Cvačka, J.; Šuta, M.: *Chem. Listy* 92, 794 (1998).

[3] Kielhorn, J.; Wahnschaffe, U.; Mangelsdorf, I. : Environmental Health Criteria 229: Selected Nitro-Oxy Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. World Health Organization, Geneva 2003.

**1Po28****STANOVENÍ TRANS-RESVERATROLU POMOCÍ HPLC S ELEKTROCHEMICKOU DETEKCÍ**

Lenka Němcová<sup>1,\*</sup>, Jiří Barek<sup>2</sup>, Jiří Zima<sup>3</sup>,

*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie,*

*UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 43 Praha 2, Česká republika e-mail: <sup>1</sup>nemcova.len@seznam.cz, <sup>2</sup>barek@natur.cuni.cz, <sup>3</sup>zima@natur.cuni.cz*

Resveratrol (3,4',5-trihydroxystilben) je přírodní vyskytující se fytoalexin produkovaný některými rostlinami jako odpověď na stres, např. napadení patogeny, UV záření nebo mechanické poškození<sup>1</sup>. Resveratrol byl nalezen ve více než 72 rostlinných druzích, např. vinné hrozny, arašidy, brusinky, pohanka a řada druhů zeleniny. V řadě studií bylo prokázáno, že resveratrol má výrazné antioxidační vlastnosti a pohlcuje volné radikály. V rostlinném materiálu se obvykle vyskytuje směs obou isomerů (*trans*- a *cis*-), většinou převažuje *trans*-isomer<sup>2</sup>. Cílem této práce bylo vypracování nové metody stanovení *trans*-resveratrolu s využitím HPLC s amperometrickou detekcí na uhlíkové pastové elektrodě s kontrolou pomocí fotometrické detekce v UV/VIS oblasti (306 nm). Uhlíková pastová elektroda lze využít jako velice selektivní a citlivý elektrochemický senzor, který je dobře použitelný v anodické oblasti pro stanovení organických sloučenin<sup>3</sup>. Byly proměřeny hydrodynamické voltamogramy *trans*-resveratrolu v mobilních fázích o složení Brittonův-Robinsonův pufru (pH 3, 5 nebo 7) a acetonitril (1:1, v/v). Za optimálních podmínek detekce (pH 7 vodné složky mobilní fáze,  $E = +1,2$  V) byly proměřeny kalibrační závislosti v rozsahu koncentrací  $1 \times 10^{-4}$  až  $4 \times 10^{-8}$  mol l<sup>-1</sup>. Vypočtená mez stanovitelnosti *trans*-resveratrolu byla  $3,5 \times 10^{-8}$  mol l<sup>-1</sup> pro elektrochemickou detekci a  $3,2 \times 10^{-8}$  mol l<sup>-1</sup> pro spektrofotometrickou detekci.

*Tento výzkum byl finančně podporován Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy ČR (projekt LC06035, MSM 021620857 a RP 14/63).*

- [1] Šmidral J.; Filip V.; Melzoch K.; Hanzlíková I.; Buckiová D.; Křisa B.: *Chem. Listy* **95**, 602 (2001).  
 [2] Zhang H.; Xu L.; Zheng J.: *Talanta* **71**, 19 (2007).  
 [3] Svancara I., Vytras K., Barek J., Zima J.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* **31**, 311 (2001).

**1Po29****VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ 4-NITROFENOLU A 5-NITROBENZIMIDAZOLU NA RŮZNÝCH AMALGAMOVÝCH ELEKTRODÁCH**

Dana Deýlová<sup>1</sup>, Jiří Barek<sup>1</sup>, Bogdan Yosypchuk<sup>2</sup>

*<sup>1</sup>Karlova Univerzita v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Hlavova 8, 128 43, Praha 2, Česká republika<sup>2</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského akademie věd česká republika, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23, Praha 8*

Zdrojem nitrofenolů v životním prostředí jsou zplodiny automobilů, průmyslové odpadní vody a jejich používání jako pesticidů [1].

5-Nitrobenzimidazol (5-NBIA) je genotoxická látka patřící mezi nitrované heterocyklické sloučeniny, jejichž přítomnost může mít negativní dopad na zdravý vývoj organismů. Výskyt této láky lze očekávat v úzkém spojení s chemickými procesy probíhajícími při spalování fosilních paliv. 5-NBIA byla v minulosti užívána a polarograficky stanovovaná jako součást roztoku ustalovače pro barevné fotografie [2].

U 5-NBIA i 4-nitrofenolu (4-NF) je prokázána karcinogenita a mutagenita [3.,4.].

Ke stanovování obou látek bylo využito metod DC voltametrie (DCV) a diferenční pulzní voltametrie (DPV). Jako pracovní elektrody byly použity pevná leštěná stříbrná amalgamová elektroda (p-AgSAE), meniskem modifikovaná pevná leštěná stříbrná amalgamová elektroda (m-AgSAE) a na rtuťovém filmem modifikovaná pevná leštěná stříbrná amalgamová elektroda (MF-AgSAE) v prostředí Brittonova-Robinsonova pufru nebo pitné vody. Tyto elektrody jsou prakticky netoxické a odpovídají konceptu tzv. zelené analytické chemie.

Rtuťový film byl na p-AgSAE vylučován ze speciální nádoby s rtuťovým dnem naplněným chloridem rtuťnatým a byl vylučován po různé časové intervaly potřebné k dalšímu měření.

Před začátkem měření byla elektroda elektrochemicky aktivována v míchaném roztoku 0,2 mol/l KCl při potenciálu -2200 mV po dobu 300 s. Meze stanovitelnosti pro 4-NF a 5-NBIA se při stanovení na daných elektrodách pohybovaly v rozmezí  $1 \cdot 10^{-7}$  až  $1 \cdot 10^{-6}$  mol/l v Brittonově-Robinsonově pufru i pitné vodě.

*Tato práce byla finančně podporována Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy (projekt LC 06035 a MSM 0021620857 a RP 14/63)*

- [1] SRS, List of the Registered Plant Protection Products. 3, The state phytosanitary administration, Brno, Česká republika 2006.  
 [2] Canterford D. R.: *J. Photogr. Sci.* **26**, 65 (1978).  
 [3] Rosenkranz H. S., Karol M. H.: *Mutat. Res.* **431**, 81 (1999).

[4] ATSDR, Toxicological profile for nitrophenols, Agency for Toxic Substances and Disease Registry, Atlanta 1992.

**1Po30**  
**THERMAL STABILITY OF POLYPROPYLENE AND POLYPROPYLENE BLENDS WITH NANOFILLERS**

A. Chochulová, P. Alexy, P. Šimon, P. Lukáč\*

*Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic*

The effect of extrusion on the thermoxidative stability of polypropylene (PP) and PP composites containing two types of nanofillers, titanium dioxide (TiO<sub>2</sub>) and a modified montmorillonite clay Cloisite 10A, was investigated through measurement of the melt flow index (MFI) and the oxidative induction time (OIT). The MFI and OIT were also determined as a function of the number of passes through the extruder with the aim of finding a relationship between these parameters. The OIT was also used as a relative measure of the thermoxidative stability. In order to assess the reliability of the kinetic models, three isoconversional models based on various temperature functions were applied.

The values of OIT were observed to decrease with the addition of the nanofillers (more significantly for low content). The thermoxidative stability of composites decreases more significantly for the case of TiO<sub>2</sub> composite. The OIT was also found to decrease sharply for one and two passes through the extruder, and then became almost constant up five passes. The MFI was found to be higher for the PP composites with the value dependent on the amount of additive (i.e. effective surface area) rather than on the type of additive, and was observed to decrease linearly with the number of passes through the extruder for all the composites with similar drop in MFI for similar loadings of additive. A straightforward relationship between the OIT and MFI was not, however, identified. It was concluded that, although the MFI is directly related to the viscosity averaged molecular weight which is reduced systematically with each pass through the extruder, the mechanisms for oxidation are more complicated resulting in a complex relationship between MFI and OIT.

\*Current address: Vlčie hrdlo 1, SK-824 12 Bratislava, Slovak Republic

**1Po31**  
**MECHANISM OF THE OXIDATIVE DEGRADATION OF HEMATOXYLIN**

Jana Bulíčková<sup>1</sup>, Romana Sokolová<sup>1</sup>, Ilaria Degano<sup>2</sup>,  
 Magdaléna Hromadová<sup>1</sup>,  
 Lubomír Pospíšil<sup>1</sup>, Michal Valášek<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, v.v.i., Academy of Sciences of the Czech Republic,*

*Dolejškova 3, 18223 Prague 8, Czech Republic*

<sup>2</sup> *Department of Chemistry and Industrial Chemistry, University of Pisa,*

*Via Risorgimento 35, 56100 Pisa, Italy*

<sup>3</sup> *Institute of Organic Chemistry and Biochemistry,*

*Academy of Sciences of the Czech Republic,*

*Flemingovo n. 2, 16610 Prague 6, Czech Republic*

Hematoxylin belongs to a large group of naturally occurring flavonoid compounds. These intensively colored polyphenolic phytochemicals were used in the past as colorants in old tapestries [1,2]. This study concerns the analysis of degradation pathways and decomposition products of the original dyes by electrochemical means. Degradation products formed during the ageing process can be used as fingerprints for the determination of the original color.

Electrochemical behaviour of hematoxylin was studied in 0.1M KCl and phosphate buffers of pH 5-12. The mechanism of oxidation and the stability of intermediates as a function of pH were studied by cyclic voltammetry. The working electrodes were Pt and glassy carbon microelectrode, the gold ultramicroelectrode was used in the case of fast voltammetry. The exhaustive electrolysis at a constant anodic peak potential was performed in order to obtain the oxidation products of hematoxylin in buffered and nonbuffered conditions. The two electron transfer is preceded by deprotonation chemical reaction. The oxidative reaction mechanism was determined by electrochemical techniques combined with spectrophotometry, LC/DAD and GC-MS analysis. The electrochemical step is followed by subsequent chemical reactions, leading to hematein and other products. The mechanism of the formation of degradation products is proposed.

*This work was supported by GAČR (203/09/1607 and 203/08/1157) and Ministry of Education of the Czech Republic (COST D36 OC140).*

[1] H. Schweppe, *Handbuch der Naturfarbstoffe. Vorkommen, Verwendung, Nachweis, Landeberg/Lech*, 1992.

[2] E.S.B. Ferreira, A. Quye, H. McNab, A.N. Hulme, *Dyes in history and archaeology*, 18 (2002) 63.



## 1P032

**STUDY OF ADSORPTION AND ELECTROCHEMICAL PROPERTIES OF EXTENDED VIIOLOGENS AT THE MERCURY-SOLUTION INTERFACE**

Viliam Kolivoška<sup>1</sup>, Michal Valášek<sup>2</sup>, Lubomír Pospíšil<sup>1</sup>, Romana Sokolová<sup>1</sup>, Magdaléna Hromadová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i. Dolejškova 3, 18223 Prague 8, Czech Republic*

<sup>2</sup>*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i. Flemingovo nám. 2, 16610 Prague 6, Czech Republic*

Molecular wires are conducting molecules that show a repeated structure of basic units. They are fundamental building blocks of molecular electronic devices. We investigate the adsorption and electrochemical properties of homologous series of fully conjugated molecular wires based on repeated extended viologen units.

The adsorption properties of the wires were studied on a static mercury drop electrode by the aid of phase sensitive AC voltammetry. In it, a small harmonic potential perturbation enables one to follow the changes in the differential capacity value of the mercury/solution interface. The constant capacity value (in a certain electrode potential range) indicates the formation of a compact layer adsorbed on the interface. We show that for aqueous solutions of all molecular wires the differential capacity reaches a constant value  $2.3 \mu\text{F}\cdot\text{cm}^{-2}$  independent of temperature, bulk concentration and chain length of the wire.

The kinetics of adsorption may be investigated by means of time resolved measurements. We prove that the adsorption is controlled by the diffusion in a wide concentration range. We employ Koryta equation to determine the surface concentration of the wires adsorbed at the interface and the area occupied by single molecules. Based on the space-filling model and constant differential capacity value we suggest that the molecules lie parallel to the electrode surface.

*A Grant Agency of the Academy of Sciences of the Czech Republic (IAA400400802), Grant Agency of the Czech Republic (GA CR 203/08/1157 and 203/09/1607) and Ministry of Education (LC510, COST OC140) greatly acknowledged for the financial support.*

- [1] R. De Levie, L. Pospíšil, *J. Electroanal. Chem.* **1969**, 22, 277-290.  
 [2] L. Pospíšil, J. Fiedler, M. Hromadová, M. Gál, M. Valášek, J. Pecka, J. Michl, *J. Electrochem. Soc.*, 2006, **153**, E179.  
 [3] L. Pospíšil, M. Hromadová, J. Fiedler, M. Gál, M. Valášek, J. Pecka, J. Michl, *ESC Transactions*, 2006, **2**, 35

## 1P033

**REAKTIVITA ANION RADIKÁLU BIFENOXU V PROSTŘEDÍ HOSTITELSKÝCH MOLEKUL**

Štěpánka Lachmanová<sup>1</sup>, Magdaléna Hromadová<sup>1</sup>, Romana Sokolová<sup>1</sup>, Lubomír Pospíšil<sup>1</sup>, Stefania Giannarelli<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AVČR, v.v.i., Dolejškova 3, 18223 Praha, Česká republika*

<sup>2</sup>*Department of Chemistry and Industrial Chemistry, University of Pisa, Via Risorgimento 35, 56100 Pisa, Itálie*

Pesticid bifenox (metyl-5-(2,4-dichlorfenoxy)-2-nitrobenzoát) se užívá v zemědělství pod názvem Modown 4F pro likvidaci plevelu ve výsevech obilovin a slunečnice. Hlavním procesem vedoucím až k destrukci buněk nežádoucích rostlin je inhibice fotosyntetického procesu volnými radikály bifenoxu. Naše práce je zaměřena na elektrochemickou přípravu anion radikálu bifenoxu a studium jeho reakcí v aprotickém rozpouštědle bez a za přítomnosti hostitelských molekul cyklodextrinů (CD). Pomocí UV-Vis spektroskopie bylo zjištěno, že ze 3 studovaných cyklodextrinů vytváří komplex s bifenoxem  $\beta\text{CD}$  a  $\gamma\text{CD}$ , přičemž  $\beta\text{CD}$  s vyšší konstantou stability. Ke studiu stability anion radikálů byly použity metody preparativní elektrolýzy, DC polarografie, cyklické voltametrie, EPR, GCMS a LCMS. Výsledky prokázaly, že tvorba komplexu s hostitelskou molekulou cyklodextrinu zabraňuje štěpení anion radikálu bifenoxu na éterické vazbě. Snížení výtěžku 2,4-dichlorfenolu, který je jedním z hlavních produktů elektrolýzy bifenoxu, koreluje se zvyšující se konstantou stability komplexu. Hydroxylové skupiny cyklodextrinů dále poskytují protony nezbytné pro následnou redukci nitro skupiny až na hydroxylamín, přičemž dimerizace anion radikálů generovaných v aprotickém rozpouštědle je za přítomnosti cyklodextrinů potlačena. Hodnota formálního potenciálu jednoelektronové redukce bifenoxu je  $-1.45\text{V}$  oproti ferrocenu. Elektrolýza bifenoxu při potenciálu  $-1.6\text{V}$  probíhá za spotřeby 1.3 elektronu, přičemž při použití  $\beta\text{CD}$  se spotřebují celkem 4 elektrony.

*Tato práce vznikla za finanční podpory grantových agentur GA AVČR (IAA400400802), GAČR (203/08/1157) a Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR (COST D36 OC140).*

- [1] Hromadová M., Mořkovská P., Pospíšil L., Giannarelli S.: *J. Electroanal. Chem.* **582**, 156 (2005).  
 [2] Mořkovská P., Hromadová M., Pospíšil L., Giannarelli S.: *Langmuir* **22**, 1896 (2006).  
 [3] Hromadová M., Pospíšil L., Sokolová R., Fanelli N.: *Electrochim. Acta* **54**, (2009) 4991.

**1Po34****ŠTÚDIUM DISTRIBÚCIE POTENCIÁLNYCH  
LIEČIV V IZOTROPNÝCH A  
ANIZOTROPNÝCH ROZDEĽOVACÍCH  
SÚSTAVÁCH**

Anna Lišková, Zuzana Slivová, Iva Kapustíková, Jozef Csöllei

*Ústav chemických liečiv, Farmaceutická fakulta VFU  
Brno, Palackého 1/3, 612 42 Brno,  
Česká republika*

Základnou požiadavkou pri posudzovaní  $\log P$ , ktorým sa charakterizuje lipofilita liečiv je voľba vhodnej rozdeľovacej sústavy. Za referenčnú sústavu, ktorá najlepšie vystihuje systém vodnej a organickej biofázy, zvolil Hansch systém oktanol/voda [1].  $\log P_{\text{okt}}$  dobre koreluje s rozdeľovaním a väzbou liečiva na proteíny v periférnom krvnom riečisku. Pri rozdeľovaní liečiva v nepolárnych častiach mozgu však platia iné princípy [2], je teda vhodné zvoliť inú rozdeľovaciu sústavu. V poslednom čase sa ako fyziologicky relevantnejšiemu modelu biologickej membrány venuje pozornosť lipozómom. Na rozdiel od organických rozpúšťadiel predstavujú vysoko usporiadaný systém. Kým vo fáze tekutého kryštálu sa vyznačujú rigiditou molekúl, v kvapalnej fáze sú ich molekuly pohyblivé. Okrem interakcií hydrofóbného charakteru, disperzných síl a vodíkových väzieb, je v prípade lipozómov možné pozorovať aj elektrostatické interakcie s liečivom. Táto skutočnosť predstavuje zásadný rozdiel medzi izotropným a anizotropným prostredím [3].

Cieľom predloženej práce bolo porovnanie charakteru distribúcie potenciálnych nootropík medzi vodnou a nepolárnou fázou v izotropných a anizotropných rozdeľovacích systémoch. Rozdeľovacie rovnováhy štyroch študovaných látok boli sledované v sústavách oktanol/tlmivý roztok, chloroform/tlmivý roztok, cyklohexán/tlmivý roztok, etylacetát/tlmivý roztok a v lipozómových systémoch DPPC/ tlmivý roztok a DOPC/ tlmivý roztok.

Lipozómy boli pripravené z dipalmytoyl- a diolelyfosfatidylcholínu metódou hydratácie lipidového filmu. Unilamelárne vezikuly definovanej veľkosti boli získané pasážovaním suspenzie multilamelárnych lipozómov cez polykarbonátové membrány. V izotropných aj anizotropných systémoch boli rozdeľovacie koeficienty stanovené metódou vytrepávania, pričom koncentrácia látok vo vodnej fáze bola určená spektrofotometricky.

Príspevok zahŕňa vyhodnotenie korelácií medzi  $\log P$  v jednotlivých sústavách a vyjadrenie vzťahov medzi logaritmi rozdeľovacích koeficientov pomocou Collanderovej rovnice. Na základe vypočítanej zmeny Gibbsovej energie pri rozdelení látky medzi dve fázy sú diskutované možné mechanizmy distribúcie. Zo získaných výsledkov je predikovaná schopnosť látok prechádzať do mozgu.

*Táto práca vznikla za podpory VZ MŠMT ČR MSM 6215712403.*

- [1] Hansch, C., Fujita, T.: J. Amer. Chem. Soc., 86, s. 1616, (1964)
- [2] Leahy, D. E., Tailor, P. J., Watt, A. R.: Quant. Struct. Act. Relat. 8, s. 17, (1989).
- [3] Plemper van Balen, G., Martinet, C., Martinet, M., Caron, G., Bouchard, G., Reist, M., Carrupt, P. A., Fruttero, R., Gasco, A., Testa, B.: Med. Res. Rev., 24, s. 303, (2004)

**1Po35****BIOANALYTICAL CHEMISTRY OF NEW  
BIOANALYTES USING NUCLEIC ACID  
BIOSENSORS**

Ján Labuda

*Institute of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical  
and Food Technology,  
Slovak University of Technology in Bratislava, 812 37  
Bratislava, Slovakia  
E-mail: jan.labuda@stuba.sk*

Besides conventional bioanalytes, nucleic acids and proteins belong today to the most intensively studied molecules. They influence strongly both methodology of analytical chemistry and methods of chemical analysis. To achieve necessary analytical selectivity, separation techniques such as capillary and gel electrophoresis and/or selective devices such as biosensors are widely used. A significant progress was in the development and application of biosensors based on nucleic acids. Due to simple construction, use and low cost, electrochemical biosensors belong to the most popular.

We report here on our contribution to this topic in the project entitled "Electrochemical nucleic acids-based biosensors: terms and methodology" which was solved within the Analytical Chemistry Division of the IUPAC in 2007 to 2009 as well as in our scientific research projects.

*The work was supported by the IUPAC (project No. 2006-026-1-500) and the Grant Agency VEGA (Project No. 1/0852/08) of the Ministry of Education of Slovakia.*

1P036

**NANOKOMPOZITNÉ ÍLOVÉ MATERIÁLY S FLUORESCENČNÝMI VLASTNOSŤAMI NA BÁZE INTERKALOVANÉHO KAOLINITU**Tomáš Zacher<sup>1</sup>, Marián Janek<sup>1,2</sup><sup>1</sup>Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, SK – 842 15 Bratislava, Slovenská Republika, zacher@fns.uniba.sk<sup>2</sup>Technologický inštitút, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, SK – 845 13 Bratislava, Slovenská Republika, marian.janek@savba.sk

Cieľom tejto práce bola príprava nových funkcionalizovaných nanokompozitov – tzv. „confined“ systémov s fluorescenčnými vlastnosťami na báze interkalovaného kaolinitu. Na funkcionalizáciu boli použité fluorescenčné farbivá kumarínovej rady. Nové organicko – anorganické nanohybridné materiály boli získané interkaláciou kumarínu 522 a kumarínu 4 do medzivrstvia ílového minerálu kaolinitu. Interkalačná procedúra zahŕňa použitie prekursora - interkalátu „kaolinit – DMSO (dimetylsulfoxid)“. Röntgenová difrakčná analýza (XRD) a infračervená spektroskopia s Fourierovou transformáciou (FTIR) potvrdili úplnú výmenu molekúl DMSO molekulami kumarínu 522 a kumarínu 4 počas interkalačného procesu. Morfológia častíc kaolinitu bola pozorovaná rastrovacím elektrónovým mikroskopom (SEM). Interkalácia kaolinitu molekulami DMSO mala za následok oslabenie vodíkových väzieb medzi susednými vrstvami, pričom došlo k vodíkovej väzbe medzi kyslíkovými atómami molekúl DMSO s vnútornými OH skupinami na povrchu kaolinitu.

Z porovnania IČ spektier jednotlivých interkalátov vidno, že v dôsledku „host – guest“ a „guest – displacement“ reakcií došlo v kaolinite k zmene intenzít a polôh AlAlOH stretching vibračných pásov najmä v oblasti 3700 - 3600 cm<sup>-1</sup>, čo tiež indikuje interakciu kumarínu 522 a kumarínu 4 s povrchovými OH skupinami kaolinitu. Detekcia absorbných pásov síce potvrdzuje prítomnosť organických molekúl na povrchu anorganickej tuhej fázy, avšak jej prítomnosť v medzivrství jednoznačne potvrdzujú len röntgenové difrakčné záznamy z ktorých vyplýva, že došlo k zmene pozície prvého bazálneho reflexu kaolinitu na základe interkalácie s DMSO a následne s kumarínom 522 a kumarínom 4. Vzdialenosť bazálnych rovín „štartovacieho“ kaolinitu vzrástla interkaláciou DMSO z 0,72 nm na 1,12 nm, čím je jednoznačne potvrdený vstup molekúl DMSO do medzivrstvia. Rovnako sa potvrdila interkalovateľnosť kumarínu 522 a kumarínu 4, pričom hodnota bazálnej vzdialenosti 0,84 a 0,77 nm indikuje pravdepodobné planárne usporiadanie molekúl kumarínu 522 a kumarínu 4 v medzivrství kaolinitu.

Táto práca bola finančne podporená grantovou agentúrou VEGA 1/4457/07, APVV No. 0491-07 a grantom UK /144/2009.

- [1] Janek M., Emmerich K., Heissler S., and Nüesch R., *Chem. Mater.*, 2007, 19, 684.  
 [2] Tunney J. J. and Detellier C., *Chem. Mater.*, 1996, 8, 927.  
 [3] Gardolinski J. E., Peralta – Zamora P. and Wypych F., *J. Colloid and interface science*, 211, 37

1P037

**FLUORESCENCIA A MORFOLÓGIA TUHÝCH FILMOV NA BÁZE OLIGOTIOFÉNOV**Ján Šepelák<sup>1</sup>, Dušan Velič<sup>1</sup>, Dušan Lorenc<sup>2,3</sup>, Ignác Bugár<sup>2</sup><sup>1</sup>Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave<sup>2</sup>Medzinárodné Laserové centrum v Bratislave<sup>3</sup>Photonics Institute, TU Vienna, Gusshausstrasse 27/387, 1040 Wien, Austria

Hlavný záujem o štúdium polovodičov ako sú oligo- a poly- tiofény je v ich potenciálnom využití v elektronických zariadeniach. Predurčuje ich dobrá chemická stabilita a vysoká elektrická vodivosť v dopovanom stave. Cieľom výskumu bolo dosiahnutie presne definovanej organizovanosti polymérnych nanoštruktúr na pevných povrchoch a tým aj dosiahnutie vylepšenia vlastností.

Práca sa zaoberala štúdiom a charakterizáciou kvapalných a tuhých vzoriek oligotioféno, pomocou fluorescenčnej spektroskopie, absorpčnej spektroskopie, atómovej silovej mikroskopie a časovo rozlíšenej fluorescence. Študoval sa vplyv koncentrácie a vplyv hrúbky vrstvy na excitačné a emisné spektrá, tiež správanie sa oligotioféno v rôznych rozpúšťadlách a topograficke vlastnosti povrchu v tuhých látkach. Tuhé vzorky boli pripravené kvapnutím a metódou spin-coating, pričom boli charakterizované fluorescenčnými maximami a spektrálnymi polšírkami. Zisťoval sa aj relaxačný čas fluorescence v závislosti od vlnových dĺžok a hrúbky vrstvy, pričom bolo zaujímavé pozorovať aj mieru degradácie vzorky. Emisné maximá mali so zvyšujúcou sa hrúbkou vrstvy oligotiofénu, tendenciu posúvať sa k vyšším vlnovým dĺžkam, nastal mierny batochrómny posun. Rozdiel medzi emisnými maximami  $\lambda_{MAX}$  vzoriek kvapnutých a vzoriek pripravených metódou spin-coating bol približne 20 nm a intenzita nelineárne rástla, z dôvodu tvorby filmu. Pomocou meraní atomovou silovou mikroskopiou, sa porovnávali vzorky pripravené kvapnutím a metódou spin-coating, pri rôznych priestorových rozlíšeniach, kde hlavným parametrom bola priemerná drsnosť povrchu.

Podakovanie patrí nasledujúcim agentúram za podporu vo forme grantov APVT-20-029804 a APVV-0491-07.

- [1] Lakowicz, R.J., *Principles of fluorescence spectroscopy*, New York: Kluwer Academic/ Plenum Publishers, 1999.

[2] Čík G., Végh Z., Šeršeň F., Krištín J., Lakatoš B., Fejdi P., Synth. Met. 149 (2005) 31-38

### 1Po38

#### FLUORESCENCIA KUMARÍNU V PROSTREDÍ HYDRATOVANÝCH SOLÍ NaCl A LiCl

Marcel Lofaj<sup>1</sup>, Dušan Velič<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie

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

Zaoberali sme sa skúmaním kumarínu C<sub>14</sub>H<sub>12</sub>F<sub>3</sub>NO<sub>2</sub> (C522, c=1.10<sup>-5</sup> mol.dm<sup>-3</sup>) a kumarínom C<sub>16</sub>H<sub>14</sub>F<sub>3</sub>NO<sub>2</sub> (C153, c=1.10<sup>-5</sup> mol.dm<sup>-3</sup>) rozpustených v polárnom rozpúšťadle (H<sub>2</sub>O). Podstatou merania excitačných a emisných spektier, bolo objasnenie vplyvu elektrolytov NaCl a LiCl na dané kumaríny. Solvatácia voľných iónov vo vodnom roztoku je hydratácia a okolo hydratovaných iónov dochádza k vzniku hydratačného obalu. Teda ide o elektrostatické pôsobenie dipólov na fluorofóry, ktoré sú priestorovo usporiadané vo vodnom roztoku. Excitačné a emisné spektrá boli merané pre kumarín + soli v koncentračnej škále od 1 mol.dm<sup>-3</sup> až po 1.10<sup>-9</sup> mol.dm<sup>-3</sup> so zameraním na C153. Fluorescenčné intenzity kumarínu C153 a maximá fluorescenčných vlnových dĺžok sa v daných koncentráciách NaCl menili od 473 559 cps do 576 135 cps a od 551 nm do 554 nm, respektíve. Fluorescenčné intenzity kumarínu C153 a maximá fluorescenčných vlnových dĺžok sa v daných koncentráciách LiCl menili od 574 269 cps do 372 957 cps a od 561 nm do 566 nm. Vyhodnotili sa aj Stokesove posuny pre C153 s hodnotu 5562,06 cm<sup>-1</sup> vo vode, ktoré sa v daných koncentráciách menili od 5161,20 cm<sup>-1</sup> do 6459,26 cm<sup>-1</sup> v NaCl a od 5373,63 cm<sup>-1</sup> do 6213,15 cm<sup>-1</sup> v LiCl. A Stokesove posuny pre C522 s hodnotu 5404,8 cm<sup>-1</sup> vo vode, ktoré sa v daných koncentráciách menili od 5309,48 cm<sup>-1</sup> do 5628,52 cm<sup>-1</sup> v NaCl a od 4948,28 cm<sup>-1</sup> do 5069,36 cm<sup>-1</sup> v LiCl.

Podakovanie patrí nasledujúcim agentúram za podporu vo forme grantov APVT-20-029804 a APVV-0491-07.

- [1] J. K. Basu, M. Shannigrahi, S. Bagchi, Electronic spectroscopic study of complexation of a ketocyanine dye in the ground and excited state with lithium and magnesium ions, *Chemical Physics Letters, Volume 441, Issues 4-6, 25 June 2007, Pages 336-341*
- [2] M. Kumbhakar, T. Mukherjee, H. Pal, Effect of added electrolytes, NaCl and LiCl, on the palisade layer water structure of Triton X-100 micelle: A fluorescence anisotropy study, *Chemical Physics Letters, Volume 413, Issues 1-3, 15 September 2005, Pages 142-146*
- [3] M. Zitnan, V. Szocs, M. Janek, I. Bugar, J. Bdzych, T. Palszegi, G. Link and D. Velič,

Fluorescence Dynamics of Coumarin C522 on Reduced-Charge Montmorillonite in Aqueous Dispersion, *Langmuir*, 2009, 25 (12), pp 6800–6807, Publication Date (Web): May 14, 2009

### 1Po39

#### ELEKTROFORETICKÝ ČIP SO SPÁJANÝMI SEPARAČNÝMI KANÁLIKMI A ZVÝŠENOU DÁVKOVACOU KAPACITOU V STOPOVEJ ANALÝZE PITNÝCH VÔD

Michal Horčičiak<sup>1</sup>, Marián Masár<sup>1</sup>, Dušan Kaniansky<sup>1</sup>, Peter Bel<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra analytickej chémie, Mlynská dolina CH-2, 842 15 Bratislava

<sup>2</sup>Israel Institute for Biological Research, 74100 Ness Ziona, Israel

Michalhorciciak@gmail.com

Cieľom práce bolo preskúmať možnosti využitia elektroforetického čipu so systémom spájania separačných kanálikov (CC) a zvýšenou dávkovacou kapacitou v stopovej analýze kontaminantov v pitných vodách. Objem dávkovacieho kanáliku (9,9 μl) bol približne rovnaký ako objem separačných kanálikov na CC čipe (9,3 μl). Ako modelový analyt bol použitý glyfozát (pesticíd), ktorého maximálna povolená koncentrácia v pitných vodách podľa US EPA je 700 μg/l. Na CC čip bola implementovaná zónová elektroforéza (ZE) s izotachoforetickým (ITP) zakoncentrovaním vzorky a ITP-ZE separácie boli monitorované vodivostnými detektormi. Použitím CC čipu so zvýšenou dávkovacou kapacitou nedošlo k poklesu separačnej účinnosti ani ku strate rozlíšenia glyfozátu a jeho migračná pozícia zostala relatívne čistá v ZE stupni ITP-ZE kombinácie.

Koncentračný limit detekcie pre objem dávkovanej vzorky 9,9 μl bol 2,7 μg/l. ITP-ZE analýzy reálnych vzoriek poskytli veľmi priaznivé krátkodobé a dlhodobé opakovateľnosti migračných (RSD migračného času boli cca. 1 %) a kvantitatívnych parametrov (RSD plochy píku boli cca. 3 %) pre glyfozát. Výťažnosti glyfozátu v pitných vodách sa pohybovali v intervale 99-119 %. CC čip so zvýšenou dávkovacou kapacitou umožnil stanoviť cca. 100-násobne nižšie koncentrácie glyfozátu v pitných vodách bez ich predúpravy ako požaduje US EPA.

**Kľúčové slová:** Glyfozát, Pitná voda, Čipová elektroforéza, On-line izotachoforéza –zónová elektroforéza, Vodivostná detekcia

- [1] U.S. Environmental Protection Agency, A Review of Contaminant Occurrence in Public Water Systems, EPA Report No. 816-R-99-006, Office of Water, 1999

**1Po40****FLUORESCENČNÁ SPEKTROSKOPIA SYSTÉMU KUMARÍN/ CYKLODEXTRÍN/ MICELA**

E. Jáné<sup>1</sup>, M. Žitňan<sup>1</sup>, J. Šepelák<sup>1</sup>, I. Bugár<sup>2</sup>, O. Grančičová<sup>1</sup>, D. Lorenc<sup>2,3</sup>, D. Velič<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Prírodovedecká fakulta UK, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovensko

<sup>2</sup>Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovensko

<sup>3</sup>Photonics Institute, TU Vienna, Gusshausstrasse 27/387, 1040 Wien, Austria

Cieľom experimentu bolo skúmať solvatačnú dynamiku systému kumarín C522/  $\beta$ -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 hydrofóbnych povrchov. Reverzné micely navyše predstavujú modely zložitých biologických membrán. Z výsledkov vyplýva, že časť C522 prenikla do n-heptánu, o čom svedčí emisné maximum pri 437 nm. C522 však interaguje aj s vodou o čom svedčí emisný peak pri 520 nm. Emisné maximum C522 vo vode je pri 536 nm. So znižovaním miciel sa zväčšuje intenzita peaku pri 520 nm v porovnaní s intenzitou pri 437 nm, čo je následok interakcie vody s C522. V najmenších micelách sa prejaví aj efekt  $\beta$ -cyklodextrínu, ktorý mierne zmenší Stokesov posun. Tento pokles môže byť spôsobený tým, že voda je v interakcii s hydrofilným povrchom  $\beta$ -cyklodextrínu a polárnymi hlavicami AOT. Takže na C522 viac pôsobí prostredie AOT a menej voda v porovnaní so systémom bez  $\beta$ -cyklodextrínu. Výsledkom je C522 v systéme C522/  $\beta$ -cyklodextrín/ micela sa pravdepodobne umiestnil medzi nepolárne reťazce AOT. Časovo rozlíšené spektrá boli merané pre micely w=10 a w=40 a ich fluorescenčná relaxácia bola podobná s hodnotou približne 33 ps.

Podakovanie patrí nasledujúcim agentúram za podporu vo forme grantov APVT-20-029804 a APVV-0491-07.

**1Po41****GENERAL APPROACH TO 2D PHOTON-ECHO SIGNAL CALCULATIONS**

Vojtech Szöcs<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina CH2 842 15, Bratislava, Slovakia, szocs@fns.uniba.sk

Two-dimensional photon-echo is extensively used in probing ultrafast dynamics in solid-state systems and bio-physical complexes [1]. It can resolve coherent dynamics and incoherent energy dissipation. Energy

transfer in molecular complexes can be detected, too. The peak-structure of the 2D spectrograms may reveal the relative orientation of local electronic transition dipoles, i.e. provides information on molecular orientation [2,3]. Theoretical methods to approach general systems are mostly based on Feynman diagrammatic techniques describing disjunct electronic models. In systems with inter-site interaction the laser light interacts with local molecules but the subsequent dynamics runs through coupled (inter-site) electronic states. Our study is a continuation of our preceding theoretical approach [2] - description of distinct electronic states in the frame of RWA. A new formalism is presented which describes any kind of short-pulse experiment (physical delta-pulses). Using it we obtain a general phase-rephasing three-pulse 2D photon echo signal in heterodyne-detected regime. Formally, our results coincide with general approach [1] but extends it with two-excitonic term, which is, e.g. in energy-transfer systems, of the same importance as the one-excitonic contributions. The obtained scheme is applied to study of the Frenkel and charge-transfer exciton contributions to the heterodyne-detected electronic 2D photon-echo signal of coupled PTCDA dimers.

[1] M. Cho M., Chem.Rev. **108**, 1331 (2008).

[2] V. Szöcs et al, J.Chem. Phys. **124**, 124511 (2006).

[3] J. Seibt, K. Renziehausen, D.V. Voronine, V. Engel, J.Chem. Phys. **130**, 134318 (2009).

**1Po42****FLUORESCENCIA KUMARÍNU V IÓNOVEJ KVAPALINE**

Z. Formánková<sup>1</sup>, E. Jáné<sup>1</sup>, M. Žitňan<sup>1</sup>, Š. Toma<sup>1</sup>, D. Velič<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Prírodovedecká fakulta UK, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovensko

<sup>2</sup>Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovensko

Fluorescencia je spektrálny jav, v ktorom sú molekuly excitované absorpciou elektromagnetického žiarenia, následne relaxujú do základného stavu, čoho následkom je uvoľnenie energie vo forme fotónov. Solvatácia je obalenie častíc rozpustenej látky molekulami rozpúšťadla, kde miera solvatácie závisí od charakteru rozpúšťadla a rozpustenej látky. Cieľom experimentu bolo skúmať vplyv rôzneho prostredia na solvatáciu prostredníctvom fluorescencie kumarínu C522 v rôznych prostrediach a to v etanole a iónovej kvapaline EMIM. Hodnota emisného maxima pre C522 v etanole je 515 nm, pričom hodnota excitačného maxima zodpovedá 399 nm. Taktiež sa potvrdilo, že vlnová dĺžka emisného maxima sa nemení s narastajúcou koncentráciou. Stokesov posun má hodnotu 5645 cm<sup>-1</sup>. Meraním fluorescencie iónovej kvapaliny sme zistili, že hodnota excitačného maxima je 340 nm a pri emisnom maxime 480 nm je hodnota

intenzity 6000 cps. Z toho vyplýva, že iónová kvapalina má fluorescenčné pozadie v rozsahu od 440 do 540 nm. Kumarín C522 v iónovej kvapaline [EMIM][SO<sub>4</sub>Et] + voda (1:9) má hodnotu vlnovej dĺžky maxima 528 nm, ktorej zodpovedá intenzita 440 000 cps a v pomere voda (1:1) má pri vlnovej dĺžke maxima 529 nm hodnotu intenzity 500 000 cps.

*Pod'akovanie patri nasledujúcim agentúram za podporu vo forme grantov APVT-20-029804 a APVV-0491-07.*

### 1Po43 BEHAVIOUR OF FULLERENES AT EXTREME CONDITIONS

Martina Toufarová<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Physics, AS CR, Na Slovance 2, 182 21 Prague 8, Czech Republic*

<sup>2</sup>*Department of Nuclear Chemistry, FNSPI, Czech Technical University in Prague, Břehová 7, 115 19 Praha 1, Czech Republic*

Fullerenes can be considered as the chemically most interesting species among elemental carbon allotropes. There are following sources of motivation for studying their stability under extreme conditions: (a) solving the problem [1] how fullerene cages can be effectively liberated from a geological and/or meteoritic matter avoiding their substantial decomposition, (b) estimating probability of their survival in severe geological and interstellar environments, (c) possible applications of fullerenes as lithographic resists and/or surface capping material of short-wavelength optics, and (d) controlled transformation of fullerenes to produce tailored carbonaceous materials.

In this contribution, both solvent systems and experimental conditions are described that allow to extract C<sub>60</sub> from various rocks at a low degree of its oxidative degradation. Contrary to that, solvents enhancing photo-oxygenation of C<sub>60</sub> to C<sub>60</sub>O and C<sub>60</sub>O<sub>2</sub> are investigated to synthesize large amounts of the fullerene-oxygen adducts. Response of C<sub>60</sub> thin films exposed to intense soft X-ray laser radiation is studied in our group with femtosecond, picosecond, and nanosecond pulses. Observed modification of fullerene solids is compared to the behaviour of amorphous carbon [2,3] irradiated under the same conditions.

*This work was partially funded by the Czech Ministry of Education from the National Research Centers program (Projects LC510 and LC528) and program INGO (Grant LA08024), by the Czech Science Foundation (Grant 205/07/0772), and by Academy of Sciences of the Czech Republic (Grants Z10100523, IAA400100701, and KAN300100702).*

[1] J. Jehlička et al.: Low extraction recovery of fullerene from carbonaceous geological materials spiked with C<sub>60</sub>, *Carbon* **43**, 1909 (2005)

[2] S. P. Hau-Riege et al.: Damage threshold of inorganic solids under free-electron-laser irradiation at 32.5 nm wavelength, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 173128 (2007)

[3] L. Juha et al.: Radiation damage to amorphous carbon thin films irradiated by multiple 46.9 nm laser shots below the single-shot damage threshold, *J. Appl. Phys.* **105**, 093117 (2009)

### 1Po44 FEMTOSEKUNDOVÁ ČASOVO ROZLIŠENÁ ABSORPČNÁ SPEKTROSKOPIA STRIEBORNÝCH NANOČASTÍČ

A. Gaál<sup>a</sup>, I. Bugár<sup>a,b</sup>, I. Capek<sup>c</sup>, L. Fialová<sup>c</sup>, V. Szöcs<sup>d</sup>, T. Pálszegi<sup>e</sup>, A. Šatka<sup>b</sup>, M. Michalka<sup>b</sup>, F. Uherek<sup>b</sup>

*a) Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava, Slovensko; gaal@ilc.sk,*

*b) Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava, Slovakia*

*c) Ústav polymérov, Slovenská Akadémia Vied, Bratislava, Slovakia*

*d) Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Bratislava, Slovakia*

*e) Technologický inštitút, Slovenská Akadémia Vied, Bratislava, Slovakia*

Strieborné nanočastice majú charakteristické fyzikálne vlastnosti, ktoré sú rozmerovo závislé. Táto vlastnosť ich predurčuje na mnohé fotonické aplikácie, ako napríklad preladiteľné fluorescenčné farbivá, povrchom zosilnený Ramanovský rozptyl (SERS), antény na sfokosovanie svetelnej energie. Táto práca sa zaoberá optickými vlastnosťami koloidných roztokov strieborných nanočastíc s priemerom v rozsahu 8 – 100 nm. Pomocou femtosekundovej absorpčnej pump-probe spektroskopie sa vyšetřovala dynamika elektrónov okolo Fermiho hladiny. Pomocou širokospektrálneho sondovania indukovanej absorpcie bol študovaný pás indukovanej absorpcie. Redistribúcia energie elektrónov sa uskutočňuje mechanizmom elektrón-elektrónového a elektrón-fonónového rozptylu s dobou trvania niekoľko pikosekúnd. Bola študovaná závislosť relaxačnej dynamiky od veľkosti nanočastice a excitačnej intenzity. Distribúcia teploty elektrónov je jednotná v celej nanočastici, podľa predpokladu „mean-field“ teórie, ktorá uvažuje jednotný potenciál vnútornej energie v celej nanočastici. Charakteristický čas relaxácie preto závisí od počiatočnej teploty elektrónov po excitácii. Pozorovaný relaxačný čas klesá s rastúcim priemerom nanočastíc, čo súvisí s rastúcou tepelnou kapacitou a jeho vplyvom na počiatočnú teplotu elektrónov. V práci sa vyšetřovala aj intenzitná závislosť relaxácie strieborných nanočastíc pri porovnaní výsledkov získaných pri dvoch rôznych excitačných intenzitách. Prezentované výsledky boli aj teoreticky modelované počítačovou simuláciou. Počítačové simulácie vychádzajúce z experimentálnych údajov potvrdili pozorované trendy klesajúceho relaxačného času s rastúcou vlnovou

dĺžkou sondovacieho impulzu ako aj nárast relaxačného času pri väčšej intenzite excitácie strieborných nanočastíc.

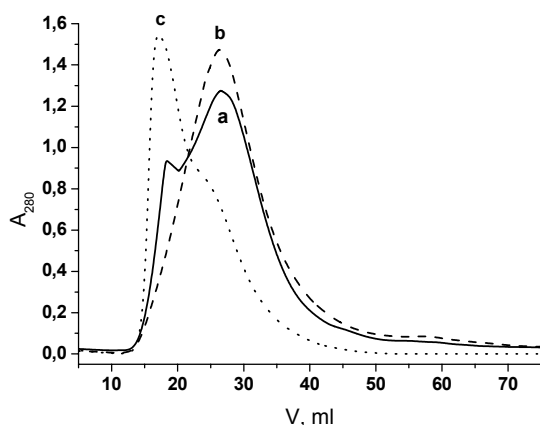
### 1Po45 MILD DEASHING OF HUMIC ACIDS FOR SPECTROSCOPIC ANALYSES

František Novák<sup>1</sup>, Martina Šestauberová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Biology Centre AS CR, v. v. i., Na Sádkách 7, 370 05  
České Budějovice, Czech Republic,  
novakf@dale.usbe.cas.cz

Spectroscopic methods (e.g. <sup>13</sup>C NMR, FTIR), widely used for characterization of humic acids (HA), require low ash content in studied samples. We studied the influence of two de-ashing procedures of humic acids, ultrafiltration and treating by HF, on molecular weight of HA.

The soil was sampled in mountain spruce ecosystem in Trojmezna hora preserve, near Plechý Pk. (1378 m a. s. l., National Park Šumava). Humic acids were extracted from the soil of horizon O<sub>h</sub> using the 0.1M NaOH after soil decalcification by 0.1M HCl. Deashing by ultrafiltration was made in Amicon cell with the filter PBVK (cut-off 500 kDa). Additional decreasing of ash content was achieved by 24-h treating of the HA in the mixture of 0.3M hydrofluoric and 0.1M hydrochloric acids in a water bath at 318 K. Molecular weight of HA was determined by low pressure size exclusion chromatography (SEC). The column was filled with the Sephacryl 200 HR, mobile phase consisted of the Britten-Robinson buffer at pH 9.0, calibration was made using Blue dextran (Sigma) and Pharmacia standards. Concentrations of standards and HA in the eluate were measured by the UV/VIS spectrophotometer Libra S22 in quartz cell 0.01 m at the wavelength of 280 nm.



**Fig. 1.** GPC of original humic acids (a), humic acid after deashing procedure (b), and high-molecular fraction of HA (c), retained on nanofilter.

HA were fractionated by ultrafiltration into two molecular fractions – highmolecular organomineral

complex with molecular weight ( $M_w$ ) >500 kDa, and HA with  $M_w$  about 19,5 kDa (Fig. 1 c, a). The HA fraction contained small portion of highmolecular complex ( $M_w$ >250 kDa), displayed by minor peak on the curve a. This peak disappeared after HA treatment by HF (curve b), which demonstrate disruption of the HA bond to minerals. Contemporary, the ash content in HA diminished. The molecular weight, corresponding to the main HA peak (a), was not changed during the HF-treatment. These results indicate that mild deashing is a useful step of HA purification for spectroscopic analyses. Moreover, it appears, that combination of the SEC with deashing can contribute to elucidation of the dilemma between polymeric and supramolecular nature of HA<sup>1,2</sup>.

*Grant dedication – This work was supported by the Czech Terra, no. MŽP VaV SP/2d1/93/07.*

[1] Piccolo A.: *Adv. Agronomy* 75, 57 (2002).

[2] Perminova I. V.: *Soil Science* 164, 834 (1999).

### 1Po46 DETERMINATION OF VAPOR PRESSURE OF MERCURY-BASED ELECTRODE MATERIALS USING AAS

Ivan Jiranek<sup>1</sup>, Jiri Barek<sup>1</sup>, Vaclav Cerveny<sup>2</sup> and Petr Rychlovsky<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Charles University in Prague, Faculty of Science,  
Department of Analytical Chemistry, UNESCO  
Laboratory of Environmental Electrochemistry,  
Hlavova 2030, 128 43 Prague 2, Czech Republic

<sup>2</sup>Charles University in Prague, Faculty of Science,  
Department of Analytical Chemistry, Hlavova 2030,  
128 43 Prague 2, Czech Republic

Fears of mercury toxicity led in past to the legislative limitation of utilization of mercury electrodes in the field of electrochemistry in European Union [1]. However, mercury is very advantageous electrode material. For that reason, several alternative materials were developed to obtain similar electrochemical properties as mercury, but with lower amount of mercury and mercury vapor pressure. These materials are mostly based on different types of amalgam, mainly silver amalgam [2, 3], which is generally considered as non-toxic with regard to its long term usage in stomatology.

Therefore, vapor pressure of pure mercury and dental amalgam was measured and compared with vapor pressure of several mercury-based electrode materials, namely silver solid amalgam, silver paste amalgam (with lower concentration of silver than silver solid amalgam), paste of silver solid amalgam (silver solid amalgam powder mixed with paraffine oil) and composite electrode containing grains of silver amalgam. Polished and mercury meniscus surface modifications of these materials were compared. For the measurement of the vapor pressure, AAS method of cold vapors was optimized (flow rate of carrier gas

and time of saturation). The parameters of the determination of individual materials such as signal/area ratio, limit of detection and repeatability of measurement will be discussed in the contribution.

*This work was financially supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (projects LC 06035, MSM 0021620857 and RP 14/63).*

- [1] [http://www.europarl.eu.int/meetdocs/2004\\_2009/documents/pr/585/585664/585664cs.pdf](http://www.europarl.eu.int/meetdocs/2004_2009/documents/pr/585/585664/585664cs.pdf), (downloaded 3.12.2005).  
 [2] Novotny L., Yosypchuk B., *Chem. Listy*, 94, 1118-20, (2000).  
 [3] Novotny L., Yosypchuk B., *Talanta*, 56, 971-6, (2002).

#### 1Po47

### VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ NITROFENOLŮ PO JEJICH PREKONCENTRACI EXTRAKCÍ TUHOU FÁZÍ POMOCÍ BÓREM DOPOVANÉ DIAMANTOVÉ FILMOVÉ ELEKTRODY

Jana Musilová, Jiří Barek, Karolína Pecková

*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Hlavova 8, 128 43 Praha 2, Česká Republika, E-mail: Jana.Musilova@seznam.cz*

V posledních dvou desetiletích si v elektroanalytické chemii získaly velkou oblibu bórem dopované diamantové filmové elektrody (BDDFE). Mezi jejich výhodné vlastnosti patří mechanická i chemická stabilita, široké potenciálové okno, malá náchylnost k pasivaci, nízký zbytkový proud, nízká adsorpce látek na jejich povrchu a biokompatibilita [1].

Nitrofenoly patří podle US Environmental Protection Agency (US EPA) mezi přední polutanty a je u nich prokázána či předpokládána karcinogenita a mutagenita [2]. Jejich zdrojem v životním prostředí jsou zplodiny automobilů, průmyslové odpadní vody z výroby herbicidů, pesticidů, barviv a rozpouštědel a také jejich používání jako herbicidů. Směs tří nitrofenolů (2-nitrofenol, 4-nitrofenol a 2,4-dinitrofenol) je v zemědělství používána jako stimulant rústu [3]. Nitrofenoly jsou také vhodnými modelovými látkami při studiu nitrovaných výbušnin.

Příspěvek se zabývá stanovením 2-nitrofenolu, 4-nitrofenolu a 2,4-dinitrofenolu diferenční pulsní voltametrií pomocí bórem dopované diamantové filmové elektrody po jejich prekoncentraci extrakcí tuhrou fází a aplikací této metody na stanovení nitrofenolů v pitné a říční vodě.

*Tato práce byla finančně podporována Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy (projekt LC 06035 a MSM 0021620857 a RP 14/63).*

- [1] A. Kraft, *Int. J. Electrochem. Sci.* 2, 355, (2007).  
 [2] <http://www.epa.gov> (27.4.2009).

- [3] Kolektiv autorů SRS, List of the Registered Plant Protection Products, The state phytosanitary administration, Brno 2006.

#### 1Po48

### FLUORESCENCE DYNAMICS OF COUMARIN IN AQUEOUS CONFINEMENT – FROM CYCLODEXTRINE, THROUGH MONTMORILLONITE, TO MICELLE

M. Žitňan<sup>1</sup>, V. Szöcs<sup>1</sup>, M. Janek<sup>1,2</sup>, E. Jáné<sup>1</sup>, I. Bugár<sup>3,4</sup>, O. Grančičová<sup>1</sup>, M. Aranyosiová<sup>1,3</sup>, D. Lorenc<sup>3,5</sup>, T. Pálszegi<sup>2</sup>, D. Velič<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Bratislava, Slovakia

<sup>2</sup> Institute of Technology, Slovak Academy of Sciences, Bratislava, Slovakia

<sup>3</sup> International Laser Centre, Bratislava, Slovakia

<sup>4</sup> Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Comenius University, Bratislava, Slovakia

<sup>5</sup> Vienna University of Technology, Wien, Austria

A process of solvation is an important phenomenon, especially in association with heterogeneous phase interaction. Immobilization and incorporation of organic molecules into inorganic materials have important applications spanning from water treatment and remediation, through chemical sensing, to tunable laser systems. Immobilization of organic molecules in cavities or micelles is important for drug and medicine storage and delivery.

A molecule of coumarin C522, C<sub>14</sub>H<sub>12</sub>NO<sub>2</sub>F<sub>3</sub>, is used as a fluorophore probe to study the interaction between coumarin and systems providing a confined aqueous environment spanning from cyclodextrine, through montmorillonite, to micelle. The probe fluorophore molecule of C522 is a test molecule of a balance between hydrophilic and hydrophobic interactions. Cyclodextrine cavity provides hydrophobic interior and hydrophilic exterior. Reduced-charge montmorillonite surfaces with varying surface charge as aqueous dispersion are also investigated. Both the amplitude of Stokes shift and the dynamics of the solvation process changes as a function of surface reduced charge. In the case, when only limited number of molecules of water provide the H-bond mobility and the molecule of C522 is confined on the montmorillonite surface, the solvation is slower. An extension of this phenomena is a study of fluorescence dynamics of C522 in AOT micelle along with the presence of cyclodextrine. The dynamics of the solvation process as a function of size of micelle is investigated.

*The financial support of APVT-20-029804 and APVV-0491-07 agencies is acknowledged.*



**1Po49**  
**RP-HPLC/MS ANALÝZA VOSKOVÝCH**  
**ESTERŮ**

Vladimír Vrkoslav, Josef Cvačka

*Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.,  
 Flemingovo nám. 2., 166 10 Praha 6,  
 Vrkoslav@uochb.cas.cz*

Voskové estery (VE), estery vyšších mastných kyselín a vyšších alkoholů, jsou produkovány organismy ve směsích s dalšími látkami s nízkou polaritou<sup>1</sup>, kde spolu s nimi plní celou řadu funkcí. VE nacházejí uplatnění ve farmaceutickém, kosmetickém a potravinářském průmyslu. Důležitým předpokladem úspěšného výzkumu a využití VE je dostupnost spolehlivých metod pro jejich analýzu. Nejvyužívanější metodou analýzy VE je plynová chromatografie (GC). Tato technika je však vhodná pro analýzu těkavějších VE. Naproti tomu technika RP-HPLC/MS principiálně umožňuje analýzu také méně těkavých VE.

Pro RP-HPLC/MS analýzu směsí VE byla využita kolona Nova-Pak C18. Eluát byl přiveden do APCI zdroje hmotnostního spektrometru pracujícího v kladném modu. Bylo testováno různé složení mobilní fáze – acetonitril v kombinaci s isopropanolem, acetonem a ethyl acetátem. Nejvhodnější z hlediska rozlišení VE a intenzity odezvy nasycených VE byla kombinace acetonitril/ethyl acetát. V MS spektrech byly pozorovány molekulové adukty  $[M+H]^+$ . Nenasyčené VE poskytovaly výrazně lepší poměr signálu k šumu v porovnání s nasycenými. Fragmentací molekulových aduktů technikou kolizně indukované disociace nebo fragmentací ve zdroji byly získány fragmenty odpovídající kyselinové části řetězce VE. Retenční časy VE se zvyšovaly s délkou řetězců a naopak snižovaly s počtem násobných vazeb v molekule. Vyvinuté metody byly otestovány na řadě přírodních směsí VE.

*Tato práce byla financována z grantu GAČR 203/09/0139 a z výzkumného záměru č. Z40550506.*

[1] R.J. Hamilton (Ed.): *Waxes: Chemistry, Molecular Biology and Functions*, The Oily Press Ltd., Dundee 1995.

**1Po50**  
**POROVNANIE ANTIOXIDAČNÝCH**  
**VLASTNOSTÍ RŮZNYCH DRUHŮ MÁTY**  
**(MENTHA SP.) POMOCOU DIFERENČNEJ**  
**PULZOVEJ VOLTAMPÉROMETRIE**

Milan Valach, Silvia Fialová

*Univerzita Komenského, Farmaceutická fakulta,  
 Odbojárov 10, 832 32 Bratislava*

Antioxidanty chránia ľudský organizmus pred škodlivými vplyvmi vonkajšieho prostredia pričom svojim pôsobením neutralizujú voľné radikály a tak

majú výrazne protektívne a imunostimulačné účinky. Hodnotenie a porovnávanie vlastností antioxidantov je vysoko aktuálna tematika vďaka hojnému výskytu ochorení a zdravotných problémov, ktoré sú vyvolávané prítomnosťou voľných radikálov. Pri sledovaní redoxne aktívnych látok nachádzajú praktické uplatnenie voltampérometrické metódy najmä kvôli pomerne nízkej finančnej náročnosti a popri tom poskytujú analyticky komplexnejšie informácie o vlastnostiach sledovaných látok. Konkrétne bola v práci použitá diferenčná pulzová voltampérometria (DPV). Porovnávané boli antioxidačné vlastnosti reálnych vzoriek vodných zápar siedmich rôznych druhov a variet mäty (*Mentha sp.*). Jednotlivé vzorky sa líšili nielen koncentráciou ale aj rôznym zložením účinných látok. Pomocou metódy DPV bolo možné získať tzv. potenciálové spektrum (prúdová odozva v závislosti od meniaceho sa potenciálu pracovnej elektródy,  $I = f(E)$ ), ktoré bolo charakteristické pre jednotlivé druhy a variety. Celkový tvar potenciálového spektra umožňuje jednoduché hodnotenie obsahu látok s rôznou antioxidačnou silou. Použitá DPV metodika sa osvedčila na rýchle „screeningové“ porovnanie obsahu látok s antioxidačnými účinkami v reálnych vzorkách.

*Táto práca vznikla s podporou projektu APVV VMSP-P-0052-07, grantu MŠ SR VEGA (projekt č. 1/4299/07), a grantu FaF UK/11/2009.*

**1Po51**  
**EXPLOITATION OF CHEMOMETRIC**  
**DECONVOLUTION FOR RESOLUTION OF**  
**GAS CHROMATOGRAPHIC UNSEPARATED**  
**CONJUGATED LINOLEIC ACID ISOMERS IN**  
**MILK SAMPLES**

Jaroslav Blaško, Róbert Kubinec, Zuzana Vetríková,  
 Ivan Ostrovský, Ladislav Soják

*Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences,  
 Comenius University, Bratislava, Slovak Republic  
 blasko@fns.uniba.sk*

A generally known problem of gas chromatographic separation of *trans-7,cis-9*, *cis-9,trans-11*, and *trans-8,cis-10* isomers of conjugated linoleic acid (CLA) was studied by GC-MS on capillary column 100-m x 0.25-mm coated with 0.2µm cyanopropyl silicone phase at isothermal column temperatures in a range of 140 – 170 °C. The resolution of these CLA isomers obtained at given conditions was not high enough for direct quantitative analysis, but it was, however, sufficient for the determination of their peak areas by commercial deconvolution software. Resolution factors of overlapped CLA isomers determined by the separation of a model CLA mixture prepared by mixing of a commercial CLA mixture and CLA isomer fraction obtained by the HPLC semi-preparative separation of milk fatty acids methyl esters were used to validate the deconvolution procedure. Developed deconvolution procedure allowed the

determination of the content of studied CLA isomers in ewes' and cows' milk samples, where dominant isomer *cis-9,trans-11* is eluted between two small isomers *trans-7,cis-9* and *trans-8,cis-10* (in the ratio up to 1:100). In cows' milk samples, in front of *trans-7,cis-9* isomer, coeluting small peak was chemometric deconvoluted and identified as *cis-7,trans-9* CLA isomer. *Trans-11, cis-13* CLA isomer was coeluted with *cis-9,cis-11* CLA isomer and their chemometrical deconvolution was also obtained. The content of CLA isomers allowed differentiate of the milk pasture-fed ewes from that fed total mixture rations, as well as the differentiation between the summer and winter cow milks.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under Contract No. APVV-0163-06, LPP-0198-06, LPP-0089-06.*

[1] Blaško, J., Kubinec, R., Ostrovský, I., Pavlíková, E., Krupčík, J., & Soják, L. (2009). Chemometric deconvolution of gas chromatographic unresolved conjugated linoleic acid isomers triplet in milk samples. *Journal of Chromatography A*, 1216, 2757-2761.

#### 1Po52

##### VARIATIONS IN MILK FATTY ACID COMPOSITION IN EWES' COLOSTRUM DURING SUCKLING PERIOD

Róbert Kubinec, Jaroslav Blaško, Beáta Meľuchová, Ivan Ostrovský, Ladislav Soják

*Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Bratislava, Slovak Republic  
kubinec@fns.uniba.sk*

A difference between colostrum and mature milk composition corresponds to changing needs of the growing lambs thus providing different amounts of components important for nutrient supply, specific and nonspecific host defence, growth and development. The objective of this study was GC-MS determination of the time-variation of 70 C4-C24 milk fatty acids (FA) in colostrum and mature milk fat of ewes fed with a winter diet. The samples of first-day colostrum were analyzed first hourly, then daily for the first six days, and twice weekly for up to 60<sup>th</sup> day of lactation. The variations in milk FA profiles were related to their potential physiological effects.

The content of individual FA through lactation was significantly increased or decreased or only slightly changed for bulk milk samples, and still more different for individual ewes' milk. For straight-chain SFA with two different physiological active groups in colostrum, the content of 4:0-10:0 increased up to 100% in colostrum, whereas that of 12:0-16:0 decreased up to 50%. For individual ewes on the first colostrum day, however, reversal trends of these relations were observed too, and the variations were up to 100%. The content of 15-17 branched-chain SFA has increased

progressively with lactation degree. For individual ewes, however, the content of iso- and anteiso isomers increased or decreased on the first colostrum day. Such variations in SFA profiles were related to ruminal bacterial activity.

In colostrum, the content of MUFA *cis-9* 14:1-16:1 significantly decreased, and that of 18:1 decreased very slightly only. However, decreasing and increasing trends in time-related content changes were noted in individual ewes. The calculated  $\Delta$ -9 desaturase indexes showed that mammary gland activity was two- to three-fold higher for colostrum compared to mature milk, and it was about 20-fold higher for *cis-9* 17:1-20:1 than for 10:1-16:1. For individual ewes, more than two-fold different  $\Delta$ -9 desaturase indexes were calculated, and increasing or decreasing content trends were observed on the first colostrum day.

In terms of PUFA, the most remarkable variations were noted in *cis-9,trans-11* 18:2 produced by  $\Delta$ -9 desaturase of *trans-11* 18:1. The CLA content on the first colostrum day was 3-fold higher than that in mature milk. The high activity of  $\Delta$ -9 desaturase of mammary gland and modified ruminal microbial activity affecting hydrogenation in the rumen during colostrum time induced wide variations in content ratio of *trans-11* 18:1/ *cis-9,trans-11* 18:2, i.e. from 0.76 to 1.44 for individual ewes on the first colostrum day vs. 2.3 for mature milk.

A detailed evaluation of changes in colostrum FA composition in relation to mature milk fat can be used for better understanding of the positive effects of individual FA on health and disease prevention. The results can also be useful for ewes selection.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under Contract No. APVV-0163-06, LPP-0198-06, LPP-0089-06 and VEGA 1/0297/08.*

#### 1Po53

##### FLUCTUATION IN FATTY ACID COMPOSITION OF EWES MILK FROM DRY WINTER TO PASTURE FORAGE

Beáta Meľuchová, Róbert Kubinec, Jaroslav Blaško, Ivan Ostrovský, Ladislav Soják

*Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Bratislava, Slovak Republic  
meluchova@fns.uniba.sk*

The profile variations of approximately 70 fatty acids (FA) in milk of ewes consuming total mixed rations (TMR) and grazing natural pasture were estimated by GC-MS. The milk of ewes grazing pasture in May and September showed 3-fold higher content of conjugated linoleic acid (CLA) ( $P < 0.001$ ) and *trans*-vaccenic acid (TVA) ( $P < 0.001$ ), and double content of  $\alpha$ -linolenic acid (ALA) ( $P < 0.001$ ) compared to those fed with TMR. A 2-fold increase of CLA and TVA contents in milk fat of ewes fed with TMR was achieved by changing the meadow hay containing higher ALA

content. Lesser availability of vegetation and lower ALA pasture content in summer ( $P < 0.001$ ) caused 2-fold decrease ( $P < 0.001$ ) of CLA and TVA contents when compared with May. With grass re-growth and ALA pasture content increase in September, the CLA and TVA contents rose to similar values as those in May ( $P > 0.05$ ). No significant differences in the FA composition in milk of ewes grazing on summer pasture with higher altitude were observed. CLA, TVA and ALA contents in the milk of ewes grazing on fresh pasture are similar to those in milk of cows grazing Alpine pastures. The *trans-11*, *cis-13* CLA isomer in milk of ewes grazed on pasture was the second-most abundant CLA isomer like in Alpine cows' milk.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under Contract No. APVV-0163-06, LPP-0198-06, LPP-0089-06.*

[1] Ostrovský I., Pavlíková, E., Blaško, J., Górová, R., Kubinec, R., Margetín, M., Soják, L. (2009). Variation in fatty acid composition of ewes milk during continuous transition from dry winter to natural pasture diet. *International Dairy Journal*, 19, 545-549.

#### 1Po54

### CIRKULUJÍCÍ NUKLOVÉ KYSELINY – ZPŮSOB VČASNÉ DETEKCE LIDSKÝCH ONEMOCNĚNÍ

Vojtěch Adam<sup>1,2</sup>, Dalibor Húska<sup>1</sup>, Ondřej Zítka<sup>1</sup>, Jaromír Hubálek<sup>3</sup>, Libuše Trnková<sup>4</sup>, Ladislav Zeman<sup>2</sup>, René Kizek<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav chemie a biochemie, a <sup>2</sup>Ústav výživy zvířat a pícninářství, Agronomická fakulta, Mendelova zemědělská a lesnická univerzita v Brně, Zemědělská 1, 613 00 Brno, Česká republika

<sup>3</sup>Ústav mikroelektroniky, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií, Vysoké učení technické v Brně, Údolní 53, 602 00 Brno, Česká republika

<sup>4</sup>Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Česká republika

Historie rozpoznání cirkulujících nukleových kyselin je datována do 40. let minulého století. Tehdy byla volná nukleová kyselina detekována v krevní plasmě. V dalších studiích byly cirkulující nukleové kyseliny analyzovány u zdravých i nemocných lidí. Byla nalezena souvislost mezi auto-imunními chorobami, systémovým *Lupus erythematosus* a revmatoidní artritidou a těmito látkami. Později byla pozorována souvislost mezi hladinou volné nukleové kyseliny a nádorovým onemocněním pankreatu. Dále bylo pozorováno, že změny v hladinách cirkulující nukleové kyseliny nastávají již v časných stádiích chemoterapie. Cílem této práce byl vývoj jednoduchého elektrochemického senzoru pro analýzu nukleové kyseliny v lidských tekutinách. Pro tento účel byly připraveny různé technické modifikace tištěných elektrochemických senzorů (pomocná

uhlíková, referenční stříbrná s vrstvou AgCl pasty a pracovní uhlíková). Navržené elektrochemické senzory byly ve spojení s potenciostatem AUTOLAB, CH-INSTRUMENTS a námi vyrobeným mikropotenciostatem použity pro detekci nukleových kyselin. Na voltamogramech DNA byly rozlišitelné oxidační signály jednotlivých bází. Pro detekci nízkých koncentrací DNA pod 500 ng/ml byly jednotlivé signály bází sečteny. Díky navrženému postupu bylo možné analyzovat koncentrace DNA pod 10 ng/ml. Kromě toho bylo pro další zvýšení senzitivity elektrochemické analýzy využito techniky eliminační voltametrie.

*Práce byla finančně podporována grantem KAN208130801 a GAČR 102/08/1546.*

#### 1Po55

### MULTIINSTRUMENTÁLNÍ HODNOCENÍ FYTOREMEDIÁČNÍHO POTENCIÁLU

Olga Kryštofová<sup>1,2</sup>, Václav Diopan<sup>1,2</sup>, Vojtěch Adam<sup>1,3</sup>, Josef Zehnálek<sup>1</sup>, Ladislav Havel<sup>2</sup>, René Kizek<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav chemie a biochemie, <sup>2</sup>Ústav biologie rostlin a <sup>3</sup>Ústav výživy zvířat a pícninářství, Agronomická fakulta, Mendelova zemědělská a lesnická univerzita v Brně, Zemědělská 1, 613 00 Brno, Česká republika

Pro sanaci půd a vod kontaminovaných toxickými kovy a dalšími toxickými látkami se jeví remediační postupy s využitím biologických systémů jako slibná alternativní metoda k průmyslově aplikovaným postupům. V naší práci jsme se zaměřili na schopnost různých odrůd lnu setého přijmout těžký kov (kadmium) s cílem jeho využití ve fytoremediačních technologiích. Pro posouzení tzv. fytoremediačního potenciálu lnu setého jsme využili řadu analytických nástrojů, jako byly automatický spektrometrický analyzátor, vysoce účinná kapalinová chromatografie s elektrochemickou detekcí, gelová elektroforéza a automatický elektrochemický analyzátor. Detekovali jsme aktivitu řady enzymů, hladinu thiolových látek (glutathionu a fytochelatinu2), celkový obsah na síru bohatých sloučenin, proteinů a antioxidační aktivitu. Vzhledem k celkovému počtu 22 testovaných odrůd jsme získali velké množství dat, které jsme matematicky vyhodnotili a vytvořili tak nový a unikátní způsob hodnocení fytoremediačního potenciálu pomocí moderních analytických metod. Bylo zjištěno, že všechny odrůdy tvoří v porovnání s kontrolou zvýšené množství thiolů a také byly pozorovány značné rozdíly v jejich množství mezi jednotlivými odrůdami. Z dvaceti dvou porovnávaných odrůd lnu setého mají nejvyšší fytoremediační potenciál odrůdy Ilona, Recital a Elektra a jsou tak vhodné pro další studia pomocí technik molekulární biologie.

*Práce byla finančně podporována grantem IM06030, GAČR 204/09/H002, GAČR 522/07/0692 a DP6/AF IGA MZLU.*

**1Po56****FLUORESCENCIA SYSTÉMOV KUMARÍN C153/B- CYKLODEXTRÍN, /SILYLOVANÝ B- CYKLODEXTRÍN A /TIOLOVANÝ B- CYKLODEXTRÍN**

Marianna Trenčanová, Dušan Velič

*Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie*

Fluorescencia je dej, pri ktorom dochádza v molekule, po prijatí určitého kvanta energie, k excitácii elektrónu. A následne elektrón začne relaxovať. Táto relaxácia je spojená s emitovaním iného kvanta energie, ktoré je možné detegovať, rovnako ako je možné detegovať aj energiu prijatú molekulou (absorbovanú). Fluorescencia je závislá od prostredia, v ktorom sa dané molekuly nachádzajú a teda aj od molekúl, ktoré sú v jej blízkosti. Kumarín C153 je látka so schopnosťou fluorescencie. Cyklodextríny sú látky kužeľovitého tvaru s hydrofilným povrchom a hydrofóbnou kavitou. Cieľom našej práce bolo zistiť, či modifikácia cyklodextrínu vo forme Heptakis(6-O-t-butylidimethylsilyl-2,3-di-O-acetyl)- $\beta$ -cyclodextrín a 6-deoxy-6-monothio- $\beta$ -cyclodextrín ovplyvní tvorbu supramolekulových komplexov medzi kumarínom a cyklodextrínmi. Tento vplyv bol dokumentovaný fluorescenčnými spektrami. Motiváciou je z daných cyklodextrínov vytvoriť povrchové supramolekulové štruktúry.

*Podakovanie patrí nasledujúcim agentúram za podporu vo forme grantov APVT-20-029804 a APVV-0491-07.*

**1Po57****FLUORESCENCIA KUMARÍNU VO VODNOM PROSTREDÍ HYDROGÉLU**

Ján Škoviera<sup>1</sup>, Dušan Velič<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Prírodovedecká fakulta UK Bratislava*

<sup>2</sup>*Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava*

Hydrogél je koloidná látka tvorená spojitou disperznou aj tuhou fázou. Disperznou fázou je voda a tuhú fázou polymér vytvárajúci trojrozmernú sieť. Najmenšou štruktúrnou jednotkou takejto siete je takzvaná bublinka, v ktorej je voda. Do akrylamidového hydrogélu sme namiesto čistej vody dali roztok kumarínu C153 vo vode pri veľmi nízkej koncentrácii, aby sa dali študovať možnosti uväznenia kumarínu vo vode v bublinkách hydrogélu. Kumarín C153 je fluorescenčné farbivo, na ktoré pôsobí voda ako zhášač. Voda spôsobuje hypsochrómny posun vo fluorescenčnom spektre kumarínu a zároveň jeho rýchlejšiu relaxáciu<sup>1</sup>. Uväznenie vody pôsobí

stlmujúco na tieto účinky vody, preto sme na štúdium tohto systému použili techniku fluorescenčnej spektroskopie. Pri meraniach sme sa stretli s problémom rozptylu svetla na sieťovej štruktúre polyméru. Priame sledovanie fluorescencie kumarínu pomocou fluorescenčnej spektroskopie je možné pri optimálnej príprave hydrogélu. V opačnom prípade môžeme s najväčšou pravdepodobnosťou zmerať len rozptylové spektrum.

[1] Lakowicz, John r. Principles of Fluorescence Spectroscopy, Kluwer Academic /Plenum Publishers, New York 357 (1999).

**1Po58****CHROMATOGRAPHIC ANALYSIS OF GALACTOSE AND GALACTITOL IN URINE OF PATIENTS HANDICAPPED WITH INBORN METABOLIC DISORDERS**

Ivan Ostrovský, Jozef Višňovský, Róbert Kubinec, Jaroslav Blaško, Beáta Meľuchová, Zuzana Vetricová

*Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Bratislava, Slovak Republic*

The term „Inborn metabolic disorders (IMDs)” is applied to genetic disorders caused by loss of function of an enzyme. Traditionally the IMDs are categorized as disorders of carbohydrate metabolism, amino acid metabolism, organic acid metabolism, or lysosomal storage diseases. Some IMDs produce relatively unimportant physical features or skeletal abnormalities. Others produce serious disease and even death. Most inborn errors of metabolism are monitored by routine blood or urine tests [1].

Galactosemia was first "discovered" in 1908 by Von Ruess. It is a metabolic disorder associated with the intolerance to dietary galactose due to an inherited enzymatic deficiency, is indicated by heightened levels of galactose and galactitol in urine [2]. Galactose is a monosaccharide present in many polysaccharides, where the most clinically important source is the disaccharide lactose. Lactose is the predominant carbohydrate in human and most other animal milk, including cow's milk, therefore many commercially available infant formulas contain lactose. Classical galactosemia (GALT deficiency), an autosomal recessive disorder occurs in the population with an incidence of approximately 1:40–60 000. Galactose-1-phosphate, a metabolite derived from ingestion of galactose, is considered to be toxic in several tissues particularly in the liver, brain and renal tubules.

Monosaccharide analysis by GC (with FID or MS detection) requires derivatization to increase their volatility and decrease interaction with the analytical system. Reduction to alditols have the advantage that each sugar generate only one peak, while trimethylsilyl (TMS) oximes give 2 peaks, but hydroxylamine reactions are more selective. Alditols preparation also include cation-exchange steps and boric acid removal,

in the TMS-oxime preparation, all reactions are carried out in the same vial and consecutively.

Recognizing the clinical need for the simultaneous measurement of galactitol and galactose in urine for galactosaemic subjects, we used the GC/MS method, permits for the first time, measurement in urine by an accurate and precise single step procedure. This method does not require urine pretreatment before the silylation.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under Contract No. APVV-0163-06, LPP-0198-06, LPP-0089-06 and VEGA 1/0298/08.*

- [1] S. Kavitha, S. N. Sarbadhikari, N. R. Ananth: *J. of Health and Allied Sciences*, 5(3) (2006).  
 [2] J. Schadewaldt, S. Killius, L. Kamalanathan, H.–W. Hammen, K. Straßburger, U. Wendel, J. *Inherit. Metab. Dis.* 26 (2003) 459–479.

## POSTERY - SEKCIA 2: ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA

### 2Po01 SYNTHESIS AND REDOX PROPERTIES OF SOME FERROCENYL SUBSTITUTED CARBORANES AND METALLACARBORANES

Josef Holub<sup>1</sup>, Bohumil Štíbr<sup>1</sup>, Petr Štěpnička<sup>2</sup> and  
Ivana Císařová<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Inorganic Chemistry of the ASCR, v. v. i., CZ-250 68, Řež, Czech Republic.*

<sup>2</sup>*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Charles University, Hlavova 2030, CZ-128 40, Prague, Czech Republic*

A sequence of reactions starting from *arachno*-4-Me<sub>2</sub>S-B<sub>9</sub>H<sub>13</sub> (**1**) and ethynylferrocene, FcC≡CH (Fc = ferrocenyl) led to the isolation of 6-Fc-*nido*-5,6-C<sub>2</sub>B<sub>8</sub>H<sub>11</sub> (**2**), 1-Fc-*closo*-1,10-C<sub>2</sub>B<sub>8</sub>H<sub>9</sub> (**3**) along with the two isomeric ferratricarbollides [1-η<sup>5</sup>-C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>-2-Fc-12-*t*-BuNH-1,2,4,12-FeC<sub>3</sub>B<sub>8</sub>H<sub>9</sub>] (**4**) and [1-η<sup>5</sup>-C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>-2-Fc-10-*t*-BuNH-1,2,4,10-FeC<sub>3</sub>B<sub>8</sub>H<sub>9</sub>] (**5**). Electrochemical studies revealed that all compounds display one (**2** and **3**) or two (**4** and **5**) well-defined, reversible one-electron redox changes. The waves for **2** and **3** are observed at higher potentials than that for ferrocene itself, which is in accord with electron deficient nature of the carborane skeletons. The oxidation of **2** occurs by 90 mV more positively than that for **3**, which corresponds with a more pronounced electron withdrawing character of the open *nido* cage in comparison to the closed cage of **3**. The oxidation of the ferrocenyl groups in **4** and **5** occurs at identical potentials, close to that of ferrocene itself. By contrast, the potentials of the metallacarborane-iron(II) oxidations differ by 70 mV, the oxidation of **5** being more difficult. More importantly, however, the metallacarborane-iron(II) oxidations are shifted to more positive potentials than those of the analogues possessing the redox silent organic groups. This probably reflects the change imparted during their *preceding* redox step that converts the strongly electron-donating ferrocenyl group into a cationic,

electron-withdrawing ferrocenium, thus making the subsequent electron removal more difficult.

*Supported by the Ministry of Education of the Czech Republic (projects no. LC 523 and MSM0021620857).*

### 2Po02 THERMAL ANALYSIS, FT-IR SPECTROSCOPY AND OPTICAL MICROSCOPY AS A TOOL FOR CHARACTERIZATION OF MARBLE

E. Plevová, A. Kožušníková, L. Vaculíková

*Institute of Geonics AS CR, Studentská 1768, 708 00, Ostrava, Czech Republic, plevova@ugn.cas.cz*

Thermal analysis is a useful tool for determination of the rock thermal behavior. This study presents the application of thermogravimetric analysis (TG), differential thermal analysis (DTA) and thermomechanical analysis (TMA) in characterization of selected marble samples. The texture and spatial orientation for marble samples was determined by optical microscopy and image analysis. FTIR-spectroscopy was also used for next characterization of material.

The thermal behavior of rock is effected not only by rock composition (temperature increase causes various changes in rock material such as decomposition, dehydroxylation, oxidation, phase and polymorphic transformation etc) but also by rock structure.

Data from thermal analysis show that the principal changes in marble decomposition occur in several temperature intervals, depending on marble composition. If there is an additional organics or ferritic oxides at sample, the oxidation process occurs at the range of temperatures 350–700°C. In case of presence of clays, endo-reactions may appear at the same temperature interval. Then at temperature interval 750–930 °C, dissociation of carbonate usually comes up.

Optical polarising microscopy is an effective tool for determination of grain structure. According optical microscopy, the calcite grains show marked anisotropy at least in one axis. Therefore the thermomechanical analysis of marble samples had to be measured in three different (perpendicular each other) axis. Data from optical microscopy correspond well with data of thermal expansion obtained by TMA.

This work was supported by the Czech Science Foundation, the project No.105/07/P416, the project No. 105/08/1398 and by Research plan No. AVOZ 30860518.

**2Po03**  
**STEREOCHEMISTRY OF VARIOUS FREE BORON CLUSTERS FROM MODEL CHEMISTRIES**

Drahomír Hnyk and Jan Macháček

*Institute of Inorganic Chemistry of the Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., No. 1001, CZ-250 68 Husinec-Řež, Czech Republic, hnyk@iic.cas.cz*

A considerable progress has been achieved in the stereochemistry of a number of heteroboranes by applying the so-called *ab initio*/GIAO/NMR method along with gas-phase electron diffraction.<sup>1</sup> The molecular geometries are computed at a very high level of theory that includes the effect of electron correlation (e.g. MP2). Such geometries turned out to be superior to those obtained at SCF levels in terms of comparing the agreement between the calculated (using a particular geometry) and experimental <sup>11</sup>B chemical shifts. Both the GIAO-SCF and GIAO-MP2 approaches are applied for the calculations of shielding tensor. Again, the computations that consider the effect of electron correlation (GIAO-MP2) provide better results when relating them to the corresponding experimental data. Summarizing, the GIAO-MP2/II//MP2/6-31G\* (level of theory//geometry) is the best approach for reproducing the measured chemical shifts. If a few candidates can account for the experimental <sup>11</sup>B spectrum of a particular cluster, this approach can decide among these possibilities. As the monocrystals of many boranes are disordered, this method remains as the only source for obtaining structural data for this class of materials. A number of structures of recently prepared heteroboranes, classified as *closo*, *nido*, and *arachno* and others, determined by this technique(s) will be demonstrated.

*This work was supported by the Ministry of Education of the Czech Republic (project no. LC523).*

[1] D. Hnyk and D.W.H. Rankin, *Dalton Trans.*, 2009, 585.

**2Po04**  
**SYNTHESIS AND REDOX POTENTIALS OF ISOMERIC**

**1- $\eta^5$ -C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>-12-*T*-BUNH-1,2,4,12-FEC<sub>3</sub>B<sub>8</sub>H<sub>10</sub> AND 1- $\eta^5$ -C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>-10-*T*-BUNH-1,2,4,10-FEC<sub>3</sub>B<sub>8</sub>H<sub>10</sub> FERRATRICARBOLLIDES SUBSTITUTED BY ME AND PH ON THE CAGE CARBON ATOMS**

Mario Bakardjiev<sup>1</sup>, Josef Holub<sup>1</sup>, Bohumil Štíbr<sup>1</sup>, Petr Štěpnička<sup>2</sup> and Ivana Císařová<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Inorganic Chemistry of the ASCR, v. v. i., CZ-250 68, Řež, Czech Republic.*

<sup>2</sup>*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Charles University, Hlavova 2030, CZ-128 40, Prague, Czech Republic*

Discussed will be the synthesis and structures of the cage isomeric *closo* ferratricarbollides [1- $\eta^5$ -C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>-2,4-R<sup>1</sup>R<sup>2</sup>-12-*t*-BuNH-1,2,4,12-FeC<sub>3</sub>B<sub>8</sub>H<sub>8</sub>] (**1**) (where R<sup>1</sup>/R<sup>2</sup>= H/H, **1a**; H/Me, **1b**; Me/Me, **1c**; H/Ph, **1d**, and Ph/Ph, **1e**) and [1- $\eta^5$ -C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>-2,4-R<sup>1</sup>R<sup>2</sup>-10-*t*-BuNH-1,2,4,10-FeC<sub>3</sub>B<sub>8</sub>H<sub>8</sub>] (**2**) (where R<sup>1</sup>/R<sup>2</sup>= H/H, **2a**; H/Me, **2b**; Me/Me, **2c**; H/Ph, **2d**, and Ph/Ph, **2e**). The electrochemical behaviour of this series has been studied by cyclic (CV) and difference pulse (DPP) voltametry at platinum disc electrode in dichloromethane solutions. Compounds **1** and **2** undergo single electron removal attributable to the Fe<sup>II</sup>/Fe<sup>III</sup> couple at potentials that are more positive than that for the related dicarbaborane complex [1- $\eta^5$ -C<sub>5</sub>H<sub>5</sub>-1,2,3-FeC<sub>2</sub>B<sub>9</sub>H<sub>11</sub>] (-0.08 vs. SCE in acetone-water 1:1). [1.]

The redox potentials for individual isomeric pairs **1** and **2** having interchanged R substituents (R<sup>1</sup>↔R<sup>2</sup>) differ uniformly by about 100 mV, isomers **2** being more difficult to oxidise. Oxidation potentials of the H- and Me-substituted compounds are lower than those of the Ph-analogues. This leads to the following sequence of the oxidation potentials for R<sup>1</sup>/R<sup>2</sup> = H/H (+0.25/+0.35) ≈ H/Me (+0.25/+0.35) ≈ Me/Me (+0.25/+0.35) < Ph/H (+0.28/+0.39) < Ph/Ph (+0.32/+0.42) (data in V for the isomeric **1** and **2** couples relative to the ferrocene/ferrocenium reference in parentheses), which roughly corresponds with the electronic properties of these substituents.

*Supported by the Ministry of Education of the Czech Republic (projects no. LC 523 and MSM0021620857).*

[1] M. F. Hawthorne, D. C. Young, T. D. Andrews, D. V. Howe, R. L. Pilling, A. D. Pitts,

[2] M.. Reintjes, L. F. Warren, Jr., P. A. Wegner, *J. Am. Chem. Soc.*, **1968**, *90*, 879.

**2Po05****OPTIMALIZACE HYDROLÝZY PŘI PŘÍPRAVĚ KOMPOZITŮ KAOLÍN/TiO<sub>2</sub>**

Kateřina Mamulová Kutláková<sup>1</sup>, Vlastimil Matějka<sup>1</sup>,  
Jana Kukutschová<sup>1</sup>, Pavel Kovář<sup>2</sup>

<sup>1</sup>VŠB-Technická univerzita Ostrava, Centrum nanotechnologií, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava-Poruba, Česká republika

<sup>2</sup>ČTC AP a.s., Přerov, Česká republika

*Email:* katerina.mamulova.kutlakova@vsb.cz

Fotokatalytické technologie se stávají stále více atraktivními pro průmysl dnešní doby, zvláště pak z důvodu globálního znečišťování životního prostředí. Mezi různými polovodičovými materiály přitahuje velkou pozornost oxid titaničitý, a to hlavně pro jeho všestranné využití v praktickém životě. Kaolín patří mezi známé jílové materiály, které představují vhodné nosiče pro pěstování nanočástic oxidu titaničitého na jejich povrchu. Kompozity typu kaolín/TiO<sub>2</sub> mohou potenciálně nacházet využití v mnoha průmyslových odvětvích např. ve stavebním průmyslu [1].

Hlavním cílem této práce bylo posouzení vlivu klíčových parametrů hydrolýzy (délka varu při hydrolýze, stupeň a způsob ředění) směsi kaolínu s titanyl sulfátem na výtěžnost oxidu titaničitého během reakce [2]. Za tímto účelem byla u všech připravených kompozitů zjišťována také výsledná fotokatalytická aktivita vůči barvivu acid oranž 7 (AO7) po 1 hodinovém osvětlení UV lampou emitující záření 365 nm o intenzitě osvětlení 2mW/cm<sup>2</sup>. Vyhodnocení úbytku koncentrace barviva bylo provedeno spektrofotometricky.

Kompozity modifikované různými navrženými způsoby hydrolýzy byly následně charakterizovány použitím kombinací metod FTIR, DRS, XRD, AFM a jsou blíže popsány v posteru.

*Studie vznikla s finanční podporou výzkumného projektu FT-TA4/025 a GAČR 205/08/0869.*

[1] Matějka V., Kovář P., Bábková P., Přikryl J., Mamulová Kutláková K., Čapková P.: Utilization of Photoactive Kaoline/TiO<sub>2</sub> Composite in Cement Based Building Materials, *Nanotechnology in Construction* 3, Proceedings of the NICOM3, 2009, 309-314.

[2] Mamulová Kutláková K., Matějka V., Neuwirthová L.: The effect of reaction conditions for sol-gel synthesis of TiO<sub>2</sub> with photocatalytic properties, *Nanomaterials and Nanotechnology Meeting*, 43 (2008).

**2Po06****RENTGENOFLOURESCENČNÍ ANALÝZA KOMPOZITŮ KAOLÍN/TiO<sub>2</sub>**

Neuwirthová L.<sup>1</sup>, Pěkníková V.<sup>1</sup>, Tomášek V.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>VŠB – Technická Univerzita Ostrava, CNT, Česká Republika

Oxid titaničitý (TiO<sub>2</sub>) představuje v poslední době pravděpodobně nejstudovanější fotokatalyzátor pro využití v oblasti fotodegradace látek znečišťujících životní prostředí.

Netoxické, snadno dostupné přírodní jílové minerály (jako např. montmorilonit, kaolinit, vermikulit ...) představují vhodné nosiče pro pěstování nanočástic TiO<sub>2</sub> na jejich povrchu.

Naše kompozity kaolín/TiO<sub>2</sub> jsou připravovány hydrolýzou směsi vybraného (upraveného, či neupraveného) jílového nosiče – kaolinit a titanyl sulfátu (TiOSO<sub>4</sub>).

Připravené kompozity jsou charakterizovány pomocí RTG, IČ, SEM a XRFS. Fotokatalytické účinky připravených kompozitů jsou hodnoceny pomocí studia jejich fotodegradačních účinků testovaných na methylenové modři.

Hlavním problémem u měření XRFS (rentgenové fluorescenční spektroskopie) je vysoký obsah TiO<sub>2</sub> u připravených kompozitů jílu/TiO<sub>2</sub> a nedostupnost referenčních materiálů jílových minerálů s vysokým obsahem Ti. Zatímco běžně dostupné jílové certifikované referenční materiály obsahují desítky hm% TiO<sub>2</sub>, námi připravované kompozity obsahují desítky hm.% TiO<sub>2</sub>. Z tohoto problému vyplynula nutná příprava vlastních referenčních materiálů a s tím i spojená kalibrace.

Tato práce se zabývá přípravou jednotlivých referenčních materiálů, posouzením jejich homogenity a opakovatelnosti přípravy a především vývojem metody s použitím firemního software.

*Tato práce vznikla za finanční podpory GAČR 205/08/0869 a FT-TA4/025.*

[1] Matějka V., Neuwirthová L., Kovář P., Valášková M.: Kaolinite and methakaolinite as a matrix for preparation of nanosized TiO<sub>2</sub> with photocatalytic properties, Brno, NANO 2007

[2] Fujishima A., Hashimoto K., Watanabe T.: TiO<sub>2</sub> fotokatalýza, základy a aplikace, Praha, 2002

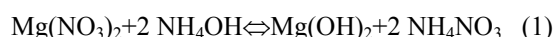
**2Po07****VPLYV PRÍMESÍ NA PROCES ZRÁŽANIA MG(OH)<sub>2</sub>**

Smrčková Eva, Gabčová Jana, Fellner Pavel

*Ústav anorganickéj chémie, technológie a materiálov, FCHPT STU Radlinského 9, 812 37 Bratislava,*

Cieľom práce bolo identifikovať vplyv NH<sub>4</sub>NO<sub>3</sub> a Ca(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> (ktoré sa môžu nachádzať v priemyselnom

roztoku dusičnanu horečnatého) na proces zrážania Mg(OH)<sub>2</sub>:



Sústredili sme sa na prvú etapu procesu, v ktorej prebieha nukleácia a rast kryštálov. Táto etapa sa uskutočňuje pri laboratórnych podmienkach (teplota, tlak). Na uskutočnenie experimentu sme zvolili model kontinuálneho reaktora, zrážanie sa uskutočnilo v stechiometrických pomeroch, so základnými roztokmi pripravenými z chemikálií čistoty p.a. – 1 M roztok dusičnanu horečnatého a 2 M roztok čpavku.

Vplyv prímiesi sa hodnotil na základe zmien priebehu sedimentácie.

Sledovanie vplyvu dusičnanu vápenatého na zrážanie Mg(OH)<sub>2</sub>

Pri sledovaní sedimentácie v suspenziách hydroxidu horečnatého vyzrážaného z roztoku dusičnanu obsahujúceho do 6 % hm Ca(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·4H<sub>2</sub>O sa nepostrehli žiadne významné rozdiely, z čoho možno usudzovať, že uvedená zložka nemá v sledovanom množstve zásadný vplyv na proces nukleácie resp. rastu zrn Mg(OH)<sub>2</sub>.

Sledovanie vplyvu dusičnanu amónneho na zrážanie Mg(OH)<sub>2</sub>

Prítomnosť dusičnanu amónneho v roztoku dusičnanu horečnatého (do obsahu 20% hm.) významne ovplyvňuje priebeh zrážania hydroxidu horečnatého. Na základe pozorovaní sedimentácie sa možno domnievať, že okrem kinetiky zrážania môže byť ovplyvnený aj stupeň vyzrážania Mg<sup>2+</sup> iónov.

Z hľadiska vplyvu dusičnanu amónneho na zrážanie Mg(OH)<sub>2</sub> má kľúčový význam skutočnosť, že amónne soli výrazne zvyšujú rozpustnosť Mg(OH)<sub>2</sub> vo vodných roztokoch.

Vysvetlenie tohto javu je založené na pomerne malej disociácii NH<sub>4</sub>OH pri laboratórnej teplote. Ionizačná konštanta pre NH<sub>4</sub>OH je pri laboratórnej teplote 1,8x10<sup>-5</sup>. Súčin rozpustnosti Mg(OH)<sub>2</sub> je 8,9x10<sup>-12</sup>. Ak teda pridávame do roztoku NH<sub>4</sub>NO<sub>3</sub>, znižuje sa koncentrácia OH<sup>-</sup> iónov a preto sa zvyšuje rozpustnosť Mg(OH)<sub>2</sub>.

Druhý dôvod uviedol Fredholm (1934) [1], ktorý tvrdí, že kation Mg<sup>2+</sup> je schopný adovať NH<sub>3</sub> za vzniku slabého komplexu.

Experimenty preukázali, že obidva tieto javy môžu ovplyvniť hnaciu silu procesu kryštalizácie Mg(OH)<sub>2</sub> z roztokov dusičnanu horečnatého amoniakom v prítomnosti ďalších amónnych solí.

Zhodnotenie týchto vplyvov umožní optimalizovať postupy pre dosiahnutie požadovaných konečných vlastností, napr. veľkosti a tvaru častíc (špecifického povrchu), čo ovplyvňuje jeho zapracovateľnosť do plastov a pod.

*Práca vznikla v rámci projektu APVV-0203-07.*

[1] H. Remy, Anorganická chemie, SNTL Praha 1961

## 2Po08

### SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF NEW DERIVATIVES OF CLOSO-1-CB<sub>7</sub>H<sub>8</sub><sup>-</sup> ANION

Radim Dostál<sup>1</sup>, Zbyněk Janoušek<sup>1</sup> and Ivana Císařová<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Inorganic Chemistry of the ASCR, v.v.i., CZ-250 68, Řež, Czech Republic.*

<sup>2</sup>*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Charles University, Hlavova 2030, CZ-128 40, Prague, Czech Republic*

Monocarbaboranes of general formula CB<sub>n</sub>H<sub>n+1</sub><sup>-</sup> are highly prized for their low nucleophilicity and they are also much sought as a weakly coordinating anions. The most studied members of this series are the CB<sub>11</sub>H<sub>12</sub><sup>-</sup> and CB<sub>9</sub>H<sub>10</sub><sup>-</sup> anions[1]. Until now, the synthesis of the seven-, eight- and nine- vertex monocarbaboranes has been a rather difficult task. However, new synthetic breakthroughs produced monocarbaboranes via the “Brellochs Reaction”[2] of aldehydes with nido B<sub>10</sub>H<sub>14</sub> to give arachno-6-CB<sub>9</sub>H<sub>14</sub><sup>-</sup>, starting an accelerated expansion in sub-icosahedral monocarbaborane chemistry. The anion is transformed in the next step to neutral arachno-4-CB<sub>8</sub>H<sub>14</sub>. This compound is a starting material for the preparation of the eight vertex closo monocarbaborane anion closo-1-CB<sub>7</sub>H<sub>8</sub><sup>-</sup>[3]. In our contribution we are focused on the substitution of this small cage, detailed study of electrophilic halogenation (bromination and iodination) of boron atoms, and electrophilic substitution (alkylation) of the carbon vertex of this small low nucleophilic anion.

[1] S. Körbe, P. J. Schreiber, J. Michl, Chem. Rev. 2006, 106(12), 5208 – 5249.

[2] B. Brellochs, Contemporary Boron Chemistry (M. G. Davidson, A. K. Hughes, T. B. Marder and K. Wade, Eds), p. 212. Royal Society of Chemistry, Cambridge (U.K.) 2000. Maximálne

[3] B. Brellochs, J. Bačkovský, B. Štíbr, T. Jelínek, J. Holub, M. Bakardjiev, D. Hnyk, M. Hofmann, I. Císařová, B. Wrackmeyer, Eur. J. Inorg. Chem. 2004, 3605-3611.



**2Po09****AU NANOVRSTVY NA PLAZMATICKY AKTIVOVANÉM PTFE**

P.Slepička<sup>1</sup>, Z.Kolská<sup>2</sup>, N.Kasálková<sup>1</sup>, J.Siegel<sup>1</sup>,  
A.Vasina<sup>1</sup>, V.Švorčík<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6, 166 28

<sup>2</sup>Katedra chemie, Univerzita J.E. Purkyně, Ústí nad Labem

V práci byl studován vliv plazmatické aktivace povrchu PTFE na změnu jeho polaritu, morfologie a zejména vlastností následně deponovaných Au nanovrstev. Polarita PTFE byla stanovena goniometricky (kontaktní úhel). Průměrná tloušťka Au byla určena pomocí atomové absorpční spektroskopie (AAS). Spojitost Au nanovrstev byla charakterizována měřením její plošné rezistance. Povrchová morfologie plazmaticky aktivovaného PTFE a naprašovaného Au byla studována mikroskopii atomárních sil (AFM).

Modifikace PTFE měla za následek nárůst jeho polaritu, změnu drsnosti a ovlivnila vlastnosti následně deponovaných Au nanovrstev. Drsnost PTFE po ozáření Ar plazmou klesá a rovněž se mění jeho povrchová morfologie. Závislost tloušťky naprašovaných Au vrstev na době depozice je kvadratická do doby depozice 130 s a lineární pro doby vyšší. Na původním PTFE se formuje elektricky spojitá vrstva pro delší doby depozice oproti plazmaticky modifikovanému PTFE. Depozice elektricky spojitě Au vrstvy na PTFE však nemá významný vliv na jeho povrchovou morfologii.

*Autoři děkují za finanční podporu grantům MŠMT č. LC06041, GAAVČR č. KAN400480701 a A400500505 a GAČR 106/09/P046.*

**2Po10****RŮST ZLATÝCH NANOVRSTEV NA HDPE A SKLE**

A. Chaloupka<sup>1</sup>, P. Šimek<sup>1</sup>, T. Hubáček<sup>1</sup>, J. Siegel<sup>1</sup>, A. Vasina<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6, 166 28, ales.chaloupka@vscht.cz

Zlato je předmětem zkoumání už od pradávna, ale v poslední době zažívá vědecký zájem o něj renesanci. Je to hlavně v souvislosti s jeho možným využitím v nanotechnologiích a při přípravě nových nanomateriálů. Velmi perspektivní jsou oblasti jako elektronické a senzorové materiály, lékařská diagnostika nebo biosenzory. Velké možnosti zlata a zlatých nanočástic slibuje také jejich kombinace s polymery [1].

Tato práce se zabývá studiem růstu zlatých nanovrstev na HDPE a skle. Zlaté nanovrstvy byly připravovány katodovým naprašováním. Množství naneseného zlata

bylo zjištěno gravimetricky. Tloušťka vrstev Au na skle byla změřena metodou AFM. Elektrická spojitost byla studována měřením plošného odporu. Zlaté vrstvy na obou substrátech byly charakterizovány rentgenovou difrakcí. Nakonec byla studována povrchová morfologie substrátu a následně nanesených zlatých nanovrstev pomocí AFM.

Bylo zjištěno, že s rostoucí dobou depozice roste vrstva Au rychleji na skle než na HDPE. Elektricky spojitá vrstva se také tvoří dříve na skle. Drsnost povrchu substrátu ovlivňuje drsnost zlaté vrstvy. Rentgenovou difrakcí bylo zjištěno, že se vrstvy zlata na HDPE a skle liší velikostí biaxiálního napětí, velikostí krystalitů a velikostí mikrodeformací krystalitů.

*Autoři děkují za finanční podporu grantům MŠMT č. LC06041, GAAVČR č. KAN400480701 a A400500505 a internímu grantu VŠCHT Praha č.126089004.*

[1] Švorčík V., Chaloupka A., et al. Nucl. Ins. Meth. B, v tisku

**2Po11****ELEKTRICKÉ VLASTNOSTI UHLÍKOVÝCH NANOVRSTEV PŘIPRAVENÝCH NAPAŘOVÁNÍM**

Hubáček T.<sup>a</sup>, Chaloupka A.<sup>a</sup>, Lyutakov O.<sup>a</sup>, Siegel J.<sup>a</sup>, Švorčík V.<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, Praha, 166 28, hubacekt@vscht.cz

Uhlíkové vrstvy připravené napařením metodou Flash mohou mít široké využití od elektronové mikroskopie po biomateriály. Výhodou takto připravených nanovrstev je jejich vysoká homogenita a spojitost[1]. Homogenita pokrytí povrchu vrstvou úzce souvisí s elektrickými vlastnostmi vrstvy. Při přechodu ze spojitě na nespojitou vrstvu dochází k výrazným změnám elektrických vlastností[2].

V této práci byl studován vliv depozičních podmínek na elektrické vlastnosti vrstvy. Jako substrát byl použit PTFE. Pro vrstvy byla stanovena teplotní závislost plošného odporu, na níž byl aplikován vztah  $R_s(T) \approx \exp((T_0/T)^{1/4})$ . Dále byla měřena V-A charakteristika. Pomocí UV-VIS byla stanovena absorbance vrstvy, na jejímž základě byla stanovena šířka zakázaného pásu podle Taucce.

Při poklesu teploty na hodnoty blízké teplotě dusíku dochází k významnému nárůstu plošného odporu. Po aplikaci výše uvedeného vztahu, vrstva s klesající teplotou vykazuje neohmický charakter, který lze podle Motta popsat jako tzv. variable range hopping mechanism. Neohmický charakter vodivosti byl zároveň potvrzen naměřenou V-A charakteristikou. Šířka opticky aktivovaného zakázaného pásu byla stanovena na 0,1 eV. Tato hodnota se blíží hodnotě šířky zakázaného pásu grafitu.

Autoři děkují za finanční podporu grantům MŠMT č. LC06041, GAAVČR č. KAN400480701 a A400500505.

- [1] Švorčík V., Hubáček T., Slepíčka P., et al., Carbon 47 (2009) 1770  
 [2] Švorčík V., Slepíčka P., Švorčíková J., et al., J APPL POLYM SCI 99 (2006) 1698

## 2Po12 STUDIUM SPOJITOSTI AU NANOVRSTEV NA POLYETHYLENU

Jakub Siegel, Kateřina Bartečková, Aleš Chaloupka, Tomáš Hubáček, Petr Slepíčka, Václav Švorčík

Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6, 166 28, jakub.siegel@vscht.cz

Ultratenké kovové filmy se v současnosti těší zájmu vědeckých skupin, zejména pro své unikátní vlastnosti v řadě technologických aplikacích. Neustálé zmenšování rozměrů otevírá dveře nové vědní disciplíně označované Size Dependent Chemistry. Aplikovaná miniaturizace v elektronice má za následek nárůst poměru povrchu aktivních struktur k jejich objemu a objevují se tak nové fenomény označované jako Surface Size a Quantum Size Effects. Kovové vrstvy, jejichž tloušťky se pohybují v řádech nanometrů, tak mohou vykazovat polovodiivý až izolační charakter [1]. Příprava kovových struktur na polymerech vyžaduje vhodnou úpravu povrchu polymeru před depozicí kovu. Možnost jak modifikovat povrchové vlastnosti polymerů při zachování charakteristických vlastností objemových, je expozice povrchu plazmatem [2,3].

Práce se zabývá modifikací povrchu polyethylenu Ar plazmatem, roztokem 1,2-ethandithiolu a roztokem Au nanočástic, s cílem snížit plošnou rezistanci následně deponovaných Au nanovrstev. Sledovány byly změny povrchové morfologie polymeru v různých stupních modifikace metodou AFM a přechod k elektricky spojitě vrstvě při depozici Au měřením plošné rezistance.

Fyzikální i chemická modifikace PE způsobuje změny povrchové morfologie. Tato práce prokázala možnost urychlení tvorby elektricky spojitě Au vrstvy při depozici kovu na modifikovaný povrch PE.

Autoři děkují za finanční podporu grantům MŠMT č. LC06041, GAAVČR č. KAN400480701 a A400500505 a internímu grantu VŠCHT Praha č.402089042.

- [1] Emil Roduner, Chem. Soc. Rev. 35, 583 (2006).  
 [2] Siegel J., et al., Radiat. Eff. Def. Sol. 163, 779 (2008).  
 [3] Jakub Siegel, et al., Mater. Sci. Forum 567, 261 (2007).

## 2Po13 CYTOTOXICITY OF CU(II), PD(II) AND PT(II) COMPLEXES INVOLVING N6-BENZYLADENINE DERIVATIVES IN SELECTED HUMAN CANCER CELL LINES AND PRIMARY HUMAN HEPATOCYTES

Radim Vrzal<sup>1</sup>, Pavel Štarha<sup>2</sup>, Alena Klanicová<sup>2</sup>, Zdeněk Dvořák<sup>1</sup>, Zdeněk Trávníček<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Cell Biology and Genetics, Faculty of Science, Palacký University, Šlechtitelů 11, 783 11 Olomouc, Czech Republic

<sup>2</sup>Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc, Czech Republic

Cu(II), Pt(II) and Pd(II) complexes of the [Cu<sub>2</sub>(μ-L)<sub>4</sub>(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> · nCH<sub>3</sub>OH (**1**, **2**), [Pt(L)<sub>2</sub>(ox)] (**3–5**) and [Pd(L)<sub>2</sub>(ox)] · xH<sub>2</sub>O (**6–9**) types, where L stands for various substituted N6-benzyladenine derivatives and ox represents oxalate dianion, were prepared and characterized by various physical methods including single-crystal X-ray analysis [1]. N6-Benzyladenine, a naturally occurring cytokinin, and especially its C2-,N9-substituted analogues {e.g. 2-[(R)-(1-ethyl-2-hydroxyethylamino)]-N6-benzyl-9-isopropyladenine, *roscovitine*} show a broad spectrum of biological features, e.g. anticancer properties. Moreover, the transition metal complexes involving the mentioned ligands are potentially biologically active, in particular, against distinct types of cancers. Therefore, we decided to test *in vitro* cytotoxicity of the complexes **1–9** against human osteosarcoma (HOS) and human breast carcinoma (MCF-7) cell lines. In addition, the cytotoxicity of the tested compounds was assessed in two different primary human hepatocyte cultures. Cells were incubated with tested compounds for 24 hrs. Cell viability was assessed by MTT test and IC<sub>50</sub> values were calculated from three independent experiments [2]. The obtained results were compared with those of *cis*-diamminedichloridoplatinum(II) (*cisplatin*). Some of the studied complexes were found to be more cytotoxic against human cancer cell lines compared to the commercially used platinum-based drug *cisplatin*.

The financial support by a grant MSM6198959218 from the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic is greatly acknowledged.

- [1] Štarha P. et al (2009) Synthesis, characterization and *in vitro* cytotoxicity of the first palladium(II) oxalato complexes involving adenine-based ligands. *J. Inorg. Biochem.* Corrected Proof, doi:10.1016/j.jinorgbio.2009.04.008.  
 [2] Dvořák Z. et al. (2006) Quaternary benzo[c]phenathridine alkaloids sanguinarine and chelerythrine do not affect transcriptional activity of aryl hydrocarbon receptor: analyses in rat hepatoma cell line H4IIE.luc. *Food Chem Toxicol* **44(9)**:1466-73.

**2Po14****VLIV MOLEKULOVÉ HMOTNOSTI PEG NA BIODOPATIBILITU PE**

N. Kasálková<sup>a</sup>, Z. Makajová<sup>a</sup>, P. Slepíčka<sup>a</sup>, L. Bačáková<sup>b</sup>, M. Pařízek<sup>b</sup>, V. Švorčík<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 166 28 Praha, Česká republika

<sup>b</sup>Fyziologický ústav, Akademie Věd České republiky, 142 20 Praha, Česká republika

Tkářové inženýrství je založeno na vytváření „nových“ tkání s jejich následným umístěním v těle. Základem je vytvořit „inteligentní“ biomateriál, který stimuluje specifickou reakci buněk [1]. V této práci byla studována biokompatibilita PE modifikovaného PEG o 3 různých molekulových hmotnostech. HDPE byl degradován Ar<sup>+</sup> plasmatem a následně na něj byl roubován PEG o M 300, 6000 a 20 000 g/mol. Změny povrchové morfologie a drsnosti byly zjišťovány pomocí mikroskopie atomárních sil (AFM). Adheze a proliferace hladkých svalových buněk (VSMC) byla studována metodou *in vitro*. Bylo zjištěno, že modifikace plasmatem vede k výrazné změně povrchové morfologie a vzrůstu drsnosti. Navázáním PEG na povrch PE dojde ke snížení drsnosti a ke změně morfologie v závislosti na molekulové hmotnosti PEG. Dále bylo zjištěno, že počet adhezujících a proliferujících buněk je závislý na molekulové hmotnosti naroubovaného PEG.

Autoři děkují za finanční podporu grantům MŠMT č. LC06041, GAAVČR č. KAN400480701 a A400500505 a internímu grantu VŠCHT Praha č.126089005.

[1] T.Prnka, K.Šperlink, Bionanotechnologie, nanobiotechnologie, nanomedicína, Ostrava, 9/2006, ISBN 80-7329-134-7

**2Po15****FYZIKÁLNĚ–CHEMICKÉ VLASTNOSTI PE ROUBOVANÉHO PEG**

Z. Makajová<sup>1</sup>, N. Kasálková<sup>1</sup>, A. Macková<sup>2</sup>, V. Švorčík<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav inženýrství pevných látek, VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika

<sup>2</sup>Ústav jaderné fyziky, AVČR, 250 68 Řež, Česká republika

V medicínské praxi se používají polymerní materiály vzhledem k jejich velké variabilitě mechanických a biologických vlastností. Tyto materiály musí splňovat přísné normy snášenlivosti a netoxicity s lidským organismem. Pro bioaplikace se povrch polymeru často modifikuje v plasmatickém nebo laserovém výboji a poté roubuje aminokyselinami nebo jinými sloučeninami [1].

V této práci byly studovány fyzikálně-chemické vlastnosti polyethylenu (PE), který byl modifikován plasmatickým výbojem (50, 150, 400 s) a následně

roubován poly(ethylenglykol) (PEG) o molekulové hmotnosti (300, 6 000, 20 000 g/mol). Bylo studováno stárnutí vzorků pomocí goniometrie, koncentrační profil kyslíku metodou RBS (Ruhefordův zpětný rozptyl).

Bylo zjištěno, že po ca 14 dnech od expozice v plasmě se hodnota kontaktního úhlu „ustálí“ [2], s rostoucí molekulovou hmotností PEG klesá u „vyzrálých“ vzorků polarita. Metodou RBS byl zjištěn nárůst koncentrace kyslíku v povrchové vrstvě, což prokazuje, že došlo k naroubování PEG na radiačně poškozená místa na povrchu PE.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA AVČR (KAN400480701, KAN 200100801), MŠMT (6046137302, LC06041) a VŠCHT (126089005)

[1] V. Švorčík, K. Kolářová, P. Slepíčka, A. Macková, M. Novotná, V. Hnатовicz: Polym. Degr. Stab., 91, 219-1225, 2006

[2] V. Švorčík, K. Kolářová, P. Slepíčka, A. Macková, M. Novotná, V. Hnатовicz: Modification of surface properties of high and low density polyethylene by Ar plasma discharge, Polym. Degr. Stab., 91, 219-1225, 2006

**2Po16****PŘÍPRAVA SLOUČENIN TYPU Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZrO<sub>2</sub>**

Pavel Bystrzycki, Petra Šulcová

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

Většina dříve používaných anorganických pigmentů obsahuje těžké kovy nebo prvky přechodných kovů, které mohou mít nepříznivý vliv na člověka a životní prostředí po překročení dané kritické hranice. Do kategorie nebezpečných pigmentů patří také chromové žluté, oranžové a kadmennaté sloučeniny. Z důvodu zpřísnění ekologických norem je snahou nalézt nové sloučeniny, které by do budoucna nahradily pigmenty s obsahem olova, kadmia a šestimocného chromu. Cílem práce je tedy nalézt nové sloučeniny s odstíny žluté a oranžové barvy. Jednou z možností jsou pigmenty na bázi Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, které mají zajímavé barevné odstíny od žlutých po oranžové a jsou ekologicky přijatelné. Intenzivní barvy těchto pigmentů vznikají začleněním chromoforů (zejména lanthanoidů) do hostitelské mřížky Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Přítomnosti prvků vzácných zemin v kubické mřížce Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub> lze také přispět ke zvýšení termické stability pigmentů.

Pigmenty typu Bi<sub>2-x</sub>Er<sub>x/2</sub>Zr<sub>3x/8</sub>O<sub>3</sub> byly syntetizovány klasickým suchým způsobem a také srážením. Jako výchozí suroviny byly použity Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Er<sub>2</sub>O<sub>3</sub> a Zr(SO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>·4H<sub>2</sub>O. Reakční směsi o složení x = 0.2 byly kalcinovány při teplotách 700, 750, 800 a 850 °C po dobu 2h. Připravené pigmenty byly aplikovány do organického pojiva a následně byla jejich barevnost

měřena ve viditelné oblasti světla pomocí spektrofotometru Color Quest XE (HunterLab, USA).

*Tato práce je realizována za finanční podpory GAČR (104/08/0289).*

## 2Po17

### MICROWAVE ASSISTED ALKYLATION OF CARBORANES. NEW METHOD OF METHYLATION OF CLOSO -1-CB<sub>9</sub>H<sub>10</sub><sup>-</sup> ANION AND ITS C-SUBSTITUTED DERIVATIVES.

Lillian E. Johnson<sup>1</sup>, Michal Valášek<sup>2</sup>, Bryan Ringstrand<sup>1,3</sup>, Zbyněk Janoušek<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Inorganic Chemistry, ASCR, v.v.i., 250 68, Řež, Czech Republic, <sup>2</sup>Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, ASCR, v.v.i. 166 10 Prague 6, <sup>3</sup>on leave from Dr. Piotr Kaszynski's Organic Materials Research Group, Department of Chemistry, Vanderbilt University, Nashville, Tennessee 37235*

The monocarborane anion [closo-CB<sub>9</sub>H<sub>10</sub><sup>-</sup>] (**1**) belongs to the group of anions of the general formula CB<sub>n</sub>H<sub>n+1</sub><sup>-</sup>, where the anionic charge is highly delocalized. These anions possess chemical, electrochemical and thermal stability; thus, they are useful in weakly coordinating and low nucleophilicity anion chemistry[1.]. Substitution of the B-H vertices in this type of clusters improves their stability. Recently, we have published an improved synthesis of anion **1** and its new C-substituted derivatives[2.]. In our contribution, we will report a new method for methylation of the C-substituted derivatives of anion **1**: microwave assisted alkylation, using methyl triflate as an alkylating agent and sulfolane as a solvent. Utilizing microwaves makes the reaction time dramatically shorter- from weeks to hours.

[1] Strauss S. H., *Chem. Rev.* **1993**, 93, 927.

[2] Ringstrand B., Bateman D., Shoemaker R.K., Janoušek Z., *Collet. Czech. Chem. Commun.* **2009**, 74, 419.

## 2Po18

### PŘÍPRAVA NANOMATERIÁLŮ Z LYOTROPNÍCH KAPALNÝCH KRYSTALŮ

Tereza Uhlířová, Peter Barath, Martina Náděrná, Jakub Reiter\*

*Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i., 250 68 Řež, Česká republika, reiter@iic.cas.cz*

Některé neionogenní surfaktanty mohou vytvářet s vodou kapalně lyotropní krystaly (LLC) ve formě vysoce organizovaných struktur, v jejichž prostředí je možné připravovat celou řadu nanomateriálů, kovů i oxidů [1]. Na rozdíl od kapalných roztoků, kde jsou ionty rovnoměrně solvatovány, v LLC je možná distribuce iontů mezi dvě fáze – polární vodnou a nepolární fázi surfaktantu. Náplní našeho současného výzkumu je studium difúze a transportu iontů v

prostředí LLC a příprava nanomateriálů pro katalyzátory nízkoteplotních H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> palivových článků.

Vzhledem k tomu, že většina materiálů se připravuje v prostředí LLC elektrochemicky, limitujícím faktorem je rychlost difúze iontů uvnitř organizované struktury kapalného krystalu. Pro studium transportu byly zvoleny dva systémy: [Fe(CN)<sub>6</sub>]<sup>3-/4-</sup> a ferrocen / ferricinium. Oba redoxní páry vykazaly vysoce reverzibilní chování v prostředí LLC a z voltametričeských dat byly získány kvalitativní i kvantitativní parametry obou reakcí [2]. Další výzkum je zaměřen na elektrochemickou přípravu mezoporézního niklu a oxidu manganicitého. Oba materiály jsou vhodné pro alkalické palivové články, kde mohou nahradit drahé katalyzátory na bázi platiny. Budou prezentovány dosažené výsledky studia oxidace vodíku na nanostrukturu niklu a redukce kyslíku na MnO<sub>2</sub>. Připravené nanomateriály jsou perspektivní také pro použití v superkondenzátorech.

*Tato práce vznikla za podpory Akademie věd ČR (AV0Z40320502), MŠMT ČR (LC523) a Grantové agentury AV ČR (KJB200320801).*

[1] G.S.Attard, J.C. Glyde: *Nature* 378 (1995) 366.

[2] J. Reiter, T. Uhlířová, J.R. Owen: *Electrochim. Acta*, v recenzii.

## 2Po19

### PEROVSKITOVÉ PIGMENTY TYPU ORTHOFERRITŮ

Markéta Zikmundová, Žaneta Dohnalová, Petra Šulcová

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

Vzhledem k tomu, že na trhu pigmentů stále chybí pigment v sytých červených a oranžových odstínech s dostatečnou termickou i chemickou stabilitou, je pozornost neustále soustředěna na hledání takového pigmentu. Jednou z možností se jeví využití lanthanoidů, které by při včlenění do vhodné hostitelské mřížky, např. perovskitové, mohly poskytnout tyto odstíny.

Reakcí v pevné fázi byly připraveny pigmenty typu Ln<sub>0,98</sub>Ca<sub>0,02</sub>FeO<sub>2,99</sub> a FeLnO<sub>3</sub>, kde Ln = La, Gd, Lu, Tm, Yb, Ho. Jako výchozí zdroj železitých iontů byl nejprve použit Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> a v případě pigmentů Ln<sub>0,98</sub>Ca<sub>0,02</sub>FeO<sub>2,99</sub> také FeO(OH). Připravené reakční směsi výchozích surovin byly připraveny mechanoaktivací a následným výpalem při teplotách 800 až 1100 °C. Byl sledován vliv jednotlivých lanthanoidů, výchozí suroviny železa a teploty výpalu na pigmentově-aplikační vlastnosti připravených pigmentů. Barevné vlastnosti pigmentů typu Ln<sub>0,98</sub>Ca<sub>0,02</sub>FeO<sub>2,99</sub> i FeLnO<sub>3</sub> byly hodnoceny po aplikaci do organického pojivového systému. Nejintenzivnější oranžový odstín poskytují po výpalu na 900 °C pigmenty typu Ln<sub>0,98</sub>Ca<sub>0,02</sub>FeO<sub>2,99</sub> první

řady, tzn. připravené z  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ , obsahující Yb, Tm a Lu. Z druhé řady pigmentů typu  $\text{Ln}_{0,98}\text{Ca}_{0,02}\text{FeO}_{2,99}$  vykazují nejoranžovější odstín pigmenty s obsahem Ho a Lu vypálené při teplotě 800 °C a 900 °C.

Z pigmentů typu  $\text{LnFeO}_3$  poskytují nejzajímavější červenooranžový odstín pigmenty obsahující lanthan a gadolinium připravené výpalem na 1000 a 1100 °C

*Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru č. MSM 0021627501 a projektu grantové agentury ČR č. 104/08/0289.*

## 2Po20

### APCI SONDA - ÚČINNÝ NÁSTROJ PRO MĚŘENÍ HMOTNOSTNÍCH SPEKTER BOROVÝCH SANDWICHOVÝCH KOMPLEXŮ

Magdalena Kvičalová, Josef Holub, Bohumír Grüner, Jaromír Plešek

*Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i., Husinec-Řež 1001, 250 68 Řež, ČR*

APCI (Atmospheric Pressure Chemical Ionization) je forma chemické ionizace, při níž dochází ionizaci měřené látky interakcí s ionty vznikajícími z nosného plynu nebo rozpouštědla elektrickým výbojem za vysoké teploty. Zatímco v hmotnostních spektrech zwitteriontových boranových klastřů sandwichového typu měřených metodou APCI jsme pozorovali výrazný pseudomolekulový pík  $[\text{M}+\text{H}]^+$ , při použití standardní metodiky ESI (Electrospray Ionization) měla hmotnostní spektra mnohem složitější strukturu s mnoha neidentifikovatelnými fragmenty.

Z chemie organokovových sloučenin je známo, že měření hmotnostních spekter ferrocenů metodou ESI bývá doprovázena oxidačně-redukčními jevy. Měření dvou sérií isomerních *closotetra*-ferratrikarbolidů  $[1-\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5\text{-2,4-R}^1\text{R}^2\text{-12-}t\text{-BuNH-1,2,4,12-FeC}_3\text{B}_8\text{H}_8]$  a  $[1-\eta^5\text{-C}_5\text{H}_5\text{-2,4-R}^1\text{R}^2\text{-10-}t\text{-BuNH-1,2,4,10-FeC}_3\text{B}_8\text{H}_8]$  ( $\text{R}^1, \text{R}^2 = \text{H, H; H, Me; Me, Me; H, Ph; Ph, Ph}$  nebo  $\text{H, Fc}$ ), které jsou isoelektronovými analogy ferrocenu, metodou ESI byla získána, i přes optimalizaci parametrů, vždy komplexní hmotnostní spektra s mnoha fragmentacemi. Použití APCI ionizace poskytlo, po optimalizaci, vždy výrazný molekulový pík kation radikálu  $[\text{M}]^{+}$ . Na posteru budou diskutovány výsledky použití obou metod ionizace, rozdíly mezi ESI a APCI MS spektry obou řad ferratrikarbolidů a uvedeny příklady užití APCI metod pro měření hmotnostních spekter některých dalších zwitteriontů odvozených substitucí od iontových klastrových sloučenin boru.

*Tato práce byla podpořena z projektu GA AV (grant IAA400310613).*

## 2Po21

### DFT VÝPOČTY PARAMETRŮ $^{57}\text{Fe}$ MÖSSBAUEROVY SPEKTROSKOPIE

Michal Čajan & Zdeněk Trávníček

*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Třída 17. listopadu 12, 779 00 Olomouc, Česká republika, e-mail: michal.cajan@upol.cz*

Železo se řadí mezi důležité biogenní prvky a stále častěji se s ním také lze setkat v souvislosti s vývojem nových materiálů a technologií. V řadě těchto případů je atom železa vázán v koordinačních sloučeninách s komplikovanou strukturou, nežádka ve směsných oxidačních a spinových stavech. Vývoj nových materiálů či léčiv a optimalizace jejich funkce jsou závislé právě na znalosti struktury, distribuce elektronové hustoty a souvisejících vlastnostech. V případě sloučenin železa lze využít kromě standardních fyzikálně-chemických metod také  $^{57}\text{Fe}$  Mössbauerovy spektroskopie. Klíčové parametry Mössbauerova spektra závisí jednak na elektronové hustotě v okolí sledovaného atomu, jednak na gradientu elektrického pole jeho jádra. Metoda tak představuje nástroj umožňující charakterizaci oxidačního i spinového stavu, stejně jako popis elektronové struktury a geometrie koordinační sféry.[1] Spektrální parametry je navíc také možné vypočítat metodami na bázi teorie funkcionálu hustoty (DFT), což může značně podpořit strukturální interpretaci experimentálně získaných informací.[2]

Prezentovaný příspěvek se zabývá analýzou vztahů mezi hodnotami teoreticky vypočítaných mössbauerovských parametrů a geometrickými a chemickými změnami v koordinační sféře vybraných komplexních sloučenin železa se známou, krystalograficky určenou molekulovou strukturou. Experimentálně naměřené parametry jsou také porovnávány s parametry vypočítanými pro geometrie optimalizované vybranými teoretickými metodami (DFT, MP2).

*Práce vznikla za podpory Grantové agentury AV ČR (IAA401370901) a Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR (MSM6198959218).*

[1] P. Gülich, R. Link, A. Trautwein, *Mössbauer Spectroscopy and Transition Metal Chemistry*, Springer, Heidelberg, 1978.

[2] F. Neese, *Inorg. Chim. Acta* **2002**, 337, 181-192. V. N. Nemykin, R. G. Hadt, *Inorg. Chem.* **2006**, 45, 8297-8307

**2Po22****VLIV MINERALIZÁTORŮ NA BAREVNOST PIGMENTU  $\text{Ce}_{0,9}\text{TB}_{0,1}\text{O}_2$** 

Vitásková L.<sup>1</sup>, Bořková K., Šulcová P.

<sup>1</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra anorganické technologie, Nám. Čs. Legií 565, 532 10 Pardubice, Česká Republika, Lucie.Vitaskova@upce.cz

Keramické pigmenty jsou anorganické struktury obsahující chromofory, které mají funkci barvicí složky. Tyto pigmenty jsou dispergovány ve vhodném pojivovém systému (např. keramická glazura), se kterým tvoří heterogenní směs[1].

V našem případě se jedná o včleňování iontů terbia do hostitelské mřížky  $\text{CeO}_2$ . Jelikož se tyto keramické pigmenty řadí mezi vysokoteplotní pigmenty, jejich kalcinace probíhá až při teplotách okolo 1500 °C, je zde snaha o snížení finální teploty kalcinace. Z tohoto důvodu byly použity různé typy mineralizátorů a vzorky s jejich přísadkami byly kalcinovány při teplotách 1100, 1200, 1300 a 1400 °C. Dopované pigmenty byly pak porovnávány s pigmentem bez mineralizátoru kalcinovaného při teplotě 1500 °C.

Všechny připravené pigmenty byly proměřeny z hlediska barevných vlastností spektrofotometrem ColorQuest XE, kde byl použit barevný prostor CIEL\*a\*b\* s barevnými souřadnicemi L\*, a\*, b\*. Dále byly barevné vlastnosti popsány mírou sytosti S ( $S = [(a^*)^2 + (b^*)^2]^{1/2}$ ) a barevným tónem H° ( $H^\circ = \arctg(b^*/a^*)$ ). Také byla u vzorků proměřena velikost částic v závislosti na obsahu mineralizátorů a teplotě výpalu.

Tato práce vznikla za finanční podpory GAČR č. 104/08/0289 a MSM č. 0021627501.

[1] Costa A.L., Cruciani G., Dondi M.: Industrial Ceramics, Volume 23 (2003) 1-11.

**2Po23****PŘÍPRAVA A BAREVNÉ VLASTNOSTI PIGMENTŮ TYPU  $(\text{Bi}_{1-x}\text{Yb}_x)_2\text{O}_3$** 

Eva Proklešková<sup>1</sup>, Jana Hořejší, Milena Kaufmannová, Petra Šulcová

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, Česká republika, eva.prokleskova@student.upce.cz

V současné době jsou na naší katedře hledány nové anorganické pigmenty, které eliminují použití těžkých kovů, a které by svojí barevností i ostatními pigmentovými vlastnostmi nahradily doposud používané žluté a oranžové pigmenty. Hlavní pozornost je soustředěna především na přiblížení se optickým a pigmentovým vlastnostem tradičních pigmentů ovšem za použití ekologicky bezproblémových surovin [1].

V této práci je hlavní pozornost soustředěna na sledování barevných vlastností sloučenin typu  $(\text{Bi}_{1-x}\text{Yb}_x)_2\text{O}_3$ , kde x = 0.1 až 0.9 (s krokem 0.1). Tyto sloučeniny byly nejprve připravovány reakcí v pevné fázi, a to smícháním příslušných oxidů a následným výpalem při teplotách 700, 750, 800 a 850 °C. Byl sledován jednak vliv obsahu yterbia a teploty výpalu na barevné vlastnosti pigmentů, a dále pak u barevně nejzajímavějšího pigmentu vliv mletí, mineralizátorů a způsobu přípravy na změnu jeho barevného odstínu. Jako mineralizátory byly použity: NaF, KCl,  $\text{AlF}_3$ ,  $\text{MgF}_2$ ,  $\text{CaF}_2$ ,  $\text{Na}_2\text{SiF}_6$  a  $\text{Na}_3\text{AlF}_6$ , a to v množství 5 hmot.%. Vzorky s mineralizátory pak byly vypáleny při teplotách 700, 750, 800 a 850 °C. Jako další způsob přípravy bylo využito suspenzní mísení surovin a srážení.

Připravené pigmenty  $(\text{Bi}_{1-x}\text{Yb}_x)_2\text{O}_3$  pokrývají žádaný sortiment žluto-oranžových a oranžových odstínů. Nejzajímavější oranžovou barvu poskytuje pigment  $(\text{Bi}_{0,6}\text{Yb}_{0,4})_2\text{O}_3$  připravený srážecí metodou.

Tato práce vznikla za finanční podpory GAČR č. 104/08/0289 a MSM č. 0021627501.

[1] Šulcová P., Jurčíková D., Voženílková J., Trojan M.: Pigmenty na bázi  $\text{Bi}_2\text{O}_3$ . Sb. konf. „Nové trendy v anorganické technologii 2005“. 26.5. – 27.5.2005. Praha. str. 134-141.

**2Po24****PŘÍPRAVA PÓROVITEJ  $\text{Si}_3\text{N}_4 - \text{SiO}_2$  KERAMIKY PRE BIOAPLIKÁCIE**

Peter Čopan<sup>1</sup>, Miroslav Hnatko<sup>2</sup>, Pavel Fellner<sup>1</sup>, Pavol Šajgalík<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Radlinského 9, Bratislava

<sup>2</sup>Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, Bratislava

Voľným spekaním  $\text{Si}_3\text{N}_4$  prášku s krupicou na vzduchu sa podarilo pripraviť  $\text{Si}_3\text{N}_4 - \text{SiO}_2$  materiál s rôznou pórovitosťou. Veľkosť pórov bola optimálna ( $\approx 100 \mu\text{m}$  podobne ako v prípade ľudskej kosti) a ich objemový podiel je možné meniť rôznym hmotnostným prídavkom krupice do východiskovej zmesi. Bolo pozorované, že veľké póry (dôsledok prídavku krupice) sú skôr izolované na rozdiel od malých pórov, ktoré tvoria spojitú sieť v objeme materiálu. V prípade vzorky bez prídavku krupice, pórovitosť bola 23%, na rozdiel od matrice vzorky, ktorá obsahovala 20 hm.% krupice, kde to bolo až 40%. Hustoty pripravených vzoriek sú porovnateľné s hustotami ľudských kostí ( $1,6 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3} - 2,2 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ).

Chemickou analýzou bola potvrdená prítomnosť  $\text{SiO}_2$  fázy (kristobalit, tridymit), ktorá vzniká v procese spekania oxidáciou  $\text{Si}_3\text{N}_4$ . Prítomnosť  $\text{SiO}_2$  zvyšuje schopnosť upevňovania ľudskeho tkaniva k implantovanému materiálu. Množstvo a forma vznikajúceho  $\text{SiO}_2$  závisí od podmienok spekania.

Pevnosť výrazne závisela od objemového podielu pórov. Bol pozorovaný pozitívny vplyv izostatického lisovania green body na konečnú pevnosť pripraveného materiálu. Pri porovnaní pevností pripravených vzoriek (350 MPa – 550 MPa) s pevnosťou v tlaku kortikálnej kosti (30 MPa – 360 MPa), môžeme konštatovať, že daným spôsobom prípravy materiálu je možné sa priblížiť k mechanickým vlastnostiam ľudských kostí.

Na vzorkách bola pozorovaná dostatočná adhézia buniek k povrchu a nedochádzalo k ich odlúčeniu (odštiepeniu). Histologicky sa dokázalo, že pripravené materiály sú biokompatibilné, bioinertné a, že nie sú cytotoxické.

Práca vznikla v rámci projektu APVV-0203-07.

## 2Po25

### KOORDINAČNÉ ZLÚČENINY CU (II) S N-METYLDERIVÁTMI ETÁN-1,2-DIAMÍNU A S ANIÓMOM BF<sub>4</sub><sup>-</sup>

Jaroslava Haníková<sup>1</sup>, Juraj Kuchár<sup>1</sup>, Juraj Černák<sup>1</sup>, Zdeněk Trávníček<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesova 11, 041 54 Košice, SR

<sup>2</sup> Katedra anorganickej chémie, Univerzita Palackého, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc, ČR

Štúdium koordinačných zlúčenín z hľadiska magnetických vlastností predstavuje v súčasnosti jeden z hlavných záujmov v koordinačnej chémii [1]. Zistilo sa, že dôležitú štruktúrnú úlohu pri sprostredkovaní magnetických výmenných interakcií môžu zohrávať aj vodíkové väzby [2]. V rámci nášho širšieho štúdia vodíkových väzieb ako potenciálnych ciest magnetických výmenných interakcií sme zo sústavy Cu<sup>2+</sup> – L-L – BF<sub>4</sub><sup>-</sup> (L-L = deriváty etán-1,2-diamínu) izolovali novú látku [Cu(men)<sub>2</sub>(BF<sub>4</sub>)<sub>2</sub>] (men = N-metyl-etán-1,2-diamín) (1). Pripravená látka bola charakterizovaná chemickou prvkovou analýzou, IČ a UV-VIS spektroskopiou. Kryštalová štruktúra 1 je tvorená molekulami [Cu(men)<sub>2</sub>(BF<sub>4</sub>)<sub>2</sub>], v ktorých atóm Cu(II) je koordinovaný deformovane oktaedricky v tvare 4+2 dvoma molekulami chelátového liganda men v ekvatoriálnej rovine (priemerná hodnota Cu-N je 2,0243(12) Å), kým axiálne polohy obsadzujú monodentátne BF<sub>4</sub><sup>-</sup> ligandy (Cu-F je 2,5091(11) Å). Kryštalová štruktúra 1 je stabilizovaná intra- a intermolekulovými vodíkovými väzbami typu N-H...F. Analýzou teplotnej závislosti magnetickej susceptibility 1 (2-300 K) podľa Curie-Weissovho zákona sa získali hodnoty Weissovej konštanty  $\theta = -0,494(1)$  K a efektívneho magnetického momentu  $\mu_{\text{eff}} = 1,94 \mu_{\text{B}}$ . Výsledky sa diskutujú.

Za finančnú podporu ďakujeme projektom APVV-VVCE-0058-07, APVV-0006-07, VEGA-1/0089/09, VVGS UPJŠ 37/09-10, VVGS PF UPJŠ 19/2009/CH a MSM6198959218.

[1] R. Boča: *Coord. Chem. Rev.*, 248 (2004) 757.

[1] M. Orendáčová, M. Kajňaková, J. Černák, J.-H. Park, E. Čížmar, M. Orendáč, A. Vlček, O. V. Kravtchyna, A. G. Anders, A. Feher, M. W. Meisel: *Chem. Phys.*, 309 (2005) 115.

## 2Po26

### PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF FLUORESCENT SILANES FOR MODIFICATION OF ORGANOCCLAYS.

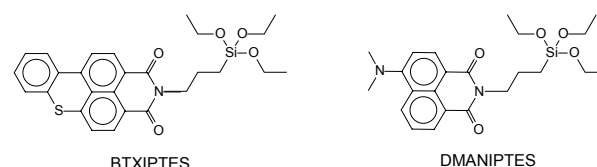
Martin Danko<sup>1</sup>, Pavol Hrdlovič<sup>1</sup>, Juraj Bujdák<sup>2</sup>, Dušan Chorvát, jr.<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Department of Photochemistry of Polymers, Polymer Institute, Slovak academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovakia.

<sup>2</sup> Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, Bratislava, Slovakia.

<sup>3</sup> International Laser Center, Bratislava, Slovakia.

In recent years, there has been an extensive effort for the development of optofunctional materials, in which dye molecules are embedded in solid host compounds. The most important features of molecular aggregation are the significant changes in the chemical, but mainly, the optical properties of the chromophore units. In this work two neutral fluorophores with alkoxy silane moiety were synthesized by condensation of aminopropyl-triethoxy silane with anhydrides of benzothioxanthene fluorophore (*N*-(3-(triethoxysilyl)propyl)-thioxanthene[2,1,9-dej]isoquinoline-1,3-dione, BTXIPTES) and dimethylaminonaphthalene fluorophore (*N*-(3-(triethoxysilyl)propyl)-*N,N*-dimethylaminonaphthalene-1,8-dicarboxy imide, DMANIPTES) accompanied with formation of imide bridge.



The new neutral dyes were characterized by UV-Vis and static and time-resolved fluorescence spectroscopies in chloroform solution. Typical absorption and emission bands of BTXIPTES and DMANIPTES fluorophores were in the same region as for unsubstituted fluorophores. Large Stoke's shift was observed for DMANIPTES. Additionally, such fluorescent silane were covalently linked to surface activated SiO<sub>2</sub> wafers and to layered silicates as fluorohectorite and laponite. These modification was proved and characterized by fluorescence microscopy and confocal laser scanning microscopy.

This work was supported by the research grants from the Slovak Research and Development Grant Agency

APVV-51-027405, VEGA grant agency through grant no. 2/0097/09 and 2/0089/09 and CE MACHINA.

## 2Po27

### EXTRAKCE TROJMOCNÝCH RADIONUKLIDŮ KOBALT BIS(DIKARBOLLIDOVÝMI) ČINIDLY S CMPO FUNKČNÍ SKUPINOU

Mária Lučaníková<sup>1</sup>, Pavel Selucký<sup>1</sup>, Magdalena Kvičalová<sup>2</sup>, Jaromír Plešek<sup>2</sup>, Bohumír Grüner<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav jaderného výzkumu Řež a.s., Husinec-Řež 130, 250 68 Řež, ČR

<sup>2</sup>Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i., Husinec-Řež 1001, 250 68 Řež, ČR

V posledním desetiletí byla vyvinuta činidla na bázi dikarbollidu kobaltitého *closo*-[(1,2-C<sub>2</sub>B<sub>9</sub>H<sub>11</sub>)<sub>2</sub>-3,3'-Co(III)] (COSAN)<sup>1-3</sup> modifikovaná funkční skupinou *N,N*-dialkyl karbamoylmethyl-difenyfosfin oxidu (CMPO), která byla dále testována pro separaci vybraných trojmocných radionuklidů z odpadních radioaktivních roztoků. U činidel byl studován především vliv způsobu připojení CMPO skupiny ke COSANovému skeletu a vliv substituentů na dusíku amidické skupiny.

Syntéza byla založena na modifikaci skeletu COSANů amoniiovými skupinami. Ze čtyř druhů připojení byly detailně studovány dva typy sloučenin s nejvyšší extrakční účinností. První je založen na látkách s amoniiovou skupinou připojenou přímo na kobaltakarboranový skelet [(8-RH<sub>2</sub>N-1,2-C<sub>2</sub>B<sub>9</sub>H<sub>10</sub>)(1',2'-C<sub>2</sub>B<sub>9</sub>H<sub>11</sub>)-3,3'-Co]<sup>1</sup>. Druhá skupina je odvozena od 8-dioxanium-COSANu [(8-(OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>-1,2-C<sub>2</sub>B<sub>9</sub>H<sub>10</sub>)(1',2'-C<sub>2</sub>B<sub>9</sub>H<sub>11</sub>)-3,3'-Co]<sup>2</sup>, který po otevření různými primárními aminy poskytuje ve vysokém výtěžku amoniiové deriváty, u nichž je atom dusíku připojen diethylenglykolovou spojkou. Oba typy amoniiových derivátů byly převedeny na odpovídající iontové CMPO deriváty COSANu<sup>2,3</sup> – [(8-CMPO-1,2-C<sub>2</sub>B<sub>9</sub>H<sub>10</sub>)(1',2'-C<sub>2</sub>B<sub>9</sub>H<sub>11</sub>)-3,3'-Co]<sup>1</sup>, [(8-CMPO-(CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>-1,2-C<sub>2</sub>B<sub>9</sub>H<sub>10</sub>)(1',2'-C<sub>2</sub>B<sub>9</sub>H<sub>11</sub>)-3,3'-Co]<sup>2</sup>, kde CMPO = Ph<sub>2</sub>P(O)-CH<sub>2</sub>C(O)NR následnou reakcí s *p*-nitrofenylesterem (difenyfosforyl)octové kyseliny.

Cílem této práce je porovnání extrakčních vlastností reprezentantů jednotlivých skupin COSANových derivátů. Většina činidel vykazuje vysokou selektivitu extrakce lanthanidů/aktinidů i ze silně kyselých roztoků. Z dosavadních testů vyplynulo, že derivát [(8-CMPO-(CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>-1,2-C<sub>2</sub>B<sub>9</sub>H<sub>10</sub>)(1',2'-C<sub>2</sub>B<sub>9</sub>H<sub>11</sub>)-3,3'-Co]<sup>2</sup>, kde CMPO = Ph<sub>2</sub>P(O)-CH<sub>2</sub>C(O)N-*t*-C<sub>8</sub>H<sub>17</sub> je účinným činidlem pro separaci lanthanidů/aktinidů od ostatních produktů z kyselých roztoků modelové štěpné směsi. Činidlo bude nadále testováno s cílem využít ho pro technologické účely.

Tato práce byla podpořena z projektů GAČR (Projekt 104/09/0668), SURAO (2007/006/Šumb a

2009/002/Šu), EUROPART (6 R.P.) a Výzkumným záměrem AV0Z40320502 od AV ČR.

- [1] Šícha, V., Plešek, J., Kvičalová, M., Císařová, I., Grüner, B. *Dalton Trans.*, **2009**, 851.
- [2] Grüner, B., Kvičalová, M., Plešek, J., Šícha, V., Císařová, I., Lučaníková, M., Selucký, P. *J. Organomet. Chem.* **2009**, 694, 1678.
- [3] Selucký, P., Rais, J., Lučaníková, M., Grüner, B., Kvičalová, M., Fejfarová, K., Císařová, I. *Radiachim. Acta* **2008**, 96, 273 a zde citované práce.

## 2Po28

### METAKRYLÁTY MODIFIKOVANÉ V PLASMĚ PRO BIOAPLIKACE

Kolářová K.<sup>1</sup>, Kasálková N., Makajová Z., Švorčík V.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> VŠCHT Praha, Technická 5, Praha 6, 16628

Materiály na bázi metakrylátů jsou dnes běžně používané v medicínské praxi. Hydrogely jsou trojrozměrné polymery, které reagují s vodními roztoky. Vstřebávají a uchovávají vodu ve svých strukturách. Vlastnosti jednotlivých hydrogelů závisí na jejich složení, morfologii, charakteru sítě a použitím botnacími činidly. Jsou nepřilnavé, mnohé z nich jsou průhledné a přizpůsobí se povrchu rány. Díky tomu se již delší dobu využívají k podpoře hojení ran. V ráně udržují vlhkost a na druhé straně mohou absorbovat nadbytečné množství exudátu. Vzhledem k tomu, že živý organismus je tvořen z větší části vodním prostředím, pak povrchové napětí na rozhraní implantát-živá tkáň je velmi nízké, což se projevuje malou sorpcí proteinů[1]. Jedním z možných využití hydrogelů je jejich aplikace jako nosný materiál pro kultivaci pacientových buněk, které mohou být poté spolu s nosičem přeneseny na ránu pacienta[2]. Pro tento účel je vhodné povrch materiálu modifikovat a podpořit tak buněčnou proliferaci. Jednou z možností je právě modifikace materiálu pomocí plasm, která mění povrchové vlastnosti, především polaritu, povrchovou morfologii a chemické složení[3].

Autoři děkují za finanční podporu grantům MŠMT č. LC06041, GAAVČR č. KAN400480701 a A400500505A.S. Hoffman: *A Drug Delivery Rev.* 43, 3 (2002).

- [1] B.Dvořánková, K.Smetana Jr., R.Königová, a kol.: *Biomaterials* 19, 141 (1998).
- [2] V.Švorčík, K.Kolářová, P.Slepička, a kol.: *Polym. Degr. Stab.* 91, 1219 (2006).



**2Po29****POVRCHOVĚ MODIFIKOVANÉ  
NANOČÁSTICE PRO SANACE PODZEMNÍCH  
VOD**

Štěpánka Klímková<sup>1</sup>, Tomáš Pluhař<sup>1</sup>, Jaroslav Nosek<sup>1</sup>,  
Miroslav Černík<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Technická univerzita v Liberci, FM, NTI, Studentská  
2, 461 17 Liberec*

Schopnosť nanočastíc elementárneho železa (nZVI) pomerně rychle a účinně odstraňovat chlorované uhlovodíky v kontaminované podzemní vodě je v dnešní době dobře známa a výsledky z pilotních aplikací jsou nadějně. Dechloračních účinků železa, které je prakticky netoxické, se již delší dobu využívá při konstrukci propustných reaktivních bariér plněných železnými pilinami. Výhoda nanočastíc spočívá nejen v jejich vyšší reaktivitě, ale také v jejich mobilitě horninovým prostředím, což umožňuje aplikaci nanočastíc *in-situ* přímým vtlačěním do vrtu. Nevýhodou nanočastíc je jejich pomerně rychlá povrchová oxidace, která způsobuje nejen ztrátu redukční síly nanočastíc, ale změnou povrchového náboje částic mají zoxidované částice větší sklon k agregaci a k ulpívání na materiálu, jehož póry mají procházet. Rovněž přílišná reaktivita nZVI přináší komplikace. Aby byla aplikace nanočastíc při odstraňování kontaminantů z horninového prostředí více efektivní, je třeba vytvořit stabilní disperzi nZVI, aby mohly být nanočastice transportovány póry v saturované zóně z aplikačního vrtu až do místa kontaminace. Na Technické univerzitě v Liberci probíhá výzkum, jehož záměrem je upravit pomocí surfaktantů, (ko)polymerů a olejů povrchové vlastnosti dostupných nanočastíc s ohledem na ekonomickou dostupnost povrchových činidel a jejich neškodnost pro životní prostředí. Hlavním cílem je optimalizovat tuto relativně novou sanační technologii.

**2Po30****KATALYTICKÁ SYNTÉZA UHLÍKOVÝCH  
NANORÚROK NA MONTMORILLONITE A  
ZEOLITE**

Katarína Pastorková<sup>1</sup>, Karol Jesenák<sup>1</sup>, Magdaléna  
Kadlečíková<sup>2</sup>, Michal Kolmačka<sup>2</sup>, Filip Lazišťan<sup>2</sup>,  
Miroslav Michalka<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Katedra anorganické chémie, Prírodovecká fakulta,  
Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 84215  
Bratislava*

<sup>2</sup>*Katedra mikroelektroniky, Fakulta elektrotechniky  
a informatiky, Slovenská technická univerzita,  
Ilkovičova 3, 81219 Bratislava*

<sup>3</sup>*Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19  
Bratislava*

Syntéza uhlíkových nanorúrok bola uskutočnená v HF CVD (Hot Filament Chemical Vapour Deposition) reaktore, v ktorom pracovná atmosféra bola tvorená zmesou metánu a vodíka. Tlak počas syntézy bol

3000 Pa a teplota 600 °C. Ako katalyzátor boli použité práškové vzorky Fe-montmorillonitu a Fe-zeolitu. Železité formy týchto hlinítkremičitanov boli pripravené iónovými reakciami vo vodnom roztoku FeCl<sub>3</sub> · 6H<sub>2</sub>O s rôznou koncentráciou (0,4M, 0,04M, 0,004M). Pred syntézou boli železité vzorky montmorillonitu a zeolitu nanosené vo forme vrstiev na leštené kremikové podložky alebo boli použité samonosné vrstvy (hrúbka 1 mm) v prípade montmorillonitu a vybrúsená platnička (hrúbka 1 mm) v prípade zeolitu. Katalytické vrstvy boli pripravené rôznymi metódami (sedimentačná metóda, spin coating, nanášanie vo forme suspenzie pomocou mikropipety), pričom sa sledoval vzťah medzi morfológiou povrchu pripravenej katalytickej vrstvy a jej katalytickou účinnosťou na rast a kvalitu uhlíkových nanorúrok. Pripravené vzorky boli analyzované pomocou SEM a Ramanovej spektroskopie. Závěry experimentov možno zhrnúť do niekoľkých bodov. Predovšetkým je vznik CNTs jednoznačne viazaný na prítomnosť Fe vo vzorkách. Rast CNTs bol pozorovaný na všetkých železitých vzorkách, avšak nanorúrky sa líšili tvarom, kvalitou a hustotou pokrytia povrchu. Najvyššia hustota uhlíkových nanorúrok bola zaznamenaná na povrchu samonosných vrstiev montmorillonitu, vytvorených metódou sedimentácie a taktiež na povrchu zeolitovej platničky. Katalytické vrstvy montmorillonitu a zeolitu vytvorené metódou spin coating boli pokryté nanorúrkami ihlicovitého tvaru, bez prítomnosti amorfného uhlíka, čo svedčí o ich vysokej kvalite. Priemer CNTs bol v užšom intervale hodnôt, v porovnaní s nanorúrkami deponovanými na povrchu vrstiev pripravených inými metódami. V prípade katalytických vrstiev vytvorených pomocou nanášania suspenzie mikropipetou, došlo k rastu rôzne stočených nanorúrok, s množstvom defektov v ich štruktúre. Na ich povrchu sme zaznamenali tiež väčšie množstvo amorfného uhlíka. Pri vrstvách vytvorených z práškoveho zeolitu bolo pozorované premostovanie častíc zeolitu pomocou nanorúrok. Z uvedeného vyplýva, že morfológia povrchu pripravenej katalytickej vrstvy a teda aj distribúcia katalytických častíc výrazne ovplyvňujú kvalitu, tvar, priemer a hustotu pripravených uhlíkových nanorúrok.

*Táto práca bola podporená grantom UK/273/2009*

**2Po31****SORPCIA IÓNOV OLOVA NA PRÍRODNÝ A SYNTETICKÝ MONTMORILLONIT**

Katarína Pastorková<sup>1</sup>, Jana Hrachová<sup>2</sup>, Vladimír Štefan Fajnor<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, e-mail: fajnor@fns.uniba.sk*

<sup>2</sup>*Ústav anorganickej chémie, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava*

Problém imobilizácie katiónov ťažkých (a toxických) kovov prírodnými sorbentami je stále aktuálny [1, 2]. Prírodný montmorillonit bol izolovaný plavením z bentonitu lokality Jelšový Potok pri Starej Kremničke. Syntetický montmorillonit bol pripravený hydrotermálne (teplota 300 °C, odpovedajúci tlak vodných pár, doba syntézy 7 dní) zo zmesi oxidov kremičitého, hlinitého, železitého a horečnatého. V prípade dioktaédrických smektitov je rozhodujúci podiel olovnatých katiónov sorbovaných mechanizmom iónovej výmeny. Sorpčné izotermy boli sledované v rozsahu koncentrácie vodného roztoku Pb(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> od 1,0 do 50,0 mmol·dm<sup>-3</sup>. Suspenzia sa intenzívne pretrepávala vždy 2 hodiny a potom sa nechala 24 hodín stáť pri laboratórnej teplote.

Sorpčné izotermy mali v prípade prírodného i syntetického minerálu v podstate rovnaký priebeh, líšili sa však kvantitatívne. V oblasti nízkych koncentrácií olovnatých katiónov nasorbované množstvo prudko stúpa, zvyšovaním koncentrácie katiónov sa dosahujú limitné hodnoty sorpcie: 500 mmol·kg<sup>-1</sup> pre prírodný montmorillonit. Syntetický montmorillonit dosahuje len 85 % tejto hodnoty, hoci jeho merný povrch (vypočítaný z retencie 2-etoxyetanolu) má hodnotu (750 ± 10) m<sup>2</sup>·g<sup>-1</sup>. Tiež sa ukázalo, že na sorpciu olovnatých iónov nemá podstatnejší vplyv izolácia montmorillonitu z východiskovej suroviny bentonitu. Možno teda predpokladať, že z ekonomického hľadiska sú bentonitové bariéry rovnako účinné ako bariéry z monominerálneho montmorillonitu.

[1] Fajnor, V., Masar, J.: Acta F.R.N. UNIV. COMEN.-CHIMIA, Vol. 23 (1973) 13 – 19.

[2] Mozgawa, W., Król, M., Bajda, T.: Journal of Molecular Structure 924 – 926 (2009) 427 – 433.

**2Po32****CHARAKTERISTIKA PRODUKTOV INTERAKCIE KYSELINY STEÁROVEJ S MG-A FE-MONTMORILLONITOM POMOCOU DTA**

Katarína Pastorková, Jana Hrachová, Vladimír Štefan Fajnor

*Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, e-mail: fajnor@fns.uniba.sk*

*Ústav anorganickej chémie, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava*

Plavením bentonitu z priemyselne najvýznamnejšej lokality Slovenska Jelšový potok pri Starej Kremničke bol získaný monominerálny montmorillonit. Pomocou [1M] roztokov chloridu horečnatého a chloridu železitého boli pripravené monoionické vzorky, ktoré sa ponechali 3 h na vodnom kúpeli v nadbytku kyseliny steárovej. Tavenina sa potom dôkladne premyla chloridom uhličitým. Na DTA krivkách komplexu Mg-montmorillonit-kyselina steárová sa prejavilo roztavenie kyseliny úzkym a výrazným endotermickým píkom pri teplote 70 °C. Termický rozklad vrcholí pri teplote blízkej 300 °C, je viacstupňový a v atmosfére vzduchu dominuje ostrý endotermický pik pri 340 °C, nasledovaný výrazným exotermickým píkom pri 470 °C. V atmosfére dusíka tento "dvojpic" na DTA krivke chýba. Dehydroxylácia sa posúva k teplote 650 °C, vysokoteplotný exotermický pik má maximum pri teplote 970 °C. Celkový hmotnostný úbytok do 1000 °C predstavuje 55,5 % vzorky. Roztavenie kyseliny steárovej sa v prípade Fe-montmorillonitu prejavilo ostrým endotermickým píkom pri teplote 65 °C. Rozklad organokomplexu vrcholí pri teplote 260 °C. Na DTA krivke sa objavuje štvornásobný exotermický pik (330 °C – 470 °C). V atmosfére dusíka dominuje výrazný symetrický endotermický pik s maximom pri teplote 470 °C. Dehydroxylačný pik sa posúva až k teplote 550 °C. Vysokoteplotný exotermický pik má maximum pri teplote 920 °C. Celkový hmotnostný úbytok do 1000 °C reprezentuje 57,0 % z hmotnosti vzorky. Popísané rozdiely dokumentujú výrazný vplyv vymeniteľných železitých iónov na mechanizmus a kinetiku termického rozkladu organomontmorillonitu.

2Po33

**MECHANOCHEMICKÁ SYNTÉZA  
NANOKRYŠTALICKÝCH OXIDOV**Peter Billik<sup>1</sup>, Mária Čaplovičová<sup>2</sup><sup>1</sup>Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká  
Fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842  
15 Bratislava, Slovensko,<sup>2</sup>Katedra ložiskovej geológie, Prírodovedecká Fakulta,  
Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15  
Bratislava, Slovensko,

Mechanochemická syntéza nanokryštalických oxidov je nová preparatívna technika, ktorá umožňuje prípravu nanokryštalických fáz počas mletia. V priebehu intenzívneho mletia dôjde ku reakcii prekursorov za vzniku amorfného oxidu a tzv. soľnej matrice. Obyčajne je ohrev súčasťou prípravy, pretože produkt je po mletí často v amorfnom stave [1]. Cieľom práce bola mechanochemická syntéza TiO<sub>2</sub>, SnO<sub>2</sub> a Mn<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Jednotlivé oxidy boli pripravené následovne: TiO<sub>2</sub> zo zmesi: TiCl<sub>4</sub> + 3(NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, SnO<sub>2</sub> zo zmesi SnCl<sub>4</sub> + 3(NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, Mn<sub>2</sub>O<sub>3</sub> zo zmesi KMnO<sub>4</sub> + NH<sub>4</sub>Cl. Počiatočné zmesi boli vysokoenergeticky mleté v planetárnom mlyne po dobu 5–60 min a následne ohrievané v teplotnom intervale od 200–750 °C /1 hod na vzduchu. V prípade SnO<sub>2</sub> bol kvôli zabráneniu straty spôsobenej vznikom medziproduktu (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>SnCl<sub>6</sub> nutný ohrev v atmosfére H<sub>2</sub>O/NH<sub>3</sub> [2]. Nový spôsob syntézy TiO<sub>2</sub> v modifikácii anatas a tetragonálneho SnO<sub>2</sub> z kvapalných chloridov ukázal, že vzniknutý NH<sub>4</sub>Cl počas následného ohrevu urýchľuje kryštalizáciu, následne sublimuje a zanecháva čistý oxid s veľkosťou kryštálov 5–50 nm v závislosti od teploty ohrevu. Tento postup odstraňuje klasické vymývanie matrice vodou po ohreve. V prípade Mn<sub>2</sub>O<sub>3</sub> vznikol kubický α-Mn<sub>2</sub>O<sub>3</sub> s veľkosťou kryštálov 12–50 nm po 15–60 min priamo počas mletia [3].

[1] T. Tsuzuki, P. G. McCormick, *Journal of Materials Science* **39** (2004) 5143.[2] P. Billik, M Čaplovičová, *Powder Technology* **191** (2009) 235.[3] P. Billik, M Čaplovičová, J. Janata, V. Š. Fajnor, *Materials Letters* **62** (2008) 1052.

2Po34

**SALICYLÁTOMEĎNATÉ KOMPLEXY S  
NIKOTÍNAMIDOM**Zuzana Repická<sup>1</sup>, Ján Moncol<sup>1</sup>, Milan Mazúr<sup>2</sup>,  
Miroslava Puchonová<sup>1</sup>, Dušan Valigura<sup>1</sup><sup>1</sup> Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej  
a potravinárskej technológie, Oddelenie anorganickej  
chémie UACHaM, Radlinského 9, 812 37 Bratislava<sup>2</sup> Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej  
a potravinárskej technológie, Oddelenie fyzikálnej  
chémie UFCHaCHF, Radlinského 9, 812 37  
Bratislava

Salicylátomeďnaté komplexy predstavujú objekt intenzívneho štúdia z pohľadu podmienok prípravy, ako aj ich rozličných vlastností. O špecifické salicylátomeďnaté komplexy je záujem v oblasti katalýzy, supramolekulovej chémie a kryštalového inžinierstva, i v oblasti medicínskej chémie.

Ako súčasť štúdia rôznych karboxylátomeďnatých komplexov na našom oddelení, bola pripravená séria nových komplexov s nikotínamidom (nia) a aniónmi kyseliny 3-, 4-, 5-metyl a metoxysalicylovej, pričom sa kládol dôraz na vplyv podmienok prípravy na výsledný produkt. Reakcie roztoku octanu meďnatého s nikotínamidom a príslušnou kyselinou v rôznych pomeroch a viacerých rospúšťadlách viedli k vzniku troch typov produktov: [Cu(X-sal)<sub>2</sub>(nia)<sub>2</sub>], kde X = 3-Me, 4-Me, 5-Me, 3-MeO, 4-MeO, 5-MeO, [Cu(X-sal)<sub>2</sub>(nia)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>], kde X = 3-Me a 4-MeO a [Cu(X-sal)<sub>2</sub>(nia)(H<sub>2</sub>O)], pre X = 5-Me a 5-MeO. Získané látky boli charakterizované elementárnou analýzou, elektrónovou, infračervenou a EPR spektroskopiou a niektorým bola zmeraná magnetická susceptibilita v závislosti od teploty. V prípade komplexu [Cu(5-MeOsal)<sub>2</sub>(nia)(H<sub>2</sub>O)] [1] bola urobená RTG štruktúrna analýza. Oba atómy meďi sú tu v štvorcovopyramidálnom obklopení, pričom v ekvatoriálnej rovine sa nachádzajú atómy kyslíka karboxylovej skupiny salicylátového aniónu, atóm dusíka z mostikujúceho nikotínamidu a atóm kyslíka z molekuly vody. V axiálnej polohe sa nachádza kyslík karboxamidovej skupiny mostikujúceho nikotínamidu zo susednej štruktúrnej jednotky.

Podakovanie za financovanie výskum patrí  
Ministerstvu školstva SR – VEGA grant 1/0353/08.

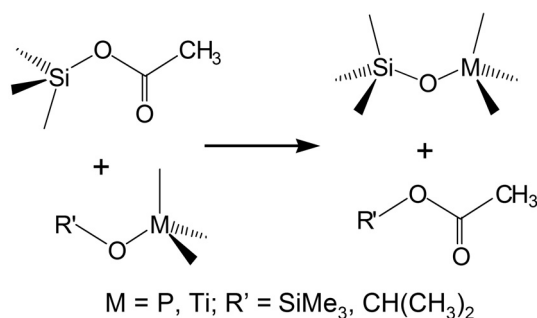
[1] Valigura D., Moncol J., Korabik M., Púčeková Z.,  
Lis T., Mrozinski J., Melník M., *Eur. J. Inorg.  
Chem.* 2006, p. 3813[2] Repická Z., Moncol J., Krupková L., Hudecová D.,  
Korabik M., D. Valigura, *Advances in  
Coordination, Bioinorganic, and Inorganic  
Chemistry*, STU Press, Bratislava, 2009 p. 286[3] Vasková Z., Moncol J., Korabik M., Valigura D.,  
Švorec J., Lis T., Valko M., Melník M.,  
*Polyhedron* 2009, *in press*

**2Po35**  
**NEHYDROLYTICKÉ METODY PŘÍPRAVY**  
**FOSFOSILIKÁTOVÝCH A**  
**A TITANOSILIKÁTOVÝCH MATERIÁLŮ**

Aleš Stýskalík, David Škoda, Jiří Pinkas\*, Zdeněk Moravec

Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno  
 jpinkas@chemi.muni.cz

Fosfosilikátové a titanosilikátové materiály jsou připravovány reakcemi ve vodných roztocích, kde hlavní nevýhodou je hydrolytická nestabilita vazeb Si–O–P a Si–O–Ti, vedoucí k fázové separaci jednotlivých oxidů. Zabránit by tomu měly postupy založené na nehydrolytických kondenzačních reakcích. Záměrem práce bylo připravit fosfosilikátové a titanosilikátové materiály sol-gelovými reakcemi na principu esterové eliminace z octanu křemičitého a tris(trimethylsilyl)esteru kyseliny fosforečné nebo isopropoxidu titaničitého. Získané xerogely byly analyzovány pomocí IČ spektroskopie, termické analýzy TG/DSC, rtg. práškové difrakce, ICP-OES,  $^{29}\text{Si}$  a  $^{31}\text{P}$  CPMAS NMR spektroskopie. Vedlejší produkty eliminačních reakcí byly detekovány pomocí NMR a GC/MS. Při kondenzaci vznikají gely s vazbami Si–O–P nebo Si–O–Ti a eliminuje se trimethylsilyl nebo isopropylester kyseliny octové. Kondenzace neprobíhají zcela kvantitativně, xerogely obsahují residuální organické skupiny. Vyšší reakční teplota napomáhá eliminaci esteru.  $^{29}\text{Si}$  CPMAS NMR prokázala přítomnost oktaedrických  $\text{SiO}_6$  skupin ve fosfosilikátovém gelu. Kalcinací fosfosilikátových gelů vzniká směs fosforečnanů křemičitých, což ukazuje na dobrou homogenitu promísení Si a P a stabilitu Si–O–P jednotek. Kalcinace při 1000 °C titanosilikátového xerogelu připraveného při vyšší gelační teplotě vedla k většímu množství anatasu oproti rutilu v amorfni matrici  $\text{SiO}_2$ . To ukazuje na vyšší stupeň kondenzace Si–O–Ti gelu.



Tato práce vznikla za podpory grantu MSM0021622410

- [1] Mutin, P. H.; Vioux, A. *Chem. Mater.* **2009**, *21*, 582.  
 [2] Aronne, A.; Turco, M.; Bagnasco, G.; Pernice, P.; Di Serio, M.; Clayden, N. J.; Marenna, E.; Fanelli, E. *Chem. Mater.* **2005**, *17*, 2081.

- [3] Lafond, V.; Mutin, P. H.; Vioux, A. *Chem. Mater.* **2004**, *16*, 5380.

**2Po36**  
**SYNTHESIS OF SILVER NANOPARTICLES**  
**AND STUDY OF THEIR ANTIBACTERIAL AND**  
**TOXIC EFFECTS**

Aleš Panáček<sup>1</sup>, Libor Kvítek<sup>1</sup>, Robert Prucek<sup>1</sup>, Jana Soukupová<sup>1</sup>, Markéta Vaníčková<sup>1</sup>, Milan Kolář<sup>2</sup>, Renata Večeřová<sup>2</sup>, Radek Zbořil<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physical Chemistry, Palacký University, Svobody 26, Olomouc, 77146, Czech Republic

<sup>2</sup> Department of Microbiology, Faculty of Medicine, Palacký University, Hněvotínská 3, Olomouc, 77515, Czech Republic

Silver nanoparticles (NPs) constitute one of the major groups of nanomaterials used in many applications due to their unique properties such as catalytic, optical and antibacterial activity.

In our recent studies we reported the controlled preparation of silver NPs using modified Tollens process, which enables to prepare silver NPs with average size ranging from 25 nm to 100 nm. Silver NPs with average size of 25 nm prepared via reduction by maltose exhibit high antimicrobial activity against Gram-positive and Gram-negative bacteria, including highly multiresistant strains such as methicillin-resistant *Staphylococcus aureus*. [1]. In our next study, considering the effect of the silver NPs surface modification by polymers and surfactants on their bactericidal properties, it was found that the bactericidal activity of the SDS-modified silver NPs was significantly enhanced where the minimum bactericidal concentration decreased under the value of 1 mg.L<sup>-1</sup> [2].

In our latest study, toxic effect of silver NPs against protozoan *Paramecium caudatum* was tested. The obtained results proved that the silver NPs are toxic against the studied organism at the concentrations higher than 25 mg.L<sup>-1</sup> [3]. This toxic concentration of silver NPs against *Paramecium caudatum* compared to the bactericidal concentration of silver NPs, is even one order higher.

Financial supports from the Ministry of Education of the Czech Republic (MSM6198959218, MSM6198959223, and 1M6198959201) are gratefully acknowledged.

- [4] A. Panacek, L. Kvitek, R. Prucek, *J Phys Chem B*, **110**, 16248-16253 (2006)  
 [1] L. Kvitek, A. Panacek, J. Soukupova, *J Phys Chem C*, **112**, 5825-5834 (2008)  
 [2] L. Kvitek, M. Vanickova, A. Panacek, *J Phys Chem C*, **113**, 4296-4300, (2009)

2Po37

**SILVER NANOPARTICLES DEPOSITED ON MONTMORILLONITE**

Petr Praus

*Department of Analytical Chemistry and Material Testing, VŠB-Technical University of Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava-Poruba, Czech Republic, e-mail: petr.praus@vsb.cz*

Na-rich montmorillonite (MMT) was intercalated with silver ions, which were reduced with sodium borohydride and formaldehyde. The reduction with  $\text{NaBH}_4$  gives rise to uniformly dispersed Ag particles with a size of 3-13 nm. Formaldehyde reduction forms particles with a much wider size distribution from 3 nm to 100 nm. The absorption spectra of Ag-MMT water suspensions show plasmon absorption bands between 400 nm and 425 nm. Ag particles exhibit the defective structure observed by TEM and HRTEM.

Photoluminescence spectra of Ag-MMT exhibit two emission bands at 430 nm and 680 nm. The first band was found in all spectra and could be explained by a scattering mechanism [1]. The second emission band is well visible in the spectrum of Ag reduced by borohydride and is attributed to the fluorescence of  $\text{Ag}_n@Ag^+$  structures [2]. The presence of  $Ag^+$  can be explained by oxidation of Ag to silver oxide.

*This work was supported by the Ministry of Education, Youth and Sport of the Czech Republic (MSM 6198910016).*

- [1] [1.] Zhang A., Zhang J., Fang Y. J. *Luminiscence*, 128 (2008) 1635-1640.  
 [2] [2.] Treuer M., Rocco F., Lelong ., Le Nestour A., Cardinal T., Maali A., Lounis B. *Solid State Sci.*, 7 (2005) 812-818.

2Po38

**SYNTÉZA NANOČÁSTIC STŘÍBRA A STUDIUM JEJICH KATALYTICKÉ A ANTIBAKTERIÁLNÍ AKTIVITY**

Ondřej Kment, Aleš Panáček

*Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Tř. Svobody 26, 77146 Olomouc, Czech Republic*

Nánočástice stříbra patří mezi nejčastěji studované kovové nanočástice díky svým unikátním optickým, katalytickým a antimikrobiálním vlastnostem, jichž lze využít např. pro konstrukci biosenzorů, průmyslových katalyzátorů či zdravotnických materiálů. Konečné vlastnosti nanočástic stříbra však výrazně závisí na jejich velikosti. Pro katalytické a antibakteriální aplikace jsou nejvhodnější částice stříbra s velikostí v intervalu 5 nm – 20 nm. Cílem této práce byla příprava nanočástic stříbra redukcí komplexní částice  $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$  tetrahydridoboritanem sodným za různých koncentrací koplexotvorného činidla v přítomnosti polymerního stabilizátoru. Touto metodou

se podařilo připravit stabilní nanočástice s průměrnou velikostí od 10 nm do 20 nm. Průměrná velikost a morfologie připravovaných nanočástic stříbra byla měřena metodami dynamického rozptylu světla, transmisní elektronové mikroskopie a absorpční spektrometrie. Další částí práce bylo studium antibakteriální a katalytické aktivity připravených nanočástic stříbra. Antibakteriální aktivita byla testována na skupině gram-pozitivních a gram-negativních bakterií a provedené experimenty prokázaly vysokou schopnost inhibice růstu bakterií při koncentraci stříbra okolo 1 mg/L. Katalytická účinnost nanočástic stříbra byla studována na modelové reakci spočívající v redukcii nitrofenolu pomocí tetrahydridoboritu sodného. Určené rychlostí konstanty pohybující se okolo řádu 10<sup>-3</sup> s<sup>-1</sup> prokázaly výrazný katalytický účinek připravovaných nanočástic stříbra.

2Po39

**SYNTÉZA A VLASTNOSTI HYDROXYCHALKÓNŮ A ICH KOMPLEXOV**Ladislav Habala<sup>1</sup>, Christian Molitor<sup>1</sup>, Annette Rompel<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institut für Biophysikalische Chemie, Universität Wien, Althanstr. 14, 1090 Wien*

Enzymy obsahujúce med' v dinukleárnom aktívnom centre, medzi ktoré patrí i aureusidínsyntáza, katalyzujú oxidáciu a hydroxyláciu fenolických látok za prítomnosti kyslíka. Polyfenoly, ako napr. flavonoidy a chalkóny, sú produktami sekundárneho metabolizmu rastlín, kde zastávajú rôzne funkcie. Tieto látky vykazujú široké spektrum biologickej aktivity: fungujú ako vychytávače voľných radikálov a majú protivírusové, protizápalové, protirakovinové a protibakteriálne účinky.

Hydroxychalkóny sú dôležitými medzistupňami v biosyntéze flavonoidov a sú substrátmi pre enzym aureusidínsyntáza. V našej práci sa zaoberáme prípravou rôznych hydroxychalkónov, ich komplexov s med'ou a inými kovmi, ako aj ich charakterizáciou analytickými a fyzikálno-chemickými metódami. Následne je študovaná interakcia týchto látok s aureusidínsyntázou izolovanou z *Coreopsis lanceolata*. Ďalším cieľom výskumu je určenie biologického pôsobenia týchto látok, najmä ich antioxidantného a protirakovinového účinku.

*Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG).*

**2Po40****FLUORESCENCE STUDY OF REDUCED CHARGE MONTMORILLONITE COMPLEXES WITH CATIONIC DYES**P. Pustková<sup>1</sup>, Z. Klika<sup>1</sup>, P. Malý<sup>2</sup>, J. Preclíková<sup>2</sup><sup>1</sup> VŠB-Technical University Ostrava, Czech Republic<sup>2</sup> Charles University Prague, Czech Republic

Series of montmorillonites (M) with reduced charge (RCM) were prepared by Li<sup>+</sup> saturation of montmorillonite and subsequently by heating at temperatures 40, 130 and 210°C. The cation exchange capacity (CEC) and X-ray diffraction pattern (d<sub>001</sub>) of RCMs were measured. The decrease of CEC and d<sub>001</sub> was found out with decreasing charge of RCM, i.e. increasing temperature of RCM preparation. The RCM samples were intercalated by cationic dyes, especially methylene blue (MB). The fluorescence spectra of these complexes (dye/RCM) were studied. In the fluorescence spectra the significant increase of intensity was observed with decreasing of RCM charge, dye loading and with decrease of methylene blue concentration in equilibrium aqueous solution. The fully intercalated MB/RCM complexes have the fluorescence intensity very poor whereas the MB/RCM complexes with low dye loading (about 10 %) indicate much higher intensity. That was proved for next two non laser cationic dyes (Crystal violet and Nile blue). The laser cationic dye (Rhodamine B) indicates opposite properties, i.e. the fluorescence intensity decreasing with decreasing of RCM charge. The RCMs with high charge induce the formation of higher aggregates of dye. These higher aggregates activate quenching of fluorescence. The formation of dye higher aggregates is suppressed by reduction of RCM charge. The mainly monomers and/or dimers are form at the surface of RCM with low charge.

Keywords: Reduced charge montmorillonite, Methylene blue, Cationic dye, Fluorescence spectra

*The authors are grateful for support from project of Ministry of Education of the Czech Republic MSM 6198910016.*

- [1] Z. KLIKA, P. ČAPKOVÁ, P. HORÁKOVÁ, M. VALÁŠKOVÁ, P. MALÝ, R. MACHÁŇ, M. POSPÍŠIL, J. Composition, structure and luminescence of montmorillonites saturated with different aggregates of methylene blue. *Colloid Interface Sci.* 2007, vol. 311, p. 14.
- [2] T. ENDO, N. NAKADA, T. SATO AND M. SHIMADA, Fluorescence of clay-intercalated xanthene dyes. *J. Phys. Chem. Solids.* 1988, vol. 49, p. 1423.
- [3] G. VILLEMURE, C. DETELLIER AND A.G. SZABO, Fluorescence of clay-intercalated methylviologen. *J. Am. Chem. Soc.* 1986, vol. 108, p. 4658.

**2Po41****PREPARATION OF ZINC SULPHIDE PARTICLES AND ZNS-MONTMORILLONITE COMPOSITES**

Ondřej Kozák, Petr Praus

*Department of Analytic Chemistry and Material Testing, Vysoká škola báňská – Technical University of Ostrava, Czech Republic*

Zinc sulphide is a semiconductor with large band gap energy about 3.6 eV. It appears to be very promising material for photocatalysis [1.]. In this study, the preparation of ZnS nanoparticles deposited on Na-rich montmorillonite (Wyoming) is described. UV-VIS spectroscopy, X-ray diffraction (XRD), and scanning electron microscopy (SEM) were used for the characterisation of ZnS particles prepared. ZnS nanoparticles were prepared using different zinc salts and sodium sulphide with and without cationic surfactant - cetyltrimethylammonium (CTA) in a mixture with montmorillonite (MMT). Another experiment was performed with MMT intercalated with zinc cations (Zn-MMT) shaken in the solution of Na<sub>2</sub>S. The intercalation was studied in our previous work [2.].

It was observed that the used zinc salt has an effect on ZnS particles formation and immobilisation on MMT due to different pH values of solutions of each salt. ZnS particles prepared without CTA were of bulk size and their visible precipitate was observed. On the other hand, ZnS nanoparticles were formed in the presence of CTA (ZnS-CTA-MMT). The sample Zn-MMT + Na<sub>2</sub>S and the sample ZnS-CTAB-MMT were dissolved in a mixture of HClO<sub>4</sub>+HNO<sub>3</sub>+HF to determine the total amounts of zinc in the prepared nanocomposites. There were 0.19 and 0.71 mmol g<sup>-1</sup> for Zn-MMT + Na<sub>2</sub>S and ZnS-CTAB-MMT respectively. Further investigations will be carried out to determine the size distribution of ZnS particles and the photocatalytic effects of ZnS-MMT on the reduction of CO<sub>2</sub>.

*This work was supported by the Ministry of Education, Youth and Sport of the Czech Republic (MSM 6198910016).*

- [1] H. Inoue, H. Moriwaki, K. Maeda, H. Yoneyama, *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* 86 (1995) 191-196
- [2] O. Kozák: Study of montmorillonite intercalation with zinc ions and their capture from the environment. Diploma thesis. VŠB-TU Ostrava, Ostrava, 2008.

## 2Po42

## TITANOSILIKÁT ETS-4 - VLIV IONTOVÉ VÝMĚNY NA JEHO VLASTNOSTI

Lhotka M.<sup>1</sup>, Fíla V.<sup>1</sup>, Cílová Z.<sup>2</sup><sup>1</sup>Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, e-mail:Miloslav.Lhotka@vscht.cz<sup>2</sup>Ústav skla a keramiky, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6

Titanosilikáty jsou obecně považovány za mikroporézní materiály. Na ÚAT VŠCHT v Praze byl hydrotermální syntézou při teplotě 200°C po dobu 48 hodin připraven titanosilikát ETS-4. Vzorky ETS-4 byly podrobeny dvěma typům iontové výměny následujícími kationy: Cu<sup>2+</sup>, Fe<sup>2+</sup>, Mn<sup>2+</sup>, Sr<sup>2+</sup>.

Jako první byla použita standardní iontová výměna z roztoku po syntéze titanosilikátu. Druhý typ iontové výměny je založen na přidavku kationu přímo do syntézní směsi při přípravě ETS-4. Připravené vzorky byly charakterizovány pomocí metod XRD, XRF, SEM a TGA. Dále byly určeny adsorpční izotermy N<sub>2</sub> a CO<sub>2</sub>.

V případě použití kationtů Mn<sup>2+</sup>, Sr<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup> při standardní iontové výměně byl původní Na<sup>+</sup> ve struktuře ETS-4 nahrazen přibližně z 80 – 95 % a struktura vzorků nebyla porušena. Vzorky s přidavkem iontu do syntézní směsi vykazovaly větší tepelnou stabilitu než vzorky připravené standardní iontovou výměnou a v tomto případě bylo nahrazeno iontem přibližně 30 % Na<sup>+</sup>. Měření adsorpční izotermy ukázalo odlišnou sorpční kapacitu u vzorků připravených standardní iontovou výměnou. Ve všech případech iontové výměny modifikované vzorky vykazovaly v rozsahu parciálních tlaků CO<sub>2</sub> 0-1 bar vyšší adsorpční kapacitu než původní vzorek ETS-4.

Tento výzkum je podporován GAAV ČR projekt č. IAA400400909, a výzkumným záměrem MŠMT ČR CZE:MSM 604 613 7301.

## 2Po43

## IN VITRO CYTOTOXIC ACTIVITY OF PALLADIUM(II) OXALATO COMPLEXES WITH N6-BENZYL-9-ISOPROPYLADENINE-BASED N-DONOR LIGANDS

Pavel Štarha<sup>1</sup>, Radim Vrzal<sup>2</sup>, Zdeněk Dvořák<sup>2</sup>, Zdeněk Trávníček<sup>1</sup><sup>1</sup>Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc, Czech Republic<sup>2</sup>Department of Cell Biology and Genetics, Faculty of Science, Palacký University, Šlechtitelů 11, 783 11 Olomouc, Czech Republic

The success of cisplatin, cis-[Pt(NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>], connected with the treatment of cancer diseases, motivated chemists to prepare thousands of new platinum complexes with the aim to find compounds for which

anticancer activity would be improved, and on the other hand, negative side-effects would be suppressed. A few platinum-based substances followed *cisplatin* to become successful pharmaceuticals, e.g. *carboplatin* and *oxaliplatin*. Moreover, complexes of other transition metals, such as Pd, Ru, etc., have also showed promising cytotoxicity against selected human cancer cell lines. That is why, we decided to prepare and characterize a series of Pd(II) oxalato complexes and to study their *in vitro* cytotoxicity. The complexes of the following composition have been synthesized and characterized by various methods including multinuclear NMR and a single-crystal X-ray analysis: [Pd(L)<sub>2</sub>(ox)] · xH<sub>2</sub>O [1] and [Pd(ros)<sub>2</sub>(ox)], where L = 2-chloro-N6-benzyl-9-isopropyladenine or its substituted analogues, ros = 2-[(R)-(1-ethyl-2-hydroxyethylamino)]-N6-benzyl-9-isopropyladenine (*roscovitine*) or its substituted derivatives, ox = oxalate dianion. *In vitro* cytotoxicity of the prepared complexes has been determined against human cancer osteosarcoma (HOS) and breast carcinoma (MCF7) cell lines [2]. The results showed that some of the prepared complexes exceed *in vitro* cytotoxicity of *cisplatin*.

The financial support by a grant no. MSM6198959218 from the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic is gratefully acknowledged.

- [1] P. Štarha, I. Popa, Z. Trávníček, *J. Inorg. Biochem.* **2009**, Corrected Proof, doi:10.1016/j.jinorgbio.2009.04.008.  
[2] Z. Dvořák, I. Sovadinová, L. Blaha, J. P. Giesy, J. Ulrichová, *Food Chem. Toxicol.* **2006** (44), 1466-1473.

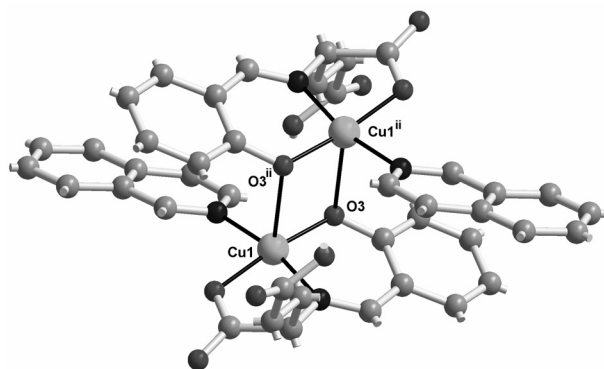
## 2Po44

## CRYSTAL STRUCTURE OF DIMERIC (ISOQUINOLINE)(N-SALICYLIDENE-D,L-GLUTAMATO)COPPER(II) ETHANOLATE

Dalma Gyepesová<sup>a</sup>, Vratislav Langer<sup>b</sup>, Mária Kohútová<sup>c</sup>, Aladár Valent<sup>c</sup><sup>a</sup>Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK-845 36 Bratislava, Slovakia, <sup>b</sup>Department of Environmental Inorganic Chemistry, Chalmers University of Technology, SE-41296 Göteborg, Sweden, <sup>c</sup>Department of Chemical Theory of Drugs, Faculty of Pharmacy, Comenius University, SK-832 32 Bratislava, Slovakia

Copper(II) complexes containing Schiff base derived from salicylaldehyde and various amino acids have received considerable attention in view of their impact in many fields of bioinorganic chemistry. A series of these copper(II) complexes were synthesized [1], [2] and studied on account of their antimicrobial and antiradical activities. The title compound showed antimicrobial activity tested against gram-negative bacteria *Escherichia coli* (IC<sub>50</sub>=0.60 mmol dm<sup>-3</sup>), yeast *Candida parapsilosis* (IC<sub>50</sub>=0.63 mmol dm<sup>-3</sup>), and

filamentous fungi *Microsporium gypseum* and *Botrytis cinerea* ( $IC_{50}=0.45$  and  $0.44$  mmol dm<sup>-3</sup>, resp.). The crystal structure consists of centrosymmetric dimers of (isoquinoline)(*N*-salicylidene-*rac*-glutamato)copper(II) and ethanol solvent molecules. Each copper ion displays a slightly distorted square-pyramidal coordination geometry. The apex of the pyramid consists of weakly bonded phenolic O atom of an adjacent molecule. A rich variety of axial distortions ranging from square-planar to square-pyramidal has been found. It may be one of the reasons for the diversity of interactions of these Cu(II) complexes with biological systems. As an example, (1-methylimidazole)(*N*-salicylidene-*rac*-glutamato)copper(II) [3] adopts a square-planar copper coordination mode.



Dimer of molecules.

- [1] Andrežalová, L., Ďuračková, Z., Valent, A. & Devínsky, F. (1998). *Pharmazie*, **53**, 338-342  
 [2] Kohútová, M., Valent, A., Mišíková, E., & Mlynarčík, D. (2000). *Chem. Papers* **54**, 87-90  
 [3] Langer, V., Scholtzová, E., Gyepesová, D., Kohútová, M. & Valent, A. (2003). *Acta Cryst. E* **59** m1181-m1183

## 2Po45

### ÚČINOK MEĎNATÝCH KOMPLEXOV TYPU SCHIFFOVÝCH ZÁSAD NA MECHANIZMUS POŠKODENIA DNA

Lucia Andrežalová<sup>1</sup>, Zdeňka Ďuračková<sup>1</sup>, Eva Cibíková<sup>2</sup>, Aladár Valent<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav lekárskej chémie, biochémie a klinickej biochémie, Lekárska fakulta Univerzity Komenského, Sasinkova 2, 811 08 Bratislava, e-mail: lucia.andrezalova@fmed.uniba.sk

<sup>2</sup>Katedra chemickej teórie liečiv, Farmaceutická fakulta Univerzity Komenského, Kalinčiakova 8, 832 32 Bratislava

Koordináčne zlúčeniny Cu(II) obsahujúce dianióny tridentálnych Schiffových zásad aldimínového typu, t.j. *N*-salicylidénaminoalkanoátomeďnaté komplexy patria do kategórie látok, ktoré sú významné najmä z hľadiska ich biologickej aktivity ako je napríklad antimikóbná, rádioprotektívna a antioxidačná aktivita [1, 2]. Cieľom práce bolo štúdium interakcie

meďnatých zlúčenín zloženia [Cu(sal-L-glu)chin] a [Cu(sal-D,L-glu)chin] (*chin* = chinolín, *sal-glu* = Schiffova zásada odvodená od salicylaldehydu a kyseliny glutámovej) s DNA. Zlúčeniny tohto typu, ako pentakoordinované komplexy, obsahujú planárny chromofór [CuO<sub>2</sub>N<sub>2</sub>] tvorený O,N,O donorovými atómami Schiffovej zásady a atómom N z molekulového *N*-donorového ligandu. Mechanizmus poškodenia DNA v prítomnosti komplexov sa sledoval s využitím UV-VIS spektrofotometrie a jednobunkovej gélovej elektroforézy (Comet Assay). Pri vysokej koncentrácii [Cu(sal-L-glu)chin] a [Cu(sal-D,L-glu)chin] vzhľadom ku koncentrácii DNA, t.j.  $c(K) : c(DNA) = 5 : 1$ , dochádza k interkaláčnemu poškodeniu DNA, čo sa prejavilo v spektre DNA hyperchrómnym efektom pri 260 nm. Pri nižších koncentráciách komplexov v prítomnosti kyseliny askorbovej a H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> oba skúmané komplexy spôsobujú oxidačné poškodenie DNA, pričom nebol zaznamenaný rozdiel medzi aktivitou L- a D,L-formy. Výsledky jednobunkovej gélovej elektroforézy potvrdili vznik jednoreťazových zlomov v DNA ľudských lymfocytov po inkubácii s [Cu(sal-L-glu)chin], resp. [Cu(sal-D,L-glu)chin] pri rôznych koncentráciách, pričom [Cu(sal-D,L-glu)chin] spôsobuje väčšie oxidačné poškodenie DNA ako [Cu(sal-L-glu)chin].

- [1] Kohútová, M., Valent, A., *Chem. Papers*, **56** (2), 95–99, (2002)  
 [2] Vančo, J., Švajlenová, O., Ramanská, E., Muselík, J., Valentová, J., *J. Trace. Elem. Med. Biol.*, **18**(2), 155-61, (2004)

## 2Po46

### STUDY OF RUBBER COMPOUNDS WITH ADDITION OF ZEOLITE

Darina Ondrušová<sup>1</sup>, Tatiana Bazyláková, Mariana Pajtášová, Slávka Ealíková, Milan Oľšovský<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Industrial Technology, TnU AD, I. Krasku 491/30, 02001 Púchov, Slovakia

The present work deals with the preparation and study of modified polymer compounds with the addition of nanoadditives on the base of natural zeolites. Zeolites form a group of aluminosilicate nanoporous materials, which can be used in the role of fillers in the polymer materials. The prepared modified polymer compounds were characterized by the methods of thermal and spectral analysis.

Samples of newprepared modified rubber compounds with zeolite filler were studied by methods of thermal analysis – DTA and TG in the temperature range of 40 °C – 900 °C and DSC method in the temperature range 30 °C – 250 °C.

The exact mineralogical composition of natural zeolite was evaluated by spectral method X-ray diffraction (XRD) analysis on a Philips PW 1730/1050 diffractometer. Diffraction pattern was recorded by



using the plate - oriented technique with CoKa radiation (35 mA, 40 kV) and a position-sensitive detector using a step size of 0,020 and a step time of 2,4 s.

The FTIR spectra for the sample of natural zeolite were recorded using KBr pellets on a FTIR spectrometer in the middle region (4000 – 400 cm<sup>-1</sup>).

The found values were compared with the values of commercially used polymer materials with the original composition.

*The authors wish to thank the Slovak Grant Agency AV 04/2014/08 for financial support.*

[1] Prekop, Š. et al.: Gumárenská technológia I., Žilinská univerzita, Žilina 1998.

[2] Kovářová, M.: Pomocné zpracovatelské přísady v gumárenském průmyslu, SPUR a.s., Zlín 1999.

#### 2Po47

### CHARACTERISTICS OF INORGANIC FILLERS AND THEIR APPLICATION IN RUBBER TECHNOLOGY

Pajtašová Mariana, Lalíková Slávka, Ondrušová Darina, Bazyláková Tatiana, Olšovský Milan<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Faculty of Industrial Technologies, TnU AD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov, Slovakia, pajtasova@fpt.tnuni.sk*

Present paper investigates the properties of inorganic filler, concrete the modified form of clay mineral - montmorillonite, which was used at the preparation of model rubber compounds. The advantage of these fillers on the basis of layered silicates are relatively low contents in the range 2 - 6 wt. %, what is a big positive in compare with a high degree of filling at the conventional fillers [1]. Besides low contents can be recorded the increased modulus, strength and other factors as a result of clay addition to rubber [2, 3].

This commercial inorganic product was submitted to measurements of thermal (DTA, TG, DSC) and spectral (IR, XRD) analysis. The influence of the used type and quantity of filler was evaluated from results of cure characteristics (M<sub>L</sub>, M<sub>H</sub>, t<sub>S</sub>, t<sub>90</sub>, R<sub>V</sub>) and physical-mechanical properties (tensile strength, modulus 300, tensibility, hardness). The obtained values at the model rubber compounds were compared with the values of standard rubber compound.

*The authors sincerely thank the Slovak Grant Agency AV 4/2014/08 for the financial support.*

[3] D. Měřínská, Plasty a kaučuk 42(3-4) (2005) 15 - 20.

[1] L. Zhang, Y. Wang, Y. Wang, Y. Sui, D. Yu, J Appl Polym Sci 78 (2000) 1873.

[2] M. Arroyo, M. A. Lopez-Machado, B. Herrero, Polymer 44 (2003) 2447.

#### 2Po48

### POUŽITÍ EDTA A TEA JAKO CHELATAČNÍCH ČINIDEL PŘI PŘÍPRAVĚ BIZMUTOVÝCH SUPRAVODIČŮ METODOU SOL-GEL

K. Rubešová<sup>1</sup>, O. Smrčková<sup>1</sup>, D. Sýkorová<sup>1</sup>, V. Jakeš<sup>1</sup>, T. Hlásek<sup>1</sup>, P. Vašek<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Ústav anorganické chemie, VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha 6, tel. +420220443765,*

<sup>2</sup>*Fyzikální ústav, AV ČR, Cukrovarnická 10, 162 53 Praha 6*

*e-mail: rubesovk@vscht.cz*

Vysokoteplotní supravodiče jsou většinou připravovány reakcí v pevné fázi zahrnující několikanásobně kalcinace, homogenizace a závěrečnou sintraci. Pro supravodivou fázi Bi-2223 to znamená zajistit homogenitu kationtů pěti kovů – Bi, Pb, Sr, Ca a Cu. Kombinace sol-gelových metod a reakce v pevné fázi může lépe zajistit homogenitu i v takto komplikovaném systému [1]. Tato práce se zabývá chelatační metodou přípravy gelů a jejich následným zpracováním. Motivací je také výběr vhodného chemického systému pro přípravu tenkých vrstev spin coatingem.

Pro přípravu gelů jsme použili ethylendiamintetraoctovou kyselinu (EDTA), triethanolamin (TEA) a jejich ekvimolární směs. Příprava bizmutových supravodičů s použitím EDTA je dobře popsána [2,3]. Tento postup vyžaduje udržení pH na optimální hodnotě, která představuje kompromis mezi deprotonizací EDTA (a její rozpustností) a potlačením hydrolyzy iontů přítomných kovů. TEA jako dobré chelatační činidlo nevyžadující tak přísnou kontrolu pH zlepšila stabilitu gelů (proti hydrolyze a následné precipitaci) hlavně ve směsi s EDTA. Proto byla zjišťována možnost vzájemné reakce EDTA a TEA ve stejném smyslu jako u Pechiniho polyestefikace [4] také využívané při přípravě směsných oxidů. Přítomnost polyesterových vazeb byla zkoumána pomocí NMR a IČ spektroskopických měření. Pomocí IČ měření byly navíc charakterizovány chemické interakce jednotlivých kationtů s EDTA a TEA.

Připravené organické gely byly rozkládány ve dvou různých teplotních režimech. Prekursorů byly následně zpracovány reakcí v pevné fázi. Složení prekursorů a výsledných supravodičů bylo charakterizováno pomocí RTG difrakční a RTG fluorescenční analýzy. Ze supravodivých transportních a magnetických vlastností byla měřena kritická teplota, kritická proudová hustota a magnetická susceptibilita.

*Tato práce byla řešena jako součást výzkumného záměru MSMT CR 604613730.*

[1] M. Kakihana J. Sol.Gel Sci. Technol. 1996, 6, 7

[2] V. Rouessac; J. Wang; J. Provost; G. Desgardin J. Mater. Sci. 1996, 31, 3387

[3] A. Gholinia; F.R. Sale J. Therm. Anal. 1993, 40, 349

[4] M. P. Pechini U.S. Patent 1967, No.3 330, 697

## 2Po49

### PREPARATION AND SIZE CONTROL OF CERIA NANOPARTICLES

Vilém Bartůnek<sup>1</sup>, Olga Smrčková<sup>1</sup>

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

Ceria nanoparticles (made by reaction of cerium(IV) sulphate with ammonia solution) have been treated in suspension in boiling water, N,N-dimethylformamide (DMF) and dimethyl sulfoxide (DMSO) for various times. X-ray powder diffraction (XRD), X-Ray Fluorescence (XRF), IR spectroscopy and high-resolution transmission electron microscopy (HRTEM) was used for characterization of prepared ultrafine nanoparticles. Nanoparticles sizes were calculated using Scherrer formula. Sizes of nanoparticles increased with increasing boiling point of solvent and with increasing time. Maximal sizes of nanoparticles were 8.9 nm and were obtained by treatment in boiling DMSO. Obtained nanoparticles were good quality, separable and has cubical like or spherical like shapes. Sulphate stabilization of the nanoparticles surface was confirmed by IR spectroscopy. Advantage of this method is ease enabling its use in almost all chemical laboratories and good characterization of nanoparticles sizes by XRD and HRTEM.

## 2Po50

### POVRCHOVÁ MODIFIKACE ALUMINOSILIKÁTŮ S VYUŽITÍM K ADSORPČNÍMU ODSTRAŇOVÁNÍ TOXICKÝCH OXOANIONTŮ As, Se

Herzogová Lenka<sup>1</sup>, Fuitová Lucie<sup>1</sup>, Doušová Barbora<sup>1</sup>, Lhotka Miloslav<sup>2</sup>, Koloušek David<sup>1</sup>, Grygar Tomáš<sup>3</sup>, Machovič Vladimír<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Ústav chemie pevných látek, VŠCHT Praha, Technická 5, Praha – Dejvice, 166 28, ČR*

<sup>2</sup>*Ústav anorganické technologie VŠCHT Praha, Technická 5, Praha – Dejvice, 166 28, ČR*

<sup>3</sup>*Ústav anorganické chemie AVČR, 250 68 Řež, ČR*

<sup>4</sup>*Ústav struktury a mechaniky hornin AVČR, V Holešovičkách 41, 182 09 Praha 8, ČR*

Sloučeniny arsenu a selenu představují svou toxicitou vážnou hrozbu pro životní prostředí a lidské zdraví. Do prostředí se dostávají z přírodních i antropogenních zdrojů. V anorganické formě se v prostředí objevují nejčastěji jako oxoanionty ( $\text{AsO}_3^{3-}$ ,  $\text{AsO}_4^{3-}$ ,  $\text{SeO}_3^{2-}$ ,  $\text{SeO}_4^{2-}$ ).

Jedním ze způsobů odstraňování toxických aniontů z vodných roztoků je adsorpce. Mezi technologicky významné adsorbenty patří aluminosilikáty (kaoliny a bentonity). Jsou to materiály s vysokými sorpčními

schopnostmi a povrchovým nábojem závislým na pH roztoku. Vzhledem k nízkým hodnotám pH nulového náboje ( $\text{pH}_{\text{ZPC}}$ ) jsou kaoliny a bentonity vhodnější pro sorpci kationtů. Jednoduchou modifikací povrchů aluminosilikátů lze hodnoty  $\text{pH}_{\text{ZPC}}$  zvýšit a tím zlepšit schopnost selektivně vázat anionty. Takovým způsobem lze připravit levný a technologicky nenáročný sorbent.

Tato práce se zabývá úpravami kaolinů a bentonitů roztokem  $\text{Fe}^{2+}$  a suspenzí Al, které by byly vhodné k adsorpčnímu odstraňování toxických oxoaniontů As a Se z modelových vodných systémů. Jako výchozí materiály byly použity dva druhy kaolinů (Horní Bříza, Sedlec z ČR) obsahujících jako hlavní složku kaolinit, bentonit (Riedel de Haën, Německo) s převahou montmorillonitu a Ca-montmorillonit (standard Saz-2, USA). Materiály před a po úpravě byly analyzovány RTG kvalitativní a kvantitativní analýzou, u některých vzorků byl změřen specifický povrch metodou BET.

*Práce byla podpořena výzkumnými projekty AV ČR č. IAA 401250701, MŠMT ČR č. 6046137302 a studentským vnitřním grantem 108089007 poskytnutým VŠCHT Praha.* PLANT, J. A. et al. Arsenic and Selenium. In: Holland HD, Turekian KK, editors. Treatise on geochemistry 9.02, Amsterdam: Elsevier, 2005, 17-66.

[2] Bonnin, D. U.S. Patent No. 6042731 (2000).

[3] Wen-Hui Kuan; Shang-Lien Lo; Ming K. Wang; Cheng-Fang Lin. Removal of Se(IV) a Se(VI) from water by aluminum-oxide-coated sand. Water Research: 1998, Volume 32, 915-923.

## 2Po51

### SORPCE OXOANIONTŮ AS/SE NA MODIFIKOVANÉ JÍLOVÉ MINERÁLY: SORPČNÍ KAPACITA A ÚČINNOST, MECHANISMUS SORPCE

Lucie Fuitová<sup>1</sup>, Lenka Herzogová<sup>1</sup>, Barbora Doušová<sup>1</sup>, Vladimír Machovič<sup>1,3</sup>, David Koloušek<sup>1</sup>, Tomáš Grygar<sup>2</sup>, Miloslav Lhotka<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28, Praha 6, Česká Republika*

<sup>2</sup>*Ústav anorganické chemie AV ČR, 250 68 Řež, Česká Republika*

<sup>3</sup>*Ústav struktury a mechaniky hornin, V Holešovičkách 41, 182 09, Praha 8, Česká Republika*

As/Se patří mezi toxické látky, které ohrožují lidské zdraví. Sloučeniny As/Se se do životního prostředí dostávají z přírodních ale především z antropogenních zdrojů. Jedním z účinných mechanismů odstranění oxoaniontů As/Se z vod jsou sorpce na jílové minerály. Jílové minerály jsou díky svým strukturním a povrchovým vlastnostem dobrými sorbenty, avšak vzhledem k nízkému  $\text{pH}_{\text{ZPC}}$  (zero point of charge), jsou vhodné pro sorpci kationtů. Je tedy nutné modifikovat jejich povrch vhodnými kationty kovů.

V této práci byly použity čisté jílové minerály, a to dva kaoliny ze západních Čech (Sedlec a Horní Bříza), bentonit z Německa (Riedel de Haën) a montmorillonit z USA (Arizona). Jejich povrch byl modifikován kationty kovů a následně byla provedena adsorpce As/Se. Byly připraveny sorpční řady jednak se změnou navážky sorbentu ( $1-10 \text{ g L}^{-1}$ ) a s původní koncentrací roztoku As/Se  $40 \text{ mg L}^{-1}$  a jednak se změnou původní koncentrace roztoku As/Se ( $20-800 \text{ mg L}^{-1}$ ) a s navážkou sorbentu  $6 \text{ g L}^{-1}$ . Sorpční procesy byly popsány podle modelu Langmuirovy adsorpční izoterm. Byla zjišťována maximální sorpční kapacita sorbentů, přičemž nejvyšších hodnot bylo dosaženo pro sorpci As na modifikovaný montmorillonit (až  $66 \text{ mg g}^{-1}$ ). Pevný podíl vzorku po sorpci byl zhodnocen také pomocí IČ spektroskopie.

*Tato práce byla podpořena projektem IAA 401250701 (AV ČR), výzkumným programem MŠMT 6046137302 (CR) and studentským grantem (108089007) poskytnutým VŠCHT Praha.*

- [1] Doušová B., Fuitová L., Grygar T., Machovič V., Koloušek D., Herzogová L., Lhotka M.: J. Hazard. Mater. 165, 134(2009).  
 [2] Erdem M., Yuksel E., Tay T., Cimen Y., Turk H.: J. Colloid Interface Sci. 333, 40 (2009).  
 [3] Kosmulski M.: J. Colloid Interface Sci. 298, 730 (2006).

## 2Po52 FOXGRID A CRYSTALCMP

Jan Rohlíček<sup>1</sup>, Michal Hušák<sup>1</sup>, Bohumil Kratochvíl<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav chemie pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28, Praha 6, Česká Republika

Metoda paralelního zpracování je velmi rozšířená metoda, která se používá pro urychlení časově náročných výpočtů. Principem této metody je rozdělení jedné složité úlohy na několik menších částí, které mohou být řešeny paralelně v několika vláknech případně na několika PC v síti.

Podářilo se nám zabudovat metodu paralelního zpracování do programu FOX [1] a vytvořit tak verzi, která nese název FOXGrid [2]. Takto modifikovaný program FOX může být spuštěn buď jako řídicí element (server) nebo jako pracující článek (klient). Na serveru se definuje a spouští výpočet. Po spuštění výpočtu se server stará pouze o přerozdělování úloh a shromažďování výsledků. Klient pak nedělá nic jiného, než že přijme úlohu od serveru, provede požadovaný výpočet a vrátí výsledek.

Klient může být spuštěn na stejném PC jako je server nebo na jakémkoli jiném PC v síti a postará se o plné využití výpočetní síly PC na kterém je spuštěn.

FOX nebo FOXGrid produkují během hledání struktury mnoho podobných řešení. Otázka zní, jak jednoduše identifikovat stejná řešení? Program CrystalCMP vypočte pro každé řešení tzv. fingerprint,

který slouží k porovnávání jednotlivých řešení mezi sebou. Jako fingerprint je použita párová distribuční funkce nebo funkce jí podobná. Výsledkem je podobnostní matice a dendrogram, ze kterého jsou stejná řešení vidět.

- [1] V. Favre-Nicolin and R. Cerny, J. Appl. Cryst. 35, 734-743, (2002).  
 [2] Cerny R., Favre-Nicolin V., Rohlicek J., Husak M., Matej Z., Kuzel R.: CPD NEWSLETTER No. 35, (2007).

## 2Po53 PŘÍPRAVA RUTILOVÝCH ZÁRODKŮ ZA ZVÝŠENÉHO TLAKU

M. Ostrčil, L. Mastný

Ústav anorganické chemie, VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha 6, tel. 00420220444273, e-mail: Libor.Mastny@vscht.cz

Oxid titaničitý se v dnešní době používá hlavně jako pigment – titanová běloba. Ta se vyznačuje především vysokým indexem lomu a vynikající kryvostí. Titanová běloba se vyrábí ve dvou krystalografických modifikacích  $\text{TiO}_2$  – anatas a rutil. Anatas, nízkoteplotní modifikace  $\text{TiO}_2$ , zahřátím přechází na vysokoteplotní modifikaci rutil.

Při výrobě rutilového typu titanové běloby je zapotřebí vyšší teplota kalcinace, která však negativně ovlivňuje pigmentové vlastnosti. Proto je za účelem snížení kalcinační teploty nutná přítomnost rutilových zárodků.

Současné způsoby přípravy rutilových zárodků vychází zejména z reakce  $\text{TiO}_2$  se zásadou za vzniku titaničitanu. Ten je poté rozložen pomocí kyseliny za zpětného vzniku  $\text{TiO}_2$  ve formě rutilových zárodků, přičemž celá příprava zárodků probíhá za normálního tlaku.

Cílem práce bylo připravit rutilové zárodky za zvýšeného tlaku a porovnat jejich aktivitu se zárodky připravenými za normálního tlaku. Dále bylo cílem práce posoudit vliv měnících se podmínek přípravy zárodků na jejich aktivitu a optimalizovat tyto podmínky přípravy.

Příprava zárodků spočívala v reakci „anatasové pasty“ v autoklávu s NaOH a poté s HCl za různých experimentálních podmínek. Získané zárodky byly použity k přípravě několika řad kalcinátů  $\text{TiO}_2$ . Připravené kalcináty se lišily v použitých zárodcích a v dané řadě i cílovou teplotou jejich tepelného zpracování. Sledovanými experimentálními podmínkami bylo množství a druh použitých chemikálií a teplota přípravy zárodků.

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

**2Po54****VLIV PLAZMATICKE MODIFIKACE  
POLYPROPYLENU NA VLASTNOSTI  
DEPONOVANÝCH AU VRSTEV**

A. Vasina, P. Slepíčka, P. Sajdl, V. Švorčík

*IÚstav inženýrství pevných látek, Vysoká škola  
chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha  
6, 166 28*

V práci byl studován vliv plazmatické modifikace na vlastnosti naprašovaných Au nanovrstev. PP folie byly modifikovány Ar plazmatem. Polarita PP byla studována goniometricky. Povrchová morfologie původního a modifikovaného polypropylenu a také následně deponovaných Au vrstev byla studována pomocí mikroskopie atomárních sil (AFM). Chemická struktura povrchu byla charakterizována pomocí fotoelektronové spektroskopie (XPS). Elektrická spojitost Au nanovrstev na povrchu PP byla studována měřením její plošné rezistance.

Po plazmatické expozici Ar plazmatem se významně zvýšila smáčivost aktivovaného povrchu. Plazmatická modifikace vedla ke změně morfologie a drsnosti povrchu (vytvoření klastrovité granulovité struktury). Expozice Ar<sup>+</sup> vedla ke zvýšení počtu kyslíkatých skupin na povrchu modifikovaného polypropylenu. Povrchová morfologie následně deponovaných Au vrstev "kopírovala" povrch PP (granulovitá struktura), přičemž se vzrůstající tloušťkou a přechodem od elektricky nespojitě do spojitě oblasti narůstala velikost klastrů až k 15 nm.

*Autoři děkují za finanční podporu grantům MŠMT č. LC06041, GAAVČR č. KAN400480701 a A400500505 a GAČR 106/09/P046.*

**2Po55****LABORATORNÍ STUDIUM  
VYUŽITELNOSTI ŽELEZNÝCH NANOČÁSTIC  
PRO SANACE PODZEMNÍCH VOD**Tomáš Pluhař<sup>1</sup>, Štěpánka Klímková<sup>1</sup>, Jaroslav Nosek<sup>1</sup>, Miroslav Černík<sup>1</sup>*<sup>1</sup>Technická univerzita v Liberci, FM, NTI, Studentská  
2, 461 17 Liberec*

Nanočástice elementárního železa (nZVI, nanoFe<sup>0</sup>) lze využít pro dechloraci chlorovaných uhlovodíků, redukci nitroslouchenin a případně i k imobilizaci anorganických kontaminantů v podzemní vodě. V souvislosti s reálnou aplikací nZVI je třeba brát v úvahu, že ve srovnání s makroskopickým železem, vykazují nanočástice o rozměrech desítek až stovek nm specifické katalytické a magnetické vlastnosti související s vysokou aktivitou atomů na povrchu částic. Nanočástice železa je nutné vhodně povrchově stabilizovat. Vlastnosti různě upravených železných nanočástic lze stanovit nebo odhadnout pomocí různých analytických metod a experimentů. Základními parametry, které je možné u železných

nanočástic, resp. u jejich suspenze, sledovat je jejich velikost, tvar, chemické složení, povrchový náboj (resp. ζ-potenciál), agregátní stabilita a vlastnosti roztoků povrchově aktivních látek. Na Technické univerzitě v Liberci pro tyto účely slouží vedle elektronového mikroskopu přístroj Zetasizer Nano ZS, který umožňuje měření velikostní distribuce částic rozptýlených v kapalinách metodou DLS a stanovení ζ-potenciálu fázovou analýzou rozptýleného světla. Další metodou využívanou pro odhad velikosti nanočástic a disperzity suspenze, je sedimentační analýza. Účinnost a kinetiku reakce modifikovaného nZVI s vybranými kontaminanty lze odhadnout pomocí vsádkových pokusů. Prostřednictvím kolonových experimentů je možné posoudit transportabilitu modifikovaného nZVI v horninovém prostředí. Ze souboru naměřených dat je potom možné zhodnotit vhodnost povrchové úpravy železných nanočástic s ohledem na reálnou sanační aplikaci.

**2Po56****VPLYV SURFAKTANTU NA SADROVÚ PENU**Zora Bazelová<sup>1</sup>, Ladislav Pach<sup>1</sup>, Jana Kozánková<sup>1</sup>, Peter Bugaj<sup>2</sup>*<sup>1</sup>Oddelenie keramiky, skla a cementu, Fakulta  
chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská  
Technická Univerzita, Radlinského 9, Bratislava**<sup>2</sup>Oddelenie plastov a kaučuku, Fakulta chemickej  
a potravinárskej technológie, Slovenská Technická  
Univerzita, Radlinského 9, Bratislava*

Sadrová pena (CaSO<sub>4</sub>·1/2H<sub>2</sub>O) s vysokou poréznoťou a s veľkým špecifickým povrchom sa pripravila priamou speňovacou metódou. Vodná suspenzia sádry a povrchovo aktívnych látok sa speňovala intenzívnym mechanickým miešaním. Krátkodobú stabilitu kvapalnej peny zabezpečovali aniónové a neiónové povrchovo aktívne látky. Kvapalná pena sa transformovala na tuhú látku v priebehu niekoľkých minút tuhnutím sádry – kryštalizáciou CaSO<sub>4</sub>·2H<sub>2</sub>O v systéme. Objemová hmotnosť sadrových pien sa pohybovala od 200 do 590 kg/m<sup>3</sup> a veľkosť pórov dosahovala 55 μm až 1,3 mm, v závislosti od koncentrácie povrchovo aktívnych látok a v závislosti od doby miešania suspenzie pri vysokých otáčkach. Pevnosť v tlaku peny rástla s objemovou hmotnosťou v rozmedzí 107 – 527 kPa. Na porovnanie boli pripravené nespeneňé vzorky toho istého zloženia zamiešané pri nízkych otáčkach (nespenené), kde objemové hmotnosti vzoriek boli 2 až 4-krát väčšie ako pri spenených vzorkách a pevnosť v tlaku bola 16 až 36-krát väčšia.

**2Po57****DUAL MRI AND FLUORESCENCE PROBE BASED ON MANGANESE PEROVSKITE NANOPARTICLES FOR CELLULAR LABELLING**

Michal Kačenka<sup>1,2</sup>, Ondřej Kaman<sup>1,2</sup>, Jan Kotek<sup>2</sup>, Lukáš Falteisek<sup>3</sup>, Jan Černý<sup>3</sup>, Daniel Jiráček<sup>4</sup>, Jaroslav Kupčík<sup>5</sup>, Pavla Jendelová<sup>6</sup>, Ivan Lukeš<sup>2</sup>, Emil Pollert<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Physics AS CR, v.v.i., Cukrovarnická 10, 162 53 Prague 6, Czech Republic*

<sup>2</sup>*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Charles University in Prague, Hlavova 8, 128 40 Prague 2, Czech Republic*

<sup>3</sup>*Department of Cell Biology, Faculty of Science, Charles University in Prague, Viničná 7, 128 44 Prague 2, Czech Republic*

<sup>4</sup>*Institute of Clinical and Experimental Medicine, Videňská 1958, 140 21 Prague 4, Czech Republic*

<sup>5</sup>*Institute of Inorganic Chemistry AS CR, v.v.i., Řež 1001, 250 68 Řež u Prahy, Czech Republic*

<sup>6</sup>*Institute of Experimental Medicine AS CR, v.v.i., Videňská 1083, 142 20 Prague 4, Czech Republic*

Fluorescent magnetic nanoparticles are promising materials for biomedical research as dual labelling agents. The relaxometric studies of La<sub>0.75</sub>Sr<sub>0.25</sub>MnO<sub>3</sub> nanoparticles coated by silica revealed high r<sub>2</sub>-relaxivity exceeding the one of iron oxides.

The nanoparticles were coated by new two-step procedure including the use of mixture of N-1-(3-triethoxysilylpropyl)-N'-fluoresceyl thiourea and tetraethoxysilane in the first step leading to the fluorescent silica shell. But the resulting particles exhibit low colloidal stability in water at neutral pH. Therefore the particles were subsequently coated by secondary silica layer in the next step employing only tetraethoxysilane. The final product exhibits high colloidal stability in water, its zeta potential dependence and the isoelectric point (app. 2) are similar to those of the silica nanoparticles.

IR and luminescence spectroscopy proved the presence of fluorescein and thiourea moiety. TEM evidenced growth of the shell during the second step, the final thickness of silica was app. 20 nm.

Cellular labelling experiments were carried out with HeLa cells, fibroblasts and rMSCs. Significant uptake of the nanoparticles occurred in all cases and the viability of the cells was high. According to the fluorescence microscopy numerous endosomes containing nanoparticles were formed. Islets of Langerhans exhibited good vitality during in vitro labelling and provided strong MR signal due to the uptake of nanoparticles.

**2Po58****UREA BASED COMPOUNDS AS SCAFFOLD FOR GEOMETRIC CONTROL OF HYDROGEN BONDED NETWORKS OF ANIONS**

Ondřej Kaman<sup>1,2</sup>, Ivana Císařová<sup>1</sup> David Havlíček<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Department of Inorganic Chemistry, Fac Sci, Charles Univ Prague, Czech Republic*

<sup>2</sup>*Institute of Physics AS CR, v.v.i., Czech Republic*

Urea is a classical receptor interacting with anions as substrates via two hydrogen bonds. It has been reported that certain bis-urea binds two H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub><sup>-</sup> with cooperative effect because the resulting 1:2 complex is stabilized by hydrogen bonds between the anions [1]. Organic scaffold comprising urea moieties might be of great potential for controlled architecture of hydrogen bonded networks of anions.

In the present work various bis-ureas and bis-thioureas were synthesized employing diamines (ethylene-, phenylene-, xylylene-) and isocyanates/isothiocyanates (substituted phenyl-). The organic compounds were characterized by NMR, IR and UV-Vis spectroscopy. The formation of complexes with H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub><sup>-</sup> was investigated spectrophotometrically using NBu<sub>4</sub>H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> in DMSO, if suitable chromophore was present and in similar <sup>1</sup>H NMR titrations. The association constants were calculated by non-linear least squares data processing. The attempts to obtain single crystals of supramolecular complexes of selected bis-ureas were carried out.

The most interesting structure is the one of (NBu<sub>4</sub>)<sub>2</sub>[(H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>.1,1'-(ethane-1,2-diyl)bis(3-(4-nitrophenyl)urea)].2H<sub>2</sub>O. The central ethane possesses the anti conformation and both urea moieties form two hydrogen bonds to H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub><sup>-</sup>. The anions are further interconnected to infinite chains parallel to *a* axis. The water molecule is linked both to urea and H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub><sup>-</sup> via hydrogen bonds stabilizing the whole arrangement. This unique feature is important from the viewpoint of the role of solvent molecules in the receptor-substrate complex formation.

[1] Amendola V., Boiocchi M., Esteban-Gómez D., Fabbri L., Monzani E.: Chiral receptors for phosphate ions. *Org. Biomol. Chem.*, **2005**, 3, 2632 - 2639.

**2Po59****REAKTIVNÍ PLAZMOVÁ DEPOZICE KARBIDU BORU S TITANEM**

Josef Stejskal<sup>1</sup>, Vlastimil Brožek<sup>1</sup>, Pavel Ctibor<sup>2</sup>, Karel Neufuss<sup>2</sup>, Michal Novák<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6*

<sup>2</sup>*Ústav fyziky plazmatu AVČR v.v.i. Praha*

Příprava vrstevnaných povlaků a samonosných skořepinových polotovarů z vysokotavitelných cermetů byla ověřována metodou plasma spraying. K

depozici byl použit generátor vodou stabilizovaného plazmatu WSP<sup>®</sup>. Pomocí dvou separátních podavačů s proměnnými parametry FD a SD (feeding a spraying distance) byly do proudu plazmatu současně vnášeny prášky karbidu boru a titanu v granulometrii 30-100 μm. V teplotním intervalu 20 000-30 000 K od výstupní trysky plazmatu až ke chlazeným substrátům během 2-5 ms letu částic dochází k chemické reakci za vniku boridů titanu. Vznik karbidů je problematický; jsou přítomny jen v difúzní mezivrstvě a jejich identifikace je na hranici citlivosti difraktometrické metody. Stechiometrický poměr produkovaných cermetů Ti-TiB<sub>2</sub>-TiB závisí především na výchozí granulometrii vnášených prášků.

Boridy titanu, vyznačující se vysokými body tání, vysokou tvrdostí a malou smáčivostí s taveninami kovů (b.t. 3225°C, HV 30 GPa) se používají k přípravě kelímků pro reakce za vysokých teplot a také jako vynikající elektrické topné odporové elementy nebo pouzdra termočlánků. Pro tento účel byla studována jejich kompatibilita s ocelovými a grafitovými substráty. S nejnovější aplikací vrstevnatých boridů titanu se uvažuje v protibalistické ochraně. Reaktivní difúzi v první fázi depozice vznikají z roztavených splatů mezivrstvy boridů podkladových kovů, u ocelových substrátů byl identifikován Fe<sub>2</sub>B.

## 2Po60 TETRAAZAMACROCYCLES ON CALIX[4]ARENE SCAFFOLD AND THEIR LANTHANIDE COMPLEXES

Marta Mádlová, Pavel Vojtíšek, Zuzana Kotková, Ivan Lukeš

*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta  
University Karlovy, Hlavova 2030, Praha 2, Česká  
republika*

A new macrocyclic ligand as a potential contrast agent for MRI (magnetic resonance imaging) for high fields was developed. The calix[4]arene bearing four gadolinium dota-like complexes, with ligand H<sub>4</sub>do3ap<sup>ABn</sup> (H<sub>4</sub>do3ap<sup>ABn</sup> = 1,4,7,10-tetraazacyclododecane-4,7,10-triacetic-1-{methyl[(4-aminophenyl)methyl]phosphinic acid}), has been attached to the core by a thiourea bridge.

In each complex, the gadolinium(III) ions are coordinated by a macrocyclic ligand and contains one water molecule in inner sphere. The MRI efficacy (relaxivity) of the conjugate has been studied by the variable temperature <sup>17</sup>O NMR and <sup>1</sup>H NMR relaxometric experiments.

As the motion of the molecule and the water exchange rate are ones of the crucial aspects limiting a relaxivity, the experimental data were fitted simultaneously with commonly used equations based on Lipari-Szabo approximation to obtain the relevant parameters. The mean water residence lifetime (<sup>298</sup>τ<sub>M</sub>) has been found to be 54 ns.

## POSTERY - SEKCIA 3: ORGANICKÁ CHÉMIA A POLYMÉRY

### 3Po01 OD ŽELEZA K NIKLU – CESTA PLNÁ PŘEKVAPENÍ

David Nečas<sup>a</sup> a Martin Kotora<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>*Katedra organické a jaderné chemie, Přírodovědecká  
fakulta UK v Praze,*

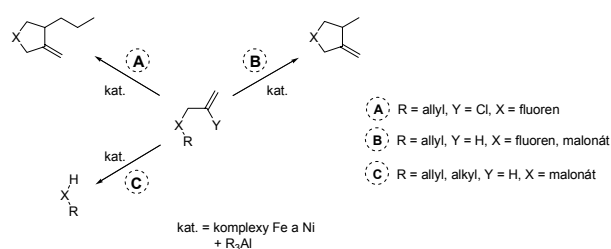
*Hlavova 8, 128 43 Praha 2*

<sup>b</sup>*Ústav organické chemie a biochemie, Akademie věd  
České republiky,*

*Flemingovo nám.2, 166 10 Praha 6*

Tvorba a štěpení C-C vazeb katalyzované pomocí komplexů přechodných kovů je v současné době bezesporu jednou z nejzajímavějších a nejintenzivnějších zkoumaných oblastí výzkumu spjatého s organickou syntézou. Během několika předchozích let jsme publikovali několik katalytických systémů umožňujících právě tvorbu, či naopak, štěpení C-C vazeb. Tyto systémy jsou založené na komplexech levných přechodných kovů, Fe či Ni, v kombinaci s

organohliníty sloučeninami (Et<sub>3</sub>Al, Et<sub>2</sub>AlCl) a vhodné pro alkylativní cyklizaci α,ω-halodienů,<sup>1a,1b</sup> cyklizaci α,ω-dienů<sup>2a,2b</sup> či štěpení neaktivované C-C vazby u allyl malonátů.<sup>1b,3a,3b,3c</sup>



Tato práce byla podpořena projektem MŠMT č. LC 06070 Struktura a syntetické aplikace komplexů přechodných kovů.

- [1] a) Nečas, D.; Kotora, M.; Císařová, I. *Eur. J. Org. Chem.* **2004**, 1280. b) Nečas, D.; Drabina, P.; Sedlák, M.; Kotora, M. *Tetrahedron Lett.* **2007**, 48, 4539.
- [2] a) Nečas, D.; Turský, M.; Tišlerová, I.; Kotora, M. *New. J. Chem.* **2006**, 30, 671. b) Nečas, D.;

Ramella, D.; Rudovská, I.; Kotora, M. *J. Mol. Catal. A: Chemical* **2007**, *78*, 274.

- [3] a) Nečas, D.; Turský, M.; Kotora, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, *126*, 10222. b) Turský, M.; Nečas, D.; Drabina, P.; Sedlák, M.; Kotora, M. *Organometallics* **2006**, *25*, 901. c) Nečas, D.; Kotora, M. *Org. Lett.* **2008**, *10*, 5261.

### 3Po02

#### HIGHLY ENANTIOSELECTIVE ORGANOCATALYTIC SYNTHESIS OF PIPERIDINES. FORMAL SYNTHESIS OF (-)-PAROXETINE

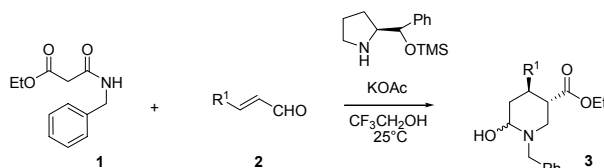
Jiří Schimer<sup>a</sup>, Ramon Rios Torres<sup>b</sup> and Jan Veselý<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Department of Organic Chemistry, Charles University, Albertov 2030, 128 40 Praha 2, Czech Republic; email: jxvesely@natur.cuni.cz

<sup>b</sup> Department of Organic Chemistry, Universitat de Barcelona, Martí i Franqués 1-11, 08028 Barcelona, Spain

The discovery of new reactions that allow us to build complex molecular scaffolds in an efficient way from readily available starting materials remains a challenging goal in chemical synthesis. However, a limited number of catalytic enantioselective cascade reactions, which enable the facile construction of complex scaffolds, have been developed thus far. Due to the widespread occurrence of the piperidine ring in biologically active compounds,<sup>1</sup> the development of efficient methods for its diastereoselective or enantioselective synthesis is a subject of considerable practical importance. It is widely accepted that the biological properties of piperidines are highly

dependent on the type and location of substituents in the heterocycle. Accordingly, great attention has been paid to the construction of functionalized piperidines. It is well documented that piperidin-2-ones are common synthetic precursors for biologically important polycyclic alkaloids, such as indolo[2,3-a]quinolizidines and benzo[a]quinolizidines. With these ideas in mind, we envisioned an easy and direct entry to piperidines by coupling of imidomalonates **1** and  $\alpha,\beta$ -unsaturated aldehydes **2**, as shown in Scheme 1, and to apply this methodology for the preparation of the facile synthesis of valuable compounds such as antidepressant (-)-Paroxetine.



Scheme 1. Amidomalonate addition.

Valero, G., Schimer, J., Cisarova, I., Vesely, J.,

Moyano, A., Rios, R. *Tetrahedron Lett.* **2009**, *50*, 1943.

- [4] 2.(a) Elbein, D. A.; Molineux, R. In *Alkaloids; Chemical and Biological Prospective*; Pelletier, S. W., Ed.; Vol. 57; John Wiley & Sons: New York, 1987; (b) O'Hagan, D. *Nat. Prot. Rep.* **2000**, *17*, 435.  
[5] This work was supported by Grant No. MSM0021620857 from the Ministry of Education of the Czech Republic and the Grant Agency of Czech Republic (203/09/P193).

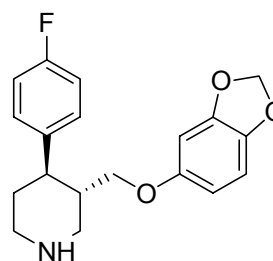
### 3Po03

#### SYNTEZA KONJUGOVANÝCH SYSTÉMŮ S BORONESTEROVOU FUNKCÍ

Jiří Kulhánek, Filip Bureš

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

V současné době nabývají stále více na významu organické molekuly, které se vyznačují konjugovaným push-pull systémem. Takovéto látky nacházejí uplatnění např. jako chromofory v nelineární optice, barviva, organické světlo emitující diody, či polymery. Jednou z možností finálního spojení elektronodorná a elektronakceptorní části chromoforu je výstavba C-C vazby pomocí Suzuki-Miyaura reakce. Dostupnost vhodné boronové kyseliny resp. boronesteru je podmínkou pro zdárnou syntézu.



(-)-Paroxetine

Z tohoto důvodu byly navrženy vhodné syntetické postupy k syntéze pinakolesterů boronových kyselin s konjugovaným systémem násobných vazeb a elektronakceptorní skupinou. Celkem bylo syntetizováno 8 sloučenin se substituenty nitro nebo kyan a styryl, biphenyl, fenylethenylfenyl a fenylethynylfenyl  $\pi$ -konjugovaným můstkem opatřeným pinakolboronesterovou funkcí. Získané látky byly plně charakterizovány pomocí GC/MS, <sup>1</sup>H a <sup>13</sup>C NMR a elementární analýzy.

Tato práce byla podporována Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy (MSM0021627501).

**3Po04****CHROMOFORY NA BÁZI IMIDAZOL-4,5-DIKARBONITRILU**

Filip Bureš, Jiří Kulhánek, Oldřich Pytela

*Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 537, Pardubice, 53210*

Zájem o push-pull systémy s konjugovanými systémy násobných vazeb opatřenými vhodnými donory a akceptory, které bývají označovány rovněž jako CT-chromofory, v posledních letech dramaticky vzrostl. Push-pull organické sloučeniny jsou nejčastěji syntetizovány jako potenciální chromofory pro nelineární optiku (NLO) a mnohé další optoelektronické aplikace. Obecně jsou hledány takové chromofory, které vykazují vysoké hodnoty polarizabilit, vhodné optické vlastnosti, dobrou tepelnou stabilitu či rozpustnost, kdy vhodný chromofor musí být rovněž synteticky dostupný (ekonomický aspekt). Charakterizace potenciálně NLO aktivních látek je prováděna nejčastěji základními metodami strukturálního výzkumu (NMR, MS, IR, X-ray analýza, elementární analýza apod.) a dále pak UV-Vis spektroskopii, elektrochemickou analýzou (CV, RDV apod.) a kvantově-chemickými výpočty. Jelikož lze imidazol-4,5-dikarbonitril rovněž aplikovat jako vhodnou akceptorní část NLO aktivního chromoforu, vlastnosti takovýchto sloučenin budou prezentovány.

*Tento výzkum byl podpořen Grantovou agenturou České republiky (203/08/0076) a Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (MSM 0021627501).*

**3Po05****MODIFIKACE VLASTNOSTÍ KOLAGENNÍHO HYDROLYSÁTU**

Pavel Mokrejš<sup>1</sup>, Dagmar Janáčková<sup>2</sup>, Vladimír Vašek<sup>2</sup>, Pavol Šujan<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Ústav inženýrství polymerů, nám. TGM 275, 762 72 Zlín; mokrejs@ft.utb.cz<sup>2</sup> Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta aplikované informatiky, Ústav automatizace a řídicí techniky, Nad Stráněmi 4511, 760 05 Zlín; janacova@fai.utb.cz

Enzymovou hydrolyzou manipulačních usňových odpadů, která je v provozních podmínkách dobře zvládnuta, se vyrábí kolagenní hydrolyzáty s prakticky nulovým obsahem chromu [1]. Využití kolagenních hydrolyzáty na použitelné výrobky (např. filmy, fólie) je omezeno jejich špatnými mechanickými vlastnostmi. Kolagenní hydrolyzáty obsahuje mnoho reaktivních skupin, proto je možné upravit jeho vlastnosti a vyhovět tak požadavkům souvisejících s jeho potenciální aplikací [2]. Pro potravinářské či farmaceutické aplikace je akceptovaným síťovadlem dialdehyd škrobu (DAS) [3]. Cílem našeho příspěvku

bylo posoudit možnosti síťování kolagenního hydrolyzáty chemicky (přídavkem síťovadla) a fyzikálně (působením tepla). Z 15 % roztoku hydrolyzáty kolagenu byly připraveny litím (na silikonové desky) biodegradabilní filmy (odpařením vody při 35 °C) o tloušťce 0,9±0,1 mm. Sledoval se vliv přídavku změkčovadla – glycerinu (0 až 10 %, w/w), síťovadla – DAS (0 až 8 %, w/w) a 24 h tepelné expozice filmů (60, 75 a 90 °C) na rozpustnost filmů ve vodě při 25 °C. Zjistili jsme, že chemickým síťováním lze prodloužit rozpustnost filmů (v závislosti na přídavku DAS) až 100 násobně. Daleko výraznějšího zpomalení rozpustnosti filmů bylo dosaženo vzájemnou kombinací chemického a fyzikálního síťování. V případě vyšších přídavků DAS (8 %) a tepelné expozice filmů při 90 °C došlo k více jak 500 násobnému zpomalení rozpouštění filmů.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM 7088352102.*

- [1] Mokrejs, P. et al. Processing of solid leather by-products from shoe-making industry (To be continued). *Leather Science and Engineering*, 2007, 17, 3, 3-7.
- [2] Langmaier, F. et al. Biodegradable packing materials from hydrolysates of collagen waste proteins. *Waste Management*, 2008, 28, 3, 549-556.
- [3] Rhim, J. W et al. Soy protein isolate-dialdehyde starch films. *Industrial Crops and Products*, 1998, 8, 3, 195-203.

**3Po06****NEW CARBAMATES BASED ON 2-PHENYLIMIDAZOLINE**

Patrik Pařík<sup>1</sup>, Josef Jansa<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Organic Chemistry and Technology, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice. Studentská 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic

<sup>2</sup>Research Institute of Organic Syntheses. Rybitví 296, 533 54 Rybitví, Czech Republic

New carbamates were formed by reactions of substituted arylisocyanates with 2-(4-hydroxyphenyl)-1H-imidazoline [1.] and its analogs. The reactivity of 2-(4-hydroxyphenyl)-1H-imidazoline towards isocyanates was studied. Its reaction with excess of isocyanate yields *N,O*-dicarboxamides, three new derivatives were prepared in this way. When 2-(4-hydroxyphenyl)-1H-imidazole was used as starting material, only *O*-carbamoylation proceeds and two new carbamates were prepared. The method of selective *N*-acetylation of 2-(4-hydroxyphenyl)-1H-imidazoline by two-step synthesis was described. Six new carbamates were prepared via reaction of 1-acetyl-2-(4-hydroxyphenyl)-1H-imidazoline with isocyanates. Further, the reaction of 2-(4-hydroxyphenyl)-1H-imidazoline hydrochloride



with isocyanates was accomplished to yield two new carbamates. 2-(4-Hydroxyphenyl)-1*H*-imidazoline, 2-(4-hydroxyphenyl)-1*H*-imidazole, and its two new carbamates were tested as acetylcholinesterase and butyrylcholinesterase inhibitors.

The authors thank the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic for financial support (project MSM0021627501).

[1] Rogers G. A., Bruice T. C.: *J. Am. Chem. Soc.* **1974**, *96*, 2463.

### 3Po07

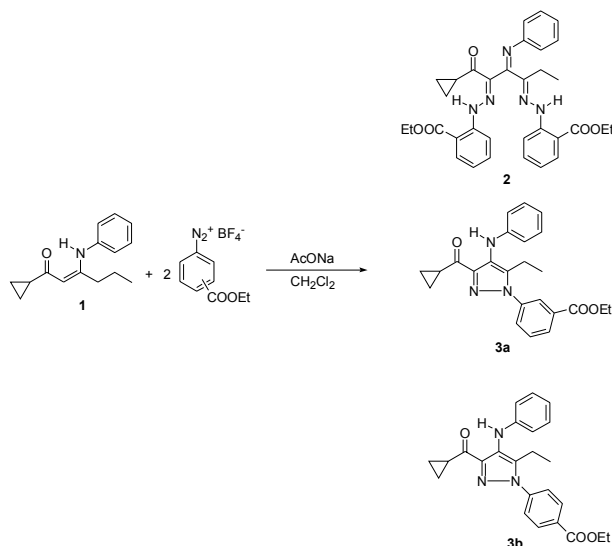
#### REAKTIVITA 1-CYKLOPROPYL-3-FENYLAMINOHEX-2-EN-1-ONU VŮČI ETHOKYKARBONYLBENZENDIAZONIUM-TETRAFLUOROBORÁTŮM

Petr Šimůnek<sup>1</sup>, Markéta Svobodová<sup>1</sup>, Aleš Růžička<sup>2</sup>, Vladimír Macháček

<sup>1</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav organické chemie a technologie, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika.

<sup>2</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra obecné a anorganické chemie, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika.

Nedávno jsme popsali metodiku syntézy 3-acyl-4-amino-1-aryl-1*H*-pyrazolů reakcí  $\beta$ -enaminonů s různými benzandiazoniovými solemi.<sup>1,2</sup> Zjistili jsme, že při reakci 1-cyklopropyl-3-fenylaminocyklohex-2-en-1-onu s izomerními ethoxykarbonylbenzendiazonium-tetrafluoroboráty závisí struktura reakčního produktu na vzájemné poloze ethoxykarbonylové skupiny a diazoniové skupiny. Pokus o přípravu pyrazolu z 2-ethoxyderivátu byl neúspěšný, místo toho byla izolována sloučenina **2**. Ostatní dva izomerní diazonium-tetrafluoroboráty poskytly při reakci příslušné pyrazoly **3a,b**. Sloučenina **2** vykazuje chiralitu a byla charakterizována pomocí multinukleární magnetické resonance a rentgenové difrakce.<sup>3</sup>



Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky za finanční podporu (projekt 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**, v tisku.  
 [3] Šimůnek P., Svobodová M., Růžička A., Macháček V.: rukopis v přípravě.

### 3Po08

#### ACID-CATALYZED DECOMPOSITION OF EXTREMELY STABLE 1-(2,1-BENZISOTHIAZOL-3-YL)-3-PHENYLTRIAZENES

Jiří Hanusek<sup>1</sup>, Vladimír Macháček<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika

Triazenes are a very useful and diverse class of compounds whose synthetic applications were recently reviewed [1]. Acid-catalyzed decomposition of unusually stable 1-(2,1-benzisothiazol-3-yl)-3-phenyltriazenes in aqueous perchloric acid or aqueous mixture of perchloric and acetic acid has been studied by us [2] under pseudo-first order reaction conditions at 25 °C. Reaction gives different products according to substitution on nitrogen N-3. For triazene carrying hydrogen corresponding 3-amino-2,1-benzisothiazole and benzenediazonium salt are formed whereas in the case of substitution on nitrogen N-3 by an alkyl group (methyl, *n*-butyl) the 2,1-benzisothiazole-3-diazonium salt and *N*-alkylanilines are formed exclusively. It was found that the observed rate constant ( $k_{\text{obs}}$ ) of the acid-catalyzed decomposition at first increases nonlinearly with increasing concentration of an acid. Then  $k_{\text{obs}}$  slightly decreases and at high acid concentration steeply increases again. *A-S<sub>E</sub>2* mechanism in which the protonation of the triazene nitrogen proceeds

simultaneously with the cleavage of N–N bond has been suggested. Tautomerism of 1-(2,1-benzisothiazol-3-yl)-3-phenyltriazene has been also examined by  $^1\text{H}$  NMR spectroscopy.

*This work was supported by Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Project No. MSM 0002 162 7501)*

[1] D. B. Kimball, M. M. Haley: *Angew. Chem. Int. Ed.* **2002**, *41*, 3338 – 3351.

[2] J. Hanusek, H. Bělohlová, J. Příkryl, V. Macháček: *Dyes Pigments* **2009**, *80*, 136 – 140.

### 3Po09

#### $\beta$ -ENAMINONY A $\beta$ -ENAMINOAMIDY JAKO VÝCHOZÍ LÁTKY PŘI SYNTÉZE BOROVÝCH HETEROCYKLŮ

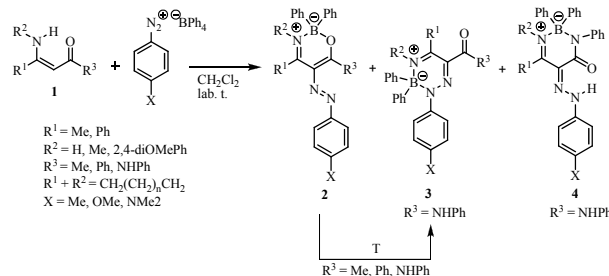
Svobodová Markéta<sup>1</sup>, Bárta Jan<sup>1</sup>, Josefík František<sup>1</sup>, Šimůnek Petr<sup>1</sup>, Macháček Vladimír<sup>1</sup>, Lyčka Antonín<sup>2</sup>, Bertolasi Valerio<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, Pardubice 532 10, Česká republika

<sup>2</sup>Výzkumný ústav organických syntéz, Rybitví 296, Pardubice 532 18, Česká republika

<sup>3</sup>Università di Ferrara, Dipartimento di Chimica and Centro di Strutturistica Diffraattometrica, Via L. Borsari 46, I-441 00, Ferrara, Italy

Polarizované ethyleny (např.  $\beta$ -enaminony a  $\beta$ -enaminoamidy, **1**) jsou široce využívanými výchozími látkami v organické syntéze. My jsme se zaměřili na jejich reaktivitu vůči diazoniovým solím, především substituovaným benzendiazonium-tetrafenylborátům.<sup>[1–3]</sup> Tyto tzv. *push-pull* alkeny poskytují s diazoniovou solí dle očekávání nejprve produkty azokopolace, které následně reagují s tetrafenylborátovým aniontem za vzniku šestičlenných heterocyklických sloučenin – oxazaborinů **2**, triazaborinů **3** nebo diazaborinů **4**. V případě  $\beta$ -enaminoamidů je složení produktů ovlivněno přítomností bezv. octanu sodného v reakční směsi. Reakce probíhá za mírných podmínek (25 °C) v dichlormethanu. Některé z oxazaborinů podléhají termickému přesmyku na triazaboriny.



*Tato práce vznikla za podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (Projekt MSM0021627501).*

[1] Pešková M., Šimůnek P., Bertolasi V., Macháček V., Lyčka A.: *Organometallics*: **2006**, *25* (8), 2025–2030.

[2] Svobodová M., Bárta J., Šimůnek P., Bertolasi V., Macháček V.: *J. Organomet. Chem.* **2009**, *694*, 63–71.

[3] Josefík, F.: Diplomová práce, Univerzita Pardubice, **2009**.

### 3Po10

#### SYNTÉZA A KATALYTICKÉ VLASTNOSTI 6-(4-ALKYL-4,5-DIHYDRO-1,3-OXAZOL-2-YL)PYRIDIN-2-KARBOXYLÁTŮ

Pavel Drabina<sup>1</sup>, Petr Funkl<sup>1</sup>, Miloš Sedlák<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika, e-mail: pavel.drabina@upce.cz

Deriváty oxazolinů tvoří významnou skupinu chirálních ligandů, které nacházejí uplatnění jako katalyzátory různých chemických procesů, zejména pak v enantioselektivní katalýze[1]. Do této skupiny patří rovněž 6-(4-alkyl-4,5-dihydro-1,3-oxazol-2-yl)pyridin-2-karboxyláty připravené v rámci této práce. Při syntéze těchto ligandů se vycházelo z kyseliny 6-methoxykarbonylpyridin-2-karboxylové[2], jejíž karboxylová skupina byla transformována na oxazolinový skelet za vzniku příslušných methyl-6-(4-alkyl-4,5-dihydro-1,3-oxazol-2-yl)pyridin-2-karboxylátů. Hydrolyzou esterové skupiny pak byla připravena série solí 6-(4-alkyl-4,5-dihydro-1,3-oxazol-2-yl)pyridin-2-karboxylové kyseliny. Jejich stabilita v kyselém prostředí byla studována pomocí kinetických metod. Reakcí karboxylátů s měďnatými halogenidy byly připraveny příslušné měďnaté komplexy. Jejich struktura v pevné fázi byla určena pomocí rentgenostrukturní analýzy. Bylo zjištěno, že měď zaujímá v těchto komplexech geometrii deformované tetragonální pyramidy, kde vrchol tvoří atom halogenu následující molekuly komplexu. Tyto komplexy tedy vytváří lineární polymerní strukturu. Byl rovněž připraven komplex obsahující nekoordinující  $\text{SbF}_6^-$  anion. Vybrané komplexy s mědi byly studovány jako enantioselektivní katalyzátory pro asymetrickou Henryho reakci, Michaelové adice a adice terminálních alkenů na iminy.

*Práce byla podpořena projektem MŠMT ČR, MSM 0021627501 a grantem GA ČR 203/08/P010.*

[1] Desimoni G., Faita G., Quadrelli P.: *Chem. Rev.*, **2003**, *103*, 3119.

[2] Schmuck C., Machon U.: *Chem. Eur. J.*, **2005**, *11*, 1109.

**3Po11****VLASTNOSTI POLYETYLÉNU OČKOVANÉHO ANTIBAKTERIÁLNYMI LÁTKAMI S VYUŽITÍM NÍZKOTEPLNOTNEJ PLAZMY**

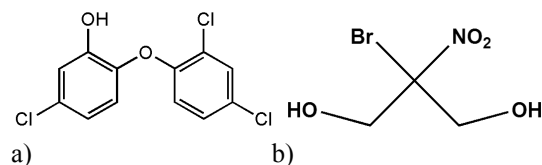
Anton Popelka<sup>1</sup>, Igor Novák<sup>1</sup>, Marián Lehocný<sup>2</sup>, Ivan Chodák<sup>1</sup>, Angela Kleinová<sup>1</sup>, Marián Števiar<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9,

842 36 Bratislava, Slovenská republika

<sup>2</sup>Centrum výskumu zdravotníckych materiálu, UTB ve Zlíně, Nad Ovčírnu 3685, 760 01 Zlín, Česká republika

Polyetylén (PE) patrí medzi najpoužívanejšie polyméry v mnohých priemyselných odvetviach, ale pre jeho hydrofóbny charakter je nevhodný pre mnohé aplikácie<sup>1</sup>. Zvýšenie hydrofilnosti PE môže byť dosiahnuté modifikáciou PE plazmou a následným očkovaním PE látkami obsahujúcimi polárne skupiny<sup>2</sup>. V tejto práci bol preskúmaný vplyv vybraných antibakteriálnych látok očkovaných na nízko hustotný polyetylén (LDPE) modifikovaný nízko teplotnou plazmou bariérového výboja. Ako antibakteriálna látka bol použitý triclosan (obr. 1a) a bronopol (obr. 1b), ktoré boli naočkované na povrch LDPE pomocou plazmy difúzneho koplánrneho povrchového bariérového výboja. Tieto antibakteriálne látky obsahujú polárne funkčné skupiny a patria medzi biokompatibilné materiály, čo je dôležité z hľadiska aplikácií v medicíne<sup>3</sup>.



Obr. 1: Štruktúra použitých antibakteriálnych látok: a – triclosan, b – bronopol

Skúmanie povrchových vlastností upraveného LDPE bolo uskutočnené goniometrickým meraním uhlov zmáčania testovacích kvapalín pri určovaní povrchovej energie polyméru a stanovením chemického zloženia pomocou FTIR spektroskopie. Adhézne vlastnosti boli stanovené určením pevnosti adhézneho spoja LDPE k polyakrylátu odlupovaním.

Očkovanie LDPE antibakteriálnymi látkami viedlo k výraznému zvýšeniu povrchovej energie a jej polárnej zložky a dosiahol sa aj rast pevnosti adhézneho spoja LDPE k polárnejšiemu polyméru.

Autori ďakujú grantovej agentúre MŠ SR a SAV, projekt VEGA č. 2/7103/27 za podporu pri výskume.

[1] Novák I., Chodák I.: Adhesion of poly(propylene) modified by corona discharge, *Angew. Makromol. Chem.* 260, 47-51 (1998).

[2] Dubreuil M. F., Bongaers E. M.: Use of atmospheric pressure plasma technology for durable hydrophilicity enhancement of polymeric substrates. *Surf. & Coat. Technol.* 202, 5036–5042 (2008).

[3] Zhang W., Chu P. K., Ji J., Zhang Y., Fu R. K. Y., Yan Q.: Antibacterial properties of plasma-modified and triclosan or bronopol coated polyethylene. *Polymer* 47, 931-936 (2006).

**3Po12****PHOTO-CROSSLINKING OF POLYETHYLENE (PE) BY MONO- AND DI-ACETOPHENONE DERIVATIVES AND THEIR PRECURSORS. NORRISH TYPE II REACTION IN PE MATRIX.**

Ivan Lukáč<sup>1\*</sup>, Csaba Kósa<sup>1</sup>, Richard G. Weiss<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Bratislava, Slovak Republic, <sup>2</sup>Department of Chemistry, Georgetown University, Washington D.C., USA

Post-polymerization crosslinking has advantages when specific polymer properties are sought. For example, UV irradiation of polyethylene (PE) containing compounds, such as benzophenone and its derivatives, is a common method of PE crosslinking. Acetophenone or alkanophenone structures have not been used for photochemical crosslinking of PE. The efficiency and mechanism of photochemical crosslinking of films of low density PE by molecules containing one or two alkanophenone groups have been correlated with the relative rates of carbonyl group depletion under equivalent irradiation conditions.

Freshly prepared low density PE films, 0.32–0.37 mm thickness, containing additives in equal initial concentrations of carbonyl groups were irradiated in argon atmospheres in quartz tubes simultaneously in a merry-go-round apparatus at 30 °C with the output from a 150 W medium pressure mercury arc. The gel contents in the films, as measures of crosslinking efficiency, were estimated as the portion insoluble in boiling toluene. FT-IR spectra were used to follow the depletion of carbonyl groups. The structures and relative yields of low molecular-mass products after irradiating PE film containing some additives for short periods were estimated by GC-MS.

The alkanophenone derivatives are found to be equally or more efficient than benzophenone as crosslinkers of PE. The effect of crystallization of some of the additives in the PE matrices and the competition between photochemical addition of the carbonyl groups to C-H or C=C bonds of the polymer and Norrish Type II processes were investigated also. The results presented here demonstrate the utility of derivatives of alkanophenones, especially those with two reactive carbonyl groups, as crosslinkers of PE. Clearly, they can be employed to crosslink many other polymers.

*I.L. and Cs.K. are grateful to the Slovak grant agency VEGA and APVV for support through project 2/0097/09 and 0562-07 respectively.*

### 3Po13

#### NOVÉ NÍZKODIMENZIONÁLNI ANORGANICKO-ORGANICKÉ HYBRIDNÍ MATERIÁLY NA BÁZI FOSFONÁTŮ MĚDI: SYNTÉZA A STRUKTURA

Jan Svoboda<sup>1</sup>, Vítězslav Zima<sup>1</sup>, Klára Melánová<sup>1</sup>, Ludvík Beneš<sup>1</sup>, Ya-Ching Yang<sup>2</sup>, Sue-Lein Wang<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Společná laboratoř chemie pevných látek Ústavu makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i. a Univerzity Pardubice. Studentská 95, 532 10 Pardubice, Česká republika

<sup>2</sup>National Tsing Hua University, Department of Chemistry, 101 Kuang Fu Rd., Hsinchu, Taiwan

Nové hybridní anorganicko-organické látky o složení  $\text{Cu}(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)(\text{O}_3\text{SC}_6\text{H}_4\text{PO}_3\text{H})\cdot\text{H}_2\text{O}$  (**1**) a  $\text{Cu}(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)(\text{O}_3\text{PC}_6\text{H}_4\text{COOH})\cdot\text{H}_2\text{O}$  (**2**) byly získány hydrotermální syntézou z měďnaté soli, 1,10-fenantrolinu ( $\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2$ ), a kyseliny 4-sulfofenylfosfonové, respektive 4-karboxyfenylfosfonové. Struktura těchto látek byla určena z vhodných monokrystalů rentgenovou difrakcí a podpořena daty z termogravimetrické analýzy, energiově-disperzní analýzy a elementární analýzy.

V obou případech je měď koordinována pěti atomy do tvaru tetragonální pyramidy, v ekvatoriálních polohách dvěma atomy dusíku z fenantrolinu. Zbývající koordinační polohy jsou zaplněny atomy kyslíku.

V případě látky **1** pocházejí oba atomy kyslíku koordinované v ekvatoriálních polohách z fosfonátových skupin dvou 4-sulfofenylfosfonových kyselin, apikální poloha je obsazena atomem kyslíku sulfonátové skupiny. Každá fosfonová skupina je takto vázána ke dvěma atomům mědi dvěma kyslíky skupiny  $\text{PO}_3\text{H}$  a působí tedy jako bidentátní můstkový ligand. Třetí kyslík fosfonátové skupiny je terminální a je na něj navázán vodík.

V případě látky **2** náleží jeden atom kyslíku v ekvatoriální poloze k fosfonátové skupině, druhý ekvatoriální atom kyslíku pochází z karboxylátové skupiny. V tomto případě je fosfonátová skupina vázána k mědi pouze jedním atomem kyslíku, zbylé atomy kyslíku jsou terminální. Atom vodíku není vázán na fosfonátové skupině, ale na skupině karboxylátové. Poslední, apikální poloha je doplněna atomem kyslíku vody.

Rozdíly ve strukturách obou látek jsou způsobeny především rozdílnou aciditou skupin vázaných na benzenovém jádře v para poloze vůči fosfonátové skupině. Ve svém důsledku tento rozdíl způsobuje i rozdílnou dimenzionalitu takto vytvořených pevných látek. Zatímco  $\text{Cu}(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)(\text{O}_3\text{PC}_6\text{H}_4\text{COOH})\cdot\text{H}_2\text{O}$  a dříve publikovaný komplex [1] odvozený od *m*-sulfofenylfosfonové kyseliny tvoří jednodimenzionální

struktury, je struktura odvozená od 4-sulfofenylfosfonové kyseliny ( $\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)(\text{O}_3\text{SC}_6\text{H}_4\text{PO}_3\text{H})\cdot\text{H}_2\text{O}$  vrstevnatá. Obdobná sloučenina dvojmocně mědi s fenantrolinem a kyselinou fosfonooctovou ( $\text{H}_2\text{O}_3\text{PCH}_2\text{COOH}$ ) tvoří dinukleární molekulární komplex [2].

[1] Zi-Yi Du, Jian-Jun Huang, Yong-Rong Xie, He-Rui Wen: *Journal of Molecular Structure* **919**, (2009), 112–116.

[2] Qi-Hua Zhao, Lin Dua, Rui-Bing Fang: *Acta Crystallographica Section E* **E62**, (2006), m219–m221.

### 3Po14

#### X-NITRO SUBSTITUTED 2-AMINO BENZIMIDAZOLES AS PRECURSORS OF FOOD BORNE CARCINOGENS

Maroš Bella and Viktor Milata

*Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37, Bratislava, Slovak Republic, viktor.milata@stuba.sk*

2-Aminobenzimidazole moiety occurs very often in food carcinogens which are usually formed when protein food is exposed to elevated temperature during cooking [1]. Structural analogues of this class of compounds could potentially lead to biologically active molecules.

Within this respect, the aim of our work was to prepare 1-(non)methylated 2-amino-X-nitro benzimidazoles which represent precursors of food carcinogens or their analogues. The above mentioned 2-aminobenzimidazoles were obtained by cyclization of appropriate nitro-*o*-phenylenediamines with cyanogen bromide in refluxing methanol with good yields. Hydrogenation of 2-amino-1-methyl-5-nitrobenzimidazoles on palladium on charcoal gave appropriate diamine which was used in Gould-Jacobs reaction [2] to create 4-pyridone ring attached to benzene ring. Furthermore, transformation of pyridone to pyridine could provide target food carcinogen.

*This work was supported by Slovak Research and Development Agency under contract No. APVV-0055-07 and Science Grant Agency 01/0225/08.*

[1] Food Borne Carcinogens (Heterocyclic Amines), ed. by M. Nagao, T. Sugimura, John Wiley & Sons, Chichester, 2000.

[2] Name Reactions in Heterocyclic Chemistry, ed. J. J. Li, John Wiley & Sons, Hoboken 2005.

**3Po15****STUDIUM DIFUZE V ČÁSTICOVÝCH  
KOMPOZITECH NA BÁZI EPOXIDOVÉ  
MATRICE**Tomáš Mořka<sup>1</sup>, Jaromír Šňupárek

<sup>1</sup> *Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice  
tomas.motka@student.upce.cz*

Epoxidové pryskyřice mají řadu vhodných vlastností, kterými jsou například skvělá adheze, elektroizolační schopnosti, dobrá odolnost proti mechanickému namáhání, chemická a tepelná odolnost. Díky nim našly velmi široké použití v mnoha průmyslových odvětvích včetně tradičního využití ve stavebnictví, elektrotechnice a průmyslu nátěrových hmot. Částicové kompozity, vzniklé přidáním poměrně nízkého množství plniv a jiných přísad, mají výrazně lepší vlastnosti než samotná epoxidová matrice.

Pochody vedoucí ke zhoršení či úplné ztrátě vlastností systému je nutno posuzovat komplexně jako souhrn několika fyzikálně-chemických procesů, které jsou navzájem propojeny a ovlivněny. Jedním z těchto procesů je difuze pronikajícího agresivního média, nejčastěji kapaliny, vytvrzeným epoxidovým systémem.

Metody hodnotící mechanické vlastnosti exponovaného kompozitu jsou například dynamická termomechanická analýza (DMA) a termomechanická analýza (TMA). Mezi již klasické způsoby studia difuze patří optické mikroskopie, jež je založena na expozici vzorku sledovaného systému v obarveném roztoku difundující kapaliny a následně optické detekci postupu difuzního čela barviva matricí. Tuto metodu lze použít i u plněných, mírně průsvitných epoxidových systémů. Nutností je však vhodná volba barviva, zejména se využívá barviv detekovatelných v UV oblasti spektra<sup>1</sup>.

Cílem práce je postihnout souvislosti mezi mechanickými vlastnostmi a stupněm difuze v závislosti na stupni vytvrzení epoxidového systému a obsahu částicového plniva.

*Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky za finanční podporu při vypracování této práce v rámci projektu MSM 0021627501.*

[1] T. Mořka: Studium vlastností zalévací epoxidové pryskyřice Veropal 148, Pardubice, (2005)

**3Po16****PREPARATION OF A CONDUCTING  
POLYMER, POLYANILINE, IN THE  
ORGANIC-SOLVENT SUSPENSIONS**

Elena N. Konyushenko, Jaroslav Stejskal, Miroslava Trchová

*Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic,  
Heyrovsky Sq. 2, CZ-162 06 Prague 6, Czech Republic  
(elenak@imc.cas.cz)*

Polyaniline is one of the most interesting conducting polymers, due to easy way of preparation and excellent environment stability. Polyaniline exists in variety of forms [1]. Protonated form has conductivity on semi-conducting level,  $10 \text{ S cm}^{-1}$ . When polyaniline is deprotonated, the conductivity is at insulator level,  $10^{-9} \text{ S cm}^{-1}$ . The main parameter – a conductivity – depends on the way of polymerization. In the present case, we have polymerized aniline hydrochloride in non-aqueous media using ammonium peroxydisulfate as oxidant. The novelty of this method consists in the polymerization of aniline in the absence of water, in the suspension of solid reactants. Polyaniline is formed just by mixing solid monomer and oxidant, followed by suspension in a proper organic solvent. The nature of the solvent affects the morphology of polyaniline, e.g., in acetone polyaniline has microspherical morphology and in heptane it is amorphous. Molecular structure of polyaniline was studied by FTIR spectra, conductivity was measured by four-point method, both scanning and transmission electron microscopies were used to see the morphology of polyaniline.

[1] Stejskal, J.; Sapurina, I.; Trchová, M.; Konyushenko, E.N. *Macromolecules* **2008**, *41*, 3530.

**3Po17****TRANSKARBAM 12: VLIV PH NA  
TRANSDERMÁLNÍ PERMEACI TEOFYLINU A  
HYDROKORTISONU.**Novotný Michal<sup>1</sup>, Vávrová Kateřina<sup>1</sup>, Hrabálek Alexandr<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Katedra anorganické a organické chemie, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové;  
Michal.Novotny@faf.cuni.cz*

Transdermální podání léčiv je systémové podání léčiv přes kůži do krevního či lymfatického oběhu. Hlavním omezením přechodu léčiva přes kůži je vnější vrstva nazývaná stratum corneum. Použití transdermálního akcelerantu je jednou z cest, jak tento přechod usnadnit.

Transkarbam 12 (T12) byl projektován s myšlenkou připravit novou sloučeninu, která bude strukturně vycházet ze struktur již publikovaných, ale bude mít

flexibilnejší molekulu a predovšetím, její metabolické štěpy budou netoxické.

V rámci postupného objasňování předpokládaného mechanismu účinku T12 jsme studovali akcelerační aktivitu transkarbamam 12 a odpovídajícího hydrochloridu  $\omega$ -aminoesteru v širokém spektru pH (pH 3–9). K permeačním studiím jsme vybrali dvě modelová léčiva – hydrokortison a teofylin. Pokusy byly prováděny in vitro pomocí Franzovy difúzní cely přes prasečí kůži plně tloušťky. Jako vehikulum jsme zvolili propylenglykol a tris-pufř v poměru 6:4. Hodnocení akcelerační aktivity bylo prováděno pomocí HPLC.

Z výsledků permeačních pokusů lze říci, že karbamátový anion obsažený v molekule T12 je pro samotný akcelerační účinek důležitý. V porovnání s odpovídajícím hydrochloridem  $\omega$ -aminoesteru byl T12 podstatně účinnější. Byl pozorován významný vliv pH donorového vzorku na urychlovací schopnost. Nejlepších výsledků při hodnocení schopnosti urychlit permeaci modelových bylo dosaženo při pH 8.

*Práce vznikla s podporou grantu GAUK 79607/2007/B-CH/FaF a grantu ministerstva školství MSM 0021620822.*

### 3Po18

#### VPLYV ŽIARENIA NA VLASTNOSTI PA-6 KOMPOZITOV

Janigová Ivica<sup>1</sup>, Porubská Mária<sup>2</sup>, Chodák Ivan<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, SR

<sup>2</sup>UKF v Nitre, Fakulta prírodných vied, Tr. A. Hlinku I, 949 74 Nitra, SR

Porovnávali sme mechanické a termické vlastnosti kompozitov polyamidu-6 so skleným vláknom s dvoma rozdielnymi lubrikáciami po ožiarení elektrónovým (I.) a gama (II.) lúčom na vzduchu. Obsah gélu ako miera sieťovacieho procesu bol pre I. a II. rozdielny. Vo vzorkách radu I. pre obidva typy vlákna gél stúpala s rastúcou dávkou žiarenia, zatiaľ čo v rovnakých vzorkách II. nebol zistený žiadny gél.

Ťahové vlastnosti modifikovaných kompozitov boli tiež rozdielne. Modul pružnosti a pevnosť v ťahu vzoriek I. s rastúcou dávkou stúpali. Na druhej strane u vzoriek II. pevnosť v ťahu spočiatku klesala a mierne stúpala len pri vyšších dávkach, pričom modul pružnosti v ťahu kolísal.

Termické vlastnosti charakterizoval pokles teplôt topenia s rastúcou dávkou pre všetky vzorky. Teplá topenia klesali výraznejšie až pri vyšších dávkach. Väčšie zmeny zaznamenali vzorky I.

Pri radiačnom pôsobení na sledované kompozity predpokladáme súčasný vplyv sieťovania, degradácie a nukleácie. Zatiaľ čo sieťovanie a degradácia znižujú hodnoty termických charakteristík, plnivo pôsobí ako nukleačné činidlo a pri nižších dávkach zvyšuje

hodnoty teplôt topenia. Absencia sieťovania pri vzorkách II. spôsobila miernejší pokles teplôt a teplôt topenia pre obidva typy aplikovaných sklených vlákien.

### 3Po19

#### DIASTEREOSELECTIVE APPROACH TO TETRAHYDROFUROINDOLIZIDINOLS

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. E-mail: jozefina.zuziova@stuba.sk*

Indolizidine rings in different degrees of unsaturation form part of the skeleton of a large number of natural compounds which display a wide range of bioactivities [1]. A concise and very efficient route to enantiopure tetrahydrofuran-fused indolizidinols has been found in two-steps sequence starting from the furoindolizidindiones. The key-step of these transformations was the formation of THF indolizidinols containing a lactam function by simultaneous highly diastereoselective catalytic hydrogenation of the carbonyl function and the furan ring. We suppose that this strategy could be quite attractive for the design and stereoselective synthesis of a wide variety of novel polyhydroxylated indolizidines alkaloids comprising different substituents and stereochemistry [2].

*The authors thank the Grant Agency of Slovak Republic, Grant No. 1/0161/2008 and the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-0210-07 for the financial support for this research program.*

[1] Michael, J. P. *Nat. Prod. Rep.* **2008**, 25, 139.

[2] Šafář, P.; Žúžiová, J.; Bobošíková, M.; Marchalín, Š.; Prónayová, N.; Dalla, V.; Dařch, A. *Tetrahedron: Asymmetry* **2008**, 19, 467.

### 3Po20

#### KRÁTKÉ ANALOGY CERAMIDŮ A JEJICH VLV NA ORGANIZACI LIPIDŮ KOŽNÍ BARIÉRY

Janušová Barbora<sup>1</sup>, Lorenc Petr<sup>1</sup>, Vávrová Kateřina<sup>1</sup>, Hrabálek Alexandr<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Katedra anorganické a organické chemie, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové; janusovab@faf.cuni.cz

Ceramidy *stratum corneum* – nejsvrchnější vrstvy epidermis, zodpovídají za bariérové vlastnosti kůže. Analogy ceramidů, především krátkořetězcové, jsou široce využívány ke studiu bariérové funkce kůže, ačkoliv vztah mezi jejich strukturou a účinkem není dosud řádně objasněn.

Naším cílem bylo objasnění vlivu krátkého ceramidu na molekulární organizaci a stabilitu lipidů v kožní bariéře za použití modelového *stratum corneum*, složeného z ekvimolární směsi cholesterolu, mastné kyseliny, krátkých analogů ceramidu (C2-18) a přídavku cholesterol sulfátu.

Fázové chování, inter a intra molekulární interakce krátkých ceramidů s lipidy byly studovány pomocí ATR-FTIR spektroskopie.

Permeabilita modelového *stratum corneum* byla hodnocena *in vitro* ve Franzových difúzních celách pomocí theofylinu jako modelového léčiva a měřením transdermální elektrické rezistence.

Získané výsledky potvrdily naši hypotézu, že délka řetězce ceramidu je pro permeabilitu kůže klíčová a ceramidy s krátkým acylem tedy nemají bariérové vlastnosti fyziologických ceramidů.

*Práce vznikla za podpory Grantové Agentury Univerzity Karlovy 92007/2007/B-CH/FaF a Výzkumného záměru MSM0021620822.*

### 3Po21

#### VLIV CHITOSANU NA ANTIMYKOBAKTERIÁLNÍ ÚČINEK A TOXICITU ISONIAZIDU

Eva Vavříková<sup>1</sup>, Jarmila Vinšová<sup>1</sup>, Jana Mandíková<sup>1</sup>, Jiřina Stolaříková<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové

<sup>2</sup>Zdravotní ústav se sídlem v Ostravě, Partyzánské náměstí 7, 702 00 Ostrava  
eva.vavrikova@faf.cuni.cz

Chitosan patří mezi polykationtové polysacharidy vyznačující se výjimečnými vlastnostmi, je netoxický, biokompatibilní a biodegradabilní. Samotný vykazuje antibakteriální a protinádorovou aktivitu, v poslední době byla publikována též jeho antioxidační aktivita<sup>1</sup>. Používá se jako systém pro transport léčiv, jehož hlavním aspektem je kontrolované uvolňování, cílení léčiva a prodloužení doby působení<sup>2</sup>.

Tuberkulóza stále patří mezi nejnebezpečnější nemoci světa, v současnosti především díky vysokému výskytu multirezistentních kmenů (MDR-TB, XDR-TB) a také díky velmi snadné infekci mykobakteriemi HIV pozitivní populace. Třetina světové populace je infikována bakterií *Mycobacterium tuberculosis*. Zvláště nebezpečnou je latentní forma tuberkulózy s nepředvídatelnou aktivací onemocnění.

Isoniazid je stále používán v kombinacích s ostatními antituberkulotiky i přesto, že vykazuje zvýšení hodnot jaterních testů a polyneuropatie. Chitosan normalizuje hodnoty diagnostických markerů a zdá se být látkou, která zabraňuje lékově indukované hepatitidě<sup>3</sup>. Tento nežádoucí účinek postihuje téměř 10% pacientů léčených na TBC. Proto se naše práce zabývá spojením chitosanu a antituberkulotika první volby isoniazidu.

Pro spojení hydroxylové nebo amino skupiny chitosanu s isoniazidem byl vybrán *O*-karboxymethylový nebo *N*-sukcinylový můstek. K aktivaci byl použit *N*-ethyl-*N'*-(3-dimethylaminopropyl)karbodiimid. Pro zvýšení rozpustnosti byla provedena fosforylace na neobsazených hydroxylových skupinách chitosanu.

V prezentaci budou u nejrozpuštěnějších derivátů uvedeny hodnoty antimykobakteriálních aktivit vůči typickým a atypickým kmenům mykobakterií a výsledky cytotoxických testů.

*Práce byla vypracována za finanční podpory FRVŠ 92/2009/G6, GAUK 76807/2007, IGA NS 10367-3 a MSM 0021620822.*

- [1] Vinšová J., Vavříková E.: *Curr. Pharm. Design.* 14, 1311 (2008).
- [2] Vavříková E., Vinšová J.: *Chem. listy* 103, 56 (2009).
- [3] Santosh S., Sini T. K., Anandan R., Mathew P. T.: *Europ. J. Pharm.* 572, 69 (2007).

### 3Po22

#### NOVÁ POTENCIÁLNÍ LÉČIVA NA BÁZI KVARTÉRNÍCH AMONIOVÝCH SOLÍ

Petrliková Eva<sup>1</sup>, Waisser Karel<sup>1</sup>, Dufková Ida<sup>1</sup>, Vejsová Marcela<sup>1</sup>, Kaustová Jarmila<sup>2</sup>, Stolaříková Jiřina<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Katedra anorganické a organické chemie, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Eva.Petrlikova@faf.cuni.cz

<sup>2</sup>Zdravotní ústav se sídlem v Ostravě, Národní referenční laboratoř pro *M. kansasii* Partyzánské náměstí 7, 702 00 Ostrava

Návrat tuberkulózy a dalších infekčních onemocnění představuje závažný celosvětový problém. Nové deriváty esteru cholesterolu a alkanových kyselin (kyselina 6-bromhexanová a 16-bromhexanová) substituovaných dusíkatými bázemi (pyridin, 4-methylpyridin, 3,4-lutidin a isochinolin) představují skupinu látek se slibnými biologickými účinky. U připravených sloučenin byla *in vitro* testována jejich biologická aktivita proti *Mycobacterium tuberculosis* (My 331/88), *M. avium* (My 330/88), *M. kansasii* (My 235/80) a kmenu *M. kansasii* (6 509/96), který byl izolován od pacienta z okresu Karviná. Dále byla vyhodnocena *in vitro* antibakteriální aktivita proti kmenům *Staphylococcus aureus* (CCM 4516/08), *Staphylococcus aureus* (H 5996/08), *Staphylococcus epidermidis* (H 6966/08), *Enterococcus sp.* (J 14365/08), *Escherichia coli* (CCM4517), *Klebsiella pneumoniae* (D 11750/08), *Klebsiella pneumoniae* (J 14368/08) a *Pseudomonas aeruginosa* CCM 1961). Antimykotická aktivita byla hodnocena u kmenů *Candida albicans* (ATCC 44859), *Candida tropicalis* (156), *Candida krusei* (E28), *Candida glabrata* (20/I), *Trichosporon beigeli* (1188), *Aspergillus fumigatus*

(231), *Absidia corymbifera* (272) a *Trychophyton mentagrophytes* (445). Z testovaných sloučenin byla nejaktivnější sůl cholesterolu, která obsahovala pyridin připojený pomocí hexanového můstku. Tento derivát vykazoval nejvyšší aktivitu proti kmenům *Enterococcus* a *Staphylococcus*, byl aktivní i proti *M. tuberculosis* a proti houbovým organismům. Předpokládáme, že díky tomu, že se jedná o kvartérní amoniové soli, je biologická aktivita těchto sloučenin obecná, vyvolaná lipofilním substituentem vázaným na kvartérním amoniovém dusíku. Studie vyvrací mechanismus biologické aktivity předchozí práce přiřazující význam estronům<sup>1</sup>.

Tato práce vznikla s podporou GAUK, grantu číslo 11809/2009/B-CH/FAF a VZ MSM 0021620822.

- [1] Adamec J., Beckert R., Weiß D., Klimešová V., Waisser K., Mölmann U., Kaustová J., Buchta V.: Hybrid molecules of estrone: New compounds with potential antibacterial, antifungal and antiproliferative activities, *Bioorganic Medicinal Chemistry*, 2007, 15 (8), 2898-2906.

### 3Po23

#### POUŽITÍ HETEROPOLYANIONTŮ IMOBILIZOVANÝCH NA POLYMERNÍCH NOSIČÍCH PŘI OXIDACI PYRIDINU A JEHO ANALOGŮ

Marcela Chmielová<sup>1</sup>, Pavel Pazdera<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centrum pro syntézy za udržitelných podmínek a jejich management

Ústav Chemie, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 61137, Brno, Česká republika

Příprava azinových *N*-oxidů je důležitá ze syntetického i jejich aplikačního hlediska. Pro syntézu *N*-oxidů z pyridinu a jeho derivátů (pikoliny, lutidiny) se nejčastěji používají peroxokyseliny (peroxooctová<sup>1</sup>, *m*-CPBA<sup>2</sup>), případně připravené *in situ*. Po reakci ale nastává problém s izolací čistého produktu jako volné báze. Dále je popsána i celá řada reakcí, které využívají oxidace pyridinu v přítomnosti katalyzátorů na bázi d-kovů (zejm. V, W, Ti, Mn, Re aj.)<sup>3</sup> kyslíkem nebo peroxidem vodíku. Nevýhodou takových reakcí jsou buď nízké výtěžky produktů, nebo procesy probíhající za relativně vysokých teplot a/nebo s drahými katalyzátory.

V příspěvku budou uvedeny výsledky studie syntéz *N*-oxidů z pyridinu a jeho analogů peroxidem vodíku bez použití organických rozpouštědel za katalýzy různými heteropolyanionty (HPA) imobilizovanými na polymerních nosičích. HPA jsou kyseliny Kegginova typu obecného vzorce  $([XM_{12}O_{40}]^{4-})$  ( $X = P^V, Si^{IV}, B^{III}, M = W$ ), k imobilizaci byly použity různé komerčně dostupné anxy. V přítomnosti HPA dochází ke zvýšení oxidačních schopností peroxidu vodíku vznikajícími aktivními peroxy nebo hyperoxy imobilizovanými polyanionty. Tím lze dosáhnout

vysokých výtěžků při výrazném zkrácení reakční doby. Imobilizovaný katalyzátor lze snadno separovat z reakční směsi.

- [1] Ochiai E.: *J. Org. Chem.* **1953**, 18, 548; *Org. Syntheses* **1963**, Coll. Vol. 4, 828.  
[2] Jana N. K., Verkade J.G.: *Org. Lett.* **2003**, 5, 21, 3787-3790.  
[3] Murray R. W., Iyanar K., Chen J., Wearing J. T.: *Tetrahedron Lett.* **1996**, 37, 6, 805-808.

### 3Po24

#### VYUŽITÍ PIPERAZINU PRO MEZIFÁZOVÉ KATALYTICKÉ SYSTÉMY

Dana Němečková<sup>1</sup>, Barbora Andělová<sup>1</sup>, Pavel Pazdera<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Centrum pro syntézy za udržitelných podmínek a jejich management, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Česká republika

Katalýza fázového přenosu je důležitou moderní syntetickou metodou, která umožňuje provádět reakce, při kterých jsou reagenty v různých fázích. Zpravidla se jedná o přenos anorganického reagentu (báze nebo nukleofilu) z vodného roztoku nebo z tuhé fáze do organického prostředí [1, 2]. Jako katalyzátory pro fázový přenos se používají kvarterní amoniové a fosfoniové soli, crown-ethery, kryptandy, polyethylenglykoly apod. Amoniové soli jsou pro svou dostupnost a cenu nejčastěji aplikovány jak v laboratoři, tak i v průmyslu. Jiným trendem zaváděným v rámci „Chemie pro udržitelný rozvoj“ je imobilizace katalyzátorů na tuhých nosičích, nejčastěji anorganických nebo organických polymerech.

V příspěvku budou diskutovány možnosti přípravy a aplikace kvartérních amoniových solí odvozených od piperazinu ve srovnání s běžně používanými katalyzátory fázového přenosu (TEBA, TBAC, Cetrimid, Aliquat). Piperazin jako cyklický sekundární 1,2-diamin umožňuje v rámci své molekuly vytvořit dvě funkčně aplikovatelná centra na dusíkových atomech – jedno pro vytvoření kvarterního katalytického místa a druhé pro imobilizaci vazbou s tuhým nosičem, organickým polymerem.

- [1] Phase Transfer Catalysis, Selected Problems and Applications, Y. Goldberg, Gordon and Breach Science Publishers, 1992 OPA Amsterdam.  
[2] Phase Transfer Catalysis, S.S. Dehmlow, E.V. Dehmlow, Second Revised edition, Verlag Chemie, 1983, Weinheim.



### 3Po25 NOVÝ IMOBILIZOVANÝ KATALYZÁTOR PRO KATALÝZU FÁZOVÝM PŘENOSEM

Barbora Andělová, Dana Němečková, Pavel Pazdera

*Centrum pro syntézu za udržitelných podmínek a jejich management, Ústav chemie, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno*

Katalýza fázovým přenosem (PTC) je proces, kdy reagující látky jsou umístěny v rozdílných kapalných fázích nebo v kapalně a tuhé fázi. Reakce mezi těmito fázemi probíhají pomocí katalyzátoru fázového přenosu. Je známo několik typů katalyzátorů jak pro tzv. klasickou PTC (např. fosfoniové a amoniové soli, crown-ethery, kryptandy, polyethylenglykoly), tak i pro inverzní PTC (např. 4-*N,N*-dialkylaminopyridiny, pyridin-1-oxid). Katalyzátory mohou být imobilizovány na anorganickém nebo organickém polymerním nosiči. Výhodou těchto katalyzátorů je snazší separace z reakční směsi a opětovné použití v další reakci [1].

Podařilo se nám připravit nový imobilizovaný katalyzátor na bázi 4-*N,N*-dimethylaminopyridinu (DMAP). DMAP je široce používaný katalyzátor v určitých typech reakcí, jako jsou např. acetylace, alkylace, benzoylace, esterifikace, silylace, Baylis-Hillmanova reakce a mnoho dalších [2, 3].

V příspěvku budou uvedeny výsledky srovnávací studie katalytické aktivity nového imobilizovaného katalyzátoru vs. DMAP na modelových elektrofilních reakcích.

- [1] *Phase Transfer Catalysis, Selected Problems and Applications*, Y. Goldberg, Gordon and Breach Science Publishers, 1992 OPA Amsterdam.
- [2] G. Hofle, W. Steglich, and H. Vorbrüggen, 4-Dialkylaminopyridines as Highly Active Acylation Catalysts, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 17, 569-583 (1978).
- [3] R. Murugan and E. F. V. Scriven, Applications of Dialkylaminopyridine (DMAP) Catalysts in Organic Synthesis, *Aldrichimica Acta* 36, 21-27 (2003).

### 3Po26 NOVÉ DERIVÁTY KORUSKANONU A : SYNTÉZA A JEJICH BIOLOGICKÉ HODNOCENÍ

Tichotová Lucie<sup>1,2</sup>, Pour Milan<sup>1,2</sup>, Kuneš Jiří<sup>1,2</sup>, Šenel Petr<sup>1,2</sup>

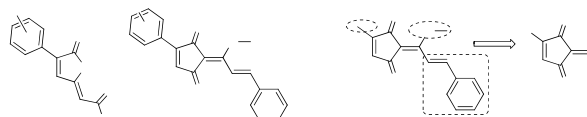
<sup>1</sup> *Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Katedra anorganické a organické chemie, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové*

<sup>2</sup> *Výzkumné centrum Nová antivirotika a antineoplastika*

Během minulých let se zdatně zvýšila incidence i závažnost systémových mykotických infekcí. Vzhledem ke vzrůstající rezistenci k používaným

přípravkům se naše pracovní skupina zabývá vývojem antifungálních látek typu 3,5-disubstituovaných butenolidů odvozených od přírodní předlohy (-)inkrustoporinu<sup>1</sup>. Tyto alkyldenbutenolidy jsou strukturálně podobné koruskanonu A, přírodní látce, která je antifungální aktivitou srovnatelná s amfotericinem B<sup>2,3</sup>. Obě struktury jsou částečně spřaženy chemickou reakcí, neboť bazicky katalyzovaným přesmykem 3-(aryl)- $\gamma$ -alkyldenbutenolidů (**1**) jsme dospěli k derivátům 4-(aryl)-cyklopenten-1,3-dionu (**2**). Takto připravené deriváty koruskanonu A, u nichž byl metyl v poloze 4 ( $R^1$ ) cyklopentendionového kruhu nahrazen substituovaným fenylem, ztratily antifungální aktivitu, zatímco cytostatická aktivita byla zachována.

Předlohovou strukturu koruskanonu A (**3**) lze obměnit i dalším způsobem: lze modifikovat alkyldenový zbytek v poloze 2 a to metoxyskupinu ( $R^2$ ) nebo jeho styrylovou část ( $R^3$ ). Deriváty bez metoxyskupiny jsme připravili pomocí katalytické verze Knoevenagelovy kondenzace cyklopent-4-en-1,3-dionu s aldehydy za využití moderních Lewisových kyselin. Optimalizovali jsme podmínky této reakce a připravili 13 analog koruskanonu A. Z výsledků hodnocení antifungální aktivity je zřejmé, že nejvyšší aktivitu vykazují látky připravené kondenzací cyklopent-4-en-1,3-dionu s nesubstituovaným cinnamaldehydem a benzaldehydem. Substituce aldehydu v poloze para i meta antimykotickou aktivitu snižuje. U para substituovaných derivátů se objevila selektivní cytostatická aktivita vůči CCRF-CEM linii (humánní akutní lymfoblastová leukémie).



- [1] Pour M., Špulák M., Buchta V. et al. *J. Med. Chem.* **2001**, 44, 2701.
- [2] Li X. C., Ferreira D., Jacob M. R. *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, 126, 6872.
- [3] Babu K. S., Clark A. M. et al., *J. Med. Chem.* **2006**, 49, 7877.

**3Po27****OPTIMALIZACE SYNTÉZY OBIDOXIMU**Jan Marek<sup>1,2</sup>, Bohuslav Doležal<sup>2</sup>, Kamil Kuca<sup>2,3</sup><sup>1</sup>Katedra toxikologie, FVZ UO, Trebesska 1575, 500 01 Hradec Králové<sup>2</sup>Vakos XT a.s., Pernerova 28a, 18600 Praha 8<sup>3</sup>Centrum pokročilých studií, FVZ UO, Trebesska 1575, 500 01 Hradec Králové

Obidoxim patří mezi látky nazývané reaktivátory acetylcholinesterázy. Jeho první syntéza byla popsána již v minulosti. V současnosti je však výroba těchto látek opět v popředí vzhledem k rostoucím rizikům zneužití bojových chemických látek, konkrétně organofosfátů (sarin, soman, tabun), teroristy. Nejpoužívanější reaktivátory acetylcholinesterázy jsou pralidoxim, obidoxim, trimedoxim, methoxim a HI-6. Existuje celá řada dalších reaktivátorů, výše zmíněné jsou však používány v praxi mnoha armádami světa. Naši snahou bylo optimalizovat syntézu obidoximu, maximalizovat výtěžky a čistotu látky s přihlédnutím na náklady. Syntéza byla provedena v několika rozpouštědlech, měněny byly rovněž poměry výchozích látek. Vyzkoušeli jsme různé krystalizační postupy pro efektivní dočištění připravené látky. Následně jsme čistotu potvrzovali pomocí TLC, NMR a HPLC analýz.

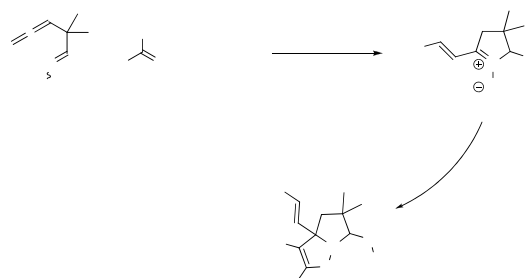
Projekt byl podporován grantem ministerstva obrany POV 9079301306023.

**3Po28****ALLENYLOXIME BASED ONE-POT APPROACH TO FUNCTIONALIZED CYCLIC NITRONES**Marian Buchlovič<sup>1</sup>, Stanislav Man<sup>1</sup>, Zdeněk Kříž<sup>2</sup>, Milan Potáček<sup>1</sup>

Department of Chemistry<sup>1</sup>, National Centre for Biomolecular Research<sup>2</sup>, Masaryk University, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Czech Republic

We have recently shown that allenylloxime chemistry can be effectively used for preparation of 5-membered cyclic nitrones bearing various functional groups [1, 2]. To enrich and improve this chemistry, we developed new effective transformation of 2,2-dimethyl-3,4-dienal oxime **1**. Reaction is base catalyzed three-component process optimized to one-pot conditions. Structural variation of both alcohol and aldehyde components led to corresponding derivatives of target substances **2**. Selected products were tested as substrates for 1,3-dipolar cycloadditions and showed expected reactivity with dipolarophile (dimethyl acetylenedicarboxylate). Structure and stereochemistry of obtained compounds were confirmed by consequent X-ray analysis. Incorporation of fused polyaromatic rings into the structure of nitrones was found to be useful in the design of antitumor agents [3]. On this background, new structural features of nitrones **2** are

now being examined for cytotoxicity and intercalation ability into DNA structure.



The present work has been supported by Masaryk University Rector's Program for Students' Creative Activity Support (Project Code MUNI/E0094/2009)

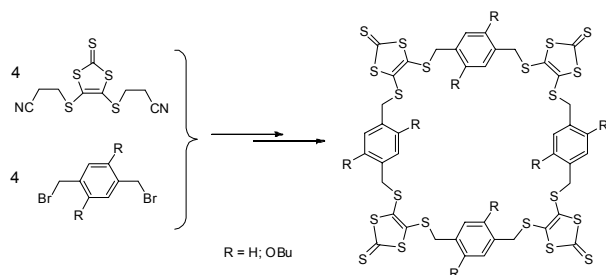
- [1] Buchlovič, M.; Man, S.; Potáček, M.: *Tetrahedron* **2008**, *64*, 9953.
- [2] Man, S.; Buchlovič, M.; Potáček, M. *Tetrahedron Lett.* **2006**, *47*, 6961.
- [3] Rescifina, A.; Chiacchio, M. A.; Corsaro, A.; De Clerq, E.; Iannazzo, D.; Mastino, A.; Piperno, A.; Romeo, G.; Romeo, R.; Valveri, V.: *J. Med. Chem.* **2006**, *49*, 709.

**3Po29****THIAMAKROCYKLY PRO KOMPLEXACI FULLERENŮ**

Petr Holý, Michal Buchta, Jiří Rybáček, Jiří Závada

Ústav organické chemie a biochemie, Akademie věd České republiky, v. v. i., Flemingovo náměstí 2, 166 10 Praha 6, Česká republika

Potenciálními ligandy pro komplexaci fullerenu jsou thiamakrocykly, jejichž cyklus vymezuje dostatečně velkou vnitřní dutinu a které jsou vytvořeny z elektronově bohatých stavebních článků pro předpoklad  $\pi$ - $\pi$  interakce s fullerem. Studované makrocykly byly vytvářeny z bis(brommethyl)-benzenových jednotek a 4,5-bis(2-kyanoethylsulfanyl)-1,3-dithiol-2-thionu jako sirmého spojivého prvku. Postupným bazickým odchráněním thiolových skupin<sup>1</sup> a následnými alkylacemi vznikajících thiolátů brommethylovými skupinami benzenových jednotek byly v několika stupních syntetizovány acyklické prekurzory. Uzávěrem kruhu byly v poslední fázi připraveny [4+4] makrocykly obsahující 4 benzenové a 4 sirmé stavební články. Syntéza byla provedena ve dvou řadách, nejprve s 1,4-bis(brommethyl)benzenem a pak pro zlepšení rozpustnosti cílového makrocyklu i s dibutoxylovaným benzenovým analogem.



Jako alternativa ke složité vícestupňové přípravě makrocyklu byla zkoumána přímá alkylace odpovídajícího zinečnatého bis(dithiolátu)<sup>2</sup> 2,5-dibutoxy-1,4-bis(brommethyl)benzenem. Podle předpokladu vznikla složitá směs cyklických i acyklických produktů. Pečlivým chromatografickým dělením se však podařilo z této směsi izolovat čistý butoxylovaný [4+4] makrocyklus v množství srovnatelném s výsledkem vícestupňové postupné syntézy.

Připravené osmičlankové makrocykly mají již velikost umožňující inkluzi fullerenu C<sub>60</sub>. U butoxylovaného makrocyklického ligandu byla studována jeho interakce s fullerenem C<sub>60</sub> pomocí UV-VIS spektroskopie.

Práce byla provedena v rámci výzkumného záměru ZA 055 0506 a za finanční podpory Grantové agentury Akademie věd ČR (grant IAA400550704).

- [1] Simonsen, K. B.; Svenstrup, N.; Lau, J.; Simonsen, O.; Mørk, P.; Kristensen, G. J.; Becher, J. *Synthesis* **1996**, 407–418.  
 [2] Wang, C.; Batsanov, A. S.; Bryce, M. R.; Howard, A. K. *Synthesis* **1998**, 1615–1618.

### 3P030 URČENIE KINETICKÝCH PARAMETROV RADIKÁLOVEJ POLYMERIZÁCIE SULFOBETAÍNOVÝCH METAKRYLÁTOVÝCH MONOMÉROV VO VODNOM PROSTREDÍ

Patrik Sobolčiak,<sup>1</sup> Marek Stach,<sup>1</sup> Peter Kasák,<sup>1\*</sup>  
Dušan Chorvát, Jr.,<sup>1,2</sup> Igor Lacík<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovenská republika, e-mail: patrik.sobolciak@savba.sk

<sup>2</sup>Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovenská republika

Sulfobetainové metakrylátové monoméry sú vnútornými soľami s pozitívnym amóniovým a negatívnym sulfátovým nábojom v molekule. Polyméry pripravené zo sulfobetainových monomérov na základe elektrostatických interakcií a vysoko hydrofilnému biomimetickému charakteru sú schopné výrazne redukovať adsorbciu proteínov a tieto vlastnosti ich predurčujú ako potenciálnych kandidátov v biomedicínskych a biotechnologických aplikáciách [1].

Tento príspevok sa zameriava na určenie kinetických parametrov radikálovej polymerizácie sulfobetainových zwitteriónových monomérov *N*-(2-metakryloxyetyl)-*N,N*-dimetyl-*N*-(3-sulfopropyl) amónium betain (SBDEM) a *N*-(3-metakryloylaminopropyl)-*N,N*-dimetyl-*N*-(3-sulfopropyl)amónium betain (SBDPMAM) vo vodnom prostredí, pomocou metódy pulznej laserovej polymerizácie v spojení s gélovou permeačnou chromatografiou [2]. Touto technikou sa zistili rýchlostné konštanty propagácie,  $k_p$ , radikálovej polymerizácie monomérov SBDEM a SBDPMAM, ktoré predstavujú vôbec prvé  $k_p$  hodnoty určené pre betainové monoméry. Hodnoty  $k_p$  boli určené v závislosti od koncentrácie monoméru, iónovej sily a teploty polymerizácie a na ich základe je možné určiť vplyv polymerizačných podmienok na objasnenie interakcií monomér-polymér-rozpúšťadlo a mechanizmu polymerizačnej reakcie. Kinetika a mechanizmus polymerizácie betainových monomérov vo vodnom prostredí predstavuje komplexný problém, ktorý je možné diskutovať na základe polymerizácie kyseliny metakrylovej v ionizovanej forme ako modelového systému [3].

Táto práca bola podporovaná 6. rámcovým programom EU, IP-031867, P. Cézanne a Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy APVV-0449-07 a APVV 51-037905.

- [1] Lowe, A. B.; McCormick, C. L. *Chem. Rev.* **2002**, 102, 4177-4189.  
 [2] Beuermann, S.; Buback, M. *Prog. Polym. Sci.* **2002**, 27, 191-254.  
 [3] Lacík, I.; Učňová, L.; Kukučková, S.; Buback, M.; Hesse, P.; Beuermann, S. *Macromolecules* **2009**,

### 3P031 ANTIOXIDAČNÉ VLASTNOSTI NIEKTORÝCH HYDROXYL DERIVÁTOV IMÍNOV.

František Šeršeň<sup>1</sup>, Martin Walko<sup>2</sup> Nikoleta Taitiová<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Chemický ústav, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, 842 15 Bratislava, Slovenská republika, sersen@fns.unba.sk,

<sup>2</sup>Katedra organickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, 041 54 Košice, Slovenská republika

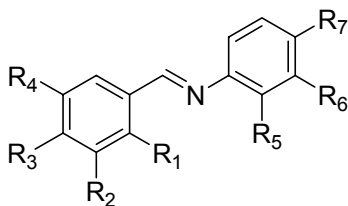
<sup>3</sup>Katedra fyzikálnej chémie liečiv, Farmaceutická fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, 832 32 Bratislava, Slovenská republika

2-((hydroxyfenylimino)methyl)fenoly alebo benzéndioly (Schéma 1) sú zlúčeniny so štruktúrou podobnou resveratrolu, ktorý je známy svojou rozmanitou biologickou aktivitou [1]. Cieľom práce bolo pripraviť imínové deriváty s hydroxylovými skupinami v rôznych polohách a otestovať ich antioxidačnú aktivitu.

Látky boli pripravené podobne ako je to popísané v práci Šeršeň a spol. [2]. Antioxidačná aktivita bola

otestovaná schopnosťou pripravených látok vychytávať DPPH radikály. Test sa robil v metanolovom roztoku DPPH ( $10^{-4}$  mol  $\text{dm}^{-3}$ ) meraním absorbancie pri 517 nm. Antioxidačná účinnosť bola vyhodnotená pomocou hodnôt  $\text{SC}_{50}$ , t.j. koncentrácie študovanej látky, ktorá spôsobí 50 % pokles absorbancie pri 517 nm. Účinnosť vychytávania DPPH radikálov študovanými látkami je prezentovaná v tabuľke 1.

Z tabuľky 1 je zrejmé, že niektoré imínové deriváty vykazujú veľmi dobrú antioxidačnú účinnosť, dokonca vyššiu ako má resveratrol ( $26,37$  [ $\mu\text{mol}/\text{dm}^3$ ] [2]). Ich antioxidačná aktivita úzko súvisí s počtom a polohou hydroxylových skupín.



Tabuľka 1  $\text{SC}_{50}$  hodnoty vychytávania DPPH radikálov študovaných imínových derivátov.

R <sub>1</sub>	R <sub>2</sub>	R <sub>3</sub>	R <sub>4</sub>	R <sub>5</sub>	R <sub>6</sub>	R <sub>7</sub>	$\text{SC}_{50}$ [ $\mu\text{mol}/\text{dm}^3$ ]	R <sup>2</sup>
OH	H	H	H	OH	H	H	390,55	0,921
OH	H	H	H	H	OH	H	51,26	0,945
OH	H	H	H	H	H	OH	133,14	0,989
H	OH	H	H	OH	H	H	16,30	0,974
OH	H	H	OH	OH	H	H	7,42	0,984
H	OH	OH	H	H	H	OH	6,23	0,993
OH	H	OH	H	H	H	OH	25,30	0,961
OH	H	OH	H	H	OH	H	206,02	0,914
OH	H	OH	H	OH	H	H	43,60	0,996
OH	H	H	OH	H	H	OH	6,19	0,984

[1] Celotti E, Ferrarini R., Zironib R., Lanfranco S., Conteb L.S.: J. Chromatog A, 730, 47 (1996)

[2] Šeršeň F., Walko M., Loos D.: Gen. Physiol. Biophys. 28, 210, (2009)

### 3Po32

#### PŘÍPRAVA NÁTĚROVÝCH HMOT S VYUŽITÍM PLNIV NA BÁZI KALCINOVANÝCH KAOLÍNŮ

Alena Fišerová, Petr Antoš

Výzkumný ústav anorganické chemie, Revoluční 84, Ústí nad Labem

Byly připraveny nátěrové hmoty na bázi rozpouštědlové alkydové pryskyřice, urethanizované alkydové disperze a styren-akrylátové disperze. Plniva, která byla použita pro přípravu těchto nátěrových hmot jsou následující: Filemon W<sub>05</sub>, Filemon P<sub>05</sub>, Omyacarb 2VA, Mikhart 2, syntetický CaCO<sub>3</sub>, fosforečnan zinečnatý ZP-10, Sylowwhite SM 405, Durafill 200, Wolkron 1010, Mastek KT1, Mastek CM3,  $\alpha$ -oxid železitý, Silica VP4, X-Pand, Alumofill KK-80 a KK-15, Bentonit B 70, plniva na bázi kaolinů kalcinovaných při teplotě 750°C a 1150°C. Použity byly také dva druhy titanové běloby Tronox 820 a KTR 720. U nátěrových hmot v tekutém stavu byly stanoveny tyto vlastnosti: viskozita, obsah sušiny, jemnost tření, slénavost, roztíratelnost, přilnavost a

kryvost. Dále byly provedeny mechanické zkoušky a v neposlední řadě byly zjišťovány antikorozi vlastnosti. Korozi zkoušky byly prováděny v solné a kondenzační komoře, procesem Machu-Schiffman a působením 5 % roztoků NaCl, H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> a NaOH. U získaných výsledků lze pozorovat jistou odlišnost ve stupni poškození povlaku nátěrové hmoty v korozi prostředí v závislosti na druhu použitého plniva. Nejlepších výsledků bylo dosaženo u nátěrových hmot, které obsahovaly plniva: fosforečnan zinečnatý ZP-10, Filemon W<sub>05</sub> a Filemon P<sub>05</sub> (nejnižší hodnoty celkového poškození nátěrového filmu). Naproti tomu nejméně příznivé výsledky byly nalezeny pro nátěrové hmoty obsahující plniva X-Pand a Silica VP4.

### 3Po33

#### ANTIDOTA OTRAV ORGANOFOSFÁTY- VÝVOJ NOVÝCH LÉČIV

Ondřej Soukup<sup>2</sup>, Kamil Kuča,<sup>1,2</sup> Kamil Musílek<sup>2</sup>, Daniel Jun,<sup>1,2</sup> Jiří Cabal,<sup>2</sup> Jiří Kassa<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Centrum pokročilých studií a

<sup>2</sup>Katedra toxikologie, Fakulta vojenského

zdravotnictví, Univerzita obrany, Hradec Králové, Česká republika

Antidota otrav organofosfáty patří do skupiny reaktivátorů acetylcholinesterázy (AChE; EC 3.1.1.7). Vývoj nových léčiv je časově velmi náročný proces, ve kterém ze stovek připravených reaktivátorů za posledních 5 let bylo vytipováno 5 perspektivních látek: K027, K203, K048, K074 a K075. Zejména K027 a K203 patří do ještě užší nadějnější skupiny, u které se uvažuje o zavedení do praxe. K027 je dle současných výsledků na tuzemských i zahraničních pracovištích zvažován jako náhrada obidoximu pro léčbu otrav organofosforovými pesticidy. K203 je v současnosti díky nízké toxicitě nejlepším kandidátem pro nahrazení obidoximu v léčbě intoxikací způsobených tabunem.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru Ministerstva obrany České republiky – FVZMO0000604.

### 3Po34

#### NOVÝ PŘÍSTUP K RADIOISOTOPICKÉMU ZNAČENÍ POLYMERŮ

Jan Kučka<sup>1</sup>, Martin Hrubý<sup>2</sup>, Miroslav Vetrík<sup>1</sup>, Ondřej Lebeda<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav jaderné fyziky AV ČR, v.v.i, 250 68 Řež, Česká republika, email: jkucka@centrum.cz

<sup>2</sup>Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i.,

Heyrovského nám. 2, 162 00 Praha 6, Česká republika

Značení syntetických polymerů a biopolymerů radionuklidy je důležité pro výzkum (studium biodistribuce atd.) a má význam i v klinické praxi (např. radiodiagnostika a radioterapie pomocí značených protilátek).

Nová strategie značení syntetických polymerů prezentovaná v příspěvku spočívá v zavedení L-tyrosinu do polymeru kopolymerací základního monomeru s *N*-metakryloyl-L-tyrosinamidem a následné azokopulaci L-tyrosinamidové monomerní jednotky s diazoniovými solemi připravenými *in situ* diazotací komerčně dostupných derivátů chelatačních činidel DTPA, DOTA a CHX-A<sup>4</sup>-DTPA nesoucími primární aminoskupinu. Obsah značitelných funkčních skupin je snadno stanovitelný spektrofotometricky (azobarvivo). Výsledné polymerní azobarvivo je značitelné chelatačnými ionty (<sup>90</sup>Y<sup>3+</sup>, <sup>111</sup>In<sup>3+</sup>) nebo kovalentně radioisotopy jodu (<sup>125</sup>I, <sup>124</sup>I, <sup>131</sup>I) díky přítomně fenolické skupině. Konjugáty byly označeny kovalentně <sup>131</sup>I a chelatačně <sup>90</sup>Y s radiochemickými výtěžky nad 75 % resp. 90 % a vykazovaly dostatečnou *in vitro* stabilitu. Stabilita byla testována v prostředí kompetujících iontů simulujícím fyziologické podmínky.

Studie byla vypracována za finanční podpory Akademie věd České republiky (grant č. KAN 200200651) a Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (granty č. IM 4635608802 a 2B06165).

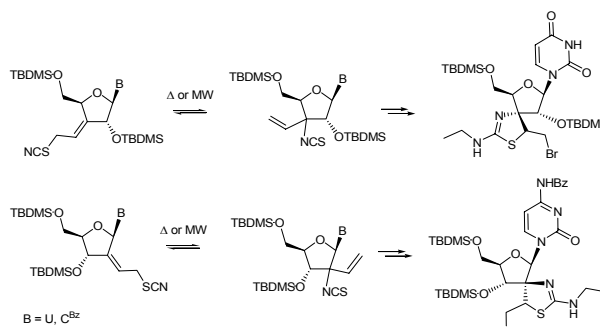
### 3Po35

#### STEREOSELECTIVE SYNTHESIS OF NEW SPIRO NUCLEOSIDES USING AZA-CLAISEN REARRANGEMENT

Monika Tvrdoňová, Miroslava Martinková and Jozef Gonda

University of P. J. Šafárik, Faculty of Natural Science, Institute of Chemical Science, Department of Organic Chemistry, Moyzesova 11, 041 67 Košice, Slovakia  
e-mail: monika.tvrdonova@upjs.sk

A large number of various structures has been synthesized and biologically evaluated as potential antiviral or antitumor agents. Due to interesting biological properties of nucleosides, synthetic modification of ribofuranose moiety or base part are still very attractive target. A new class of inhibitors targeted at the viral HIV reverse transcriptase are C-3'-spiro-oxathiazoles (TSAO) and C-3'-spiro-isothiazoles (ATSAO) [1, 2]. We have synthesized C-2'- and C-3'-spiro-tiazole nucleosides derived from uridine and 4-*N*-benzoylcytidine. The new stereogenic centre has been created using aza-Claisen rearrangement of allylic thiocyanates in microwave-assisted or conventional heating conditions [3, 4]. Spiro moiety at the C-2' or C-3' positions has been created by cyclization of tioureas prepared from arising isothiocyanates.



The present work was supported by Grant Agency (1/3557/06 and 1/0281/08) from the Ministry of Education of Slovak republic, Research and development support agency, Slovak republic (APVV 20-038405) and VVGS UPJŠ 8/09-10.

- [1] Camarasa, M. J.; Pérez-Pérez, M. J.; San-Félix, A.; Balzarini, J.; De Clerq, E. *J. Med. Chem.* **1992**, *35*, 2721-2727.
- [2] Nguyen Van Nhien, A.; Tomassi, C.; Len, Ch.; Marco-Contelles, J. L.; Postel, D. *Nucleos. Nucleot. Nucl. Acids* **2003**, *22*(5-8), 939-941.
- [3] Gonda, J.; Martinková, M.; Zádrosťová, A.; Šoteková, M.; Raschmanová, J.; Čonka, P.; Gajdošíková, E.; Kappe, C.O. *Tetrahedron Lett.* **2007**, *48*, 6912-6915.
- [4] Martinková, M.; Gonda, J.; Šoteková, Buděšínský, M.; Císařová, I. *Chem. Pap.* **2005**, *59* (2), 113-116.

### 3Po36

#### PŘEMOSTĚNÉ IMIDAZOLY, SYNTÉZA OPTICKY AKTIVNÍCH DERIVÁTŮ PINCERŮ A CYKLOFANŮ ODVOZENÝCH OD AMINOKYSELIN

Aleš Marek<sup>1</sup>, Jiří Kulhánek, Filip Bureš

<sup>1</sup>Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice 2

Imidazol a jeho deriváty jsou biologicky důležité heterocyklické sloučeniny (např. základní aminokyselina histidin a produkt její dekarboxylace histamin, dále adenin, purin,...). Využití derivátů imidazolu lze nalézt v řadě léčiv (např. antihistaminika, inhibice cyklické HIV proteázy, inhibice reverzní transkriptasy. Různé deriváty imidazolu jsou též využívány jako ligandy v koordinační chemii. Pincery jsou ligandy tvořící chelátový kruh obsahující alespoň jeden heteroatom působící jako donor. Předností pincerů je jednoduchá modulace jejich sterických a elektronových vlastností a tím ovlivnění reaktivity, stability a katalytické aktivity následně připravovaného komplexu.<sup>1</sup> Na podobném půdorysu jako pincery jsou založeny i NHC-pincery (*N*-heterocyklické karbenové pincery), které však mají ve svém skeletu jeden nebo více karbenů.<sup>2</sup> Zavedení NHC do architektury pincerů

poskytuje neobyčajne stabilní sloučeniny, což je způsobeno p[π-p] donačným efektem dvou atomů dusíku sousedících s karbenovým uhlíkem. Syntéza opticky aktivních přemostěných imidazolů byla provedena jednoduchou a efektivní cestou *N*-substituce imidazolového dusíku. Chiralita byla zavedena již při syntéze výchozích imidazolů, které obsahují v poloze 4(5) opticky aktivní část z aminokyseliny.<sup>3</sup> Při syntéze pincerů vznikají vlivem rychlé imidazolové tautomerie dva regioizomery, které byly oděleny chromatograficky. Vhodné regioizomery byly dále využity pro syntézu cyklofanů (imidazoliofanů) jakožto prekurzorů *N*-heterocyklických karbenů.

- [1] Morales-Morales D., Jensen C. M.: *The Chemistry of pincer compounds* **2007**, Elsevier.  
 [2] Herrmann A. W.: *Angew. Chem.* **2002**, *114*, 1342-1363.  
 [3] Ales Marek, Jiri Kulhanek, Miroslav Ludwig, Filip Bures: *Molecules* **2007**, *12*, 1183-1190.

### 3Po37 PRÍPRAVA A SPEKTRÁLNA CHARAKTERIZÁCIA KUMARÍNOVÝCH FLUORESCENČNÝCH ZNAČIEK VIAZANÝCH SO STÉRIČKY TIENENÝM AMÍNOM

Martin Danko a Pavol Hrdlovič

*Oddelenie fotochémie polymérov, Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovensko, e-mail: upolhrdl@savba.sk*

Dvojfunkčné fluorescenčné značky s kumarínovým chromofórom a *N*-derivátmi stéricky tieneného amínu boli pripravené amidáciou kyselín kumarín 3-karboxylovej (deriváty C-TMP-R) a 7-dietylamino-kumarín-3-karboxylovej (deriváty DEAC-TMP-R) so 4-amino-2,2,6,6-tetrametylperidínom, jeho *N*-oxylom a *N*-alkoxyamínom (Schéma). Pre aktiváciu karboxylovej skupiny hlavne pre kumarín s elektrón-donorným substituentom bol využitý 3,5-dimetoxy-2,4,6-triazín-*N*-metyl-morfolínium chlorid.

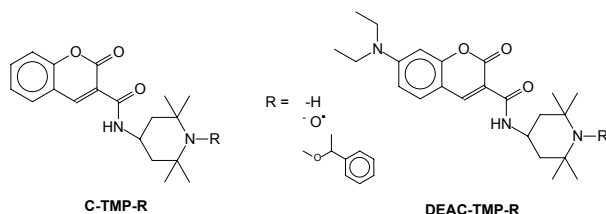


Schéma:

Pripravené deriváty boli charakterizované absorpčnou a fluorescenčnou spektroskopiou v roztokoch chloroformu a metanolu a v polymérnych maticiach ako polystyrén (PS), poly(metylmakrylát) (PMMA) a poly(vinylchlorid) (PVC).

Intenzita fluorescencie C-TMP-R derivátov pri excitácii 295 nm je oveľa slabšia ako fluorescencia

DEAC-TMP-R derivátov excitovaná pri 420 nm. Pre oba typy fluorofórov je fluorescencia vyššia v chloroforme ako v metanole alebo cyklohexáne. Vnútromolekulové zhášanie fluorescencie fluorofóru vyjadrené pomerom  $\Phi_{\text{NH}}/\Phi_{\text{NO}}$  pre parentný amín a *N*-oxyl a pomerom  $\Phi_{\text{NOR}}/\Phi_{\text{NO}}$  pre *N*-alkoxy a *N*-oxyl je pre C-TMP-R okolo 2-5 v roztokoch a 4-16 v polymérnych maticiach. Pre DEAC-TMP-R je vnútromolekulový prenos o niečo účinnejší, okolo 6 v roztokoch a 7 – 20 v polymérnych maticiach. Doba života excitovaného stavu parentných amínov a alkoxyamínov je okolo 2-4 ns, pre *N*-oxyly to je o niečo kratšie.

*Autori ďakujú za financovanie výskumu v rámci projektov VEGA č. 2/0097/09 a 2/0082/08 a Centru excelentnosti MACHINA.*

### 3Po38 VLASTNOSTI KOMPOZITOV NA BÁZE NÍZKOHUSTOTNÉHO POLYETYLÉNU S HYDROXIDOM HOREČNATÝM.

Zuzana Nógellová, Ivan Chodák

*Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovenská republika, Zuzana.Nogellova@savba.sk*

V tejto práci sme testovali niekoľko typov hydroxidu horečnatého v kompozitoch s maticou nízkohustotného polyetylénu. Tri typy hydroxidu horečnatého boli povrchovo upravené rôznymi činidlami. Na porovnanie sme použili aj dva bežné komerčné typy uvedeného plniva. Zároveň sme overovali možnosť kompatibilizácie zosietením aj v súvislosti s možnou aplikáciou pre nehorľavé izolácie káblov. Na iniciáciu sieťovania sme použili organický peroxid 2,5-dimetyl-2,5-ditercetylperoxyhexín.

Hodnotením mechanických vlastností je vidieť, že zosietenie vedie k výraznému zvýšeniu pevnosti v ťahu a aj predĺženia pri pretrhnutí. Youngov modul pružnosti je u zosietených vzoriek nižší, čo môže súvisieť so znížením kryštalinity v dôsledku obmedzenia pohyblivosti reťazcov po zosietení. Porovnaním viacerých typov hydroxidu horečnatého sa pozorovali určité rozdiely v mechanických vlastnostiach, najmä v hodnotách ťažnosti, kde boli rozdiely aj niekoľkonásobné.

Účinnosť sieťovania sme stanovili z hodnôt nerozpustného podielu. Nerozpustný podiel pre nezosietené vzorky sa zvyšoval len mierne a súvisel s tvorbou fyzikálne viazaného polyméru. U zosietených kompozitov sa nerozpustný podiel zvyšoval výrazne a pri najvyššej koncentrácii plniva dosiahol hodnotu takmer 100 hm.%

*Táto práca bola financovaná v rámci projektu APVV 0203-07.*

3Po39

**CYKLOADIČNÍ REAKCE V SYSTÉMU  
CYKLOPENTADIEN – ISOPREN**

Jiří Krupka

*Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-  
technologická Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6,  
ČR*

Práce se zabývala detailním studiem kinetiky cykloadičních reakcí mezi isoprenem a cyklopentadienem. Bylo zjištěno, že v teplotním rozmezí 40–140°C vzniká kodimerací cyklopentadienu s isoprenem 6 izomerních produktů Diels-Alderova typu. Převládají dva: *endo*-5-isopropenyl-2-norbornen, označovaný jako kodimer A, a 5-methyl-3a,4,7,7a-tetrahydro-1*H*-inden, označovaný jako kodimer B. Při reakční teplotě 120°C je v reakční směsi 6x více kodimeru A než kodimeru B. Autoři Muja a kol. [1] sestavili kinetický model, kde uvažují, že kodimer A s isopropenylnorbornenovou strukturou a kodimer B s tetrahydroindenovou strukturou vznikají nezávisle paralelními reakcemi cyklopentadienu s isoprenem. Naopak podle práce Iwase a kol. [2] vzniká reakcí cyklopentadienu s isoprenem pouze *endo*-5-isopropenyl-2-norbornen (kodimer A) a *exo*-5-isopropenyl-2-norbornen, zatímco 5-methyl-3a,4,7,7a-tetrahydro-1*H*-inden (kodimer B) vzniká výhradně až Copeho přesmykem z *endo*-5-isopropenyl-2-norbornenu. Vlastní kinetická měření předkládané práce však jednoznačně ukázala, že tvorba kodimeru B je možná oběma reakčními cestami a záleží na reakčních podmínkách, která reakční cesta bude převažovat. Pokud reakční směs obsahuje cyklopentadien a isopren, a koncentrace kodimeru A je nízká, pak převažující reakční cestou vzniku kodimeru B je cykloadiční reakce cyklopentadienu s isoprenem, kde cyklopentadien vystupuje jako dienofil. Druhá reakční cesta (Copeho přesmyk) je preferována při vyšší koncentraci kodimeru A a při vyšších reakčních teplotách.

- [1] I. Muja, G. Andreescu, M. Corciovei, R. Fratiloiu: *Revista de chimie*, 26, 981 (1975)  
[2] S. Iwase, M. Nakata, S. Hamanaka, M. Ogawa: *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 49, 2017 (1976)

3Po40

**PRÍPRAVA A VLASTNOSTI EXTERNE  
GÉLOVANÉHO ALGINÁTOVÉHO  
HYDROGÉLU***Eva Papajová,<sup>1</sup> Zuzana Kroneková,<sup>1</sup> Martin Danko,<sup>1</sup>  
Igor Krupa,<sup>1</sup> Dušan Chorvát Jr.,<sup>1,2</sup> Igor Lacík<sup>1,\*</sup>**<sup>1</sup> Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36  
Bratislava, Slovenská republika,**e-mail: eva.papajova@savba.sk ;**igor.lacik@savba.sk**<sup>2</sup> Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812  
19 Bratislava, Slovenská republika*

Alginátový hydrogél je často využívaný materiál v rôznych aplikáciách, z ktorých medzi typické patria potravinárstvo, medicína a biotechnológia. Odlišné aplikácie si vyžiadali vznik hydrogélů s rôznymi vlastnosťami. Najčastejšie sa využívajú alginátové hydrogély, ktoré vznikajú iónotropným presieťovaním reťazcov alginátu sodného pomocou dvojmocných kationov ako napr. Ca<sup>2+</sup>, Ba<sup>2+</sup>, Sr<sup>2+</sup>.

V príspevku bude prezentovaná tvorba alginátového hydrogélů s planárnou geometriou externým gélovaním. Externé gélovanie je bežný spôsob prípravy najmä gélov so sférickou geometriou. Menej rozšírená je planárna geometria. Problémom prípravy planárneho alginátového hydrogélů je, že nie je jednoduché zabezpečiť dostatočne pomalú expozíciu alginátových roztokov voči účinku gélujúcich kationov. V opačnom prípade dochádza ku nekontrolovanej zmene geometrie. Riešenie poskytuje aerodisperzia CaCl<sub>2</sub> [1] privádzaná na povrch roztoku alginátu sodného. Tento princíp umožňuje regulovať prívod gélujúcich kationov potrebných pre vznik presieťovanej štruktúry a rýchlosť gélovania.

Alginátové hydrogély boli charakterizované z pohľadu mechanických a optických vlastností, a rozmerovej stability. Ďalšou charakteristikou bola priestorová distribúcia alginátových reťazcov sledovaná pomocou konfokálnej laserovej snímacej mikroskopie s fluorescenčne značeným alginátom. Tieto charakteristiky boli určené v závislosti od parametrov prípravy.

Príspevok ukazuje na možnosť prípravy planárnych alginátových hydrogélů externým gélovaním, ktorých vlastnosti pre imobilizáciu biologicky aktívnych látok budú testované v ďalšej práci.

*Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-51-033205 a 6. rámcovým programom EÚ, IP-031867, P. Cézanne.*

- [1] M. D. Cathell, C. L. Schauer *Biomacromolecules* **2007**, 22 (1), 33-41

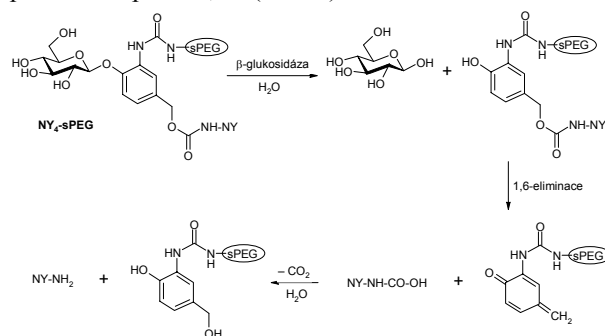
**3Po41****NOVÝ CÍLENÝ KONJUGÁT NYSTATIN – STAR POLY(ETHYLENGLYKOL) CITLIVÝ K B-GLUKOSIDÁZÁM**

Eliška Bílková, Aleš Imramovský a Miloš Sedlák

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic, eliska.bilkova@centrum.cz

Nystatin (NY) je polyenové makrocyclické antibiotikum se širokým spektrem antifungální aktivity proti mnoha druhům včetně *Aspergillus fumigatus*, *Candida albicans*, *Coccidioides immitis*, *Cryptococcus neoformans* a *Histoplasma capsulatum*. Nystatin také vykazuje antifungální aktivitu vůči houbovým kmenům, u kterých se objevila rezistence na amfotericin B. Samotný nystatin se však špatně absorbuje z gastrointestinálního traktu a parenterální administrace je limitována především jeho toxicitou.

Návrh struktury konjugátu NY<sub>4</sub>-sPEG byl jako v případě předchozího analogického konjugátu amfotericinu B (AMB<sub>4</sub>-sPEG) [1] inspirován poznatkem, že mnoho parazitujících fungálních patogenů např. z rodu *Aspergillus*, *Candida* nebo *Trichosporon* mají ve své enzymové výbavě specifické hydrolázy β-glukosidázy (E.C.3.2.1.21). Ty se však ve zdravé lidské tkáni nenacházejí. Základní strukturní jednotku spojky NY<sub>4</sub>-sPEG tvoří β-glukosidická vazba substituovaného fenyl-β-D-glukopyranosidu. Jako polymerní nosič byl pro svou biokompatibilitu a vazebnou kapacitu použit star poly(ethylenglykol) [pentaerythritol poly(ethylenglykol)ether, M = 20 000]. Na rozdíl od konjugátu AMB<sub>4</sub>-sPEG byl vyvinut nový způsob navázání glukopyranosidu na polymerní nosič pomocí močovinového fragmentu. Ve srovnání s připojením pomocí karbamátové vazby (65 °C/100 h) je tento způsob proveditelný za velmi mírných podmínek (25 °C/24 h). Enzymatickou hydrolýzou β-glukosidické vazby vzniká glukóza a následnou 1,6-eliminací karbamátová kyselina nystatinu, která se velmi rychle hydrolyzuje na volný nystatin (Schéma 1). Při testování za podmínek *in vitro* v modelovém prostředí (β-glukosidáza (*Aspergillus niger*) 2 mg/ml, 66 jednotek/g; fosfátový pufr pH 7,4; 2 × 10<sup>-2</sup>) je uvolňování nystatinu řízeno pouze enzymaticky, což bylo potvrzeno spektrofotometricky a pomocí HPLC; poločas rozpadu τ<sub>1/2</sub> = (88 ± 2) s.

**Schéma 1:** Princip uvolňování nystatinu z NY<sub>4</sub>-sPEG.

Tato práce vznikla za podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy, projekt č. MSM 002 162 7501.

[1] Sedlák, M.; Drabina, P.; Bílková, E.; Šimůnek, P.; Buchta, V.: *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2008**, *18*, 2952.

**3Po42****SELF-STABILIZED LIQUID POLYBUTADIENES**

Jana Kovářová, Jiří Podešva

Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., Heyrovský Sq. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic, kovarova@imc.cas.cz

Low-molar-mass (liquid) polybutadienes (L-PB) are used in many industrial applications because of their remarkable properties derived from the unsaturation of polymer chains. However, the presence of C=C bonds in the molecule makes these polymers susceptible to thermo-oxidation and to subsequent loss of desired properties in the environment. Therefore, stabilization plays an important role in preventing the oxidative processes that proceed in L-PB during its interaction with heat, light or air.

The reaction of L-PB with air is clearly seen in thermoanalytical experiments as a pronounced exotherm on DSC curves or as an increase in mass on TGA curves. This contribution presents results from DSC and TGA scans in air, which were applied for the characterization and stability testing of a series of modified liquid polybutadienes.

Polymer-bound stabilizers bearing a variable content of phenolic moieties or HALS moieties, as well as polymer-bound stabilizers bearing both moieties covalently attached to the same polymer chain of the L-PB, were prepared with the aim to stabilize commercial polymers, such as styrenic polymers or polyurethanes, in which they perform at the same time as impact modifiers.

Financial support of the Grant Agency of the Czech Republic (project 203/07/0987) is gratefully acknowledged.

**3Po43****FLUOROVÉ IMIDAZOLIOVÉ SOLI A NHC LIGANDY**

Martin Skalický, Vendula Kelbichová, Jaroslav Kvičala

Ústav organické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6

N-heterocyclické karbeny (NHC) jsou často využívány jako výhodnější alternativa fosfinových ligandů, neboť nabízejí vyšší tepelnou odolnost a stabilitu vůči



oxidaci. Jsou součástí celé řady komplexů přechodných kovů (Grubbsův katalyzátor, komplexy palladia, niklu a dalších kovů) [1.].

Cílem této práce je příprava polyfluoralkylovaných imidazoliových solí a studium jejich transformace na karbeny a komplexy přechodných kovů od nich odvozené. V první části práce byly syntetizovány imidazoliové soli nesoucí různé polyfluoralkylové substituenty oddělené od imidazolového cyklu methylovou, ethylovou nebo arylovou spojkou. Byly provedeny nízkoteplotní NMR experimenty s cílem sledovat *in situ* vznik karbenů a nalézt pro ně vhodné experimentální podmínky.

Ve druhé části byly připraveny první polyfluoralkylované karbenové komplexy stříbra, které byly následně testovány v transmetalacích reakcích [2.]. Analogicky k nefluorované variantě [3.] byl připraven také palladiový komplex vykazující katalytickou aktivitu v modelové Suzukiho a Heckově reakci.

[1] Herrmann W. A.: *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2002**, *41*, 1290-1309.

[2] Lin I. J. B.; Vasam C. S.: *Coord. Chem. Rev.* **2007**, *251*, 642-670.

[3] O'Brien Ch. J.; Kantchev E. A.; Valente C.; Hadei N.; Chass G. A.; Lough A.; Hopkinson A. C.; Organ M. G.: *Chem. Eur. J.* **2006**, *12*, 4743- 4748

### 3Po44

#### FLUOROVÉ TRIPYRAZOLYLMETHANY

Veronika Fraňková, Martin Holan, Martin Skalický, Markéta Rybáčková, Jaroslav Kvíčala

Ústav organické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6

Tripyrazolylmethany, uhlíkatá analoga tripyrazolylborátů, jsou novou skupinou ligandů komplexující téměř všechny kationty kovů a hrající tak důležitou roli v koordinační chemii [1.]. Tyto ligandy jsou isoelektronové s cyklopentadienidovými anionty, ale umožňují selektivnější modifikace sterických a elektronických vlastností. S cílem získat nové komplexy s fluorovými vlastnostmi jsme studovali připojení polyfluoralkylovaného řetězce jednak k centrálnímu methinovému uhlíku, jednak do polohy 4 pyrazolových jader tripyrazolylmethanu.

Při první syntéze jsme vyšli z 2,2,2-tripyrazol-1-ylethan-1-olu, který jsme reakcí s allylbromidem převedli na požadovaný allylether v 92% výtěžku. Ten jsme dále podrobili radikálové adici se sérií perfluoralkyljodidů lišících se délkou fluorovaného řetězce s výtěžky kolem 60%. Redukcí atomu jodu pomocí  $\text{Bu}_3\text{SnH}$  jsme v kvantitativních výtěžcích získali pět [3-(perfluoralkyl)propyl](2,2,2-tripyrazol-1-ylethyl)etherů s perfluorbutylovou až perfluordodecyllovou skupinou.

Pro syntézu tris{4-[2-(perfluorhexyl)ethyl]pyrazol-1-yl}methanu jsme nejprve využili vícenásobnou

Heckovu reakci tris(4-jodpyrazol-1-yl)methanu s (perfluorhexyl)ethenem, ale získané výtěžky byly velmi nízké. Jako výhodnější se ukázala Heckova reakce (perfluorhexyl)ethenu s tritylovou skupinou chráněným 4-jodpyrazolem s výtěžkem 63%, která po následné deprotekcí vedla k polyfluoralkylovanému pyrazolu. Jeho palladiem katalyzovanou hydrogenací jsme připravili klíčový polyfluoralkylovaný pyrazol v 84% výtěžku. Reakce tohoto pyrazolu s chloroformem za katalýzy fázovým přenosem poskytla žádaný fluorový tripyrazolymethan ve výtěžku 61%. Tavením klíčového fluoropyrazolu s  $\text{NaBH}_4$  jsme získali fluorový škorpionát, natrium-tris{4-[2-(perfluorhexyl)ethyl]pyrazol-1-yl}borát, ve výtěžku 42%.

[1] Trofimenko S.: *J. Am. Chem. Soc.*, **1970**, *92*, 5118-5126.

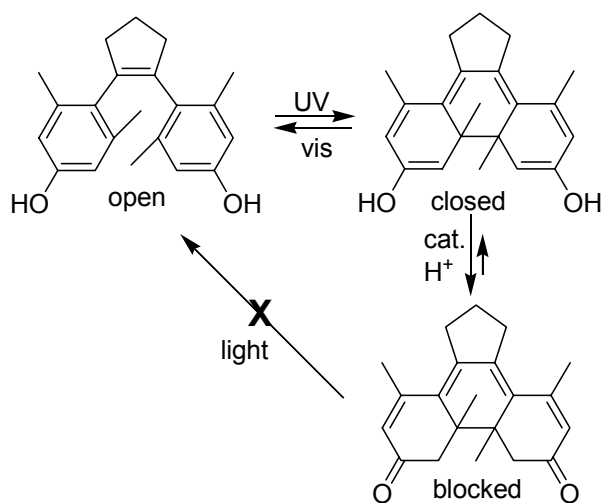
### 3Po45

#### A THREE STATE PHOTOCROMIC SWITCH

Martin Walko<sup>1</sup>, Norbert Varga<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Department of Organic chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science of P. J. Šafárik University in Košice, 040 01, Košice, Slovakia  
<sup>2</sup>present address: Department of Organic and Industrial Chemistry, University of Milan, Via Venezian 21, 20133 Milano, Italy

Diarylethenes are the most promising family of photochromic switches [1]. Their thermal stability, fatigue resistance and fast and efficient photoreaction makes them well suited for a wide range of applications. Diarylethenes can exist in two forms, the open and the closed, which differ by their absorption spectra, and the switching between those forms is induced by UV and visible light respectively (see figure).



One of the problems in the application of photochromic compounds for the data storage is the readout method. If light is used to probe the state of a switch, it can trigger the switching process and change

the state of the switch, thus compromising a stored information. The way to avoid this unwanted phenomenon is to use a secondary process to transform the closed form to the photochemically inert isomer. We have developed the system where the closed form of the switch can, under suitable conditions, undergo tautomerization from the enol to the oxo isomer, for which the photochemical reactivity is blocked.

[1] Irie, M. *Chem. Rev.* **2000**, *100*, 1685.

### 3Po46 ELECTROGRAFTING – A POWERFUL TECHNIQUE FOR MODIFICATION OF ELECTROCONDUCTIVE SURFACES

Marek Stach,<sup>1</sup> Peter Kasák,<sup>1</sup> Zuzana Kroneková,<sup>1</sup>  
Dušan Chorvát Jr.,<sup>1,2</sup> Igor Lacík<sup>1,\*</sup>

<sup>1</sup> *Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences,  
Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovak  
Republic, e-mail: marek.stach@savba.sk*

<sup>2</sup> *International Laser Centre, Ilkovičova 3, 812 19  
Bratislava, Slovak Republic*

Electrografting is a powerful technique for modification of electroconductive surfaces with organic material. Electrografting is an electro-initiated process which requires a charged electrode [1, 2]. It is based on direct initiation via electron transfer to a monomer which forms a radical anion. The cathodic electrografting of different monomers, for example various methacrylates and acrylates, allows for formation of thin polymer films, which are generally insulating, highly adherent and optically transparent. The unique feature of this technique is in controlling the density, polymer chain length and, by selection of monomers, chemical character of the polymer layer attached to a surface. A very stable polymer/metal interface produced by the cathodic electrografting is due to formation of metal-carbon chemical bonds [1]. Electrografting is thus very suitable for covalent attachment of various polymers onto the conductive surfaces, which by themselves or after the appropriate chemical modification can exhibit required properties.

*N*-succinimidyl methacrylate bears an activated ester group highly reactive towards nucleophiles, so making the electrografted coating appropriate to the anchoring of a large variety of molecules including proteins and synthetic polymers.

Electrografting of poly(dimethyl-aminoethylmethacrylate) onto electroconductive surface and subsequent modification of electrografted polymer film leads to obtaining of the zwitterionic groups known for their non-biofouling properties.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. RPEU-0007-06 and by Sixth Framework Program of the EU, IP-031867, P. Cézanne.*

- [1] Bureau, D.P. Chong, G. Lécayon, J. Delhalle, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **83**, 227 (1997)  
[2] J. Tanguy, G. Deniau, G. Zalczer, G. Lécayon, *J. Electroanal. Chem.* **417**, 175 (1996)

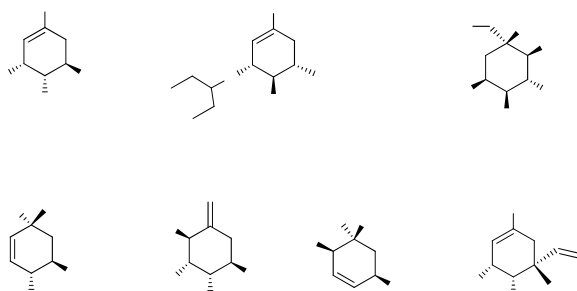
### 3Po47 NEW AMINO-ANALOGS OF SHIKIMIC ACID AS POTENTIAL NEURAMINIDASE INHIBITORS

Dávid Maliňák, Miroslava Martinková and Jozef Gonda

*Department of Organic Chemistry, Institute of  
Chemistry, Faculty of Science, P.J. Šafárik University,  
Moyzesova 11, 040 01, Košice, Slovak Republic  
e-mail: david.malinak@gmail.com*

The shikimate pathway, exclusively present in plants, fungi, and microorganisms [1], is the biosynthetic sequence that links the metabolism of carbohydrates to the biosynthesis of aromatic amino acids, folate coenzymes and various quinones [2]. Additionally, all the intermediates can also be considered branch point compounds that may serve as substrates for other metabolic pathways. The complete absence in mammals makes shikimate-pathway enzymes potential targets for nontoxic herbicides, antimicrobial agents, antifungal agents [3] and new antiparasite compounds [4]. The syntheses of shikimic acids analogues have been an active area of research with a view to the study of enzymatic mechanisms and to the design and synthesis of inhibitors [5]. Selective inhibitors of influenza neuraminidase, such as oseltamivir [6] and the potent  $\alpha$ -glycosidase inhibitor valiolamine are some key examples of such analogues.

We present five possible synthesis, starting from shikimic acid, leading to amino-analogs. The key steps of our synthesis are [3.3]-sigmatropic rearrangements of cyanates, thiocyanates and imidates.



*The present work was supported by Grant Agency (No. 1/2472/05, 1/3557/06, 1/3557/06 and 1/0281/08) from the Ministry of Education of Slovak republic, Research and development support agency, Slovak republic (APVV 20-038405) and VVGS PF 20/2009/CH.*

- [1] Kishore, G. M.; Shah, D. M. *Annu. Rev. Biochem.* **1988**, *57*, 627-663.  
 [2] Haslam, E. *Shikimic Acid Metabolism and Metabolites*; Wiley: New York, 1993, pp 260-270.  
 [3] Jiang, S.; Singh, G. *Tetrahedron* **1998**, *54*, 4697-4753.  
 [4] Coombs, G. H.; Muller, S. *Int. J. Parasitol.* **2002**, *32*, 497-508.  
 [5] Jiang, S.; Singh, G.; Boam, D. J.; Coggins, J. R. *Tetrahedron: Asymmetry* **1999**, *10*, 4087-4090.  
 [6] Abrecht, S.; Harrington, P.; Iding, H.; Karpf, M.; Trussardi, R.; Wirz, B.; Zutter, U. *Chimia* **2004**, *58*, 621-629.

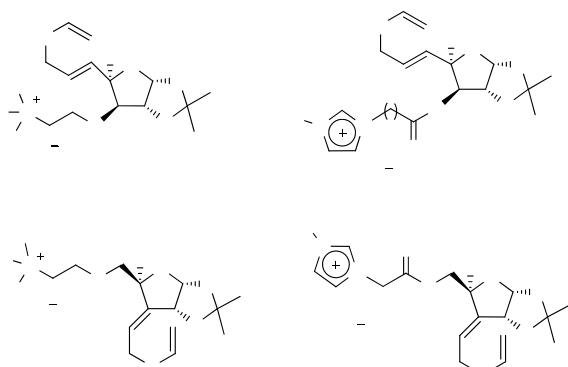
**3Po48****MW-INDUCED CLAISEN REARRANGEMENT IN THE SYSTEMS WITH COVALENTLY BONDED IONIC LIQUID**

Eva Gajdošíková, Miroslava Martinková and Jozef Gonda

*University of P.J. Šafárik, Faculty of Natural Science, Institute of Chemical Science, Department of Organic Chemistry, Moyzesova 11, 041 67 Košice, Slovakia*  
 eva.gajdosikova@gmail.com

Claisen rearrangement is [3,3]-sigmatropic rearrangement of an allyl vinyl ether into a  $\gamma,\delta$ -unsaturated carbonyl compound. It has found a widespread application in the synthesis of heterocyclic compounds, carboxylic acid derivatives, sugar derivatives and others [1]. It proceeds by heating (150-200 °C) or catalyzed by metal compounds, enzymes and others [2]. We have recently reported that aza-Claisen rearrangement induced by microwave irradiation lead to shortening reaction times compared to the conventional heating [3, 4].

We have investigated stereoselectivity of the Claisen rearrangement in the systems with covalently bonded ionic liquids on C-3 and C-5 D-xylose thermally and under microwave irradiation in different solvents. The diastereoisomeric ratios were determined from the reaction mixture based on  $^1\text{H}$  NMR experiments.



*The present work was supported by Grant Agency No. 1/3557/06, 1/0281/08, from the Ministry of Education,*

*Research and development support agency (APVV 20-038405) Slovak republic and VVGSPF 18/2009/CH.*

- [1] Castro, A. M. M.; *Chem. Rev.* **2004**, *104*, 2939-3002.  
 [2] Majumdar, K. C.; Alam, S.; Chattopadhyay, B. *Tetrahedron.* **2008**, *64*, 597-643.  
 [3] Gajdošíková, E.; Martinková, M.; Gonda, J.; Čonka, P. *Molecules.* **2008**, *13*, 2837-2847.  
 [4] Gonda, J.; Martinková, M.; Zadrošová, A.; Šoteková, M.; Raschmanová, J.; Čonka, P.;  
 [5] Gajdošíková E.; Kappe, C. O. *Tetrahedron Lett.* **2007**, *48*, 6912-6915.

**3Po49****SYNTEZA A APLIKACE BIS(POLYFLUORPOLYALKOXY)IMIDAZOLI OVÝCH SOLÍ**

Jana Paterová, Ondřej Kysilka, Martin Skalický, Markéta Rybáčková, Jaroslav Kvičala

*Ústav organické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6*

Iontové kapaliny jsou moderní skupinou sloučenin nacházející uplatnění v mnoha oblastech chemie. Mezi jejich nejvýznamnější představitele patří 1,3-disubstituované imidazoliové soli. Přestože mono(polyfluoralkylované) imidazoliové soli jsou známy a byly využity jako iontové kapaliny, jejich fluorofilita je velmi nízká. Bis(polyfluoralkylované) imidazoliové soli jsou naproti tomu krystalické a jako iontové kapaliny nemohou být využity [1].

V rámci studia polyfluorovaných ligandů jsme využili trimeru HFPO pro syntézu nového stavebního bloku pro fluorovou chemii,  $\text{CF}_3\text{CF}_2[\text{CF}_2\text{OCF}(\text{CF}_3)]_2\text{CH}_2\text{-OTf}$  ( $\text{R}_{\text{FO}}\text{CH}_2\text{-OTf}$ ), který reakcí s imidazolem poskytl odpovídající polyfluoralkylovaný imidazol,  $\text{R}_{\text{FO}}\text{CH}_2\text{-Im}$  [2]. Jeho kvarternizací s polyfluorovanými trifláty a případnou následnou metatezí jsme získali sérii 20 nových vysoce fluorovaných iontových kapalin o složení  $[\text{R}_{\text{FO}}\text{CH}_2\text{-Im}^+\text{-CH}_2\text{R}_F] \text{X}^-$ , kde  $\text{R}_F = \text{R}_{\text{FO}}, \text{CF}_3, \text{C}_6\text{F}_{13}, \text{CH}_2\text{C}_6\text{F}_{13}$  a  $\text{X} = \text{OTf}, \text{I}, \text{BF}_4, \text{PF}_6, \text{NTf}_2$ . Zatímco imidazoliové soli na bázi prvních dvou kationtů jsou za pokojové teploty viskózní kapaliny, ostatní jsou voskovité látky s teplotou tání pod 100 °C. Všechny nově připravené fluorové iontové kapaliny mají vysokou rozpustnost v perfluorovaných rozpouštědlech a dipolárních aprotických rozpouštědlech, naproti tomu ve vodě a nepolárních rozpouštědlech jsou prakticky nerozpustné [3].

Nově připravené fluorové iontové kapaliny mají nižší chemickou stabilitu oproti běžným typům (BMIM), ale urychlují Dielsovu-Alderovu reakci s kvantitativní recyklací iontové kapaliny.

- [1] Skalický M., Rybáčková M., Kysilka O., Kvičalová M., Cvačka J., Čejka J., Kvičala J.: *J. Fluorine Chem.*, zasláno k publikaci.

- [2] Kysilka O., Rybáčková M., Skalický M., Kvičalová M., Cvačka J., Kvičala J.: *Collect. Czech. Chem. Commun.* **2008**, *73*, 1799-1813.
- [3] Kysilka O., Rybáčková M., Skalický M., Kvičalová M., Cvačka J., Kvičala J.: *J. Fluorine Chem.* **2009**, *130*, 629-639.

**3Po50****PHENYLSILANE POLYMERIZATION CATALYZED BY TITANIUM COMPLEXES**

Jan Merna<sup>1</sup>, Jana Kredatusová<sup>1</sup>, Jan Sýkora<sup>2</sup>, Jiří Pinkas<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Chemical Technology, Prague, Department of Polymers, Technická 5, 166 28 Prague 6, Czech Republic*

<sup>2</sup>*Institute of Chemical Process Fundamentals, ASCR, v.v.i., Rozvojová 135, Prague 6, 16502, Czech Republic.*

<sup>3</sup>*J. Heyrovsky' Institute of Physical Chemistry of ASCR, v.v.i., Dolejškova 2155/3, 182 23 Prague 8, Czech Republic*

Polysilanes are promising materials with semiconducting (when doped by eg. AsF<sub>5</sub>) and photoluminescent properties making them suitable for molecular electronics and sensing applications<sup>1</sup>. Polysilanes can be prepared by either by Wurtz coupling (reaction of alkyl(aryl)chlorosilanes with alkali metals) or by catalytic process based on transition metal complexes<sup>2</sup>.

Here, we investigate dehydrocoupling polymerization of phenylsilane (PhSiH<sub>3</sub>) catalyzed by titanium complexes without activation by other organometals. New catalyst dicyclopentadienyltitanium bis(2,6-diisopropylphenoxid) **1**, derived from Cp<sub>2</sub>Ti(OPh)<sub>2</sub> firstly introduced by Moreau<sup>3</sup> as a catalyst for silane dehydrocoupling, was prepared by replacing simple phenoxo ligand (OPh) by bulky 2,6-bis(isopropyl)phenoxo groups (OPh-2,6-iPr<sub>2</sub>). **1** was synthesized by reaction of Cp<sub>2</sub>TiCl<sub>2</sub> with two equivalents of Li(OPh-2,6-iPr<sub>2</sub>). Dehydrocoupling of PhSiH<sub>3</sub> was observed surprisingly even in presence of Cp<sub>2</sub>TiCl<sub>2</sub>, however, only low molar mass products were produced.

The effect of activation and polymerization temperature on polymer yield, molar mass and its distribution was investigated in reaction of PhSiH<sub>3</sub> with complex **1**. Polysilanes with weight average molar mass 1400-3300 g.mol<sup>-1</sup> and bimodal molar mass distribution were obtained. Thermal stability of polysilanes is higher than 260°C and glass transition temperatures are in broad range -40°C to 30°C.

*Research was supported by Grant Agency of the Czech Republic (grant No. 203/09/1574) and Ministry of Education, Youth and Sports (MSM 6046137302).*

- [1] R.D. Miller, J. Michl, *Chem. Rev.* **89** (1989) 1359  
 [2] C. Aitken, J.F. Harrod, U.S. Gill, *Can. J. Chem.-Rev. Can. Chim.* **65** (1987) 1804

- [3] S. Bourg, R.J.P. Corriu, M. Enders, J.J.E. Moreau, *Organometallics* **14** (1995) 564

**3Po51****STUDY OF SA – CS /PMCG CAPSULES PROPERTIES PREPARED BY USING TWO DIFFERENT SODIUM ALGINATES**

Gabriela Kolláriková,<sup>1</sup> Igor Lacík,<sup>1</sup> David Hunkeler,<sup>2</sup> Meirigeng Qi,<sup>3</sup> José Oberholzer,<sup>3</sup> Dušan Chorvát Jr.<sup>4</sup>

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

<sup>2</sup>*AQUA+TECH Specialties S.A., CH-1283 La Plaine, Geneva, Switzerland*

<sup>3</sup>*UIC, Division of Transplantation, 840 South Wood Street CSB, Chicago, IL 60612, USA*

<sup>4</sup>*International Laser Center, Ilkovičova 3, 81219 Bratislava, Slovakia*

Polymeric materials utilized for immobilization of bioactive substances involve different types of gelling polysaccharides and synthetic polymers with ability to form non-ionic hydrogels and polyelectrolyte complexes. Important development has been achieved in the immobilization of biological materials. Transplantation and immunoprotection of pancreatic islets of Langerhans in microcapsules made by polyelectrolyte complexation seem to represent the promising encapsulation principle to final cure of type I diabetes mellitus.

The aim of this contribution is to present the comparison of properties, e.g. permeability [1], mechanical [2] and chemical stability of SA-CS/PMCG microcapsules based on polyelectrolyte complexation. Microcapsules were made of two different sodium alginates, certified and non-certified.

This contribution presents also the results about encapsulation of human islets of Langerhans in SA-CS/PMCG microcapsules and transplantation to the peritoneal cavity of diabetic animals. The human islets used for the studies were delivered from University of Illinois as a part of the Chicago Project activities [3].

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No APVV-51-033205 and by the Chicago Project coordinated by the University of Illinois at Chicago and the Christopher Foundation.*

- [1] M. Briššová, M. Petro, I. Lacík, A.C. Powers, T. Wang, *Analytical Biochemistry*, **242**, (1996), 141  
 [2] A. Rehor, L. Canaple, Z. Zhang, D. Hunkeler, *J. Biomater. Sci. Polymer Edn.*, **12**, (2001), 157.  
 [3] www.thechicagoproject.org

### 3Po52 VYUŽITÍ DERIVÁTU BROMACETOFENONU PRO SYNTÉZU HETEROCYKlickÉHO SYSTÉMU PODOBNÉHO KYSELINĚ TETRAHYDROLISTOVÉ

Eva Schütznerová, Petr Cankář

*Katedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta  
Univerzity Palackého, tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc*

Thymidylát syntáza patří mezi významné molekulární cíle<sup>1</sup>. Inhibice tohoto enzymu má významný vliv na biosyntézu nukleových kyselin. Aktivní forma tetrahydroolistové kyseliny, která je esenciální pro funkci thymidylát syntázy, slouží jako přenašeč jednouhlíkatého zbytku. Přípravě antimetabolitů vycházející ze struktury tetrahydroolistové kyseliny je věnována velká pozornost zejména pro jejich kancerostatické<sup>2</sup> a antibakteriální účinky<sup>3</sup>.

Za účelem přípravy podobného heterocyklického systému byl zvolen jako výchozí materiál 4-(bromacetyl)benzonitril, ze kterého byl získán pomocí několikastupňové syntézy dusíkatý kondenzovaný heterocyklus založený na pyrazolo[5,1-c]pyrimido[4,5-e][1,2,4]triazinovém skeletu. Strategie vícestupňové syntézy byla založena na konsekutivním způsobu. Výstavba heterocyklického systému byla provedena sledem cyklizačních reakcí přikondenzováním triazinového a pyrimidinového cyklu k pyrazolu. Připravené intermediáty a cílová sloučenina budou následně testovány na biologickou aktivitu.

*Tato práce vznikla na základě finanční podpory MŠMT ČR v rámci výzkumného záměru MSM6198959216.*

- [1] Carreras, C.W.; Santi, D.V.: *Annu. Rev. Biochem.* 64, 721-762 (1995).  
[2] Popat, S.; Matakidou, A.; Houlston, R.S.: *J. Clin. Oncol.* 22, 529-536 (2004).  
[3] Costi, M.P. *et al.*: *J. Med. Chem.* 49, 5958-5968 (2006).

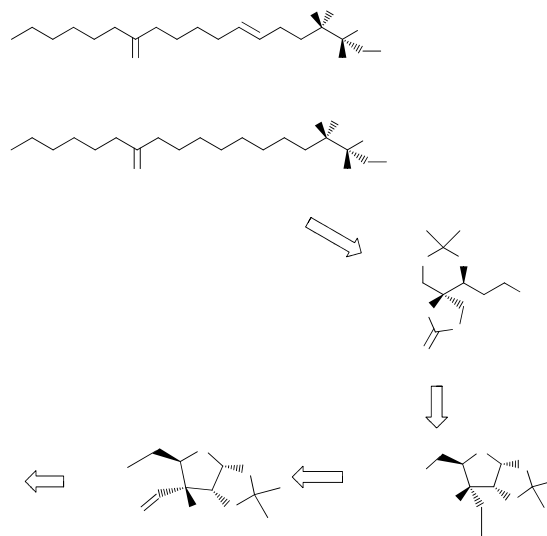
### 3Po53 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA POLÁRNEJ ČASTI MYCESTERICÍNOV D, F

Alena Uhríková, Beáta Oroszová, Miroslava Martinková, Jozef Gonda

*Univerzita P. J. Šafárika, Přírodovědecká Fakulta,  
Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie,  
Moyzesova 11, Košice, Slovenská republika*

Mycestericíny A, B, C, D, E, F a G<sup>1,2</sup> patria medzi zlúčeniny sfingoidnej štruktúry obsahujúce  $\alpha$ -substituovaný  $\alpha$ -aminokyselinový serínový fragment. Boli izolované zo živného substrátu huby *Mycelia sterilia*<sup>1</sup> a vykazujú pozoruhodnú imunopresívnu aktivitu.<sup>1</sup> Navyše mycestericíny D, E, F a G inhibujú serínpalmitoyltransferázu (enzým podieľajúci sa na biosyntéze sfingolipidov).<sup>2</sup> V predkladanom príspevku je popísaná stereoselektívna syntéza pokročilého

chirálného prekursora mycestericíno D **1** a F **2**. Ako východisková látka pre syntézu bola použitá komerčne dostupná D-xylóza, ktorá bola modifikovaná na stavebný fragment **3** obsahujúci požadované tetrasubstituované chirálne centrum (uhlík C-3). Príslušný izotiokyanát **3** bol transformovaný vzájomnou premenou funkčných skupín na syntón **4** a ten následne prevedený na polárnu časť **5** mycestericíno D **1** a F **2**.



*Tento príspevok vznikol s podporou Grantovej agentúry (No.1/0100/09 a No. 1/0281/08) Ministerstva školstva Slovenskej Republiky, Agentúry na podporu výskumu a vývoja (APVV 20-038405) Slovenskej Republiky a Vnútorného vedeckého Grantového systému Přírodovědeckej Fakulty UPJŠ (VVGs PF 26/2009/CH)*

- [1] 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.  
[2] Byun, H.-J.; Lu, X.; Bittman, R. *Synthesis* **2006**, 2447-2474.

### 3Po54 PREPARATION OF STANDARDS FOR MONITORING CHEMICAL WARFARE AGENTS, THEIR PRECURSORS AND METABOLITES

Jakub Stýskala<sup>1</sup>, Petr Cankář<sup>1</sup>, Petr Bednář<sup>2</sup>

*<sup>1</sup>Department of Organic Chemistry, Palacky University, Tr. Svobody 8, 771 48 Olomouc, Czech Republic*

*<sup>2</sup>Department of Analytical Chemistry, Palacky University, Tr. Svobody 8, 771 48 Olomouc, Czech Republic*

The detection of chemical warfare agents (CWAs) is an important task in today's world. Modern approaches to analytical monitoring involve primarily the direct

detection of hazardous compounds. In addition to the methods for unambiguous control of precursors and by-products of synthesis or degradation, other tools are important in blocking the illegal movement of the base material for CWA production and verifying monitored disposal. Another essential task is to prove the use of the CWA in suspected location or the exposure of humans to them (e.g. identification of products of their transformation). The majority of these activities and tasks are defined and listed in The Convention on the Prohibition of the Development, Production, Stockpiling and Use of Chemical Weapons and on their Destruction (OPCW)<sup>1</sup>.

A class of chemicals of concern in monitoring CWAs are 2-(dialkylamino)ethyl chlorides related alcohols and thiols<sup>2,3</sup> (Me, Et, n-Pr, iso-Pr), as well as the corresponding N-quarterised aminium salts, which are listed as Schedule 2 B precursors in the Convention. This communication is devoted to the development and improvement of synthetic methods for the synthesis mentioned compounds as valuable analytical standards for monitoring chemical warfare agents, their precursors and metabolites.

*The project was supported by The Organization for the Prohibition of Chemical Weapons, The Hague, The Netherlands (No. L/ICA/ICB/84366/04), The State Office for Nuclear Safety, Czech Republic, and the Ministry of Education, Youth and Sports, Czech Republic (MSM6198959216).*

[1] The Convention on the Prohibition of the Development, Production, Stockpiling and Use of Chemical Weapons and on their Destruction, Organization for the Prohibition of Chemical Weapons (OPCW), The Hague 1994 ([www.opcw.org](http://www.opcw.org)).

[2] Stýskala, J.; Cankař, P.; Soural, M.; Bednář, P.; Lemr, K. *J. Label Compd. Radiopharm.* **2008**, *51*, 19.

[3] Stýskala, J.; Cankař, P.; Soural, M.; Bednář, P.; Lemr, K. *Arxivoc* **2007**, *15*, 171.

### 3Po55 NOVEL FLUORESCENT PROBES BASED ON 1,8-NAPHTHALIMIDES: INTRAMOLECULAR QUENCHING BY MONO- AND BI-NITROXIDES

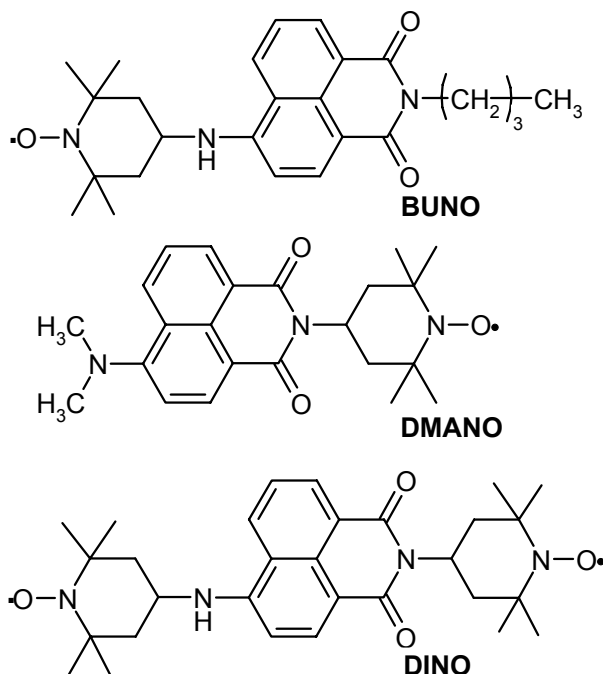
Jozef Kollár, Štefan Chmela, Pavol Hrdlovič

*Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences,  
Dúbravská cesta 9,  
SK-842 36 Bratislava, Slovakia  
email: Jozef.Kollar@savba.sk*

Novel series of chromophore-nitroxide adducts were synthesized for the monitoring of photophysical and photochemical processes in solution as well as in a polymer matrix. Paramagnetic probes BUNO, DMANO and DINO representing connection of 1,8-naphthalimides as chromophore and structural unit of

quencher in different position.<sup>1, 2</sup> Corresponding diamagnetic parent amines (BUNH, BUNO and DINH) were used as standard samples for comparison of the efficiency of intramolecular quenching. Absorption and fluorescence spectra of probes were taken in solution as well as in polymer films. In their absorption spectrum the longest wavelength band of all types of probes lies in the range from 400 up to 440 nm depending on the medium. In fluorescence spectrum the maximum lies in the range from 460 to 530 nm. When compared with less polar media the maxima of absorption and fluorescence spectra in polar media are red-shifted. All derivatives exhibit similar solvatochromism in absorption as well as in fluorescence spectrum.

The fluorescence is observed for all probes but there is distinctly much higher fluorescence intensity for parent amine and alkoxyamine than for respective nitroxyl radical. The extent of intramolecular quenching, represented by the ratio of quantum yields of diamagnetic and paramagnetic forms, for all pairs BUNH/BUNO, DMANH/DMANO and DINH/DINO is in the range 2-18, strongly depending on the medium and on the position of the quencher. Intramolecular quenching in methanol and cyclohexane for both pairs of mono-nitroxyl radical (BUNH/BUNO and DMANH/DMANO) exhibits an additive effect when compared with bi-nitroxyl radical (DINH/DINO).



*Financial support of APVV-0562-07 is gratefully acknowledged.*

[1] Kollár, Jozef, Hrdlovič, Pavol, Chmela, Štefan *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, Vol. 204 (2009) p. 191-199.

[2] Kollár, Jozef, Hrdlovič, Pavol, Chmela, Štefan, *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*. Vol. 195 (2008) p. 64–71.

### 3Po56

#### INOVAČE VÝROBY ETHANDINITRILU

Karel Zelinka<sup>1</sup>, Jan Šimbera<sup>1,2</sup> a Pavel Pazdera<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Lučební závody Draslovka a.s. Kolín, Havlíčkova 205, 280 99 Kolín

<sup>2</sup> Centrum pro syntézu za udržitelných podmínek a jejich management, Ústav chemie, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Czech Republic  
Email: karel.zelinka@draslovka.cz

V příspěvku je diskutována možnost inovace výroby ethandinitrilu (dikyanu) v rámci podmínek „Čistší produkce“ a „Zelené chemie“. Je popsána možnost využití imobilizovaných katalytických systémů na bázi komplexů mědi a železa, je porovnáván stávající systém výroby založený na katalýze pomocí roztoku iontů obou uvedených kovů s novou možností katalýzy pomocí iontů kovů navázaných na pevném nosiči. Oba katalytické systémy jsou porovnávány z hlediska konverze výchozích látek, selektivity reakce, životnosti katalyzátoru a způsobu jeho regenerace.

### 3Po57

#### SYNTHESIS OF D-PSICOSE BASED INHIBITORS OF GLYCOSYLTRANSFERASES

Marek Baráth, Ján Hirsch and Igor Tvaroška

*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovakia*

Glycosyltransferases are enzymes that catalyst transfer of monosaccharide unit from an activated sugar phosphate to an acceptor molecule, usually an alcohol. The result of glycosyl transfer can be a monosaccharide glycoside, an oligosaccharide or polysaccharide. Many functions have been implicated for protein glycosylation, including promoting protein folding or stabilizing cell-surface glycoproteins.

During oligosaccharide processing, oligosaccharides are converted into hybrid and complex oligosaccharides by the addition of *N*-acetylglucosaminyl (GlcNAc) residues. This transfer is catalysed by *N*-acetylglucosaminyltransferases (GlcNAc-T's). In such a transfer, the donor of the GlcNAc residue is UDP-GlcNAc while the acceptor is one of the hydroxyl groups located at a particular position of a variety of oligosaccharides.

There are at least 15 different GlcNAc-T's involved in the biosynthesis of *N*- and *O*-glycans. These enzymes represent prime target for the design of glycosylation inhibitors with the potential to specifically alter the structure of cell-surface glycoproteins.<sup>1</sup>

Different strategies have been used in order to identify potent inhibitors of glycosyltransferases. The main goal of this project is to design of the transition state

(TS) analogs starting from the donor UDP-GlcNAc. A leading idea of all these TS analogs is a „1-thio“ linker between a mimetic of GlcNAc in TS geometry and a mimetic of the acceptor bearing the β-D-psicofuranose backbone with key substitution on position C-1 by the phosphate group and on position C-2 by the thiophenyl group.

Starting material for the synthesis was 1,2:3,4-Di-*O*-isopropylidene-β-D-psicofuranose, which can be easily synthesized from the commercially available D-fructose in 4 steps with overall yield 44%.<sup>2</sup> Further protection of C-6 position following by acetolysis of 1,2 isopropylidene ring leading to corresponding diacetate. Sequential cleavage of remaining isopropylidene ring and protection of free hydroxyles afforded appropriate compound for thioglycosylation and (after selective deprotection) phosphorylation, which after final deprotection gave the target molecule.

A multi-member library of similar compounds can be reached by usage of similar synthetic strategy. These compounds will undergo a biological assays on human GnT's, namely (GnT-I, Core2GnT and GnT-V).

*This work was supported by the grant VEGA No. 2/0128/08 and Centre of Excellence-GLYCOMED.*

[1] Schachter, H. *Curr. Opin. Struct. Biol.* **1991**, *1*, 755-765.

[2] Mio, S.; Kumagawa, Y.; Sugai, S. *Tetrahedron* **1991**, *47*, 2133-2144.

### 3Po58

#### POLYSACCHARIDES OF INSTANT COFFEE POWDER OF *COFFEA ARABICA*: AN ARABINOGLACTAN-PROTEIN

M. Matulova<sup>1</sup>, P. Capek<sup>1</sup>, J. Kozák<sup>1</sup>, L. Navarini<sup>2</sup>, F. Suggi-Liverani<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Chemistry, Center for Glycomics, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK-845 38 Bratislava, Slovakia*

<sup>2</sup>*Illycaffè S.p.A., Research & Innovation, via Flavia 110, I-34147 Trieste, Italy*

It is well known that *Coffea arabica* beans contain about 50% of carbohydrate material and arabinogalactan-proteins represent about 15%. These highly glycosylated macromolecules possess a large scale of functions in biological processes. They have been recognized very important as roasted coffee aroma precursors and play an important role in determining some functional properties of coffee brews. In spite of the relevant steps ahead performed up to now in the knowledge of both green and roasted coffee beans arabinogalactans chemistry, little effort has been dedicated to investigate arabinogalactans from instant coffee powder. Industrial soluble coffee processing, in addition to roasting, includes further thermal treatments: the extraction, which is normally performed at high temperature and it is accompanied

by hydrolysis and the drying step which can be performed by using high temperature as in the case of spray drying process. These drastic conditions may remarkably alter the chemical structure of the polysaccharides originally present in the green coffee beans and for this reason more attention has been given to investigate mono and oligosaccharides. As far as we know, a part the pioneering work by Wolfrom and Anderson in 1967 [1] and some observations regarding the presence of arabinogalactan-derived polymer material in soluble coffee, no detailed structural characterization of arabinogalactan-protein from soluble coffee has been reported in the literature and the experimental data by Wolfrom and Anderson have not yet been rediscussed.

In the present work, AGP has been isolated, according to Wolfrom and Anderson, from freeze-dried instant coffee powder industrially produced from dark roasted *C. arabica*. The isolation procedure reproducibility, in terms of yield and chemical identity, has been assessed. AGP has been characterized by chemical (fractionation, partial hydrolysis and methylation analysis) and spectroscopic methods ( $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR). The polymer was composed of Gal (85%), Ara (8.2%), Man (2.7%), Glc (1.4%), Hep (2.7%) and traces of Xyl residues with 1.6% protein. No rhamnose and glucuronic acid as well as incorporated chlorogenic acid have been found. It had  $M_w$  5400. The preliminary results of chemolytic and spectroscopic investigation revealed the expected 3-linked  $\beta$ -galactosyl backbone branched at C-6 by side oligomeric chains [2]. Whereas galactose/arabinose (12.0) and t-Araf/5-Araf (4.92) molar ratios, in the purified unfractionated polymer are consistent with those expected for both roasting and processing conditions, the degree of branching is higher than that expected. The role played by soluble coffee processing in determining yield and chemical features of AGP is emphasized.

*This project has been supported by the Illy-Coffee grant (Italy), VEGA grant No. 2/0155/08 from the Slovak Grant Agency and APVV grant No. 0030-08.*

- [1] Wolfrom, L.; Anderson, E.; J. Agr. Food Chem., 15, 1967, 687-689.  
 [2] Capek, P.; Matulová, M.; Navarini, L.; Suggi-Liverani F.; J. Food and Nutr. Res., 48, 2009, 80-86.

### 3Po59 CHARACTERIZATION OF STARCH AND ITS MONO AND HYBRID DERIVATIVES BY THERMAL ANALYSIS AND FT-IR.

J. Turjan<sup>1</sup>, M. Drábik<sup>2</sup>, P. Capek<sup>1</sup>, P. Magdolen<sup>1</sup>, J. Švec<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Chemistry, Center for Glycomics, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK-845 38 Bratislava, Slovakia*

<sup>2</sup>*Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK-845 36, Bratislava, Slovakia*

Polysaccharides are among the most widespread organic compounds in the plant kingdom. They are typically complex carbohydrate biopolymers composed of monosaccharide units linked together by glycosidic bonds into linear or branched chains of different length, and are classified on the basis of their main building units, i.e. monosaccharide components, type of linkages and the anomeric configuration of glycosidic linkages. Polysaccharides play crucial roles in life processes of all plants. They can be divided into several broad groups according their functions i.e. structural polymers (cellulose), protective polysaccharides (pectin and hemicelluloses) and reserve polysaccharides (starch).

From an industrial point of view, one of the most important polysaccharides is starch. Native starch and its derivatives are used mainly in the food industry (as a main nutrient for humans), in pharmaceutical, medicinal, paper and pulp industries, printing and textile industries, etc. Starch is attractive as a raw material due to its low cost, biodegradability and simple chemical modification. Moreover, low molecular weight fragments of starch can be found in cyclic form as cyclodextrins (or cycloamyloses). Cyclodextrins are produced from starch by means of enzymatic conversion and have found a wide range of applications in food, pharmaceutical (delivery of drugs), chemical, agriculture and other industrial contexts.

All carbohydrates, i.e. monosaccharides, oligosaccharides and polysaccharides upon heating undergo several physical and chemical transformations which can be studied by thermogravimetric analysis. There have been several reports of the thermal decomposition of native starches isolated from different plant origin, but no significant differences in their thermograms were noticed [1]. However, thermogravimetric studies of various starch derivatives showed characteristic degradation patterns of individual starch derivatives differing in thermal stability [2]. The aim of our work is to characterize the thermal behavior of wheat starch, its sulfate, carboxymethyl and hybrid derivatives as well as the low molecular weight  $\alpha$ -cyclodextrin, its carboxymethyl, sulfate and hybrid derivatives [3].



This work was supported by the Slovak Scientific Grant Agency (VEGA), grants Nos. 2/0155/08 and 2/0055/08, and the Science and Technology Assistance Agency (APVV), grant No. 0030-08.

- [1] Aggarwal P.; Dollimore D. *Talanta* 43, 1996, 1527-1530.  
 [2] Fang J.M.; Fowler P.A.; Tomkinson J.; Hill C.A.S. *Carbohydr. Polym.* 47, 2002, 245-252.  
 [3] Capek, P.; Drábik, M.; Turjan, J. J. *Therm. Anal. Cal.* 2009, in press.

### 3Po60

#### COUGH SUPPRESSIVE EFFECT OF *ALTHAEA* RHAMNOGALACTURONAN IN GUINEA PIGS TEST SYSTEM

M. Šutovská<sup>1</sup>, P. Capek<sup>2</sup>, G. Nosáľová<sup>1</sup>, S. Fraňová<sup>1</sup>, L. Prisenžňáková<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Pharmacology, Jessenius Faculty of Medicine, Comenius University, SK-036 01 Martin, Slovakia

<sup>2</sup>Institute of Chemistry, Center for Glycomics, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK-845 38 Bratislava, Slovakia

In the nineties it had been found that mucilage, a viscous carbohydrate rich material isolated from a medicinal plant *A. officinalis*, showed an antitussive activity on mechanically induced cough reflex in cats [1]. More detailed analysis of *Althaea* mucilage revealed glucan, arabinan and rhamnogalacturonan polymers as its main structural components. Further antitussive activity tests of individual purified polysaccharide components of mucilage revealed the rhamnogalacturonan as the most active component to be responsible for antitussive effect of *Althaea* hydrocolloid [2]. Later, acidic polysaccharides as glucuronoxylans, pectic polysaccharides and mostly rhamnogalacturonan type of polymers from *Salvia officinalis*, *Malva mauritiana*, *Verbascum thapsiforme*, *Rudbeckia fulgida* and *Mahonia aquifolium* were shown to be the most active carbohydrate components influencing the experimentally induced cough mainly from laryngopharyngeal airway area [3]. It has been found that their high cough suppressive effect is connected mainly with decreasing of the cough effort numbers and the cough attacks intensity during the expiration and inspiration. Besides, isolated herbal biomacromolecules did not influence the intensity of maximal cough efforts in the aspiration and expiration which are important parameters characterizing their expectoration quality. The high antitussive effect, no negative influence on expectoration and rare adverse reaction on organism make some herbal polysaccharides prospective drugs for a application in the treatment of cough.

Despite of the fact that curing effects of *Althaea* mucilage and its main acidic component were demonstrated, mechanisms of plant polysaccharides action are still not clarified. Generally it is admitted

that the cough suppressive effect might be explained by their protective effect on cough receptors. Besides, the cough reflex is very close to bronchoconstriction and therefore bronchodilation could in theory participate on the antitussive activity of polysaccharides.

The present studies were focused on the effect of *Althaea* rhamnogalacturonan on the citric acid-induced cough reflex and reactivity of airways smooth muscle *in vivo* as well as *in vitro* conditions in the test system – guinea pigs.

*Aknowledgments:* This work was supported by the Slovak Scientific Grant Agency (VEGA), grants No. 1/3375/06 and 2/0155/08, and the Science and Technology Assistance Agency (APVV), grant No. 0030-08.

- [1] Nosáľová, G.; Strapková, A.; Kardošová, A.; Capek, P.; Zathurecký, L.; Bukovská, E. *Pharmazie* 47, 1992, 224-226.  
 [2] Nosáľová, G.; Strapková, A.; Kardošová, A.; Capek, P. J. *Carbohydr. Chem.* 12, 1993, 589-596.  
 [3] Nosalova, G.; Capek, P.; Sutovska, M.; Franova, S.; Matulova, M.; Floriculture, Ornamental and Plant Biotechnology 2006, Vol. IV, 471-480.

### 3Po61

#### HIGH $\kappa$ /SI SEMICONDUCTOR STRUCTURES IN MICROELECTRONICS

A. Vincze<sup>1,2</sup>, R. Lupták<sup>3,4</sup>, K. Hušeková<sup>3</sup>, M. Michalka<sup>1</sup>, E. Dobročka<sup>3</sup>, K. Fröhlich<sup>3</sup>

<sup>1</sup>International Laser Centre, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava, Slovak Republic

<sup>2</sup>Department of Microelectronics, Slovak University of Technology in Bratislava,

Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovak Republic

<sup>3</sup>Institute of Electrical Engineering, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 841 01 Bratislava, Slovakia

<sup>4</sup>Institute for Bio- and Nanosystems (IBN1-IT), Research Center Jülich, D-52425 Jülich, Germany  
 Corresponding author: vincze@ilc.sk

Most of the semiconductor MOS structures in microelectronics are using a kind of active oxide layers. One of the most popular is still the SiO<sub>2</sub> layer. Scaling the SiO<sub>2</sub> gate thickness down to 1.5 nm has led to high tunnelling leakage current [1] and, therefore continuous research has been done for alternative material development in microelectronics. One of the results here are high permittivity (high- $\kappa$ ) oxides such as Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, HfO<sub>2</sub>, La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, HfSiO<sub>x</sub> and their alloys [2]. These high permittivity oxides can be prepared with various technological methods like pulsed laser deposition (PLD), metal organic chemical vapour deposition (MOCVD) or atomic layer deposition (ALD). Hafnium based dielectrics were used for SiO<sub>2</sub> replacement as the first generation. The next

generation candidates are metal oxides, like the rare earth oxides in RE<sub>2</sub>O<sub>3</sub> configuration.

In this work thin dielectric GdScO<sub>3</sub> and LaLuO<sub>3</sub> films were grown by metal organic chemical vapour deposition (MOCVD). We have studied the thermal stability of as-deposited and annealed in oxygen, nitrogen or ultra-high vacuum (UHV) films by (SIMS). In addition, we have evaluated electrical properties of GdScO<sub>3</sub> and LaLuO<sub>3</sub> dielectrics in MOS structures [3].

*This work was supported by the Slovak Grant Agency contract VEGA 1/0787/09, by grants of Slovak Research and Development Agency APVV 0133-07 and VMSP P-0051-07 under the frame of Centre of Excellence CENAMOST (VVCE 0049-07) and CE ASFEU NanoNET with ITMS 26240120010.*

- [1] Yamamoto T, Morita N, Sugiyama N, Karen A, Okuno K, *App Surf Sci* 2003;203-204:516-9  
 [2] [Besmehn A, Scholl A, Rije E, Breuer U, *App Surf Sci* 2005;252:172-6  
 [3] Vincze A, Lupták R, Hušková K, Dobročka E, Fröhlich K. Thermal stability of GdScO<sub>3</sub> and LaLuO<sub>3</sub> films prepared by liquid injection MOCVD, *Vacuum* (2009), doi: 10.1016/j.vacuum.2009.05.017

### 3Po62

#### FREE RADICAL POLYMERIZATION OF WATER-SOLUBLE MONOMERS WITH DIFFERENT CHEMICAL BEHAVIOR IN NON-AQUEOUS PHASE BY PLP-SEC METHOD

Lucia Učňová<sup>1</sup>, Dušan Chorvát Jr.<sup>2</sup>, Igor Lacík<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Institute of the Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovak Republic, e-mail: lucia.ucnova@savba.sk, igor.lacik@savba.sk*

<sup>2</sup> *International laser centre, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovak Republic*

Accurate values of propagation rate coefficients are necessary for understanding a polymerization process and mechanism of polymerization. They can be used to simulate the molecular weight distribution of final products and also modeling the polymerization process. The situation about the limited knowledge of rate coefficients for free radical polymerization has been improved with employing the pulsed-laser-assisted techniques [1]. With applying the pulsed laser polymerizations associated with analysis of resulting polymer by size exclusion chromatography (PLP-SEC) [2], the precise  $k_p$  values were obtained. Recently, the PLP-SEC technique has been applied for measuring the  $k_p$  for water-soluble monomers.

This contribution will focus on *N*-vinyl pyrrolidone (NVP), which have been identified after set of experiments as a model monomer for studies into the propagation kinetics in the aqueous phase [3]. In this case NVP was polymerized in organic solvents with

different chemical behavior as butanol, butylacetate, *N*-ethylpyrrolidone and *N*-ethylformamide.  $k_p$  values determined by organic phase polymerizations were compared to  $k_p$  values obtained in aqueous phase polymerization. These values in organic solvents are clearly below those in the aqueous solution. It is discussed in frame of the effect of solvent on interactions with the transition state structure.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-51-037905 and by BASF AG Ludwigshafen.*

- [1] Beuermann, S.; Buback, M. *Prog. Polym. Sci.* **2002**, 27, 191–254  
 [2] Olaj, O.F.; Schnöll-Bitai, I.; Hinkelmann, F. *Makromol. Chem.* **1987**, 188, 1689–1702  
 [3] M. Stach, I. Lacík, D. Chorvát, Jr., M. Buback, P. Hesse, R.A. Hutchinson, L. Tang *Macromolecules*, **2008**, 41 (14), 5174–5185.

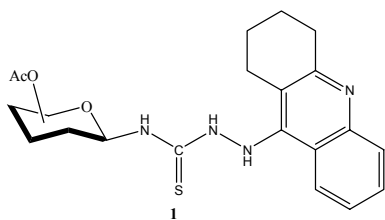
### 3Po63

#### SYNTEZA NOVÝCH GLYKOKONJUGÁTOV TAKRÍNOVÉHO TYPU AKO POTENCIÁLNYCH ALZHEIMEROVÝCH LIEČIV

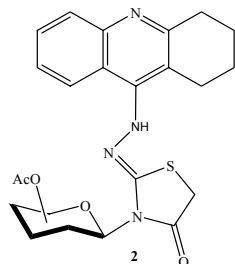
L. Drajna, J. Imrich, S. Hamul'aková, P. Kristian

*Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice, ladislav.drajna@gmail.com*

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 tiosemikarbazidový linker a cez tiazolidínový skelet. Za sacharidové prekursorzy sme zvolili glykozyliizotiokyanáty,<sup>1</sup> ktoré sa získali konverziou peracetylovaných sacharidov s trimetylsilyliizotiokyanátom za prítomnosti SnCl<sub>4</sub>. Príslušné tiosemikarbazidy **1** sa syntetizovali reakciou tetra-*O*-acetyl-β-glykozyl izotiokyanátov s 9-hydrazino-1,2,3,4-tetrahydroakridínom.<sup>2</sup> Adično-cyklizačná reakcia tiosemikarbazidov **1** s metylbromacetátom, bromacetyl bromidom, bromacetonitrilom a dimetylacetyléndikarboxylátom viedla ku vzniku nových 5-článkových glykozyltiazolidínov takrínového typu. Popisuje sa mechanizmus týchto reakcií.



Glykozyltiosemikarbazid takrinového typu 1



Glykozyl 1',3'-tiazolidín-4'-ón 2

- [1] Al-Masoudi N., Hassan N.A., Al-Soud Y.A., Schmidt P., Gaafar A., El-Din M., Weng M., Marino S., Schoch A., Amer A., Joachims J.C.: *J. Chem. Soc. Perkin Trans.1*, (1998) 947-953.
- [2] Elsingerhorst P.W., Tanarro C.M.G., Guetschow M.: *J. Med. Chem.* **2006**, 49, 7540-7544.

### 3Po64 VIMOBILIZOVANÉ KATALYZÁTORY PRO HYDROKYANACE

Richard Ševčík, Pavel Pazdera

*Centrum pro syntézu za udržitelných podmínek a jejich management, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kamenice 5, 625 00 Brno, Česká republika, email: sevcik@chemi.muni.cz, pazdera@chemi.muni.cz*

Sloučeniny obsahující nitrilovou skupinu jsou důležitými surovinami pro chemický a farmaceutický průmysl. Pro jejich výrobu se používá několik postupů, přičemž reakce využívající přímé adice kyanovodíku na násobnou vazbu patří mezi nejvíce využívané. Takové reakce probíhají za relativně mírných podmínek a s vysokým výtěžkem, vyžadují však katalýzu komplexů přechodných kovů s fosforovými ligandy. Nejčastěji jde o sloučeniny obecného vzorce  $Ni[P(OR)_3]_4$  ( $R = \text{aryl}$ )<sup>1</sup>, přičemž volbou ligandu můžeme silně ovlivnit nejen samotný výtěžek, ale i čistotu vznikajícího produktu nebo reakční dobu. Homogenní katalýza však sebou přináší několik problémů, např. separace katalyzátoru z reakční směsi, jeho postupná degradace, nutnost přidavku dalších látek do reakční směsi (volný ligand, Lewisova kyselina), a proto se neustále hledají nové způsoby, jak uvedené nevýhody eliminovat. Vzhledem k mechanismu hydrokyanačních reakcí<sup>2,3</sup> může být

jedním z vhodných přístupů přechod ke katalýze heterogenní za použití imobilizovaných katalyzátorů. Výběrem vhodného polymerního nosiče a postupnou modifikací jeho funkčních skupin lze na jeho skeletu vybudovat vhodné linkery, na jejichž konce lze ukotvit vybraná funkční centra, např. fosfitové ligandy. Při vhodném prostorovém uspořádání ukotvených ligandů, pak můžeme na polymerní skelet navázat ionty přechodných kovů, které mohou být základem imobilizovaného komplexu – heterogenního katalyzátoru pro hydrokyanační reakce.

- [1] Vahrenkamp H., Dahl L. F.: *Angew. Chem. Int. Edn.* 8, 144 (1969).
- [2] Seidel W. C., Tolman C. A.: *Annals New York Academy of Sciences* 415, 201 (1983).
- [3] Tolman C. A., Seidel W. C., Druliner J. D., Domaille P. J.: *Organometallics* 3, 33 (1984).

### 3Po65 VLIV OXIDU WOLFRAMOVÉHO A MOLYBDENOVÉHO NA ODOLNOST PVC VŮČI POVĚTRNOSTNÍMU STÁRNUTÍ

Zdeňka Kovářová, Jiří Domlátil, Štěpán Huber, Libor Mastný

*Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6*

V současné každodenní praxi se setkáváme s profily PVC, které jsou vystaveny běžným povětrnostním podmínkám. Aditiva, která společně s makromolekulami PVC tvoří plastový výrobek, mohou do značné míry ovlivnit jeho stabilitu, a to jak po stránce uživatelských vlastností, tak po stránce chemické struktury polymerní matrice. V tomto příspěvku se autoři zabývají vlivem oxidů wolframového a molybdenového na rychlost povětrnostního stárnutí plastu a srovnávají je s vlivem běžně používaného aditiva, oxidu titaničitého.

V práci byly testovány kalandrované fólie PVC tloušťky 0,8 mm s příměsí těchto oxidů v hmotnostním poměru k polymeru 2:100. Fólie byly vystaveny umělému povětrnostnímu stárnutí v přístroji Q-Sun. Míra ovlivnění stability umělým povětrnostním stárnutím byla stanovena tepelnou degradací plastu, a to jednak měřením změny barevnosti plastu a jednak měřením dehydrochloračních křivek [1].

Ačkoli materiál v průběhu povětrnostního stárnutí navenek nevykazuje výraznější změny, které jsou navíc maskovány barevností přidaného oxidu, tepelná stabilita polymeru je do značné míry ovlivněna působením prostředí v kombinaci s vlastnostmi použitého oxidu. Ukazuje se, že jak přítomnost  $TiO_2$ , tak  $WO_3$  negativně ovlivňují stabilitu matrice, nejspíše vlivem vlastní fotoaktivity [2]. Oxid molybdenový naopak pravděpodobně polymerní matici stabilizuje.

*Tato práce byla řešena jako součást výzkumného záměru MSM 6046137302*

„Příprava a výzkum funkčních materiálů a materiálových technologií s využitím mikro- a nanoskopických metod“.

[1] ČSN 64052 (1981)

[2] Domlátil J., Brožek V., *Chem. Listy* **100** 624, 2006

### 3Po66

#### POUŽITÍ METHYLESTERU ŘEPKOVÉHO OLEJE VE SMĚSÍCH PVC

R. Kalousková<sup>1</sup>, M. Pešek<sup>1</sup>, R. Slavětínská<sup>2</sup>, L. Mastný<sup>2</sup>, M. Marek<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav polymerů, VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha 6, tel. 00420220444048, e-mail:

[Radka.Kalouskova@vscht.cz](mailto:Radka.Kalouskova@vscht.cz)

<sup>2</sup>Ústav anorganické chemie, VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha 6, tel. 00420220444273, e-mail:

[Libor.Mastny@vscht.cz](mailto:Libor.Mastny@vscht.cz)

Methylester řepkového oleje tvoří základní složku bionafty. Jeho masová výroba, vlastnosti, cena přímo vyzývají k aplikaci v plastikařském průmyslu, kde se rostlinné oleje, resp. jejich epoxidované modifikace s úspěchem používají. Příspěvek se zabývá možností částečné alternace změkčovadla na bázi esteru cyklohexandikarboxylové kyseliny methylesterem řepkového oleje, popř. jeho hydrogenované formy ve směsích PVC. Směsi byly hodnoceny z hlediska tepelné stability a odolnosti stárnutí. Míra stárnutí byla vyjádřena změnou mechanických a termických vlastností a změnou barvy směsí.

Nahrazení poloviny komerčního změkčovadla esterem řepkového oleje nezhoršilo mechanické vlastnosti a tepelnou a světelnou stabilitu PVC směsí. Lepších výsledků bylo dosaženo použitím hydrogenovaného produktu.

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

### 3Po67

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

O. Novotný<sup>1</sup>, L. Mastný<sup>1</sup>, M. Plešková<sup>1</sup>, R. Kalousková<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav anorganické chemie, VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha 6, tel. 00420220444273,

e-mail: [Libor.Mastny@vscht.cz](mailto:Libor.Mastny@vscht.cz)

<sup>2</sup>Ústav polymerů, VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha 6, tel. 00420220444048,

e-mail: [Radka.Kalouskova@vscht.cz](mailto:Radka.Kalouskova@vscht.cz)

TiO<sub>2</sub> jako nejpoužívanější pigment pro PVC výrazně ovlivňuje jeho vlastnosti. Kromě toho, že jej vybarvuje, ovlivňuje také jeho mechanické chování. Obě používané krystalické modifikace oxidu

titaničitého (rutil a anatas) mají také odlišný vliv na fotooxidaci a fotodegradaci polymeru. Rutilový typ je méně aktivní, zatímco anatas způsobuje jeho významnější degradaci [1].

V této studii je posuzován vliv TiO<sub>2</sub> na světelnou a tepelnou stabilitu PVC. Ke zkoumání byl použit anatasový typ TiO<sub>2</sub>, povrchově upravený různými organickými látkami. Pro srovnání byl použit odpovídající s povrchově neupravený anatas. Vzorky ve formě fólií byly vystaveny statickému tepelnému namáhání a byly měřeny změny jejich optických parametrů oproti hodnotám naměřeným před expozicí teple. Vzorky ve formě mikrofolií byly vystaveny umělému povětrnostnímu stárnutí a byly měřeny změny jejich optických parametrů oproti hodnotám naměřeným před expozicí. Hodnota tepelná stability TS, resp. zbytkové tepelné stability TS<sub>z</sub> a rychlost uvolňování HCl z mikrofolií, byla taktéž stanovena u vzorků před a po expozici umělému povětrnostnímu stárnutí.

Pigment TiO<sub>2</sub> anatasového typu výrazně ovlivňuje vzhled PVC při zpracování i při následné expozici světlu a/nebo teple, a to i při relativně nízké koncentraci v polymeru. Pro tepelnou ale zvláště světelnou stabilitu PVC je také velmi důležitá použitá organická povrchová úprava testované titanové běloby zejména z hlediska hloubky průniku paprsků světla do stabilizovaných mikrofolií PVC.

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

[1] SKOWRONSKI, T.A. & RABEK, J.F. & RÁNBY, B.: “The Role of Commercial Pigments in the Photodegradation of Poly(Vinyl Chloride) (PVC)”, *Polym. Degrad. Stab.* **8**, 37-53, 1984

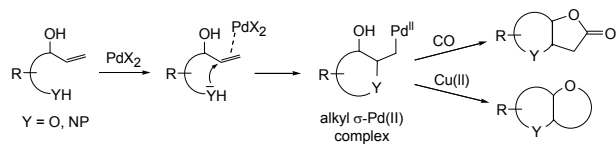
### 3Po68

#### DOMINO REACTION: PALLADIUM(II)-CATALYSED CYCLISATION OF UNSATURATED POLYOLS AND CROSS-COUPPLING

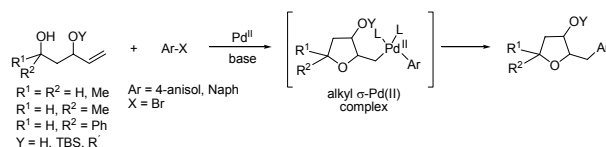
Jana Doháňořová, Lucia Hlavínová, Angelika Lásiková, Tibor Gracza

*Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava, Slovakia*

Palladium(II)-catalysed reactions of unsaturated polyols such as oxycarbonylations [1] or bicyclisations [2] are powerful stereoselective methods for the preparation of heterocyclic structures contained in many natural or biologically interesting compounds. The key intermediate of these transformations is an alkyl σ-Pd(II) complex.



The aim of this study includes stereoselective trapping of alkyl  $\sigma$ -Pd(II) complex by aryl halides in chain extension with a view to study the influence of potential complexation of free  $\alpha$ -hydroxygroup with palladium(II) to diastereoselectivities. The need for the protection of free hydroxyl groups will be discussed.



These domino reactions would present an interesting strategy for stereoselective implementation of side chain into saturated heterocyclic skeletons.

*This work was supported by Slovak Grant Agencies (VEGA, Slovak Academy of Sciences and Ministry of Education, Bratislava, project No. 1/0236/09, and APVV Bratislava project No. APVV-20-000305).*

- [1] (a) Kapitán, P.; Gracza, T. *Arkivoc* **2008**, viii, 8.  
 (b) Kapitán, P.; Gracza, T. *Tetrahedron: Asymetry* **2008**, 38.  
 [2] (a) Szolcsányi, P.; Gracza, T. *Chem. Commun.* **2005**, 3948. (b) Babjak, M.; Remeň, L.; Szolcsányi, P.; Zálupský, P.; Mikláš, M.; Gracza, T. *J. Organomet. Chem.* **2006**, 928.

### 3Po69 MODULAR FUNCTIONAL INTEGRATION OF A TWO-INPUT INH LOGIC GATE WITH A FLUOROPHORE-SPACER-RECEPTOR<sub>1</sub>- CER-RECEPTOR<sub>2</sub> CONJUGATE<sup>1</sup>

Marek Klučiar<sup>1</sup>, Rita Ferreira<sup>2</sup>, Baltazar de Castro and Uwe Pischel<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Organometallic Synthesis Laboratory, Faculty of Chemistry, University of Warsaw, Żwirki i Wigury 101, 02-089 Warsaw, Poland*

<sup>2</sup>*Department of Chemical Engineering, Physical Chemistry, and Organic Chemistry, Faculty of Experimental Sciences, University of Huelva, Campus de El Carmen s/n, E-21071 Huelva, Spain*

The implementation of logic principles at the molecular level is an interesting strategy toward nanoscale computing, based on the bottom-up

approach. Therefore, the realization of molecular devices with the capability of mimicking logic gates has attracted considerable interest in recent years.<sup>2</sup> Novel fluorophore-spacer-receptor<sub>1</sub>-spacer-receptor<sub>2</sub> conjugate was used for the modular functional integration of two input INH molecular logic. The conjugate, containing 1,8-naphthalimide as electron-accepting photoactive unit and amino and urea receptors for protons and anions, respectively, shows *ideal* PET behavior. Protonation of the amino group leads to drastic fluorescence enhancement, due to the blocking of PET. On the other hand, anions bind to the urea receptor, as demonstrated by the resulting fluorescence quenching by PET. The modular architecture composed of fluorophore, YES and NOT receptor, and insulating spacers is expected to be adaptable to a variety of photoactive signaling units and opens interesting perspectives for the tailored implementation of INH logic with a wide range of spectral output signals.

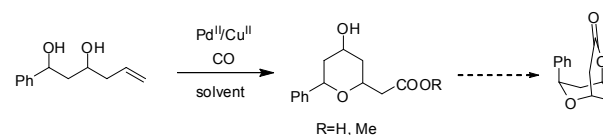
- [1] Marek Klučiar, Rita Ferreira, Baltazar de Castro and Uwe Pischel, *J. Org. Chem.*, **2008**, 73 (16), 6079–6085  
 [2] Pischel, U. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2007**, 46, 4026–4040.

### 3Po70 PALLADIUM(II)- CATALYSED OXYCARBONYLATION OF ALKENE- $\beta,\delta$ - DIOLS

Oľga Karlubíková, Tibor Gracza

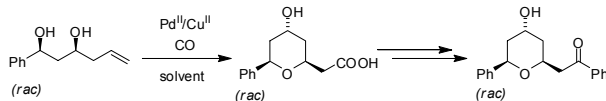
*Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava, Slovakia*

Stereocontrolled Pd(II)-catalysed oxycarbonylations of alkene- $\beta,\delta$ -diols were studied as a complement to our previous work showing that unsaturated polyols can be transformed in oxycarbonylation conditions to bicyclic lactones [1], [2], [3].



Impact of protecting group and stereochemistry of the substrate on the stereochemical course of this reaction was explored.

This transformation was applied in the synthesis of natural product diospongin.



### 3Po72

## THERMAL AND MECHANICAL PROPERTIES OF METALLOCENE POLYPROPYLENE FIBRES

A. Marcinčin, M. Hricová, K. Marcinčin, A. Hoferiková

*Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Department of Fibres and Textile Chemistry, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, SK*

The paper deals with the rheological properties of polymer melt, spinning and selected properties of PP fibres, such as mechanical and thermal properties. Two kinds of the selected equivalents of commercial miPP and conventional-based zniPP were spun at the same spinning conditions within the spinning temperatures 190-290°C. The fibres were drawn at 120°C and annealed under tension at 100°C. The mechanical and thermal properties of fibres were evaluated. Experimental results reveal, that mechanical properties of miPP fibres depend mainly on molecular weight of polymer and orientation of fibres and less on spinning and drawing temperatures.

The DSC measurements were carried out using conventional method (CM) and constant length method (CLM) at which the constant length of fibres during measurement was assured. The average orientation of fibres has been evaluated by method of sonic velocity. The parameters of the thermal properties and supermolecular structure of fibres were correlated with the basic mechanical properties of fibres.

*The research was supported by grant APVV 0226-06 and VEGA project 1/4456/07*

- [1] Bhat G.S., Nanjundappa R., Kotra R.: *Thermochimica Acta* **392-393**, 323-328 (2002)  
 [2] E.B. Bond, J.E. Spruiell: *Appl. Polym. Sci.* **82**, 3237-3247, (2001)

- [1] Gracza T., Hasenöhrl T., Stahl U., Jäger V. *Synthesis* **1991**, 1108.  
 [2] Jäger V., Gracza T., Dubois E., Hasenöhrl T., Hümmer W., Kautz U., Kirschbaum B., Lieberknecht A., Remen L., Stahl U., Stephan O. *OSM* **5**, Springer Verlag, Heidelberg, G. Helmchen, J. Dibo, D. Flubacher, B. Wiese (Eds.), **1997**, 331-360.  
 [3] Babjak M., Zálupský P., Gracza T. *ARKIVOC* **2005**, (v), 45-57.

### 3Po71

## SOLID PHASE GRAFTING OF IPP POWDER WITH METHACRYLATES

Agnesa Fiedlerová, Štefan Chmela, Ivica Janigová, Igor Novák, Eberhard Borsig

*Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovakia, E-mail: Agnesa.Fiedlerova@savba.sk*

The usual procedure for solid phase grafting consists of a mixture of powdered iPP containing an adsorbed mixture of peroxide and monomer in amorphous part of iPP particles, where the main reaction of grafting is realized. This represents a heterogeneous material, in which heat transfer is realized slowly. Therefore, in this study we have used water as a heat transfer medium. The main aim of this study is to check the possible role of water as heat transfer medium, to investigate the influence of alkyl chain in the ester group of the series of methacrylic monomers on the efficiency of iPP chain grafting and also on the hydrophilicity of the grafted iPP.

The samples of grafted iPP with MA monomers at constant concentration of peroxide  $1.39 \times 10^{-2}$  mol TBPPI/100 g iPP in water medium were prepared. Methyl- (MMA), ethyl- (EMA), butyl- (BMA), ethyl hexyl- (EHMA), and dodecyl (DMA) methacrylate were used as comonomers. Amount of methacrylate grafted onto iPP was determined by FTIR spectroscopy. DSC measurements were done and the surface energy of grafted iPP copolymer was also determined.

*The authors thank Grant Agency VEGA for financial support through Grant 2/0082/08.*

**3Po73****PRODUCTION OF CELLOBIONIC ACID BY A *BACILLUS* STRAIN ISOLATED FROM CLOUD WATER**

Slavomíra Husárová<sup>1,2</sup>, Mickael Vařtilingom<sup>1</sup>, Martine Sancelme<sup>1</sup>, Mária Matulová<sup>2</sup>, Anne-Marie Delort<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire Synthèse Et Etude de Systèmes à Intérêt Biologique, UMR 6504 CNRS-Université Blaise Pascal, Clermont Université, F-63 177 Aubière Cedex, France

<sup>2</sup>Institute of Chemistry, Center for Glycomics, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK-845 38 Bratislava, Slovakia  
Maria.Matulova@savba.sk

Recent research has shown that microorganisms including bacteria, yeast and fungi are present in atmospheric waters. Our group has collected cloud water samples at the Puy de Dôme summit (France, 1465 m) and found that the concentration of bacteria reached  $8.1 \times 10^4$  cell mL<sup>-1</sup> [1,2]; most of them are metabolically active although less than 1 % is cultivable. Amato et al. [1,3] observed a diversified cultivated population in these cloud water samples distributed among various phyla or sub-phyla (*Alpha*-, *Beta*- and *Gamma-Proteobacteria*, *Bacteroides*, *Actinobacteria* and *Firmicutes*), and belonging mainly to the genera *Pseudomonas*, *Sphingomonas*, *Staphylococcus*, *Streptomyces* and *Arthrobacter*. They also found an important diversity among the fungal (*Cladosporium* and *Trametes*) and yeast (*Cryptococcus*) communities. Some microbial isolates present high genetic similarities with strains isolated from cold regions, aquatic environments, soil and vegetation. Our goal is to study the role of these microorganisms in atmospheric chemistry as biocatalysts able to degrade organic compounds present in cloud water [4]. Among these bacteria, the metabolism of the strain *Bacillus* sp 3B6 was studied in more details. We present here the NMR study of various saccharide metabolism, and more specifically the evidence of the production of cellobionic acid when *Bacillus* sp 3B6 was incubated with cellobiose.

*This work is supported by the joint French-Slovak program Stefanik SK-FR-009-07, APVV-0650-07, the Slovak State Program Project No. 2003SP200280203. Slavomíra Husárová has been awarded by French Government Fellowship for doctoral studies.*

- [1] Amato, P.; Ménager, M.; Sancelme, M.; Laj, P.; Mailhot, G.; Delort, A.-M. *Atmosph. Environ.* **2005**, *39*, 4143-4153.  
[2] Amato, P.; Parazols, M.; Sancelme, M.; Laj, P.; Mailhot, G.; Delort, A.-M. *Atmosph. Environ.* **2007**, *41*, 8253-8263.  
[3] Amato, P.; Parazols, M.; Sancelme, M.; Laj, P.; Mailhot, G.; Delort, A.-M. *FEMS Microbiol. Ecology* **2007**, *59*, 242-254.

- [4] Amato, P.; Demeé, F.; Melaoui, A.; Martin-Biesse, A.-S.; Sancelme, M.; Laj, P.; Delort, A.-M. *Atmosph. Chem. Phys.* **2007**, *7*, 4159-4169.

**3Po74****CRYSTAL AND MOLECULAR STRUCTURE OF TWO PARENT BENZIMIDAZOLE COMPOUNDS**

Ján Lokaj<sup>a</sup>, Viktor Kettmann<sup>b</sup>, Viktor Milata<sup>a</sup>, Tomáš Solčan<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Faculty Of Food And Chemical Technology, Slovak University Of Technology, Bratislava

<sup>b</sup> Faculty Of Pharmacy, Comenius University, Bratislava

Benzimidazole compounds are known to possess a variety of biological properties, the anti-cancer activity being one of the most important<sup>1</sup>. It was shown that (a) introduction of small substituent to the benzo-ring of 1H-benzimidazoles has a profound effect on cytotoxic activity<sup>2</sup> and (b) the activity is related to intercalative interaction of the drug molecule with the nuclear DNA or DNA-topoisomerase binary complex<sup>2</sup>. It is, however, unclear whether the influence of the substituents reflects their effect on the charge distribution of the heterocyclic (and hence the intercalative energy) or results from interaction of the substituents with additional DNA or enzyme functionalities. We prepared series of substituted 1-methylbenzimidazoles and determined their molecular and electronic structures by various techniques.

The purpose of this work was to compare molecular dimensions of two new compounds, 5-amino-1-methyl-1H benzimidazole(I) and 1-Methyl-6-nitro-1H benzimidazole (II) with those of unsubstituted 1-methyl benzimidazole. The Cambridge Structural Database(CSD) was used to search for compounds possessing the benzimidazole nucleus and just 1-substituent with methylene group in the  $\alpha$ -position was found; 42 such compounds[ hereafter(III)] were found. The comparison have shown that the corresponding bond lengths in benzimidazole heterocycle in (I) and in the molecules of (III) are significantly different but that of (II) and (III) are equal. This implies that the large difference in cytotoxic activities between (II) and (III) lies the interaction of the 6-substituent with additional DNA intercalation component or enzyme amino acid residues which surrounds the intercalation site<sup>3</sup>. As for the compound (I) the amino group is conjugated with the benzimidazole ring and thus the intercalation energy makes an important contribution to the overall drug-DNA binding energy and hence the enhanced cytotoxic activity of (I) relative to (III)<sup>3</sup>.

- [1] Nguen, D.M., Schrupp, W.D., Chen, G.A., Tsal, W., Nguen, P., Trepel, J.B. & Schrupp, D.S. (2004). *Clin. Cancer Res.* **10**, 1813-1825

[2] Statkova-Abeghe, S., Ivanova, I., Daskalova, S. & Dzhambazov, B. (2005). *Med. Chem. Res.* **14**, 429-439

[3] Kettmann, V., Košťálová, D. & Hóltje, H.-D. (2004) *J. Comput. Aided Mol. Des.* **18**, 785-797

### 3Po75

#### VPLYV MONTMORILONITU NA MORFOLOGIU A ŠTRUKTÚRU KOMPOZITNÝCH VLÁKIEN

Alena Hoferíková<sup>1</sup>, Anton Marcinčin<sup>1</sup>, Andrej Rusnák<sup>2</sup>, Marcela Hricová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav polymérnych materiálov, Oddelenie vlákien a textilu, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

<sup>2</sup>Slovenská akadémia vied, Ústav molekulárnej fyziológie a genetiky, Vlárská 5, 833 34 Bratislava

Polymérne nanokompozity vyvolávajú veľkú pozornosť výskumníkov a to z akademického i priemyselného hľadiska. Organicky modifikované íly sú efektívne tuhé plniva pre polypropylénové (PP) kompozity a kompozitné vlákna. Niektoré vlastnosti polymérov možno výrazne zlepšiť vrstvenými silikátmi pri už relatívne nízkych koncentráciách. Organoíly rozdispergované v polypropylénovej matici majú výrazný vplyv na štruktúru kompozitu. Plnené nanokompozity z hľadiska morfológie a mikroštruktúry nanokompozitov je možné rozdeliť do dvoch skupín interkalované a exfoliované.

Práca sa zaoberá štúdiom prípravy, štruktúry a vlastností PP/montmorilonit (MMT) kompozitných vlákien. Použili sa dva typy komerčných plnív na báze MMT (Cloisite 15A a Cloisite 30B) a kompatibilizátory zo skupiny modifikovaných polyglykolov a polysiloxanov. Študovala sa nerovnomernosť a štruktúra PP/MMT kompozitných vlákien s použitím mikroskopických metód, metód WAXS, SAXS a TEM v závislosti od koncentrácie plniva a kompatibilizátora. Parametre štruktúry sa korelovali s mechanickými vlastnosťami PP kompozitných vlákien.

Táto práca vznikla s podporou grantu MŠ SR VEGA (projekt č. 1/4456/07).

### 3Po76

#### VFUNCTIONALIZED BIS(TREN) CRYPTANDS

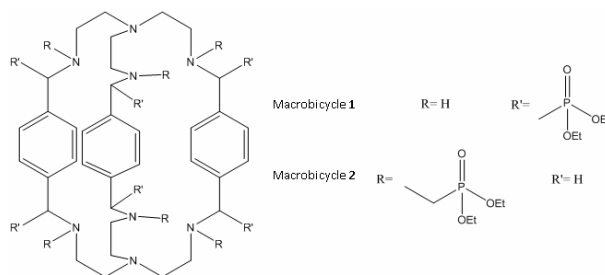
Monika Szymczyk<sup>1</sup>, Piotr Mlynarz<sup>1</sup>, Paweł Kafarski<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute of Bioorganic Chemistry, Wrocław University of Technology, Wybrzeże Wyspiańskiego 27 50-370 Wrocław, Poland

Macrocyclic compounds, being host molecules, are commonly used in supramolecular chemistry. Their particular ability to mimic numerous reactions and interactions, which take place in the nature, draw attention of many research groups. The group of

polyamine macrocycles found large application in coordination chemistry of inorganic/organic ions [1.]. Thus, due to the nature of macrocycles, current research focus on the synthesis of specific macrocyclic systems, which mimic activity of enzymes or can be applied as efficient contrast agents. Building such models allow to investigate enzymatic mechanisms in the simplified manner and synthesize compounds being useful in MRI spectroscopy.

In this work, the endeavour is devoted to attain aminophosphonic molecular spindles **1** and **2**. Macrobicyclic **1** was synthesized by condensation of tris-(2-aminoethyl)amine with terephthalaldehyde [2.], followed by functionalization with phosphonic groups [3.]. Alternatively, the product of condensation, Schiff base macrobicyclic, was reduced with NaBH<sub>4</sub> to amine cryptand [2.]. Then, in order to obtain compound **2**, the amine macrobicyclic was subjected to the reaction of secondary amine groups with diethyl vinylphosphonate [4.].



[1] M. Schroder *et al.*, *Coord. Chem. Rev.*, **250** (2006) 2987

[2] D. Chen, A. E. Martell, *Tetrahedron*, **34** (1991) 6895

[3] R. Tyka, *Tetrahedron Letters*, **9** (1970) 677.

[4] E. V. Matveeva, P. V. Petrovskii, I. L. Oudinets, *Tetrahedron Letters*, **49** (2008) 6129.

### 3Po77

#### CHIRÁLNÍ LIGANDY TYPU TERPEN-IMIDAZOL: SYNTÉZA A VLASTNOSTI

Miroslav Ludwig, Jiří Kulhánek, Filip Bureš

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 537, Pardubice, 53210

Přírodní monoterpeny a jejich využití pro přípravu chirálních heteroaromatických sloučenin přitahují pozornost syntetických chemiků již řadu let. Zatímco anelace terpenových kruhů s šestičlennými (hetero)aromáty již byla ověřena, připojení terpenového zbytku k pětičlenným heterocyklům typu diazol zůstává neprozkoumanou oblastí. Terpeny, především (1R)-(+)-kafr, (1S)-(-)-β-pinen či (1S,2S,3S,5R)-(+)-isopinocampheol jsou levné a dostupné chirální prekurzory a lze je využít v syntéze 1,3-diazolů – imidazolů.



Diketon- a monoxim-deriváty terpenů lze cyklizovat s aldehydy resp. alifatickými aminy na opticky aktivní deriváty imidazolu. Bylo syntetizováno celkem 11 nových derivátů imidazolu, které byly plně charakterizovány spektrálními metodami a dále byly tyto sloučeniny aplikovány jako opticky aktivní ligandy v asymetrické verzi Henryho reakce. Rovněž byl diskutován mechanismus kondezační reakce.

*Tento výzkum byl podpořen Grantovou agenturou České republiky (203/07/P013) a Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (MSM 0021627501).*

[1] Kulhánek, J.; Bureš, F.; Šimon, P.; Schweizer, W. B. *Tetrahedron: Asymmetry* **2008**, *19*, 2462-2469.

### 3Po78

#### UTILIZATION OF FLUORESCENCE MARKED REGULATOR IN NITROXIDE MEDIATED POLYMERIZATION

Ludmila Hřčková, Štefan Chmela, Jozef Kollár

*Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovakia, Ludmila.Hrckova@savba.sk*

In this work we prepared polystyrenes by NMP using combined molar mass regulators containing besides

alkoxyamine part the structure of fluorescence mark. Stable nitroxyl radical represented 2,2,6,6-tetramethylpiperidine-N-oxyl and covalently bonded fluorescence mark was 1,8-naphthylimid. Concentration of marked polystyrene chain ends in polymers was measured directly by UV-absorption or emission spectroscopy. Theoretical molar masses of polystyrenes were calculated from these concentrations on the assumption that all polystyrene chains are terminated by alkoxyamine dormant end-functionality bearing fluorescence probe. Comparisons of these data with the molar masses from GPC gave us the range of the marked active polymer chain ends. Fractions of active polymer chain ends depended on the conversion. With increased conversion the fraction of alkoxyamines was decreased. From this follows that the „livingness“ of polymerization process was decreased with the increasing of conversion. It should result in the increase of polydispersity. Despite this polydispersity was the same for all conversions and reached value ca. 1.3.

*Acknowledgement, the authors thank Grant Agency VEGA for financial support through grant 2/0082/08 and through APVV project 0562-07.*

## POSTERY - SEKCIA 4: VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE

### 4Po01

#### INOVACE LABORATORNÍCH ÚLOH Z KAPALINOVÉ A PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE NA PEDAGOGICKÉ FAKULTĚ UHK

Aleš Imramovský<sup>1,2</sup>, Jana Dostálová<sup>1</sup>, Martin Zdráhal<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Pedagogická fakulta Univerzity Hradec Králové, Rokitsanského 62, Hradec Králové, Česká Republika*

<sup>2</sup>*Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs legií 565, Pardubice, Česká Republika*

Laboratorní úlohy z vysokoučinné kapalinové chromatografie a plynové chromatografie jsou vyučovány na Katedře chemie, Pedagogické fakulty Univerzity Hradec Králové v magisterských studijních oborech v předmětech Laboratorní cvičení z fyzikálně chemických metod a Speciální analytické metody.

Pro plynovou chromatografii je k dispozici sestava PerkinElmer (PE) AutoSystem XL Gas Chromatograph (manuální nástřik vzorku, voltametrický detektor, řídicí jednotka se softwarem TotalChrom). Pro vysokoučinnou kapalinovou chromatografii je k dispozici Sestava HPLC Perkin-Elmer 200 series (DAD detektor, řídicí jednotka DELL se softwarem

TotalChrom). Tato sestava byla v dubnu 2009 doplněna autosamplerem vzorku taktéž PE.

Laboratorní úlohy musí přinést studentům v požadovaném časovém rozsahu dostatečné znalosti o praktickém využití a o možnostech zmíněných analytických metod. Jsou proto připravovány analytické metody, které posluchačům lehece stravitelnou formou, přinesou přehled o obsahu účinných látek v některých kombinovaných farmaceutických přípravcích ze skupiny tzv. analgetik široké spotřeby.<sup>1,2</sup>

Studenti získají také základní přehled o možnostech ovlivnění průběhu analýzy změnou mobilní fáze eventuálně změnou jejího průtoku. Vyhodnocení průběhu analýzy bude provedeno s využitím softwaru TotalChrom.

*Práce byla řešena za finanční podpory FRVŠ 845/2009 F6 a MŠMT ČR MSM 002 162 7501.*

[1] Perkin-Elmer Educational Consumable Kit – Manual Crimper 1998.

[2] Šatinský, D. et. al. *J. Sep. Sci.* **2004**, *27*, 529-536

**4Po02****TERMICKÁ ANALÝZA VE VÝUCE ANORGANICKÉ A MATERIÁLOVÉ CHEMIE**

Jan Chyba, Petr Ostržížek, Jiří Pinkas\*

*Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno  
jpinkas@chemi.muni.cz*

Termická analýza patří k základním metodám sledování fyzikálních a chemických změn látek v závislosti na teplotě. U analyzovaných systémů lze sledovat procesy dehydratace, tepelného rozkladu, oxidačně-redukční reakce, fázové přeměny a pod. Pro přiblížení problematiky této instrumentální metody studentům byly vypracovány nové úlohy pro základní a pokročilá laboratorní cvičení z anorganické a materiálové chemie obsažené v bakalářském a magisterském studijním programu Chemie na Přírodovědecké fakultě Masarykovy univerzity v Brně.

Pro laboratorní úlohy byly vybrány chemické sloučeniny, které vhodně dokumentují možnosti a metody termické analýzy pro studium různých typů chemických látek a materiálů. Na základě získaných poznatků budou studenti schopni navrhnout potenciální použití této instrumentální metody u dalších konkrétních systémů.

Experimentální odzkoušení připravených úloh bylo realizováno s využitím přístroje Netzsch STA 449C

Jupiter. Na tomto přístroji je možno provádět vedle termogravimetrie (TG) také diferenční skenovací kalorimetrii (DSC) a diferenční termickou analýzu (DTA). Vzorky lze zahřívat do 1200 °C ve vzduchu nebo do 1300 °C v dusíkové atmosféře. Propojení přístroje STA449C s infračerveným spektrometrem Bruker Tensor T27 navíc umožňuje následnou analýzu plynných produktů vznikajících v průběhu zahřívání vzorku.

Zpracované detailní návody k úlohám pro studenty a instrukce k použití přístrojů jsou dostupné v elektronické podobě vystavené v Informačním systému MU.

*Tato práce vznikla za podpory grantu FRVŠ G6/328/2009*

- [1] Oettinger, W. J.; Kattner, U. R.; Moon, K.-W.; Perepezko, J. H. (2006): DTA and Heat-flux measurements of Alloy Melting and Freezing, NIST, Washington D.C.
- [2] Blažek, A. (1972): Termická analýza. SNTL, Praha.
- [3] Šesták, J. (1982): Měření termofyzikálních vlastností pevných látek: Teoretická termická analýza, 1. vydání, Academia, Praha.

## POSTERY - SEKCIA 5: POTRAVINÁRSTVO, ŽIVOTNÉ PROSTREDIE A BIOTECHNOLÓGIA

**5Po01****APLIKACE MIKROEXTRAKČNÍ METODY MEPS PRO ANALÝZU VITAMINU C V NÁPOJÍCH**

Veronika Mlejová, Martin Adam\*, Petra Pavlíková, Petr Dobiáš, Karel Ventura

*Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika  
\* e-mail: Martin.Adam@upce.cz*

Kyselina L-askorbová (vitamin C) byla poprvé izolována v roce 1928 maďarským biochemikem, laureátem Nobelovy ceny za fyziologii a lékařství z roku 1937, Albertem Szent-Györgyim. Sir Walter Norman Haworth z Birminghamské univerzity, držitel Nobelovy ceny za chemii z roku 1937, dokázal poté jako první popsat přesnou chemickou strukturu vitamínu C a vyrobit jej syntetickou cestou.

Většina živých organismů není schopna si tento vitamin sama syntetizovat, proto je přijímán v potravě. V přírodě se vyskytuje především v ovoci a zelenině, které slouží také jako suroviny pro přípravu mnoha

dalších pokrmů a nápojů. V organismu zastává vitamin C mnoho důležitých funkcí (např. při tkáňovém dýchání). Mírný nedostatek se projevuje zvýšenou kazivostí zubů či narušením stavby kostí, vysoký nedostatek poté onemocněním zvaným kurděje.

Moderní extrakční techniky jsou vyvíjeny s ohledem na požadavky současné analytické chemie. Trendem je snižovat spotřebu organických rozpouštědel, časovou i instrumentální náročnost, což jde ruku v ruce se snahou snížit pořizovací i provozní náklady. Mezi tyto metody lze zařadit i techniku MEPS (Microextraction by Packed Sorbent), která je obdobou a miniaturizací dobře známé a hojně používané extrakce tuhou fází (SPE). Využívá tedy všech poznatků a výhod spojených s touto technikou, přičemž použitý sorbent je umístěn přímo ve speciálně upravené jehle mikrostržáčky.

**5Po02****VÝVOJ METODIKY SLEDOVÁNÍ RŮSTOVÝCH KŘIVEK POD VLIVEM IONIZUJÍCÍHO A UV ZÁŘENÍ**

Pavel Bláha, Viliam Múčka, Václav Čuba

*ČVUT v Praze, FJFI, 115 19, Břehová 7, Praha 1*

Růst mikroorganismů je ovlivněn mnoha faktory, například těžkými isotopy [1], teplotou prostředí [2], nebo ionizujícím (případně UV) zářením [2,3]. Práce

se zabývá srovnáváním růstových křivek mikroorganismů (*Saccharomyces cerevisiae*) během jejich kultivace v kapalně živné půdě naočkované kulturou neovlivněnou zářením a kulturou, která byla ozářena různými dávkami. Metodika je založena na měření intenzity rozptýleného infračerveného záření na suspenzi buněk (nefelometrie). K měření byl použit nefelometr firmy Merck Turbiquant 3000 IR pracující s infračerveným paprskem. Kultura byla ozářována ve fyziologickém roztoku gama zářením  $^{60}\text{Co}$  (s dávkovým příkonem  $\dot{D} = 5,7 \text{ Gy}\cdot\text{h}^{-1}$ ) dávkami 0 až 1,8 kGy a UV zářením (s dávkovým příkonem  $\dot{D} = 1,76 \text{ Gy}\cdot\text{s}^{-1}$ ) dávkami 158 a 316 Gy. Účinek záření bylo možné vyhodnotit jako rozdíl směrnice přímkové části růstové křivky v semilogaritmických souřadnicích pro neozářenou a ozářenou kulturu. Bylo potvrzeno, že za daných podmínek má ionizující záření inhibiční účinek na růst mikroorganismů, který je možno detegovat navrženou metodikou. Další výzkum bude soustředěn na ovlivnění nalezeného účinku různými chemickými agens působícími na přítomné radiolytické produkty, zejména vodíkové a hydroxylové radikály a hydratované elektrony.

- [1] Múčka, V., Einhorn, G., Cabicar, J. Der Einfluß des physiologischen Inokulumsalters auf das Wachstum einer mikrobiellen Kultur in  $\text{H}_2\text{O}$  und 50%  $\text{D}_2\text{O}$ . *Zeitschrift für Naturforschung*, 1965, Heft 6, Band 20 b.
- [2] Farhataziz, Rodgers, M. A. J. *Radiation Chemistry: Principles and Applications*. 1. vyd. New York: VCH Publishers, 1987. 641 s. ISBN 0895731274.
- [3] Petin, V. G., Kyu Kim, J. Survival and Recovery of Yeast Cells after Combined Treatment with Ionizing Radiation and Heat. *Radiation Research*, 2004, vol. 161, s. 56-63.

#### 5Po03

### REDUKCE VOLNÉHO FORMALDEHYDU VE FENOLFORMALDEHYDOVÉ PRYSKYŘICI PŘÍDAVKEM KERATINOVÉHO HYDROLYZÁTU

Svatopluk Sukop<sup>1</sup>, Pavel Mokejš<sup>2</sup>, Karel Kolomazník<sup>3</sup>

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, <sup>1</sup>Ústav chemie, <sup>2</sup>Ústav inženýrství polymerů, <sup>3</sup>Ústav automatizace a řídicí techniky, nám. TGM 275, 762 72 Zlín; sukop@ft.utb.cz

V průběhu vytvrzování fenolformaldehydových pryskyřic, kdy vznikají z rozpustných termoplastických rezolů nerozpustné termosetické rezity, dochází k uvolňování značného množství formaldehydu. Část formaldehydu zůstává volná ve hmotě pryskyřice i po vytvrzení a proto je žádoucí jeho obsah snižovat vzhledem k jeho karcinogenním účinkům. Tento problém je zvláště závažný při výrobě dřevovláknitých desek, které nalézají hlavní uplatnění při aplikaci v nábytkářském průmyslu.

Cílem práce bylo sledovat vliv přídatku keratinového hydrolyzátu na obsah volného formaldehydu ve

vytvrzené fenolformaldehydové pryskyřici. Keratinový hydrolyzátní byl připraven modifikovaným redukčním způsobem spočívajícím ve dvojfázovém rozkladu ovčí vlny<sup>1</sup>. Pro toto sledování byla použita komerčně dostupná fenolformaldehydová pryskyřice EBOLIT AB (Chemotex Děčín a.s.). Po nanesení fenolformaldehydové pryskyřice s určitým obsahem keratinového hydrolyzátu (1-5% hmot.) na bukovou dýhu, bylo provedeno vytvrzování při teplotě 125°C po dobu v rozmezí od 20-80 minut. Volný formaldehyd byl stanoven v modifikované fenolformaldehydové pryskyřici provozní lahvovou metodou<sup>2</sup>.

Výsledky experimentu v laboratorních podmínkách prokázaly příznivý vliv přídatku keratinového hydrolyzátu na redukcii volného formaldehydu ve vytvrzené fenolformaldehydové pryskyřici. Pro provozní použití bude nutno provést další experimenty.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM 7088352102.*

[1] Sukop S., et al: ChemZi 1/3, 206 (2007)

[2] ČSN EN 717-3. Formaldehyde release by the flask Metod, ECS 1997.

#### 5Po04

### DYSSYMMETRIZATION OF 1,3- AND 1,4-BIS[(DIETHOXYPHOSPHORYL)HYDROXYMETHYL]BENZENE DI-BUYTL ESTERS BY LIPASES FROM VARIOUS SOURCES

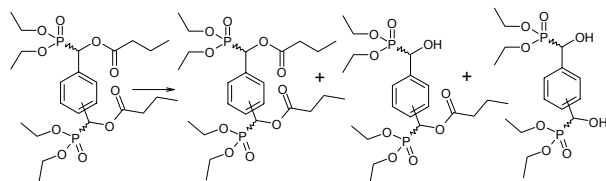
Barbara Malinowska, Barbara Lejczak, Paweł Kafarski  
Politechnika Wroclawska, Wydział Chemiczny, Zakład Chemii Bioorganicznej,  
Wybrzeże Wyspiańskiego 27, Wrocław

Biocatalysis with hydrolytic enzymes such as lipases is a useful tool to resolution of racemic mixture of substrates possessing ester moieties (especially butyl ester chain), giving one enantiomer of hydroxyphosphonate and their ester in opposite configuration. Racemic hydroxyphosphonates may also serve as a substrate of reverse reaction - resulting in esterification of one hydroxyl moiety of selected enantiomer in non-aqua's environment.

Dyssymmetrization of hydroxyphosphonates with two stereogenic centers (four possible enantiomeric forms of compound) is difficult to obtain by chemical methods, but easily to carried out by stereoselective biocatalyzators. Screening reactions allow to select lipases leading to dextrarotatory as well to levorotatory nonsymmetric products.

There were tested lipases from various sources: *Candida cylindracea*, *Candida rugosa*, *Candida antarctica* CLEA, *Pseudomonas cepacia*, *Pseudomonas fluorescens*, *Rhizopus niveus*, *Rhizopus oryzae*, *Rhizopus species*, *Penicillium roqueforti*, *Penicillium camemberti* G, *Aspergillus Niger*, *Mucor javanicus*, *Rhizomucor Mihei*, immobilized enzymes from *Mucor*

circinelloides and *Pseudomonas cepacia* and also enzymes from porcine and pig pancreas as well as commercially available preparates Lipozyme® and Novozyme435®.



Enzymatic hydrolysis of butyryloxphosphonates derivating from bis[(diethoxyphosphoryl)hydroxymethyl]benzene in position 1,4 and 1,3 result in set of active and stereoselective biocatalizators, which may be universal applied to optically active  $\alpha$  – hydroxy-organophosphorus compounds

- [1] Drescher, M., Li Yong-Fu, Hammerschmidt, F., *Tetrahedron*, 1995, 51, 4933  
 [2] Skwarczynski, M., Lejczak, B., Kafarski, P., *Chirality*, 1999, 11, 109  
 [3] Majewska P., Kafarski P., Lejczak B., *Tetrahedron: Asymmetry*; 2006, 17, 2870

### 5Po05

#### WEBOVSKÝ PROHLÍŽEČ FORMÁTU MMCIF

Petr Čech<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze  
 Fakulta chemické technologie, Laboratoř informatiky  
 a chemie*

*Technická 5, 166 28 Praha 6 - Dejvice*

mmView je webová aplikace, která slouží k prohlížení biomakromolekulárních strukturálních dat uložených ve formátu mmCIF (macromolecular Crystallographic Information File) [1]. Aplikace mmView je nástrojem, který prohledává a zpracovává jednotlivé kategorie datového formátu mmCIF a získané informace třídí a zobrazuje uživateli v přehledné podobě. Aplikace je navržena ve vývojovém prostředí frameworku Django [2] a hlavním programovacím nástrojem projektu je interpretovaný, objektově orientovaný jazyk Python [3]. Cílovou skupinou uživatelů aplikace mmView není jen vědecká veřejnost z řad strukturálních a molekulárních biologů, ale aplikace je také velmi vhodná pro výuku principů strukturální biologie. Aplikace mmView je volně dostupná na serveru Sourceforge.net a testovací verze projektu je také zprovozněna online na veřejné adrese <http://ich.vscht.cz/~cechp/mmcif>.

- [1] BOURNE, P.E., et al. The Macromolecular Crystallographic Information File (mmCIF). *Methods in Enzymology*, 1997, 277, 571-590.

- [2] HOLOVATY, A.; KAPLAN-MOSS, J. *The Definitive Guide to Django: Web Development Done Right*. 2007. ISBN 1590597257.

- [3] LUTZ, M. *Learning Python*. 3rd ed. 2008. ISBN 0596513984.

### 5Po06

#### ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD Z VÝROBY VÝBUŠNIN POMOCÍ ADSORPCE

J. Palarčík, A. Nemrahová

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

Práce je zaměřena na čištění odpadních vod z výroby výbušnin, konkrétně nitroglycerinu, pomocí adsorpce. Tyto vody obsahují značné množství organických kontaminantů, převážně nitroesterů, které jsou problematické nejen z hlediska jejich toxicity, ale také pro svou obtížnou biologickou odbouratelnost. Mezi metody jejich odstraňování patří Fentonova oxidace, postupy využívající redukce nitrolátek nulavalentním drobnozrnným železem a samozřejmě také adsorpce. [1, 2]

Experimentálně byly odzkoušeny čtyři druhy adsorbentů (bentonit mletý BA – 03, zeolit ZP – 4A, aktivní uhlí Chezacarb SH a sulfitová buničina) a bylo provedeno stanovení jejich optimálních pracovních podmínek.

Největší účinnost odstranění organických kontaminantů byla nalezena pro zeolit ZP - 4A, jako nejhorší se jeví použití sulfitové buničiny.

*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<sub>2</sub>O<sub>2</sub>*. 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.

**5Po07**  
**THE METHODS OF STUDIES OF**  
**PHOSPHONIC XENOBIOTICS**  
**BIODEGRADATION**

D. Wieczorek, J. Lipok, P. Kafarski

*Departmenta of Chemistry, Opole University, Oleska 48, 45-052 Opole* Among diverse organophosphorus compounds, residues of which are present in various ecosystems, phosphonates possess special meaning. Regarding their broad spectrum of biological activity, capability to chelation of metal cations and stability of direct carbon to phosphorus bond in physiological conditions, organophosphonates are finding many applications. Thus, these substances are commonly used as pesticides, drugs, anticorrosive and anti-scale agents, as well as the additives to surfactants and polymers. Moreover the origin of chemicals of these kind and their structural analogy to extremely dangerous chemical warfare agents (e.g. sarin, VX gases) are the reasons, why their transformations in environment are still actual and interesting subject of scientific research. Nowadays, studies are focused on efforts for finding organisms, mainly among the bacteria and lower fungi, which are capable to biotransform and/or mineralize the phosphonates. Also the studies leading to enrichment of the knowledge about the metabolic pathways responsible for these processes are in the centre of interest.

Earlier studies on biodegradation of phosphonic xenobiotics had based mainly on observation of morphological changes and on dynamics of growth of tested organisms, what allowed to assess the utilization of phosphorus and/or other elements comprised in the structures of tested compounds. Later, using diverse and specific analytical methods, particularly spectrophotometry and chromatography, monitoring of any changes in the quantity of tested compounds has been available. The combination of high performance liquid chromatography (HPLC) or gas chromatography (GC) with mass spectrometry (MS) makes possible the development of contemporary studies on metabolism of phosphonic compounds. The increasing interest in dynamics of phosphonate transformations, especially combined with *in vivo* experiments, was the reason of introduction of some methods, which may provide reliable results of this kind. Regarding this, the nuclear magnetic resonance spectroscopy (NMR) seems to be of choice, particularly when considering *in vivo*  $^{31}\text{P}$  NMR technique. Moreover, current results of studies on fate of phosphonates in biological systems show explicitly, that only interdisciplinary combination of several available analytical methods with those, which are based on molecular biology

techniques, may significantly increase our understanding of metabolism of phosphonic xenobiotics and thus, to plan efficient systems of their bioremediation.

**5Po08**  
**MOŽNOSTI DETEKCE ENTEROBACTER**  
**SAKAZAKII**

<sup>1</sup>Pavel Rauch, Martina Blažková, Ladislav Fukal

<sup>1</sup>*Ústav biochemie a mikrobiologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6*

Velké zdravotní riziko, které přináší *Enterobacter sakazakii* alias *Cronobacter sakazakii*, zvláště pro kojence a batolata, vyvolalo zvýšený zájem o vhodné metody detekce tohoto patogenního mikroorganismu. Zejména v posledních pěti letech bylo vyvinuto několik principiálně odlišných detekčních postupů. Mezi získanými výsledky však existuje dosud značný nesoulad.

Klasické metody detekce *E. sakazakii*, kterými lze prokázat nepřítomnost tohoto patogenu v potravině až za několik dní, nejsou pro výrobce potravin dostatečně rychlé. Je proto nezbytné vyvíjet rychlejší metody detekce, které by dovolily získat informace o možném výskytu tohoto patogenu zejména v dětské výživě a umožnily kontrolu výrobní technologie a monitorování hygienických podmínek výroby.

Pro detekci *E. sakazakii* bylo zatím popsáno, vedle klasických kultivačních technik a biochemických testů, několik hybridizačních technik. Tyto molekulárně genetické postupy využívají nejčastěji polymerázovou řetězovou reakci.

Cílem práce je pokusit se vyvinout rychlé, specifické a jednoduché metody detekce *Enterobacter sakazakii* na imunochemickém a molekulárně genetickém principu a jejich vhodné kombinaci, z nichž některé by byly aplikovatelné v podmínkách běžných provozních laboratoří.

*Práce byla podpořena z prostředků GAČR 525/09/1075 a MŠMT ČR MSM 6046137305*

**5Po09**  
**KOMBINOVANÉ SORBENTY KOVŮ NA BÁZI**  
**NÍZKOENERGETICKÝCH UHLÍ**  
**A CHITOSANU**

J. Mizera<sup>1</sup>, M. Havelcová<sup>2</sup>, V. Machovič<sup>2</sup>, L. Borecká<sup>2</sup>, I. Krausová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Ústav jaderné fyziky AV ČR, v.v.i., Řež 130, 250 68 Řež, ČR*

<sup>2</sup>*Ústav struktury a mechaniky hornin AV ČR, v.v.i., V Holešovičkách 41, 182 09 Praha 8, ČR*

Studie se zabývá vývojem levných sorbentů toxických kovů a radionuklidů na bázi nízkoenergetických uhlí a chitosanu pro použití při čištění odpadních a spodních vod a konstrukci aktivních geochemických bariér.

Byly studovány a porovnávané strukturální a chemické vlastnosti přirozeně oxidovaného uhlí (oxihumolitu) a lignitu oxidovaného v laboratorních podmínkách. Na oxihumolitu a uměle oxidovaných lignitech byla studována sorpce kovů rovnovážnými sorpčními experimenty v závislosti na pH. Byla studována možnost zvýšení sorpční účinnosti uhelných sorbentů v neutrálním a zásaditém prostředí jejich kombinací s chitosanem. Chitosan za určitých podmínek zlepšuje sorpční schopnosti uhelných sorbentů, především oxihumolitu, zřejmě záchytem rozpustných komplexů s huminovými látkami louženými z uhlé matrice. Byly testovány možnosti přípravy a využití kombinovaného sorbentu na bázi oxihumolitu impregnovaného chitosanem.

**5Po10**  
**REGISTRATION, EVALUATION,  
 AUTHORISATION AND RESTRICTION OF  
 CHEMICAL SUBSTANCES – ELECTRONIC  
 SUPPORT SYSTEM**

Kryštof Dibusz

*VŠCHT Praha, Technická 5, Praha 6, 166 28, ČR*

The main purpose of my work was to create an electronic support system concerning the new European Union Regulatory Framework REACH (Registration, Evaluation and Authorisation of Chemicals) and to transform the REACH Regulation into interactive form. The development of this system was successfully performed by using the XML, XSLT, Python and Django technologies. Within the frame of my work the whole REACH Regulation was transformed and the REACH Online system was created.

The REACH Online system is a standalone application which offers either online or off-line use. It provides interactive electronic form of REACH Regulation featuring structured table of contents, related Articles cross references and two types of search.

The REACH Online project is still in progress mostly by improving the search possibilities and by transforming other lingual REACH versions.

**5Po11**  
**FOTOKATALYTICKÝ ROZKLAD 4-  
 CHLÓRFENOLU POMOCOU  
 MONTMORILLONITU S INKORPOROVANÝM  
 AMONIÓVÝMI SOĽAMI  
 STYRYLBEZOTIAZOLU**

*Stanislava Pavlíková<sup>1</sup>, František Šeršeň<sup>1</sup> Karol Jesenák<sup>2</sup>, Ivica Sigmundová<sup>3</sup>*

<sup>1</sup> *Chemický ústav, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Mlynská dolina CH2, 842 15, Bratislava, Slovenská republika*

<sup>2</sup> *Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Mlynská dolina CH2, 842 15, Bratislava, Slovenská republika*

<sup>3</sup> *Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Mlynská dolina CH2, 842 15, Bratislava, Slovenská republika*

Fotokatalýza je progresívna metóda, ktorú možno používať na rozklad veľkého počtu rôznych polutantov. Ako katalyzátory sa najčastejšie používajú rôzne modifikované hlinitokremičitány a oxid titaničitý [1]. V predchádzajúcich prácach sme zistili, že niektoré amonióvé soli styrylbenzotiazolu sú schopné generovať singletový kyslík vplyvom viditeľného svetla [2].

V tejto práci prezentujeme využitie dvoch hybridných anorganicko-organických látok na báze prírodného montmorillonitu s inkorporovaným (E)-2-{4-[(difenylamino)fenyl]vinyl}-3-metyl-6-nitrobenzotiazólium-jodidom a (E)-2-{4-[(dimetylamino)fenyl]vinyl}-3-metyl-6-nitrobenzotiazólium-jodidom pri rozklade 4-chlórfenolu vo vodnom prostredí vplyvom viditeľného svetla. Rozklad chlórphenolu bol sledovaný pomocou absorpčnej spektroskopie a bol vyhodnotený na základe absorpčných maxím chlórphenolu pri 226 nm a 280 nm. Mechanizmus rozkladu 4-chlórfenolu je spojený tvorbou singletového kyslíka, ktorý je schopný rozložiť uvedený polutant v prvej fáze na kyselinu malenovú alebo fumarovú a následne na oxid uhličitý a kyselinu chlorovodíkovú [3].

[1] Pera-Titus M, Garcia-Molina V., Baños M., Giménez J., Esplugas S.: *Appl. Catal. B: Environ.* 47, 219, (2004)

[2] Šeršeň F. Sigmundová I., Cigáň M.: *Chem. listy* 100, 995, 2006

[3] Gryglik D., Miller J. S., Ledakowicz S.: *J. Hazard. Mater.* 146, 502, (2007)

**5Po12****STRUKTURNÍ CHARAKTERIZACE  
POLYSACHARIDŮ DŘEVOKAZNÝCH HUB  
RODŮ PHELLINUS A INONOTUS**

Gordon K. Gomba<sup>1</sup>, Andriy Synytsya<sup>1</sup>, Jana Čopíková<sup>1</sup>, Michal Tomšovský<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav chemie a technologie sacharidů, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6

<sup>2</sup>Ústav ochrany lesů a myslivosti, MZLU v Brně, Zemědělská 3, 61300 Brno

Dřevokazní houby rodů *Phellinus* a *Inonotus* obsahují biologicky aktivní látky, zejména polysacharidy a polyfenoly. Jsou ceněné mimo jiné pro svou antikarcinogenní a imunomodulační účinky. Polysacharidové frakce byly izolované z plodnic hub *Phellinus alni* 857 a *Inonotus obliquus* 991 pomocí extrakce vroucí vodou a vodním roztokem NaOH (1 mol l<sup>-1</sup>) při 4°C. Byly získané dvě rozpustné frakce, označené F1 (vroucí voda) a F2 (alkalický roztok); pevný podíl byl označen F3. Frakce F1 a F2 se byly přečišťované pomocí dialýzy a posléze lyofilizované. Barevné látky byly odstraňované pomocí H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (pH 8,6). Všechny frakce se podrobily strukturální analýze pomocí spektroskopických metod. Molární poměry neutrálních cukrů byly charakterizované pomocí HPAEC-PAD. Frakce F1 a F2 izolované z obou druhů hub prokázaly přítomnost jak polysacharidů tak i polyfenolů. Hlavní cukernou složkou všech frakcí F3 a F2 byla glukosa. Frakce F1 z *Phellinus alni* 857 obsahovala srovnatelné množství glukosy, galaktosy, mannosy a arabinosy. Frakce F1 a F2 z *Inonotus obliquus* 991 obsahovali glukosu, xylosu a galaktosu. V pevných podílech F3 byli nalezené glukosa, mannosy a glukosamin (strukturální jednotka chitinu). Výsledky ukazují že rozpustné frakce obsahují směs glukánů a heretoglykanů (galaktomannany, arabinogalaktany – *Phellinus alni* 857; galaktoxylyany – *Inonotus obliquus* 991). Pevné podíly jsou směsí chitin-glukanových komplexů a mannanů.

Práce vznikla za podporou projektů GAČR č. 521/07/J039 a MŠMT ČR č. 6046137305.

**5Po13****A COVALENT IMMOBILIZATION OF  
PROTEOLYTIC ENZYMES ON MAGNETIC  
NANOPARTICLES ISOLATED FROM  
MAGNETOTACTIC BACTERIA**

Michaela Pečová<sup>1</sup>, Marek Šebela<sup>1</sup>, Ludmila Zajoncova<sup>1</sup>, Zdenka Marková<sup>2</sup>, Radek Zbořil<sup>2</sup>, Jan Čuda<sup>2</sup>, Kateřina Kluchová<sup>2</sup> and Dalibor Jančík<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department of Biochemistry, Faculty of Science, Palacký University, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, Czech Republic

<sup>2</sup>Centre for Nanomaterial Research, Palacký University, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, Czech Republic

Superparamagnetic nanoparticles of iron oxides (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, γ-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) have proven useful in various bioapplications including magnetic resonance imaging (MRI), tumor hyperthermia, magnetic drug targeting, protein and enzyme immobilization, bioseparation, immunoassays, RNA and DNA purification and others [1]. For such bioapplications, magnetic nanoparticles must be coated with substances that make them biocompatible, biodegradable, stable, non-toxic and capable of binding to complex biological molecules such as proteins, peptides, enzymes, hormones or drugs. Chitosan, dextran etc. have been used as coating materials to prevent aggregation, improve chemical stability and provide active groups for the possible conjugation with biocomponents [2]. Magnetic nanoparticles isolated from magnetotactic bacteria have been used as an ideal solid support material for binding enzymes including proteases.

Magnetic carriers coated by chitosan (providing hydroxy and amino groups) were used for protein immobilization. Bovine trypsin was modified by cyclodextrins [3] and covalently immobilized onto the magnetic support via carbodiimide as a coupling agent. Free and immobilized enzymes were characterized by kinetic parameters, thermostability, functional stability and reusability. Magnetic properties of the nanoparticles before and after attaching trypsin were characterized by SQUID. Their morphology and size were characterized by TEM. Magnetic nanoparticles containing immobilized trypsin were then applied for digestion of proteins.

This work was supported by the grant MSM 6198959216 from the Ministry of Education, Youth and Sports, Czech Republic.

- [1] Selim K. M. K., Ha Y. S., Kim S.J., Chang Y., Kim T. J., Lee G., H., Kang I. K.: *Biomaterials* 28, 710 (2007).
- [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.: *Biomaterials* 30, 2855 (2009).

[3] Sebela M., Stosova T., Havlis J., Wielsch N., Thomas H., Zdrahal Z., Shevchenko A.: *Proteomics* 6, 2959 (2006).

#### 5Po14

##### ANTIOXIDANT ACTIVITIES OF THE SELECTED MATRIX OF ANTIOXIDANTS

Tibor Maliar<sup>a,b\*</sup>, Mária Maliarová<sup>a</sup>, Katarína Bugárová<sup>a</sup>, Petra Černá<sup>a</sup>, Stanislav Šilhár<sup>b</sup>

<sup>a</sup>*University of SS. Cyril and Methodius, Faculty of Natural Sciences, Námestie Jozefa Herdu 2, SK – 917 01 Trnava, Slovakia.*

<sup>b</sup>*Food Research Institute, Biocentre, Kostolná 5, SK – 900 01 Modra, Slovakia*

The aim of this study was creation of the antioxidant activity matrix for various samples relation purpose. Selected collection of antioxidants (28 standards) was tested for antioxidant activity by three different methods - DPPH, FRAP and BKLM model method. A couple of polyphenolic acids – rosmarinic acid, chlorogenic acid, protocatechuic acid and gallic acid and several flavonoids – morin, malvin and rutin are by activity comparable with the stronghets synthetic standard – BHA. Using this model would be possible to evaluate real antioxidant potency of any samples /synthetic or natural origin/ or complex mixture samples. From the presented study there are evident several conclusions as follows:

For the expression of the complex antioxidant activity it is necessary to test more by the mechanisms different models.

The contribution of the particular models of antioxidant activity under *in vitro* condition would be better to optimize by convenient chemometric method.

Real antioxidant activity of the vitamins is relative comparing with standard matrix results.

Using this model would be possible to evaluate real antioxidant activity /antioxidant power/ of any samples /synthetic or natural origin / as only an intensive parameter of antioxidant activity per mg of dry weight of the tested sample.

#### 5Po15

##### ASPEKTY VÝŽIVY (VYŠŠIE KARBOXYLOVÉ KYSELINY) U PACIENTOV S CYSTICKOU FIBRÓZOU

Doktorová, M., Vozár, I.

*Ústav lekárskej chémie, biochémie a klinickej biochémie*

Cystická fibróza (CF) je geneticky podmienené ochorenie spôsobené mutáciou génu CFTR, kódujúceho proteín chloridového kanálu. Manifestuje sa tvorbou nadmerne hustého hlienu v dýchacích cestách a pankrease. U 78% pacientov s CF je diagnostikovaná pankreatická insuficiencia. Z dôvodu pankreatickej insuficiencie, ale aj zvýšených

energetických požiadaviek organizmu pri chronickej infekcii musí byť kalorický príjem u pacientov s CF vyšší o 30-50% oproti zdravým jedincom. To sa dosahuje prídávaním rastlinných olejov do stravy. Viaceré štúdie preukázali deficit esenciálnych vyšších karboxylových kyselín (linolovej a linolénovej) v plazme pacientov s CF.

V práci sme stanovovali percentuálne zloženie voľných a viazaných vyšších karboxylových kyselín (VKK) v plazme pacientov metódou plynovej chromatografie a taktiež aj zloženie vybraných rastlinných olejov z hľadiska obsahu esenciálnych VKK. V plazme pacientov sme zistili výrazný deficit kyseliny linolénovej (0,3% z celkových VKK), naopak kyselina linolová bola zastúpená až v 29,4%. Z analyzovaných rastlinných olejov viac ako 10% kyseliny linolénovej obsahuje ľanový (26,7%), repkový (13,9%) a sójový (10,1%) olej. U uvedených olejov sme zaznamenali aj obsah voľnej kyseliny linolénovej, ktorá môže byť pre pacientov s cystickou fibrózou dostupnejšia. Z dôvodu vysokého obsahu viazanej kyseliny linolénovej, ale najmä voľnej kyseliny linolénovej, je pre pacientov na konzumáciu najvhodnejší ľanový, repkový a sójový olej.

#### 5Po16

##### STANOVENIE F2-IZOPROSTANOV METÓDOU PLYNOVEJ CHROMATOGRAFIE V SÉRE

Vozár I., Doktorová M.

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

Biologické systémy sú kontinuálne menené látkami (prooxidantami), ktoré uvoľňujú exogénne, alebo endogénne do tkanív, čím dochádza k oxidatívne mu poškodeniu. Poškodením nenasýtených vyšších karboxylových kyselín (peroxidácia lipidov) dochádza k tvorbe dvojných väzieb a k tvorbe reaktívnych metabolitov, čo má za následok zmenu fluidity membrán a vplyvom enzýmov viazaných na membránach dochádza k tvorbe chemoaktívnych látok. Peroxidácia lipidov prebieha na aktívnych centrách enzýmov (cyklooxygenázy a lipooxygenázy), čím sa produkujú biologicky aktívne látky (napr. izoprostany)

Izoprostany vznikajú neenzýmovou reakciou, peroxidáciou kyseliny arachidónovej pomocou voľných radikálov. Sú tvorené esterifikáciou s fosfolipidmi a následne uvoľnením do plazmy, kde sa nachádzajú vo voľnej a viazanej forme. Slúžia ako markery oxidatívneho poškodenia. Fyziologická hladina v ľudskej plazme je  $35 \pm 6$  ng/l, pri poškodení hladina stúpa 200x oproti MDA (malondialdehyd)

V našej práci sme pripravili metodiku stanovenia F2-izoprostanov pomocou plynovej chromatografie v sére. Metodika stanovenia: - odobratie vzoriek, izolácia z plazmy, čistenie

príprava n-butyl- PFB esterov



sklenená kolóna ( 5% SPB- 1701 on Chromosorb WAW,80-100mesh)

programovaná teplota 175°C- 270°C, program 30°C/min

limit detekcie 5 pg/l

#### 5Po17

### PRODUCTION OF CAROTENOIDS BY RED YEASTS CULTIVATED ON VARIOUS WASTE SUBSTRATES

Dvořáková Terezie, Čarnecká Martina, Márová Ivana, Kubáčková Martina

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Department of Food Chemistry and Technology, Purkyňova 118, 612 00 Brno, e-mail: xcobruca@fch.vutbr.cz*

Carotenoids are synthesized in many types of microorganisms including yeasts. In this work different red yeasts (*Sporobolomyces* sp., *Rhodotorula* sp., *Cystofilobasidium* sp.) were enrolled into a comparative study. To increase the yield of carotenoid pigments at improved biomass production, several types of nutrition and physiological stress were tested. Each strain was cultivated at optimal growth conditions and in medium with modified carbon and nitrogen sources. Synthetic media with addition of complex substrates (e.g. yeast extract) and vitamin mixtures as well as some waste materials were used as nutrient source. As waste substrates cheese whey, molasses, potato extract, apple mass, apple fiber, bran, whole-grain meal were tested, either in natural form (combined with glucose) or processed by enzyme hydrolysis. Changes in yeast cells morphology, biomass production and carotenoid level were studied.

The best production of biomass was obtained in all tested strains during cultivation in mineral/glucose medium with yeast extract. The highest biomass production in optimal conditions was reached in *Rhodotorula glutinis* CCY 20-2-26 (35 g/L in laboratory fermentor), while production of other strains was about 60 – 80%. Most strains were able to utilize waste substrates containing glucose rests or polysaccharide substrates previously cleaved by fungal hydrolytic enzymes. The best results of biomass and carotenoid production were obtained in *R. glutinis* grown on processed whey substrate. In conclusion, some agriculture and food industry waste substrates can be used as medium component, which can induce carotenoid -rich biomass production and contribute to final biomass quality.

*This work has been supported by project MSM 0021630501 of Czech Ministry of Education.*

#### 5Po18

### THE INFLUENCE OF SELECTED STRESS FACTORS ON POLY(3-HYDROXYBUTYRATE) BIOSYNTHETIC PATHWAY AND ITS REGULATION ON ENZYMIC LEVEL IN *WAUTERSIA EUTROPHA*

Obruča Stanislav, Márová Ivana

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Department of Food Chemistry and Technology, Purkyňova 118, 612 00 Brno, e-mail: xcobruca@fch.vutbr.cz*

Polyhydroxyalkanoates (PHA) are materials that have received much interest due to their biodegradable nature and mechanical properties which are very similar to traditional plastics from petrochemical routes. This is the reason why PHA appears to find many potential applications in medical, industrial and agricultural fields. PHA are a group of hydroxyacid polyesters that are produced and accumulated in form of intracellular granules by a wide variety of bacterial strains that use PHA as carbon, energy and reducing power storage material. Of the big family of PHA, a homopolymer of 3-hydroxybutyrate, poly(3-hydroxybutyrate) (PHB), is the most widespread in nature and the best characterized [1]. Generally, it is assumed that PHA production and degradation ability improve bacterial survival under stress condition, but the mechanisms are not fully understood yet [2, 3].

This work is aimed at study of influence of ethanolic and peroxide stress on PHB biosynthetic pathway and its regulation on enzymatic level. Enzymes of interest were beta-ketothiolase, acetoacetyl-CoA reductase, PHA synthase, glucose-6-phosphate dehydrogenase, NAD(P)H dependent alcohol dehydrogenase and isocitrate dehydrogenase. Moreover, intracellular concentrations of free CoA and NADPH/NADP<sup>+</sup> ratios were estimated too. PHB content in cells was measured using GC-FID and molecular weight of produced PHB was estimated using GPC.

According to our results, when the stress factors were applied in appropriate concentration at optimal phase of cultivation, the enzymes of PHB biosynthetic pathway were activated. This resulted in over-production of PHB. Thus, PHB biosynthetic pathway is closely connected with stress endurance. Anyway, these results suggested several possible strategies which could improve process of PHB fermentative production and reduce PHB producing cost.

*This work has been supported by project MSM 0021630501 and FR 2613/G4/2009 of Czech Ministry of Education.*

- [1] Reddy, C. S. K., R. Ghai, Rashmi, Kalia V.C.. (2003) *Bioresource Technology* 87, 137–146.
- [2] Kadouri D, Jurkevitch E, Okon Y, Castro-Sowinski S. (2005) *Critical Reviews in Microbiology* 31(2), 55-67.

[3] Kessler B., Wilholt B. (2001) Journal of Biotechnology 86, 97-104

#### 5Po19

### CHANGES OF ACTIVE SUBSTANCES IN TWO APPLE VARIETIES DURING LONG-TERM STORAGE UNDER VARIOUS CONDITIONS

Duroňová Kateřina, Ferdová Jitka, Dvořáková Terezie, Márová Ivana

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Department of Food Chemistry and Technology, Purkyňova 118, 612 00 Brno, e-mail: katka.duronova@centrum.cz*

Apples represent one of the most important all-year-round sources of antioxidants. This work was focused on study of changes of antioxidant and metabolic status in two local sorts of apples – Idared and Golden Delicious. Intact apples were stored for 3 months at 20°C, in refrigerator and in cellar (9°C, 37.5 %). Analysis of individual flavonoids and ascorbate was performed by RP-HPLC/UV-VIS and LC/MS. Antioxidant activity was measured by Randox kit. Ascorbate, total phenolics and flavonoids were analyzed spectrophotometrically. Activities of superoxide dismutase, catalase and lipoxygenase were determined too.

Total phenolic and flavonoid levels slightly differed according to apple sort and colour. Phenolic levels were relatively stable during storage in all used conditions. The highest values were detected at 20°C, while flavonoid levels substantially increased with time of storage. Ascorbate levels dramatically decreased during storage. Total antioxidant corresponded mainly to ascorbate changes course, however, at the end of storage also flavonoid contribution can be observed. Concentrations of individual flavonoids (morin, rutin, quercetin, chlorogenic acid, procyanidin B2), carotenoids (lutein, lycopene, beta-carotene) and catechins differed slightly according to apple sort. These substances exhibited significant contribution to final colour of apple fruits.

According to our results, the best storage conditions with regard to antioxidant levels exhibited cellar, the lowest fruit stability was observed at 20°C. It seems, that great group of antioxidants is mobilized in over-ripen or damaged apples.

*This work has been supported by project FR 26393/G4/2009 of Czech Ministry of Education.*

#### 5Po20

### PRODUCTION OF EXTRACELLULAR POLYSACCHARIDE PULLULAN BY STRESSED AUREOBASIDIUM PULLULANS CELLS

Ondruška Vladimír, Matoušková Petra, Márová Ivana, Obruča Stanislav

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Department of Food Chemistry and Technology, Purkyňova 118, 612 00 Brno, e-mail: xcondruska@fch.vutbr.cz*

Pullulan is water-soluble polysaccharide naturally produced by yeast-like strain *Aureobasidium pullulans* during growth in media with different sugar carbon sources. Pullulan can be used in various applications in food industry, packaging, film industry and pharmacy. Different metabolic strategies can be used for regulation of extracellular metabolite production in microbial cultures. In this study, influence of different types of exogenous stress to pullulan production was tested.

*A. pullulans* cells were cultivated in Erlenmeyer flasks at 28°C under permanent aeration. Stress factors (salt 0.1-2%), ethanol (0.5-5%), hydrogen peroxide and heavy metals (Cr(III), Se(IV)) were added into inoculation medium only, into production medium only and also both into inoculation and production media. Quantitative changes of biomass and pullulan content were determined gravimetrically. Characterization of pullulan product was made by GPC/RI.

The highest production of pullulan (5.9 g/l) as well as biomass (16 g/l) was obtained in medium with 40 g/l glucose and 5 g/l ammonium ions. Reduced oxygen availability resulted in a decrease of biomass production and increased production of pullulan. Addition of NaCl was significantly affected mainly biomass production, the maximum was reached 15 g/l NaCl. In the presence of ethanol dramatical decrease of pullulan production was observed. Hydrogen peroxide exhibited no significant changes. The long-term effect of heavy metals led to pullulan decrease, while less exposure to stress exhibited opposite effect.

*This work has been supported by project MSM 0021630501 and FR 2613/G4/2009 of Czech Ministry of Education.*

**POSTERY - SEKCIA 6:  
CHEMPROGRESS**
**6Po01****VLIV PODMÍNEK PŘÍPRAVY PD/AL<sub>2</sub>O<sub>3</sub> NA VÝSLEDNOU VELIKOST ČÁSTIC PD**

Jan Patera<sup>1</sup>, Jiří Krupka<sup>1</sup>, Květa Jiráťová<sup>2</sup>, Nataliya Murafa<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Ústav organické technologie, Fakulta chemické technologie,

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6

<sup>2</sup>Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Rozvojová 135, 165 02 Praha 6

<sup>3</sup>Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i., Husinec-Řež 1001, 250 68 Řež

Jedním z aktuálních témat heterogenní katalýzy je příprava katalyzátorů s přesně definovanou nanostrukturou aktivních složek a výzkum jejich chování v katalytickém cyklu.

Cílem této práce byla příprava katalyzátorů s velmi malou velikostí částic palladia v řádu jednotek nm a s velmi úzkou distribucí velikosti těchto částic. Pro tento účel byla použita metoda přípravy kovových nanočástic pomocí reverzně micelárního prostředí. Mikroemulzní systém tvořil impregnační roztok chloridu palladnatého rozpuštěný ve zředěné HCl, surfaktant a organické rozpouštědlo. V práci byl použit komerční tenzid s označením IGEPAL CO-520 rozpuštěný v cyklohexanu. Výsledná velikost částic palladia je výrazně ovlivňována podmínkami při přípravě mikroemulze a může být řízena změnou velikosti micel, koncentrací PdCl<sub>2</sub> ve vodném roztoku a způsobem redukce. Optimalizací mikroemulzní techniky byl získán katalyzátor se střední velikostí částic palladia 2,2 nm. Byla porovnáována metoda vlhké impregnace nosiče s mikroemulzní přípravou palladiových katalyzátorů. Metoda mikroemulzní přípravy katalyzátorů vedla v porovnání s klasickou mokrou impregnací nosiče vodným roztokem PdCl<sub>2</sub> k užší distribuci velikosti Pd částic s nižší hodnotou střední velikosti. Při zachování stejného obsahu Pd na nosiči byl mokrou impregnací připraven katalyzátor s velikostí specifického povrchu Pd o cca. 60% nižší.

**6Po02****MOŽNOSTI ROZVOJE VÝROB CHEMICKÝCH SPECIALIT NA BÁZI DICYKLOPENTADIENU V ČESKÉ REPUBLICE**

Jiří Krupka<sup>1</sup>, Josef Pašek<sup>1</sup>, Tomáš Herink<sup>2</sup>, Kamil Štěpánek<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická Praha,

Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR

<sup>2</sup>Unipetrol RPA s.r.o., 436 70 Litvínov – Záluží

<sup>3</sup>Výzkumný ústav anorganické chemie a.s., Revoluční 1521/84, 400 01 Ústí nad Labem

Počátkem ledna 2008 schválilo představenstvo společnosti Unipetrol realizaci investiční akce vybudování výroby technického dicyklopentadienu v Unipetrolu RPA Litvínov, a v současné době je jednotka ve stadiu výstavby. Investice je zajímavá tím, že není realizována na základě cizího know-how, jak je ve výrobě základních chemikálií v České republice běžné, ale naopak, že proces byl vyvinut jako jeden z mála na domácí půdě. Plánovaná kapacita výroby je 26 000 t rok<sup>-1</sup>, což představuje přibližně 6-7% světového a 25-30% evropského trhu s dicyklopentadienem (DCPD). V případě dokončení a spuštění jednotky by se Česká republika stala významným evropským producentem DCPD. Předpokládá se, že většina technického DCPD vyrobeného na nové jednotce v Litvínově bude určená pro koncové aplikace výroby uhlovodíkových a nenasycených polyesterových pryskyřic, cykloolefinových kopolymerů, ethylidennorbornenu a EPDM elastomerů. Část technického DCPD by však mohla sloužit jako výchozí surovina pro hlubší zpracování a zhodnocení. Tyto návazné technologie by měly převážně charakter střednětonážních nebo spíše malotonážních výrob typu chem. specialit. V oblasti dalšího rozvoje petrochemie jsou chem. speciality na bázi DCPD jedním z mála směrů, ve kterém má Česká republika šanci uplatnit se vlastními procesy. Mezi perspektivní produkty na bázi DCPD, kterým je v ČR v současné době věnována výzkumná pozornost, patří ultračistý DCPD a z něj připravované formulované směsi pro RIM polymerace, nebo trojice návazných specialit cyklopenten – cyklopentanon – cyklopentylamin.

**6Po03****SYNTEZA 4,4'-METHYLENDIANILINU NA ZEOLITOVÉM KATALYZÁTORU**

Jiří Trejbal

Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

Technická 5, 166 28 Praha 6 E-mail:

Jiri.Trejbal@vscht.cz

Methyldianiliny (MDA) vznikají kondenzací anilinu a formaldehydu za přítomnosti kyselého katalyzátoru. Při syntéze, kromě žádaného isomeru 4,4'-MDA,

vznikajú také isomery 2,2'-MDA a 2,4'-MDA. Najstarším, ale v súčasnej dobe stále najpoužívanejším katalyzátorom pro syntézu MDA, je kyselina chlorovodíková. Výhodou kyseliny chlorovodíkovej je jej nízka cena a je dosahováno totálna konverzia a vysokého výtěžku na isomer 4,4'-MDA. Na druhou stranu kyselina chlorovodíková spôsobuje koroziu zariadení a neutralizáciou vznikajú odpadní soli. Alternatívnym postupom výroby 4,4'-MDA je katalýza pomocou nejakého kyselého heterogénneho katalyzátora. V posledných rokoch sa ukazujú ako najvhodnejšie zeolity. Cieľom práce bolo testovať niekoľko komerčných zeolitů na syntézu MDA a nájsť vhodné reakčné podmienky. Bylo zistené, že najvhodnejším zeolitom s ohľadom na výtěžek žadáného isomeru 4,4'-MDA je zeolit štruktúry Y. Ďalej bolo zistené, že spôsob prípravy reakčnej smesi pred kontaktom s katalyzátorom ovplyvňuje rýchlosť jeho deaktivácie.

#### 6Po04

### VYUŽITÍ APATITU KOVDOR PŘI VÝROBĚ KOMBINOVANÝCH HNOJIV

Jan Videnský, David Gabriš, Ivona Sedlářová, Jana Jiroušová

*VŠCHT Praha, Ústav anorganické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6*

Vzhľadom k vysokej cene a obtížnej dostupnosti kvalitných fosfátových rud je dôležité hľadanie a ověřovanie použiteľnosti nových surovinových zdrojů pro súčasne výrobní jednotky. Při jejich použití je pro optimalizaci rozkladných zariadení potřebná znalost kinetiky reakčného systému. Cieľom této práce je stanovit základní kinetické parametry rozkladu apatitu Kovdor kyselinou dusičnou.

Laboratorní měření byla provedena v izotermním míchaném vsádkovém reaktoru pro počáteční fázi rozkladu s frakcí částic apatitu Kovdor o velikosti 0,315 až 0,400 mm v rozpětí teplot 293 až 315 K. K rozkladu byla použita kyselina dusičná o koncentraci 160 až 1673 mol/m<sup>3</sup>. Průběh rozkladu byl sledován gravimetricky.

Naměřené závislosti stupně přeměny na čas byly zpracovány pomocí modelové představy nezreagovaného jádra s použitím kinetické rovnice mocinného typu. Bylo zistené, že „řád reakce“ roste se zvyšující se teplotou v rozmezí hodnot 0,6 až 0,8. Z teplotní závislosti byla vyhodnocena „aktivační energie“ cca 42 kJ/mol. Rychlost rozpouštění apatitu Kovdor v kyselině dusičné je přibližně dvakrát větší než u používaného apatitu Kola super.

Z provedené studie vyplynulo, že z kinetického hlediska lze apatit Kovdor využít na výrobu NPK hnojiv. Stávající rozkladné linky, navrhované pro apatit Kola, budou pracovat se značnou kapacitní rezervou.

#### 6Po05

### VLASTNOSTI KVAPALNÝCH BIOPALÍV Z KRAKOVANIA OLEJOV A TUKOV

Eduard Buzetzkí<sup>1</sup>, Katarína Švaňová<sup>2</sup>, Zuzana Cvengrošová<sup>3</sup>, Jozef Mikulec<sup>4</sup>, Ján Cvengroš<sup>5</sup>

<sup>1</sup> TB, s.r.o., Novackého 4, 841 04 Bratislava

<sup>2,3,5</sup> Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

<sup>4</sup> Slovnaft VÚRUP, a.s., Vlčie hrdlo, 820 03 Bratislava

FAME sú akceptovaným alternatívnym palivom alebo jeho zložkou pre dieselové motory. Vyrábajú sa alkalicky katalyzovanou transesterifikáciou rastlinných olejov a živočíšnych tukov metanolom. Voči fosilnej naftě majú rad všeobecne známych výhod, ale aj niekoľko nevýhod, ako sú obmedzené zdroje, konkurencia s produkciou potravín a vysoká cena. Krakovaním olejov a tukov je možné znížiť prevádzkové náklady vo výrobe kvapalných palív pri jednoduchšej technológii a pri znížených nárokoch na kvalitu vstupných olejov/tukov. Pri teplotách 350 až 440 °C pri atmosférickom tlaku počas 30 až 50 min v prítomnosti zeolitového katalyzátora je možné získať kvapalné kondenzáty s vysokým výtěžkom okolo 80 až 90 %. GLC chromatogramy produktov krakovania a fosilnej nafty sú podobné, prítomné zložky však nie sú identické. Kvapalný kondenzát tvoria najmä parafíny, olefiny a kyseliny, pričom parafíny sú dominantné. Aromáty sa tu nenachádzajú. Medzi parafínmi je najviac C15, C14, C17 a C13 uhľovodíkov. Medzi olefinmi prevládajú C14 a C15, z kyselín je výrazne najviac kyseliny C10. Plynné produkty predstavujú asi 5 % a sú tvorené najmä CO a CO<sub>2</sub>. Zvyšok po krakovaní asi 5 % je viskózna kvapalina až bitúmen. V práci sú diskutované vlastnosti upravených kvapalných kondenzátov z krakovania olejov/tukov v prítomnosti zeolitových katalyzátorov a možnosti úpravy niektorých parametrov týchto kondenzátov.

#### 6Po06

### VYUŽITIE ATÓMOVEJ SILOVEJ MIKROSKOPIE PRI CHARAKTERIZÁCIÍ UHLÍKOVÝCH NANORÚROK A FULERÉNU

Daniel Haško<sup>1</sup>, Monika Stupavská<sup>1,2</sup>, Monika Aranyosiová<sup>1,2</sup>, Dušan Velič<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Medzinárodné Laserové Centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava, Slovenská republika

<sup>2</sup> Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta UK, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovenská republika

Na 3D zobrazenie povrchu štruktúr a materiálov so subnanometrovým rozlíšením je možné využiť rastrovaciu sondovú mikroskopiu (SPM). SPM je založená na rastrovaní ostrého hrotu (sondy) umiestneného na konci nosníka nad povrchom vzorky. Interakcia sondy so vzorkou je monitorovaná pomocou odrazeného laserového žiarenia z vrchnej strany

nosníka do fotodiódy. Rastovanie hrotu alebo vzorky je riadené piezoelektrickým skenerom. Rozdielový elektrický signál z fotodiódy zodpovedá morfológii povrchu alebo iným skúmaným vlastnostiam. Historicky najstaršou je rastrovacia tunelová mikroskopia (STM), ktorá využíva na zobrazenie povrchu tunelový jav a na vodivých, prípadne polovodivých povrchoch dosahuje subnanometrové rozlíšenie. Pre potreby charakterizácie povrchov polovodičov a izolantov vznikla atómová silová mikroskopia (AFM). AFM umožňuje zobrazit' 3D povrchovú morfológiu s nanometrovým laterálnym a subnanometrovým vertikálnym rozlíšením vodivých aj nevodivých materiálov.

Prezentované budú výsledky analýz morfológie povrchov uhlíkových nanorúrok a fullerénu metódou

AFM. Fullerény a nanorúrky boli použité ako chemicky inertná matrica v hmotnostnej spektrometrii sekundárnych iónov a sledoval sa ich vplyv na intenzitu píkov skúmaných molekúl.

*Prezentované výsledky boli realizované v rámci Centra Excelentnosti CENAMOST (APVV) VVCE-0049-07, s podporou projektov RPEU-0005-06 a APVV-0491-07.*

- [4] G. Binnig, et al.: Atomic Force Microscope, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 930- 933, 1986
- [5] D. Bonifazi, O. Enger, F. Diederich, *Chem. Soc. Rev.* **36**, 390- 414, 2007
- [6] P. A. Zimmerman, D. M. Hercules, *App. Spectr.* **47**, 1545-47, 1993

**AUTORSKÝ INDEX****A**

Adam M. ....	118, 210
Adam V. ....	147
Alexy P. ....	136
Andělová B. ....	87, 184, 185
Andrezálová L. ....	168
Antoš P. ....	188
Anzenbacher P. ....	125
Anzenbacherová E. ....	125
Aranyosiová M. ....	121, 126, 144, 220
Armstrong D. W. ....	126
Augustynek A. ....	71

**B**

Babánková D. ....	129
Bačáková L. ....	155
Bajus M. ....	108
Bakardjiev M. ....	150
Balentová E. ....	86
Banáš P. ....	66
Baráth M. ....	199
Barath P. ....	156
Barek J. ....	122, 134, 135, 143, 144
Bárta J. ....	178
Bartečková K. ....	154
Bartůněk V. ....	170
Bazelová Z. ....	172
Bazyláková T. ....	168, 169
Bedlovičová Z. ....	86
Bednář P. ....	120, 197
Bednářová L. ....	90
Beinrohr E. ....	71, 117
Bel P. ....	140
Bella M. ....	180
Bělohav Z. ....	109
Benčíková E. ....	116
Beneš L. ....	180
Beneš M. ....	84
Berešík M. ....	116
Bertolasi V. ....	178
Bessada C. ....	74
Bezdička P. ....	77
Bílková E. ....	192
Billik P. ....	163

Bláha P. ....	210
Blaško J. ....	145, 146
Blažek P. ....	81
Blažková M. ....	213
Blechová Z. ....	89
Bleha R. ....	107
Bleha T. ....	64
Blinova N. V. ....	83
Boča M. ....	73, 113
Böhmová H. ....	96, 97
Borecká L. ....	213
Bořková K. ....	158
Borošová D. ....	102
Borsig E. ....	206
Bouillon I. ....	87
Bouzek K. ....	79, 113
Božoň M. ....	100
Brezová V. ....	129
Brindza J. ....	107
Brindzová L. ....	129
Brožek V. ....	173
Brulíková L. ....	93, 239
Buchlovič M. ....	186
Buchta M. ....	186
Buděšínský M. ....	94
Bugaj P. ....	172
Bugár I. ....	79, 139, 141, 142, 144
Bugárová K. ....	216
Bujdák J. ....	159
Bulíčková J. ....	136
Bureš F. ....	84, 175, 176, 189, 208
Burgert L. ....	89
Bustin D. ....	71
Buszewski B. ....	120
Buzetzi E. ....	220
Bystrzycki P. ....	155

**C**

Cabal J. ....	188
Čacho F. ....	117
Čajan M. ....	157
Cambray G. ....	106
Cankař P. ....	197
Capek I. ....	142
Capek P. ....	199, 200, 201
Čapková P. ....	79

Čaplovičová M. ....	163
Čarnecká M. ....	217
Čársky J. ....	99
Castro de B. ....	205
Čech P. ....	212
Čechová E. ....	134
Černá P. ....	216
Černák J. ....	159
Černík M. ....	161, 172
Černý J. ....	74, 173
Černý M. ....	89
Červený L. ....	81
Cerveny V. ....	143
Červený V. ....	118, 123
Chaloupka A. ....	153, 154
Chmela Š. ....	198, 206, 209
Chmielarz L. ....	78
Chmielová M. ....	87, 184
Chochulová A. ....	136
Chodák I. ....	115, 179, 182, 190
Chorvát jr. D. ....	159, 187
Chorvát Jr. D. ....	191, 194, 196, 202
Chrpvá E. ....	103
Chyba J. ....	210
Cibíková Z. ....	168
Cihelka J. ....	129, 130
Cílová Z. ....	167
Císařová I. ....	76, 149, 150, 152, 173
Compton R. G. ....	71
Čopan P. ....	158
Čopíková J. ....	215
Coufal P. ....	68
Csöllei J. ....	138
Ctibor P. ....	173
Čtrnáctová H. ....	95, 96, 97
Čuba V. ....	210
Čuda J. ....	215
Čuda J. ....	106
Cvačka J. ....	145
Cvengroš J. ....	111, 220
Cvengrošová Z. ....	220

**D**

Daňhel A. ....	122
Danielik V. ....	114
Danko M. ....	159, 190, 191
Darmo J. ....	79
Datinská V. ....	87
Degano I. ....	136
Delort A.-M. ....	207
Deýlová D. ....	135

Dibusz K. ....	214
Dibuszová E. ....	100
Diopan V. ....	147
Dirner V. ....	127
Dobiáš P. ....	118, 210
Dobročka E. ....	201
Doháňošová L. ....	204
Dohnalová Ž. ....	156
Doktorová M. ....	216
Doležal B. ....	186
Domlátil J. ....	203
Dostál R. ....	152
Dostálová J. ....	209
Doušová B. ....	81, 170
Drábík M. ....	78, 200
Drabina P. ....	178
Dračínský M. ....	94
Drajna L. ....	202
Drašar P. ....	95
Dudek B. ....	78
Dudková I. ....	101
Dudová M. ....	79
Dufková I. ....	183
Žuračková Z. ....	168
Duroňová K. ....	218
Dvořák Z. ....	154, 167
Dvořáková T. ....	217, 218
Dvorsky R. ....	110
Dybal J. ....	132
Dziembaj R. ....	78

**E**

Eignerová B. ....	94
Elyashevich G. K. ....	115
Epherre R. ....	74

**F**

Fábry M. ....	90
Fajnor V. Š. ....	162
Falteisek L. ....	74, 173
Fargašová A. ....	102
Fellner P. ....	151, 158
Ferdová J. ....	218
Ferreira R. ....	205
Fialová L. ....	142
Fialová S. ....	145
Fiedlerová A. ....	206
Fíla V. ....	167
Filip J. ....	81
Filip V. ....	60

Filippov S. K. ....	90
Fišerová A. ....	188
Flegr V. ....	101
Florová P. ....	68
Foret F. ....	70
Formánková Z. ....	141
Fraňková V. ....	193
Fraňová S. ....	201
Fribert P. ....	104, 105
Fröhlich K. ....	201
Fuitová L. ....	81, 170
Fukal L. ....	213
Funk P. ....	178
Furczoń K. ....	78
Furdíková K. ....	65

**G**

Gaál A. ....	79, 142
Gaálková J. ....	75
Gabčová J. ....	151
Gabriš D. ....	220
Gadzala-Kopciuch R. ....	120
Gajdošíková E. ....	195
Gaľa L. ....	65
Giannarelli S. ....	137
Gomba G. K. ....	215
Gonda J. ....	93, 189, 194, 195, 197
Gondová T. ....	126
Gracza T. ....	204, 205
Grančičová O. ....	128, 141, 144
Grüner B. ....	77, 157, 160
Grünwaldová V. ....	74
Grygar T. ....	81, 170
Gyepesová D. ....	167

**H**

Habala L. ....	165
Hajdúch M. ....	85
Hájková M. ....	84
Halaška J. ....	82
Halasová T. ....	133
Halouzka V. ....	70
Halvíček V. ....	120
Hamuřáková S. ....	202
Hanika J. ....	110
Haníková J. ....	159
Hanna-Brown M. ....	60, 233, 235, 238, 240, 242, 244
Hanta V. ....	115
Hanusek J. ....	177
Haško D. ....	114, 220

Havel L. ....	147
Havelcová M. ....	213
Havlíček D. ....	69, 173
Held E. ....	62
Herink T. ....	219
Herynek V. ....	74
Herzogová L. ....	81, 170
Hezinová V. ....	70
Hirsch J. ....	199
Hlásek T. ....	169
Hlaváč J. ....	85, 86, 93
Hlavínová L. ....	204
Hnát J. ....	79
Hnatko M. ....	158
Hnyk D. ....	150
Hobza P. ....	67
Hoferiková A. ....	206
Hoferiková A. ....	208
Holan M. ....	193
Holub J. ....	149, 150, 157
Holý P. ....	186
Horčíciak M. ....	140
Hořejší J. ....	158
Horváth B. ....	117
Hovančíková K. ....	107
Hrabálek A. ....	181
Hrachová J. ....	162
Hradil P. ....	85
Hraniček J. ....	118, 123
Hrbáč J. ....	70
Hrčková E. ....	209
Hrdlovič P. ....	159, 190, 198
Hricová M. ....	206, 208
Hromadová M. ....	136, 137
Hronec M. ....	112, 117
Hrubý M. ....	90, 188
Hrvolová B. ....	107
Hubáček T. ....	153, 154
Hubálek J. ....	147
Huber Š. ....	203
Hunkeler D. ....	196
Hušák M. ....	84, 171
Husárová S. ....	207
Hušeková K. ....	201
Húska D. ....	147

**I**

Imramovský A. ....	192, 209
Imrich J. ....	86, 202



**J**

Jakeš V. ....	169
Jakubec P. ....	70
Janáčková D. ....	176
Jančík D. ....	106, 215
Jančová P. ....	125
Jáné E. ....	141, 144
Janek M. ....	66, 79, 114, 139, 144
Janigová I. ....	182, 206
Janoušek Z. ....	152, 156
Janovská M. ....	103
Jansa J. ....	176
Janůšová B. ....	182
Javorová K. ....	98
Jendelová P. ....	74, 173
Jesenák K. ....	161, 214
Jesenský M. ....	99
Jiráček D. ....	173
Jiraneček I. ....	143
Jiráček J. ....	100
Jiráčková K. ....	75, 219
Jiroušová J. ....	220
Johnson L. E. ....	156
Josefík F. ....	178
Jun D. ....	188
Jurečka P. ....	67, 122
Jůzová Z. ....	132

**K**

Kačenka M. ....	74, 173
Kačer P. ....	119
Kadlečíková M. ....	161
Kafarski P. ....	208, 211, 213
Kalafut P. ....	119
Kalina J. ....	107
Kaliňák M. ....	65
Kaloušková R. ....	204
Kaman O. ....	74, 173
Kaniánský D. ....	121, 140
Kapustíková I. ....	138
Karaba A. ....	109
Karlubíková O. ....	205
Kasák P. ....	187, 194
Kasálková N. ....	153, 155, 160
Kašpar P. ....	74
Kassa J. ....	188
Kaszonyi A. ....	116
Kaufmannová M. ....	158
Kaustová J. ....	183
Kelbichová V. ....	192

Kettmann V. ....	207
Kizek R. ....	147
Klanicová A. ....	154
Klein P. ....	113
Kleinová A. ....	115, 179
Klepárník K. ....	70
Klika K. D. ....	86
Klika Z. ....	79, 166
Klíma J. ....	65, 70, 95
Klimesh J. ....	119
Klímková Š. ....	161, 172
Klučáková M. ....	134
Kluchová K. ....	106, 215
Klučiar M. ....	205
Kment O. ....	165
Kobliha D. ....	131
Kočí J. ....	87
Kociánová R. ....	131
Kodým R. ....	113
Kohajdová Z. ....	108
Kohútová M. ....	167
Kolář M. ....	164
Kolářová K. ....	160
Kolesárová J. ....	114
Kolivoška V. ....	137
Kollár J. ....	198, 209
Kolláriková G. ....	196
Kolmačka M. ....	161
Kolomazník K. ....	211
Koloušek D. ....	75, 81, 170
Kolská Z. ....	153
Kolská Z. ....	123
Koman M. ....	75
Komers K. ....	125
Koňák Č. ....	90
Konyushenko E. N. ....	181
Kósa C. ....	179
Košata B. ....	100
Kostka L. ....	90
Kostolányiová E. ....	98
Kotek J. ....	173
Kotková Z. ....	174
Kotora M. ....	94, 174
Kovanda F. ....	75
Kovář P. ....	151
Kovářová J. ....	88, 192
Kovářová M. ....	125
Kovářová Z. ....	203
Kozák J. ....	199
Kozák O. ....	166
Kozánková J. ....	172
Kozler J. ....	114

Kožušníková A.....	149	Lazišťan F.....	161
Král V.....	90, 104	Lebeda O.....	90, 188
Kramarová Z.....	102	Lebeda P.....	92
Kratochvíl B.....	84, 171	Lederer J.....	109, 110
Krausová I.....	213	Ledererová H.....	103
Krchňák V.....	87	Lehocký M.....	179
Kredatusová J.....	196	Lehotay J.....	61
Křen V.....	125	Leitmannová E.....	81
Kreps F.....	108	Lejczak B.....	211
Kristian P.....	202	Lemr K.....	120
Křišťofíková L.....	89	Lhotka M.....	81, 167, 170
Kříž Z.....	186	Linhová M.....	104, 105
Kronek J.....	88	Lipok J.....	213
Kroneková Z.....	191, 194	Lipovský J.....	104, 105
Krouská J.....	133	Liška F.....	65
Krupa I.....	191	Lišková A.....	138
Krupka J.....	191, 219	Lišková M.....	70
Křupková S.....	86	Lofaj M.....	140
Kryštofová O.....	147	Lokaj J.....	207
Kubáčková M.....	217	Lorenc D.....	139, 141, 144
Kubala M.....	103	Lorenc P.....	182
Kubát P.....	80	Lučaníková M.....	160
Kubelík P.....	130	Ludvík J.....	65, 95, 131
Kubíková B.....	73	Ludwig M.....	208
Kubínek R.....	145, 146	Luha J.....	129
Kuča K.....	186, 188	Lukáč I.....	179
Kucanová E.....	127	Lukáč P.....	136
Kučera R.....	119	Lukeš I.....	173, 174
Kuchár J.....	93, 159	Lupták R.....	201
Kučka J.....	90, 188	Luštická I.....	81
Kudrlička L.....	114	Lustoň J.....	88
Kukačka J.....	109	Luxbacher T.....	123
Kukutschová J.....	151	Lyčka A.....	178
Kulhánek J.....	175, 176, 189, 208	Lyutakov O.....	153
Kuneš J.....	185		
Kupčík J.....	74, 173		
Kutschy P.....	126		
Kvasnička V.....	62		
Kvíčala J.....	84, 192, 193, 195		
Kvíčalová M.....	157, 160		
Kvítek L.....	81, 132, 164		
Kysilka O.....	195		

**L**

Labuda J.....	138
Lachmanová Š.....	137
Lacík I.....	187, 191, 194, 196, 202
Ľalíková S.....	168, 169
Lang K.....	80
Langer V.....	167
Lásiková A.....	204

**M**

Macháček J.....	150
Macháček V.....	177, 178
Machovič V.....	81, 170, 213
Macková A.....	155
Mádlová M.....	174
Magdolen P.....	200
Makajová Z.....	155, 160
Maliar T.....	216
Maliarová M.....	216
Maliňák D.....	194
Malinowska B.....	211
Mališ J.....	111
Maloň P.....	90
Malovíková A.....	133
Malý P.....	166

Mamulová Kutláková K. ....	151	Mosinger J. ....	80
Man S. ....	186	Mořka T. ....	181
Mandíková J. ....	183	Mravec F. ....	133
Manová A. ....	71, 117	Mucha M. ....	69
Marák J. ....	121	Můčka V. ....	131, 210
Marchalín Š. ....	85, 182	Müller L. ....	100
Marcinčin A. ....	206, 208	Murafa N. ....	219
Marcinčin K. ....	206	Musílek K. ....	188
Marek A. ....	189	Musilová J. ....	144
Marek J. ....	186		
Marek M. ....	204		
Marková Z. ....	106, 215	<b>N</b>	
Maroszová J. ....	75	Nadasky P. ....	106
Márová I. ....	217, 218	Nádherná M. ....	156
Maršálek R. ....	63, 122	Nagyová I. ....	102
Martinková M. ....	93, 189, 194, 195, 197	Navarini L. ....	199
Maryško M. ....	74	Nečas D. ....	174
Masár M. ....	140	Nečesaný F. ....	109, 110
Mastný L. ....	171, 203, 204	Němcová L. ....	135
Matejdes M. ....	66, 79	Němec I. ....	76
Matějka V. ....	151	Němečková D. ....	87, 184, 185
Matoušková P. ....	218	Nemrahová A. ....	212
Matoušková Š. ....	96	Nesměrák K. ....	64
Matulková I. ....	76, 129, 130	Netriová Z. ....	73
Matulova M. ....	199	Neufuss K. ....	173
Matulová M. ....	207	Neuwirthová L. ....	151
Matuška J. ....	114	Nevěčná T. ....	81
Mazúr M. ....	65, 163	Nógellová Z. ....	190
Melánová K. ....	180	Nosáľová G. ....	201
Melichová Z. ....	102	Nosek J. ....	124, 161, 172
Melník M. ....	75	Novák F. ....	143
Meľuchová B. ....	146	Novák I. ....	115, 179, 206
Melzoch K. ....	104, 105	Novák M. ....	173
Merna J. ....	196	Novák P. ....	113, 119
Michalka M. ....	142, 161, 201	Novotná P. ....	68
Michl J. ....	95	Novotný M. ....	181
Mikulec J. ....	111, 220	Novotný O. ....	204
Milata V. ....	110, 180, 207		
Milczarek J. M. ....	71	<b>O</b>	
Minko E. ....	88	Oberholzer J. ....	196
Mistrik R. ....	59	Obruča S. ....	217, 218
Mizera J. ....	213	Obšil T. ....	119
Mlejová V. ....	210	Olexová A. ....	128
Mlynarz P. ....	208	Olšovský M. ....	168, 169
Mlynková B. ....	108	Omastová M. ....	83
Mlýnský V. ....	66	Ondrášková K. ....	116
Mokrejš P. ....	176, 211	Ondruška V. ....	218
Molenda M. ....	78	Ondrušová D. ....	168, 169
Molitor C. ....	165	Oroszová B. ....	197
Moncoľ J. ....	75, 76, 82, 163	Ostrčil M. ....	171
Moravec Z. ....	77, 164	Ostřížek P. ....	77, 210
Morrison R. ....	106		

Ostrovský I ..... 145, 146  
 Otyepka M ..... 66, 67, 68, 72

**P**

Pach L ..... 172  
 Paidar M ..... 79, 111  
 Pajtášová M ..... 168, 169  
 Palarčík J ..... 212  
 Paleta O ..... 84  
 Pálszegi T ..... 142, 144  
 Panáček A ..... 81, 164, 165  
 Papajová E ..... 191  
 Pařík P ..... 125, 176  
 Pařízek M ..... 155  
 Pašek J ..... 219  
 Pastorek J ..... 58  
 Pastoreková S ..... 58  
 Pastorková K ..... 161, 162  
 Patáková P ..... 104, 105  
 Patera J ..... 219  
 Paterová J ..... 195  
 Pavlíková P ..... 118, 210  
 Pavlíková S ..... 214  
 Pavlovský J ..... 69  
 Pazdera P ..... 70, 87, 184, 185, 199, 203  
 Pechar M ..... 90  
 Pecková K ..... 144  
 Pečová M ..... 106, 215  
 Pekař M ..... 133  
 Pěčnicková V ..... 151  
 Pešek M ..... 204  
 Pešlová K ..... 119  
 Petráková A ..... 103  
 Petrlíková E ..... 183  
 Petrovaj J ..... 126  
 Píkna L ..... 127  
 Pilař J ..... 92  
 Pinkas J ..... 77, 164, 196, 210  
 Pischel U ..... 205  
 Piwowarska Z ..... 78  
 Plešek J ..... 77, 157, 160  
 Plešková M ..... 204  
 Plevová E ..... 149  
 Pluhař T ..... 161, 172  
 Podešva J ..... 88, 192  
 Podobeková S ..... 89  
 Pola R ..... 90  
 Polcr P ..... 122  
 Pollák V ..... 115  
 Pollert E ..... 173  
 Popelka A ..... 179

Porubská M ..... 182  
 Pospíšil L ..... 136, 137  
 Pospíšil M ..... 131  
 Potáček M ..... 186  
 Pour M ..... 185  
 Poživil J ..... 115  
 Praus P ..... 165, 166  
 Prchal V ..... 122  
 Preclíková J ..... 166  
 Příkryl J ..... 70  
 Prisenžňáková E ..... 201  
 Prítula O ..... 74  
 Proklešková E ..... 158  
 Proks V ..... 91  
 Prokúpek L ..... 88, 89, 92  
 Pucek R ..... 81, 164  
 Puchoňová M ..... 163  
 Pudelová N ..... 87  
 Pustková P ..... 79, 166  
 Pykal M ..... 67  
 Pytela O ..... 84, 176

**Q**

Qi M ..... 196

**R**

Rábara L ..... 126  
 Rafalska-Łasocha A ..... 78  
 Rakhmattulin A ..... 74  
 Rakottyay K ..... 116  
 Rambousek L ..... 119  
 Ranc V ..... 120  
 Rapta P ..... 129  
 Raschmanová J ..... 93  
 Rauch P ..... 213  
 Reguli J ..... 62  
 Reiffová K ..... 120  
 Reiter J ..... 156  
 Remeteiová D ..... 127  
 Repická Z ..... 163  
 Ričanyová J ..... 120  
 Rievaj M ..... 71  
 Ringstrand B ..... 156  
 Rohlíček J ..... 171  
 Rompel A ..... 165  
 Rubešová K ..... 169  
 Ruppenthalová L ..... 122  
 Rusnák A ..... 208  
 Rusnák R ..... 127  
 Růžička A ..... 76, 82, 177

Rybáček J. ....	186
Rybáčková M. ....	193, 195
Rychlá L. ....	58
Rychlovsky P. ....	143
Rychlovský P. ....	118, 123
Rychlý J. ....	58
Rychtera M. ....	104, 105
Rypáček F. ....	91

**S**

Šafář P. ....	85, 182
Šafařík I. ....	81
Sajdl P. ....	172
Šajgalík P. ....	113, 158
Salayová A. ....	126
Sancelme M. ....	207
Sandra P. ....	60, 233, 235, 238, 240, 242, 244
Sasinková V. ....	133
Šatka A. ....	114, 142
Schauer J. ....	79
Schimer J. ....	175
Schmidt P. ....	132
Schmidt Š. ....	107, 108
Schütznerová E. ....	197
Šebela M. ....	106, 215
Šeděnková I. ....	92
Sedlák M. ....	178, 192
Sedlářová I. ....	220
Sekretár S. ....	107, 108
Selucký P. ....	160
Šenel P. ....	185
Šepelák J. ....	139, 141
Šeršeň F. ....	187, 214
Šestauberová M. ....	143
Ševčík P. ....	63
Ševčík R. ....	203
Šícha V. ....	77
Siegel J. ....	153, 154
Sieglová I. ....	90
Sigmundová I. ....	214
Šilhánek J. ....	101
Šilhár S. ....	216
Šiller M. ....	125
Šimánek V. ....	103, 125
Šimbera J. ....	87, 199
Šimek P. ....	153
Šimko F. ....	74
Šimková L. ....	65
Šimon P. ....	72, 136
Šimůnek P. ....	177, 178
Skalický M. ....	192, 193, 195

Sklenovský P. ....	68, 72
Škoda D. ....	164
Skopalová J. ....	70, 100
Škoviera J. ....	148
Škramlíková T. ....	132
Škrha J. ....	132
Slaninková M. ....	93
Slavětínská R. ....	204
Slepička P. ....	123, 153, 154, 155, 172
Slivová Z. ....	138
Slovák P. ....	132
Smogrovicova D. ....	106
Smrčková E. ....	151
Smrčková O. ....	98, 169, 170
Smreková E. ....	124
Šňupárek J. ....	181
Sobolčíak P. ....	187
Soják L. ....	145, 146
Sokolová R. ....	136, 137
Solčan T. ....	207
Součková J. ....	100
Soukup O. ....	188
Soukupová J. ....	164
Soural M. ....	85, 86
Sovová K. ....	129
Špaček V. ....	88
Šponer J. ....	66, 67
Stach M. ....	187, 194
Štancí M. ....	89
Staňová A. ....	121
Štarha P. ....	154, 167
Štaško A. ....	129
Stefanova S. ....	127
Stejskal J. ....	83, 173, 181
Štěpánek K. ....	219
Štěpánková Š. ....	125
Štěpnička P. ....	149, 150
Števiar M. ....	115, 179
Štíbr B. ....	149, 150
Stolaříková J. ....	183
Štolcová M. ....	112
Stratilová Urválková E. ....	95, 96, 97
Stupavská M. ....	121, 220
Šturcová A. ....	132
Stursa J. ....	95
Stýskala J. ....	197
Stýskalík A. ....	164
Suggi-Liverani F. ....	199
Šujan P. ....	176
Sukop S. ....	211
Šulc M. ....	119
Šulcová P. ....	155, 156, 158

Šulcová R. ....	96, 97
Šutovská M. ....	201
Švaňová K. ....	220
Švec J. ....	200
Svoboda J. ....	180
Svoboda L. ....	89, 92
Svobodová I. ....	70
Svobodová M. ....	177, 178
Švorčík V. ....	123, 153, 154, 155, 160, 172
Sýkora J. ....	196
Sýkorová D. ....	98, 169
Synytsya A. ....	107, 215
Sysel P. ....	88
Syslová K. ....	119
Szabo E. ....	63
Szöcs V. ....	141, 142, 144
Szöcz V. ....	79
Szücs R. ....	60
Szymczyk M. ....	208

**T**

Taitiová N. ....	187
Tandlich R. ....	106
Taraba B. ....	63
Teubner K. ....	76
Tichotová L. ....	185
Titěrová T. ....	88
Toma Š. ....	141
Tomaščíková J. ....	86
Tomášek V. ....	151
Tomáška Ľ. ....	124
Tomčík P. ....	71
Tomšovský M. ....	215
Torres R. R. ....	175
Toufarová M. ....	142
Trávníček Z. ....	154, 157, 159, 167
Traxmandlová M. ....	88
Trchová M. ....	83, 92, 181
Trejbal J. ....	219
Trenčanová M. ....	148
Trnková L. ....	147
Tukač V. ....	110
Turjan J. ....	200
Tvaroška I. ....	199
Tvrdoňová M. ....	189

**U**

Učňová L. ....	202
Uher M. ....	99
Uherek F. ....	114, 142

Uhlířová T. ....	156
Uhríková A. ....	197
Ujhelyiová A. ....	89
Ulbrich K. ....	90
Ulrichová J. ....	59, 103
Urbanová M. ....	68

**V**

Vaculíková L. ....	149
Vařilingom M. ....	207
Valach M. ....	145
Valasek M. ....	95
Valášek M. ....	136, 137, 156
Valent A. ....	167, 168
Valent I. ....	124
Valigura D. ....	75, 76, 163
Valko M. ....	65
Vandlíčková M. ....	81
Vaničková M. ....	164
Varga N. ....	193
Vašek P. ....	169
Vašek V. ....	176
Vasileská M. ....	97
Vasína A. ....	153, 172
Vasková Z. ....	75, 76, 82
Vavříková E. ....	183
Vávrová K. ....	181, 182
Vdovjak L. ....	112
Večeřa M. ....	88, 89, 92
Večeřová R. ....	164
Vejsová M. ....	183
Velič D. ....	79, 121, 126, 139, 140, 141, 144, 148, 220
Ventura K. ....	118, 210
Veselý J. ....	175
Veselý V. ....	109, 110
Vetřík M. ....	90, 188
Vetřiková Z. ....	145
Veverka M. ....	74
Veverka V. ....	74
Vídenský J. ....	220
Vilimovská M. ....	123
Vilková M. ....	86
Vincze A. ....	114, 201
Vinšová J. ....	183
Višacká K. ....	124
Vitásková L. ....	158
Vojtíšek P. ....	174
Vojtylová T. ....	127
Voldřich K. ....	123
Vopálka D. ....	130
Vozár I. ....	216

Vránková A. ....	132
Vranovičová B. ....	98
Vrkoslav V. ....	145
Vrzal R. ....	154, 167
Vyskočil V. ....	122

---

**W**

Wahab A. ....	95
Waisser K. ....	183
Walko M. ....	187, 193
Walter N. G. ....	66
Wang S. ....	180
Weiss R. G. ....	179
Widimský jr J. ....	132
Wieczorek D. ....	213
Wilhelmi B. S. ....	106

---

**Y**

Yang Y. ....	180
Yosypchuk B. ....	135
Yosypchuk O. ....	134

---

**Z**

Zachář P. ....	104
----------------	-----

Zacher T. ....	139
Zaitz M. M. ....	78
Zajíček J. ....	87, 95
Zajoncová L. ....	106, 215
Zákostelná B. ....	96
Žáková M. ....	130
Žakovičová S. ....	121
Zalibera M. ....	129
Zámostný P. ....	109
Zapletal M. ....	113
Závada J. ....	186
Zavadilová A. ....	130
Zbořil R. ....	81, 106, 164, 215
Zdráhal M. ....	209
Zehnálek J. ....	147
Zelený T. ....	67
Zelinka K. ....	87, 199
Zeman L. ....	147
Zgarbová M. ....	67
Zięba-Palus J. ....	71
Zikmundová M. ....	156
Zima J. ....	135
Zima V. ....	180
Žitka J. ....	79
Žitka O. ....	147
Žitňan M. ....	141, 144
Znamenáček J. ....	100
Žúžiová J. ....	85, 182

## PROGRAM PREDNÁŠOK

## Sekcia 1: Analytická a fyzikálna chémia

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (žltý farebný kód)

## Utorok, 8. september 2009

14:20 - 15:10	PP1	<u>Jozef Rychlý</u> , Lýdia Rychlá
(miestnosť Sekcie 1)		Svetelná emisia z teplom iniciovanej oxidácie polymérov a jej vzťah so zvyškovou stabilitou polymérneho materiálu
14:20 - 15:10	PP2	Jitka Ulrichová
(miestnosť Sekcie 3)		Polyfenoly – od fytochemie k funkčnej potravine?
15:10 - 15:15		Presun do sekcií
15:15 - 15:25		<b>Úvodná informácia garanta sekcie</b>
15:25 - 15:50	1P01	<u>Erik Szabo</u> , Peter Ševčík
		On-line meranie vývoja plynov v Briggsovej–Rauscherovej a Belousovej–Žabotinského oscilačnej reakcii
15:50 - 16:15	1P02	<u>Roman Maršálek</u> , Boleslav Taraba
		Vliv teploty na adsorpciu ctab na uhlí
16:15 - 16:45		<b>Prestávka s občerstvením</b>
16:45 - 17:10	1P03	<u>Karel Nesměrák</u> „Keynote“
		Oxidačne-redukční potenciál ve vztazích struktura-vlastnosti, resp. struktura-biologická aktivita
17:10 - 17:35	1P04	Tomáš Bleha
		Polyetylén a DNA: Podobnosti a odlišnosti z ich modelovania
17:35 - 18:00	1P05	<u>M. Mazúr</u> , K. Furdíková, L. Gaľa, M. Kaliňák and M. Valko
		NMR Spectroscopy of Grape Must, “Burčiak”, “Rampáš” and New Wine
20:00 - 24.00	Po	<b>Posterová prezentácia 1: 1Po01-1Po29, 2Po01-2Po30, 3Po01-3Po39, 4Po01, 5Po01-5Po10, 6Po01-6Po03</b>

## Streda, 9. september 2009

08:30 - 09:20	PP3	Róbert Mistrík
(miestnosť Sekcie 1)		De novo určovanie chemickej štruktúry látok pomocou tandemovej hmotnostnej spektrometrie
08:30 - 09:20	PP4	Vladimír Filip
(miestnosť Sekcie 3)		Možnosti využitia rastlinných olejů
09:20 - 09:25		Presun do sekcií
09:25 - 09:50	1P06	<u>Ludmila Šimková</u> , František Liška, Jiří Klíma, Jiří Ludvík
		Elektrochemické studium intramolekulární degradace nového exploziva 2,2-dinitroethen-1,1-diaminu
09:50 - 10:15	1P07	<u>Marián Matejdes</u> , Marián Janek
		Štúdium hybridných materiálov na báze montmorillonitu a supramolekulových komplexov s fluorescenčnými farbivami
10:15 - 10:40	1P08	<u>Vojtěch Mlýnský</u> , Pavel Banáš, Nils G. Walter, Jiří Šponer and Michal Otyepka



		Molecular Dynamics of Hairpin Ribozyme
<b>10:40 - 11:10</b>		<b>Prestávka s občerstvením</b>
11:10 - 11:35	1P09	<u>Marie Zgarbová</u> , Michal Otyepka, Jiří Šponer a Petr Jurečka Porovnatelnosť empirických potenciálov a kvantovo mechanických výpočtov
11:35 - 12:00	1P10	<u>Tomáš Zelený</u> , Martin Pykal, Pavel Hobza Teoretická štúdie hyperplochy potenciálnej energie komplexu indol-benzen
12:00 - 12:25	1P11	<u>Petra Florová</u> , Petr Sklenovský a Michal Otyepka Vliv explicitních modelů vod na stabilitu a dynamiku chignolinu v molekulárně dynamických simulacích
20:00 - 21:00		<b>80 rokov SCHS, slávnostný seminár</b>
20:00 - 24:00	Po	<b>Posterová prezentácia 2: 1Po30-1Po58, 2Po31-2Po60, 3Po40-3Po78, 4Po02, 5Po11-5Po20, 6Po04-6Po06</b>

**Štvrtok, 10. september 2009**

<b>08:30 - 09:20</b>	<b>PP5</b>	<u>Roman Szücs</u> , Melissa Hanna-Brown a Pat Sandra
(miestnosť Sekcie 1)		Vplyv inovácie v separačných metódach na vývoj nových farmaceuticky aktívnych látok a produktov
<b>08:30 - 09:20</b>	<b>PP6</b>	Jozef Lehotay
(miestnosť Sekcie 3)		Význam analytickej chémie v súčasnosti
09:20 - 09:25		Presun do sekcií
09:25 - 09:50	1P12	<u>Pavel Coufal</u> „Keynote“ Miniaturizace v analytických separačných metódach
09:50 - 10:15	1P13	<u>Pavína Novotná</u> , Marie Urbanová Structural study on polypeptides using vibrational circular dichroism
10:15 - 10:40	1P14	<u>Jiří Pavlovský</u> , Martin Mucha Různé postupy sorpce huminových kyselin na jílové minerály včetně studia vlastností interkalátů metodami RTG digrakce, UV-VIS a IČ spektroskopie
<b>10:40 - 11:10</b>		<b>Prestávka s občerstvením</b>
11:10 - 11:35	1P15	David Havlíček „Keynote“ Možnosti a meze kvantitativní analýzy práškovou rentgenovou difrakci
11:35 - 12:00	1P16	<u>Marcela Lišková</u> , Karel Klepárník, Věra Hezinová, Ivona Svobodová, Jan Příkryl, František Foret, Pavel Pazdera Preparation and modification of quantum dots as selective probes in bioanalysis
12:00 - 12:25	1P17	<u>Jiri Klima</u> Výhody využití ultrazvuku v elektrochemii, fyzikální mechanizmy a vhodné experimentální uspořádání
<b>12:30 - 14:20</b>		<b>Obed</b>
<b>14:20 - 15:10</b>	<b>PP7</b>	Vladimír Kvasnička
(miestnosť Sekcie 1)		Umelá chémia a Darwinova evolúcia
<b>14:20 - 15:10</b>	<b>PP8</b>	Ľubomír Held, <u>Ján Reguli</u>
(miestnosť Sekcie 3)		"Last Reaction Hero" – Hrozí koniec chemikov na Slovensku?
15:10 - 15:15		Presun do sekcií
15:15 - 15:40	1P18	<u>Petr Jakubec</u> , Jan Hrbáč, Vladimír Halouzka, Jana Skopalová Elektrochemická metoda pro stanovení látek s thiolovou a dithiolovou skupinou
15:40 - 16:05	1P19	<u>P. Tomčík</u> , M. Rievaj, D. Bustin, R. G. Compton Influence of surfactants on deposition process when cadmium is determined on boron doped diamond electrode

16:05 - 16:30 1P20 Manová Alena, Beinrohr Ernest  
AAS for trace analysis of metals

16:30 - 17:00 **Prestávka s občerstvením**

**Piatok, 11. september 2009**

08:30 - 08:55 1P21 Aleksandra Augustynek, Jakub M. Milczarek, Janina Zięba-Palus  
Forensic identification and comparison of adhesive tapes by means of infrared spectroscopy (FT-IR) and pyrolysis-gas chromatography-mass spectrometry (Py-GC/MS)

08:55 - 09:20 1P22 Petr Sklenovský, Michal Otyepka  
In silico tepelná denaturace neglobulárního proteinu P18INK4C

09:20 - 09:45 1P23 Peter Šimon  
Physicochemical properties of biopersistent nanoparticles and their conceivable interactions with biomatrices

09:45 - 10:15 Prestávka s občerstvením

11:10 - 12:00 **Panelová diskusia, záver**

**Sekcia 2: Anorganická a materiálová chémia**

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (modrý farebný kód)

**Utorok, 8. september 2009**

14:20 - 15:10 PP1 Jozef Rychlý, Lýdia Rychlá  
(miestnosť Sekcie 1) Svetelná emisia z teplom iniciovanej oxidácie polymérov a jej vzťah so zvyškovou stabilitou polymérneho materiálu

14:20 - 15:10 PP2 Jitka Ulrichová  
(miestnosť Sekcie 3) Polyfenoly – od fytochemie k funkční potravine?

15:10 - 15:15 Presun do sekcií

15:15 - 15:25 **Úvodná informácia garanta sekcie**

15:25 - 15:50 2P01 Miroslav Boča  
Taveniny anorganických solí - Popoluška v priemysle

15:50 - 16:15 2P02 Blanka Kubíková, Zuzana Netriová, Miroslav Boča  
Fluoridové systémy na báze žiaruvzdorných kovov

16:15 - 16:45 **Prestávka s občerstvením**

16:45 - 17:10 2P03 Ondřej Kaman, Pavel Veverka, Michal Kačenka, Miroslav Maryško, Miroslav Veverka, Vít Herynek, Jaroslav Kupčík, Lukáš Falteisek, Jan Černý, Petr Kašpar, Pavla Jendelová, Veronika Grünwaldová, Romain Epherre, Emil Pollert

Silica coated and functionalized manganese perovskite nanoparticles for biomedical applications

17:10 - 17:35 2P04 František Šimko, Ondřej Prítula, Aydar Rakhmattulin a Catherine Bessada

Štúdium sústavy Na<sub>3</sub>AlF<sub>6</sub>-FeF<sub>3</sub>

17:35 - 18:00 2P05 František Kovanda, David Koloušek, Jana Gaálová, Květa Jiráťová  
Příprava strukturovaných katalyzátorů depozicí podvojných vrstevnatých hydroxidů na kovový nosič

20:00 - 24.00 Po **Posterová prezentácia 1: 1Po01-1Po29, 2Po01-2Po30, 3Po01-3Po39, 4Po01, 5Po01-5Po10, 6Po01-6Po03**

**Streda, 9. september 2009**

**08:30 - 09:20 PP3**  
(miestnosť Sekcie 1) Róbert Mistrík  
De novo určovanie chemickej štruktúry látok pomocou tandemovej hmotnostnej spektrometrie

**08:30 - 09:20 PP4**  
(miestnosť Sekcie 3) Vladimír Filip  
Možnosti využitií rastlinných olejů

09:20 - 09:25 Presun do sekcií

09:25 - 09:50 2P06 M. Koman, J. Moncol, and M. Melník  
New carboxylato complexes of copper(ii) with nicotinamide

09:50 - 10:15 2P07 Jaroslava Maroszová, Ján Moncol, Zuzana Vasková, Dušan Valigura, Marian Koman  
Structural variability of 3-nitro and 3,5-dinitro benzoato copper (II) complexes with pyridylmethanols

10:15 - 10:40 2P08 Zuzana Vasková, Jan Moncol, Aleš Růžička, Dušan Valigura  
Vlastnosti nitrobenzoátomednatých komplexov s 2,6-pyridíndimetanolom

**10:40 - 11:10**  
**Prestávka s občerstvením**

11:10 - 11:35 2P09 Ivan Němec, Irena Matulková, Ivana Císařová, Karel Teubner  
Studium slabých vodíkových vazeb u nelineárních optických materiálů na bázi sloučen aminotriazolů

11:35 - 12:00 2P10 Václav Šícha, Jaromír Plešek, Bohumír Grüner  
Substituční deriváty metallakarboranů jako účinné inhibitory HIV-1 proteázy

12:00 - 12:25 2P11 Petr Ostřížek, Petr Bezdička, Zdeněk Moravec, Jiří Pinkas  
Nanoscopic cobalt ferrite particles by sonolysis of metal acetylacetonate complexes

20:00 - 21:00 **80 rokov SCHS, slávnostný seminár**

20:00 - 24.00 Po **Posterová prezentácia 2: 1Po30-1Po58, 2Po31-2Po60, 3Po40-3Po78, 4Po02, 5Po11-5Po20, 6Po04-6Po06**

**Štvrtok, 10. september 2009**

**08:30 - 09:20 PP5**  
(miestnosť Sekcie 1) Roman Szűcs, Melissa Hanna-Brown a Pat Sandra  
Vplyv inovácie v separačných metódach na vývoj nových farmaceuticky aktívnych látok a produktov

**08:30 - 09:20 PP6**  
(miestnosť Sekcie 3) Jozef Lehotay  
Význam analytickej chémie v súčasnosti

09:20 - 09:25 Presun do sekcií

09:25 - 09:50 2P12 Milan Drábik  
Niekoľko poznámok k obsahu pojmu a definícii materiálovej chémie

09:50 - 10:15 2P13 Malgorzata M. Zaitz, Katarzyna Furczoń, Marcin Molenda, Lucjan Chmielarz, Zofia Piwowarska, Barbara Dudek, Alicja Rafalska-Lasocha and Roman Dziembaj  
Nanostructured ceria doped with metal ions obtained by the reverse microemulsion method as a catalyst for VOCs oxidation

10:15 - 10:40 2P14 Z. Klika, P. Pustková, P. Čapková, M. Dudová  
Montmorillonite intercalates with protonated methylene blue cations

<b>10:40 - 11:10</b>		<b>Prestávka s občerstvením</b>
11:10 - 11:35	2P15	<u>Jaromír Hnát</u> , Martin Paidar, Karel Bouzek, Jan Žitka a Jan Schauer Alkalické polymerní membrány pro alkalickou elektrolýzu vody
11:35 - 12:00	2P16	<u>Marián Janek</u> , Marián Matejdes, Atilla Gaál, Ignác Bugár, Vojtech Szöcz, Dušan Velič, Juraj Darmo Stanovenie dielektrických vlastností slúď pomocou terahertzovej spektroskopie s časovým rozlíšením
12:00 - 12:25	2P17	<u>Mosinger Jiří</u> , Lang Kamil, Kubát Pavel Studium polymerních nanotkanin s enkapsulovanými a externě vázanými fotosenzitizery
<b>12:30 - 14:20</b>		<b>Obed</b>
<b>14:20 - 15:10</b>	<b>PP7</b>	Vladimír Kvasnička Umelá chémia a Darwinova evolúcia
(miestnosť Sekcie 1)		
<b>14:20 - 15:10</b>	<b>PP8</b>	Ľubomír Held, <u>Ján Reguli</u> "Last Reaction Hero" – Hrozí koniec chemikov na Slovensku?
(miestnosť Sekcie 3)		
15:10 - 15:15		Presun do sekcií
15:15 - 15:40	2P18	<u>Barbora Doušová</u> , Lucie Fuitová, Lenka Herzogová, David Koloušek, Ivo Šafařík, Tomáš Grygar, Vladimír Machovič, Miloslav Lhotka, Jan Filip Příprava anionaktivních sorbentů z odpadních materiálů – nové možnosti v dekontaminačních postupech
15:40 - 16:05	2P19	<u>Ivana Luštická</u> , Eliška Leitmannová, Libor Červený Imobilizace aktivních substancí
16:05 - 16:30	2P20	<u>Libor Kvítek</u> , Miroslava Vandlíčková, Petr Blažek, Aleš Panáček, Robert Pucek, Taťjana Nevěčná, Radek Zbořil Příprava nanočástic stříbra modifikovanou Tollensovou reakcí
<b>16:30 - 17:00</b>		<b>Prestávka s občerstvením</b>
17:00 - 17:25	2P21	<u>Jan Moncol</u> , Zuzana Vasková, Jozef Halaška, Aleš Růžička Synthesis, structure and supramolecular hydrogen-bonding networks of dimeric benzoatocopper(II) complexes with n-methylnicotinamide

**Piatok, 11. september 2009**

11:10 - 12:00 Panelová diskusia, záver

**Sekcia 3: Organická chémia a polyméry**

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (červený farebný kód)

**Utorok, 8. september 2009**

<b>14:20 - 15:10</b>	<b>PP1</b>	<u>Jozef Rychlý</u> , Lýdia Rychlá Svetelná emisia z teplom iniciovanej oxidácie polymérov a jej vzťah so zvyškovou stabilitou polymérneho materiálu
(miestnosť Sekcie 1)		
<b>14:20 - 15:10</b>	<b>PP2</b>	Jitka Ulrichová Polyfenoly – od fytochemie k funkční potravine?
(miestnosť Sekcie 3)		
15:10 - 15:15		Presun do sekcií
15:15 - 15:25		<b>Úvodná informácia garanta sekcie</b>
15:25 - 15:50	3P01	Mária Omastová

15:50 - 16:15	3P02	Úloha tenzidov pri príprave vodivých polymérov a kompozitov N. V. Blinova, M. Trchová, J. Stejskal A new approach for the synthesis of polyaniline with separated reactants
<b>16:15 - 16:45</b>		<b>Prestávka s občerstvením</b>
16:45 - 17:10	3P03	<u>Bohumil Kratochvíl</u> , Michaela Hájková, Michal Hušák Pevné formy molekúl
17:10 - 17:35	3P04	<u>Oldřich Pytela</u> , Filip Bureš Solvatochromie jako nástroj studia sloučenin s nelineárními optickými vlastnostmi
17:35 - 18:00	3P05	<u>Jaroslav Kvičala</u> , Michal Beneš, Oldřich Paleta Teoretická studie nukleofilní aromatické substituce na 2,3,4,5,6-pentafluorbifenyly
20:00 - 24.00	Po	<b>Posterová prezentácia 1: 1Po01-1Po29, 2Po01-2Po30, 3Po01-3Po39, 4Po01, 5Po01-5Po10, 6Po01-6Po03</b>

**Streda, 9. september 2009**

<b>08:30 - 09:20</b>	<b>PP3</b>	Róbert Mistrík De novo určovanie chemickej štruktúry látok pomocou tandemovej hmotnostnej spektrometrie
(miestnosť Sekcie 1)		
<b>08:30 - 09:20</b>	<b>PP4</b>	Vladimír Filip Možnosti využití rostlinných olejů
(miestnosť Sekcie 3)		
09:20 - 09:25		Presun do sekcii
09:25 - 09:50	3P06	<u>Štefan Marchalín</u> , Jozefína Žúžiová a Peter Šafář Stereoselektivna syntéza substituovaných indolizidinolov
09:50 - 10:15	3P07	<u>Miroslav Sural</u> , Jan Hlaváč, Pavel Hradil, Marián Hajdúch Efficient Synthesis and Cytotoxic Activity of Some Symmetrical Disulfides Derived from the 4(1 <i>H</i> )-Quinolinone Skeleton
10:15 - 10:40	3P08	<u>Soňa Křupková</u> , Miroslav Sural and Jan Hlaváč Efficient Solid-Phase Synthesis of 6-Nitro-3-Hydroxy-4(1 <i>H</i> )-Quinolinones with Two Diversity Positions
<b>10:40 - 11:10</b>		<b>Prestávka s občerstvením</b>
11:10 - 11:35	3P09	<u>Ján Imrich</u> , Mária Vilková, Jana Tomaščíková, Zdenka Bedlovičová, Eva Balentová, Karel D. Klika Nové tiomočoviny a tiosemikarbazidy akridínu a ich cyklizačné reakcie
11:35 - 12:00	3P10	<u>Pavel Pazdera</u> , Barbora Andělová, Vladimíra Datinská, Marcela Chmielová, Dana Němečková, Jan Šimbera a Karel Zelinka Ionexy jako imobilizátory pro katalytické systémy v čistších syntézách
12:00 - 12:25	3P11	<u>Naděžda Pudelová</u> , Isabelle Bouillon, Jaroslav Zajíček, Jan Kočí, and Viktor Krchňák Solid-phase synthesis of diverse heterocycles from polymer-supported amino ketones
20:00 - 21:00		<b>80 rokov SCHS, slávnostný seminár</b>
20:00 - 24.00	Po	<b>Posterová prezentácia 2: 1Po30-1Po58, 2Po31-2Po60, 3Po40-3Po78, 4Po02, 5Po11-5Po20, 6Po04-6Po06</b>

Štvrtok, 10. september 2009

<b>08:30 - 09:20 PP5</b> (miestnosť Sekcie 1)	<u>Roman Szücs</u> , Melissa Hanna-Brown a Pat Sandra Vplyv inovácie v separačných metódach na vývoj nových farmaceuticky aktívnych látok a produktov
<b>08:30 - 09:20 PP6</b> (miestnosť Sekcie 3)	Jozef Lehotay Význam analytickej chémie v súčasnosti
09:20 - 09:25	Presun do sekcií
09:25 - 09:50 3P12	<u>Luboš Prokúpek</u> , Tereza Titěrová, Vladimír Špaček, Miroslav Večeřa, Jiří Podešva, Jana Kovářová Ověření vlastností směsných polymerních stabilizátorů na modelových polyurethanových systémech
09:50 - 10:15 3P13	<u>Petr Sysel</u> , Martina Traxmandlová, Evgenia Minko Vysoce větvené polyimidy na bázi tris(2-aminoethyl)aminu
10:15 - 10:40 3P14	Jozef Lustoň, Juraj Kronek Iniciátory pre kationovú polymerizáciu cyklických imino éterov
<b>10:40 - 11:10</b>	<b>Prestávka s občerstvením</b>
11:10 - 11:35 3P15	<u>Michal Černý</u> , Zdeňka Blechová, Ladislav Burgert, Lucia Krištofiková Optimalizace barvení celulóзовých materiálů kypovými barvivы
11:35 - 12:00 3P16	<u>Ladislav Svoboda</u> , Miroslav Večeřa, Luboš Prokúpek, Miroslav Štancel Optimalizace podmínek vytvrzování polymerních nosičů identifikačních tělísek pro výbušiny
12:00 - 12:25 3P17	<u>Silvia Podobeková</u> , Anna Ujhelyiová Potlač polyetylentereftalátových textílií za účelom zlepšenia bariérových vlastností
<b>12:30 - 14:20</b>	<b>Obed</b>
<b>14:20 - 15:10 PP7</b> (miestnosť Sekcie 1)	Vladimír Kvasnička Umelá chémie a Darwinova evolúcia
<b>14:20 - 15:10 PP8</b> (miestnosť Sekcie 3)	Lubomír Held, <u>Ján Reguli</u> "Last Reaction Hero" – Hrozí koniec chemikov na Slovensku?
15:10 - 15:15	Presun do sekcií
15:15 - 15:40 3P18	<u>Martin Hrubý</u> , Čestmír Koňák, Jan Kučka, Miroslav Vetrík, Sergey K. Filippov, Karel Ulbrich, Ondřej Lebeda Termoresponsivní polymerní micely jako potenciální radiofarmaka
15:40 - 16:05 3P19	<u>Michal Pechar</u> , Robert Pola, Libor Kostka, Karel Ulbrich, Lucie Bednárová, Petr Maloň, Vlastimil Král, Irena Siegllová, Milan Fábry Hybridní kopolymery obsahující coiled coil motiv pro řízenou dopravu a směrování léčiv
16:05 - 16:30 3P20	<u>Monika Horáková</u> , Alena Hýbnerová, Ladislav Burgert, Jitka Kunstová, Gabriela Krylová Vývoj samosekvestrujících biodegradabilních tenzidů
<b>16:30 - 17:00</b>	<b>Prestávka s občerstvením</b>
17:00 - 17:25 3P21	<u>Vladimír Proks</u> , František Rypáček Syntetický fibronectin mimetický ligand pro integriny zprostředkovanou adhezi buněk na biomateriály
17:25 - 17:50 3P22	<u>Ivana Šeděnková</u> , Miroslava Trchová, Jan Pilař Infrared spectra measured during Polymer weathering evaluated by factor analysis
17:50 - 18:15 3P23	Miroslav Večeřa, Luboš Prokúpek, Ladislav Svoboda, Petr Lebeda Charakterizace akrylátových disperzí metodou A4F-MALS

**Piatok, 11. september 2009**

08:30 - 08:55	3P24	<u>Lucie Brulíková</u> , Jan Hlaváč Synthesis of 5-modified uridine analogues and study of their cytotoxic activity
08:55 - 09:20	3P25	<u>Jana Raschmanová</u> , Michaela Slaninková, Miroslava Martinková, Jozef Gonda, Juraj Kuchár Stereoselektivná syntéza vysokofunkcionalizovaného prekursora polárnej časti (-)-sfingofungínu E
09:20 - 09:45	3P26	<u>B. Eignerová</u> , M. Dračínský, M. Buděšínský, and M. Kotora Perfluoroalkylation via cross-metathesis and its application in a synthesis of biological active compounds
<b>09:45 - 10:15</b>		<b>Prestávka s občerstvením</b>
10:15 - 10:40	3P27	<u>Jiří Ludvík</u> , Irena Hoskovcová, Stanislav Záliš Molekulární elektrochemie – vhodný prostředek ke studiu elektronové struktury a reaktivity Fischerových aminokarbenů chromu a železa
10:40 - 11:05	3P28	Abdul Wahab, Michal Valasek, Stursa Jan, Josef Michl, Jiri Klima, and Jiri Ludvik Electrooxidation behavior of substituted $CB_{11}H_{12}^-$ anions in LIQuid $SO_2$ and Hammett equation
11:10 - 12:00		<b>Panelová diskusia, záver</b>

**Sekcia 4: Vyučovanie a história chémie**

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (fialový farebný kód)

**Utorok, 8. september 2009**

<b>14:20 - 15:10</b>	<b>PP1</b>	<u>Jozef Rychlý</u> , Lýdia Rychlá Svetelná emisia z teplom iniciovanej oxidácie polymérov a jej vzťah so zvyškovou stabilitou polymérneho materiálu
(miestnosť Sekcie 1)		
<b>14:20 - 15:10</b>	<b>PP2</b>	Jitka Ulrichová Polyfenoly – od fytochemie k funkční potravine?
(miestnosť Sekcie 3)		
15:10 - 15:15		Presun do sekcií
15:15 - 15:25		<b>Úvodná informácia garanta sekcie</b>
15:25 - 15:50	4P01	<u>Hana Čtrnáctová</u> , Pavel Drašar, Eva Stratilová Urválková, Jiří Zajíček CITIES: evropský projekt pro učitele chemie středních škol
15:50 - 16:15	4P02	Eva Stratilová Urválková, Hana Čtrnáctová, Šárka Matoušková CITIES: mezinárodní webová prezentace projektu
<b>16:15 - 16:45</b>		<b>Prestávka s občerstvením</b>
16:45 - 17:10	4P03	<u>Renata Šulcová</u> , Hana Böhmová, Eva Stratilová Urválková, Barbora Zákostelná CITIES: Materiály pro zajímavé experimentální činnosti
17:10 - 17:35	4P04	Hana Böhmová, Hana Čtrnáctová, Renata Šulcová, Eva Stratilová Urválková CITIES: Aktuality pro učitele v chemickém vzdělávání

17:35 - 18:00	4P05	Marie Vasilešková Hodnocení v chemii jako součást nové státní maturity v ČR
20:00 - 24.00	Po	<b>Posterová prezentácia 1: 1Po01-1Po29, 2Po01-2Po30, 3Po01-3Po39, 4Po01, 5Po01-5Po10, 6Po01-6Po03</b>

**Streda, 9. september 2009**

<b>08:30 - 09:20</b>	<b>PP3</b>	Róbert Mistrík De novo určovanie chemickej štruktúry látok pomocou tandemovej hmotnostnej spektrometrie
(miestnosť Sekcie 1)		
<b>08:30 - 09:20</b>	<b>PP4</b>	Vladimír Filip Možnosti využitií rostlinných olejů
(miestnosť Sekcie 3)		
09:20 - 09:25		Presun do sekcií
09:25 - 09:50	4P06	Beata Vranovičová Vplyv neverbálnych prostriedkov v zadaní chemickej výpočtovej úlohy na výber spôsobu jej riešenia
09:50 - 10:15	4P07	<u>D. Sýkorová</u> , O. Smrčková Základní laboratoře pro středoškolské studenty
10:15 - 10:40	4P08	Eva Kostolányiová, Katarína Javorová Ako pracovať s talentovanou mládežou?
<b>10:40 - 11:10</b>		<b>Prestávka s občerstvením</b>
11:10 - 11:35	4P09	Jozef Čársky Vznik a činnosť slovensko-podkarpatskoruskej odbočky ČSSCH (príprava chemického zjazdu, ktorý sa mal konať v Bratislave)
11:35 - 12:00	4P10	Jozef Čársky, Michal Uher História tradičných zjazdov slovenských a českých chemikov v Banskej Štiavnici
12:00 - 12:25	4P11	Miloš Jesenský Historical outline of slovak alchemy
20:00 - 21:00		<b>80 rokov SCHS, slávnostný seminár</b>
20:00 - 24.00	Po	<b>Posterová prezentácia 2: 1Po30-1Po58, 2Po31-2Po60, 3Po40-3Po78, 4Po02, 5Po11-5Po20, 6Po04-6Po06</b>

**Štvrtok, 10. september 2009**

<b>08:30 - 09:20</b>	<b>PP5</b>	<u>Roman Szücs</u> , Melissa Hanna-Brown a Pat Sandra Vplyv inovácie v separačných metódach na vývoj nových farmaceuticky aktívnych látok a produktov
(miestnosť Sekcie 1)		
<b>08:30 - 09:20</b>	<b>PP6</b>	Jozef Lehotay Význam analytickej chémie v súčasnosti
(miestnosť Sekcie 3)		
09:20 - 09:25		Presun do sekcií
09:25 - 09:50	4P12	<u>Jiří Jiráť</u> , Eva Dibuszová Nové možnosti licencování elektronických výukových materiálů – Licence Creative Commons
09:50 - 10:15	4P13	<u>Jiří Znamenáček</u> , Michal Božoň, Bedřich Košata ESO – jednotný celoškolský rozcestník elektronickýCH studijníCH materiálů VŠCHT Praha
10:15 - 10:40	4P14	<u>Jitka Součková</u> , Lukáš Müller, Jana Skopalová Programovaná učebnice elektroanalytických metod
<b>10:40 - 11:10</b>		<b>Prestávka s občerstvením</b>



11:10 - 11:35	4P15	Vratislav Flemr Ústav anorganické chémie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze
11:35 - 12:00	4P16	Iva Dudková Celoživotní vzdělávání na VŠCHT Praha
12:00 - 12:25	4P17	Jaroslav Šilhánek Chemisches Zentralblatt – historická súčasnosť
<b>12:30 - 14:20</b>		<b>Obed</b>
<b>14:20 - 15:10</b>	<b>PP7</b>	Vladimír Kvasnička Umelá chémia a Darwinova evolúcia
(miestnosť Sekcie 1)		
<b>14:20 - 15:10</b>	<b>PP8</b>	Ľubomír Held, <u>Ján Reguli</u> "Last Reaction Hero" – Hrozí koniec chemikov na Slovensku?
(miestnosť Sekcie 3)		

**Piatok, 11. september 2009**

11:10 - 12:00 **Panelová diskusia, záver**

**Sekcia 5: Potravinárstvo, životné prostredie a biotechnológia**

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (oranžový farebný kód)

**Utorok, 8. september 2009**

<b>14:20 - 15:10</b>	<b>PP1</b>	<u>Jozef Rychlý</u> , Lýdia Rychlá Svetelná emisia z teplom iniciovanej oxidácie polymérov a jej vzťah so zvyškovou stabilitou polymérneho materiálu
(miestnosť Sekcie 1)		
<b>14:20 - 15:10</b>	<b>PP2</b>	Jitka Ulrichová Polyfenoly – od fytochémie k funkčnej potravine?
(miestnosť Sekcie 3)		
15:10 - 15:15		Presun do sekcií
15:15 - 15:25		<b>Úvodná informácia garanta sekcie</b>
15:25 - 15:50	5P01	<u>Agáta Fargašová</u> Fytotoxicita a genotoxicita chrómu a niklu
15:50 - 16:15	5P02	<u>Daniela Borošová</u> , Iveta Nagyová, Zuzana Melichová Arsenic contamination of surface and ground waters at the Ľubietová deposit (Central Slovakia)
<b>16:15 - 16:45</b>		<b>Prestávka s občerstvením</b>
16:45 - 17:10	5P03	<u>Zuzana Kramarová</u> and Agáta Fargašová The effect of arsenic and selenium on the growth and chlorophyll production of <i>Desmodemus quadricauda</i> and <i>Pseudokirchneriella subcapitata</i>
17:10 - 17:35	5P04	<u>Alžběta Petraková</u> , Eliška Chrpová, Hana Ledererová Omezení růstu bakterií na textiliích a ochrana životního prostředí
17:35 - 18:00	5P05	<u>Martin Kubala</u> , Marika Janovská, Vilím Šimánek, Jitka Ulrichová Studium interakce sanguinarinu s Na <sup>+</sup> /K <sup>+</sup> -ATPázou metodami fluorescenční spektroskopie
20:00 - 24.00	Po	<b>Posterová prezentácia 1: 1Po01-1Po29, 2Po01-2Po30, 3Po01-3Po39, 4Po01, 5Po01-5Po10, 6Po01-6Po03</b>

**Streda, 9. september 2009**

<b>08:30 - 09:20</b>	<b>PP3</b>	Róbert Mistrík
(miestnosť Sekcie 1)		De novo určovanie chemickej štruktúry látok pomocou tandemovej hmotnostnej spektrometrie
<b>08:30 - 09:20</b>	<b>PP4</b>	Vladimír Filip
(miestnosť Sekcie 3)		Možnosti využitií rostlinných olejů
09:20 - 09:25		Presun do sekcií
09:25 - 09:50	5P06	<u>Pavel Zachař</u> , Vladimír Král
		Katalyzátory na bázi metaloporfyrinů – nástroj k modelování působení vybraných enzymů
09:50 - 10:15	5P07	<u>J. Lipovský</u> , M. Linhová, P. Fribert, P. Patáková, M. Rychtera, K. Melzoch
		Uspořádání kultivačního procesu pro produkci butanolu
10:15 - 10:40	5P08	<u>P. Fribert</u> , J. Lipovský, M. Linhová, P. Patáková, M. Rychtera, K. Melzoch
		Optimalizace stripování plynem při separaci 1-butanolu z kultivačního media během fermentačního procesu
<b>10:40 - 11:10</b>		<b>Prestávka s občerstvením</b>
11:10 - 11:35	5P09	<u>Michaela Linhová</u> , Petra Patáková, Petr Fribert, Jakub Lipovský, Mojmir Rychtera, Karel Melzoch
		Sledování morfologických a fyziologických změn u bakterií rodu <i>clostridium</i> s využitím průtokové cytometrie
11:35 - 12:00	5P10	<u>Daniela Smogrovicova</u> , Pavol Nadasky, B. S. Wilhelmi, R. Tandlich, R. Morrison, G. Cambray
		Slovak and south African Mead
12:00 - 12:25	5P11	<u>Ludmila Zajoncova</u> , Michaela Pečová, Marek Šebela, Zdenka Marková, Radek Zbořil, Kateřina Kluchová, Jan Čuda and Dalibor Jančík
		Immobilization of enzymes on superparamagnetic nanoparticles
20:00 - 21:00		<b>80 rokov SCHS, slávnostný seminár</b>
20:00 - 24:00	Po	<b>Posterová prezentácia 2: 1Po30-1Po58, 2Po31-2Po60, 3Po40-3Po78, 4Po02, 5Po11-5Po20, 6Po04-6Po06</b>

**Štvrtok, 10. september 2009**

<b>08:30 - 09:20</b>	<b>PP5</b>	<u>Roman Szűcs</u> , Melissa Hanna-Brown a Pat Sandra
(miestnosť Sekcie 1)		Vplyv inovácie v separačných metódach na vývoj nových farmaceuticky aktívnych látok a produktov
<b>08:30 - 09:20</b>	<b>PP6</b>	Jozef Lehotay
(miestnosť Sekcie 3)		Význam analytickej chémie v súčasnosti
09:20 - 09:25		Presun do sekcií
09:25 - 09:50	5P12	<u>Andriy Synytsya</u> , Alla Synytsya, Roman Bleha, Jan Brindza
		Třídění květových a včelích pylů: využití spektroskopických a statistických metod
09:50 - 10:15	5P13	<u>Stanislav Sekretár</u> , Kristína Hovančíková, Štefan Schmidt
		Trendy v balení potravin
10:15 - 10:40	5P14	<u>Barbora Hrvolová</u> , Jiří Kalina
		Selektivní extrakce vybraných karotenoidů

**10:40 - 11:10**

11:10 - 11:35 5P15

**Prestávka s občerstvením**

Štefan Schmidt, František Kreps, Zlatica Kohajdová, Stanislav Sekretár

Trans fatty acid content in slovak margarines

**12:30 - 14:20**

**14:20 - 15:10 PP7**

(miestnosť Sekcie 1)

**14:20 - 15:10 PP8**

(miestnosť Sekcie 3)

**Obed**

Vladimír Kvasnička

Umelá chémia a Darwinova evolúcia

Ľubomír Held, Ján Reguli

"Last Reaction Hero" – Hrozí koniec chemikov na Slovensku?

**Piatok, 11. september 2009**

11:10 - 12:00

**Panelová diskusia, záver**

**Sekcia 6: CHEMPROGRESS**

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (zelený farebný kód)

**Utorok, 8. september 2009**

**14:20 - 15:10 PP1**

(miestnosť Sekcie 1)

Jozef Rychlý, Lýdia Rychlá

Svetelná emisia z teplom iniciovanej oxidácie polymérov a jej vzťah so zvyškovou stabilitou polymérneho materiálu

**14:20 - 15:10 PP2**

(miestnosť Sekcie 3)

Jitka Ulrichová

Polyfenoly – od fytochemie k funkčnej potravine?

15:10 - 15:15

Presun do sekcií

15:15 - 15:25

**Úvodná informácia garanta sekcie**

15:25 - 15:50 6P01

M. Bajus, B. Mlynková

Copyrolysis and cocracking of oil fractions with polymeric wastes by chemical recycling

15:50 - 16:15 6P02

Petr Zámotný, Adam Karaba, Zdeněk Bělohav

Matematický model pyrolýzy uhlovodíků s automatickým generovaním sítě reakcí

**16:15 - 16:45**

16:45 - 17:10 6P03

**Prestávka s občerstvením**

J. Lederer, F. Nečesaný, V. Veselý, J. Kukačka

Možnosti zpracování směsných odpadních plastů jako alternativní palivo

17:10 - 17:35 6P04

Václav Veselý, Jiří Hanika, Jaromír Lederer, František Nečesaný a Vratislav Tukač

Ekonomické aspekty recyklace polyetylenotereftalátu

17:35 - 18:00 6P05

R. Dvorsky

From structural biology to the drugs against inflammatory bowel diseases

20:00 - 24:00 Po

**Posterová prezentácia 1: 1Po01-1Po29, 2Po01-2Po30, 3Po01-3Po39, 4Po01, 5Po01-5Po10, 6Po01-6Po03**

**Streda, 9. september 2009**

**08:30 - 09:20 PP3**

Róbert Mistrík

(miestnosť Sekcie 1)		De novo určovanie chemickej štruktúry látok pomocou tandemovej hmotnostnej spektrometrie
<b>08:30 - 09:20</b>	<b>PP4</b>	Vladimír Filip
(miestnosť Sekcie 3)		Možnosti využitií rostlinných olejů
09:20 - 09:25		Presun do sekcií
09:25 - 09:50	6P06	<u>Viktor Milata</u>
		Zelená chémia – áno či nie ?
09:50 - 10:15	6P07	<u>Ján Cvengroš</u> , Jozef Mikulec
		Biopalivá a ich perspektívy
10:15 - 10:40	6P08	<u>Jakub Mališ</u> , Martin Paidar
		Vliv provozních parametrů na výkon palivových článků
<b>10:40 - 11:10</b>		<b>Prestávka s občerstvením</b>
11:10 - 11:35	6P09	Vdovjak Ladislav
		Konverzia vákuového zvyšku na jednotke LC-Fining v rafinérii Slovnaft
11:35 - 12:00	6P10	<u>Magdaléna Štolcová</u> and Milan Hronec
		Synthesis and application of benzothiazolythio-substituted alkylaminopropene
12:00 - 12:25	6P11	<u>Martin Zapletal</u>
		Syntéza vybraných aminoetherů v plynné fázi
20:00 - 21:00		<b>80 rokov SCHS, slávnostný seminár</b>
20:00 - 24:00	Po	<b>Posterová prezentácia 2: 1Po30-1Po58, 2Po31-2Po60, 3Po40-3Po78, 4Po02, 5Po11-5Po20, 6Po04-6Po06</b>

**Štvrtok, 10. september 2009**

<b>08:30 - 09:20</b>	<b>PP5</b>	<u>Roman Szűcs</u> , Melissa Hanna-Brown a Pat Sandra
(miestnosť Sekcie 1)		Vplyv inovácie v separačných metódach na vývoj nových farmaceuticky aktívnych látok a produktov
<b>08:30 - 09:20</b>	<b>PP6</b>	Jozef Lehotay
(miestnosť Sekcie 3)		Význam analytickej chémie v súčasnosti
09:20 - 09:25		Presun do sekcií
09:25 - 09:50	6P12	Pavol Šajgalík, Miroslav Boča
		MACHINA - Centrum pre <u>M</u> ateriály, vrstvy a systémy pre <u>A</u> plikácie a <u>C</u> hemické procesy v extrémnych podmienkach
09:50 - 10:15	6P13	<u>Roman Kodým</u> , Petr Klein, Karel Bouzek, Pavel Novák
		Komplexní dynamický model procesů probíhajících u povrchu katodicky chráněné kovové konstrukce uložené v půdě
10:15 - 10:40	6P14	<u>Ladislav Kudrlička</u> , Jana Kolesárová a Josef Kozler
		Měření a vyhodnocování dynamické adsorpce těžkých kovů na přírodních sorbentech s obsahem huminových látek
<b>10:40 - 11:10</b>		<b>Prestávka s občerstvením</b>
11:10 - 11:35	6P15	<u>A. Vincze</u> , A. Šatka, D. Haško, M. Janek, V. Danielik, F. Uherek, J. Matuška
		Chemical analysis and Surface investigation of Pyrolytic Boron Nitride (PBN)
11:35 - 12:00	6P16	<u>Igor Novák</u> , Galina K. Elyashevich, Ivan Chodák, Marian Števiar, Angela Kleinová, Vladimír Pollák
		Polyethylene membranes treated by argon barrier discharge plasma
12:00 - 12:25	6P17	<u>V. Hanta</u> , J. Poživil
		Use of discrete event systems as means of building computer

		models of batch plants
<b>12:30 - 14:20</b>		<b>Obed</b>
<b>14:20 - 15:10</b>	<b>PP7</b>	Vladimír Kvasnička
(miestnosť Sekcie 1)		Umelá chémia a Darwinova evolúcia
<b>14:20 - 15:10</b>	<b>PP8</b>	Lubomír Held, <u>Ján Reguli</u>
(miestnosť Sekcie 3)		"Last Reaction Hero" – Hrozí koniec chemikov na Slovensku?
15:10 - 15:15		Presun do sekcií
15:15 - 15:40	6P18	<u>Benčíková Eleonóra</u> , Berešík Marián, Ondrášiková Katarína
		Functional materials in health service institutions
15:40 - 16:05	6P19	<u>Karol Rakottyay</u> , Alexander Kaszonyi
		Katalytická oxidácia cyklohexylamínu
16:05 - 16:30	6P20	<u>Blažej Horváth</u> and Milan Hronec
		Gas-phase epoxidation of propylene
<b>16:30 - 17:00</b>		<b>Prestávka s občerstvením</b>
 <b>Piatok, 11. september 2009</b>		
11:10 - 12:00		<b>Panelová diskusia, záver</b>
 <b>Cena Shimadzu 2009</b>		
 <b>Štvrtok, 10. september 2009</b>		
15:15 - 15:30		<u>Čacho František</u> , Manová Alena, Beinrohr Ernest
		Stanovenie stopových koncentrácií ortuti technikou ETAAS po elektrochemickej úprave vzorky
15:30 - 15:45		<u>Petr Dobiáš</u> , Petra Pavlíková, Martin Adam, Karel Ventura
		Pressurised fluid and ultrasonic extraction methods for analysis of plant antioxidants and their antioxidant capacity
15:45 - 16:00		<u>Jakub Hraníček</u> , Václav Červený, Petr Rychlovský
		Stanovení ultrastopových koncentrací arsenu a selenu v pitných vodách metodou ECHG-QFAAS
16:00 - 16:15		<u>Peter Kalafut</u> , Radim Kučera, Jiří Klimeš
		Možnosti využití stacionárních fází na bázi oxidu zirkoničitého ve farmaceutické analýze
16:15 - 16:30		<u>Kateřina Pešlová</u> , Petr Novák, Tomáš Obšil, Miroslav Šulc
		Protein-proteinové interakce pohledem hmotnostní spektrometrie
<b>16:30 - 17:00</b>		<b>Prestávka s občerstvením</b>
17:00 - 17:15		<u>Lukáš Rámbošek</u> , Syslová Kamila, Petr Kačer
		Determination of dopamine and its metabolites by LC-ESI-MS/MS in rat brain microdialysis samples
17:15 - 17:30		<u>Václav Ranc</u> , Vladimír Halvíček, Petr Bednář and Karel Lemr
		Instrumental and experimental parameters important for chiral analysis by the kinetic method
17:30 - 17:45		<u>Júlia Ričanyová</u> , Renata Gadzala-Kopciuch, Katarína Reiffová, Boguslaw Buszewski
		Supramolecular recognition of steroids from biological fluids
17:45 - 18:00		<u>Andrea Staňová</u> , Jozef Marák, Soňa Žakovičová and Dušan Kaniansky
		Preparative isotachopheresis as a sample pretreatment technique for mass spectrometry
18:00 - 18:15		<u>Monika Stupavská</u> , Monika Aranyosiová, Dušan Velič
		Matrice na báze uhlíka v hmotnostnej spektrometrii sekundárnych iónov pri analýze makromolekul