Regionální a výukové centrum REACH a chemické bezpečnosti

Regionální a výukové centrum REACH a chemické bezpečnosti (REACH centrum) vzniklo 1. 9. 2012 díky pochopení a podpoře vedení Vysoké školy báňské - Technické univerzity Ostrava (VŠB-TUO) a účelové dotaci Státního fondu životního prostředí v rámci Operačního programu Životní prostředí na projekt „Regionální a výukové centrum REACH a chemické bezpečnosti“ (CZ.1.02/5.1.00/10.09757). Centrum je součástí Výzkumného energetického centra (VEC) VŠB-TUO. Centra je výzkum, vývoj a vzdělávání v oblasti managementu rizik chemických látek. Další významnou činností je poskytování poradenství a služeb podnikům při zavádění chemické legislativy REACH a CLP do praxe. Součástí REACH centra je laboratoř pro zkoušení fyzikálně-chemické nebezpečnosti chemických látek a laboratoř pro měření nanočástic v ovzduší.

Služby

- Poradenství, školení, vzdělávání a osvěta v oblasti hodnocení a řízení rizik chemických látek (vč. nanomateriálů) a chemické legislativy REACH a CLP
- Komplexní literární rešerše o nebezpečnosti chemických látek
- Bezpečnostní listy
- Klasifikace látek a směsí
- Registrační dokumentace (registrační dossier)
- Zpráva o chemické bezpečnosti
- Žádost o povolení (zhodnocení rizik, analýza alternativ, socioekonomická analýza)
- Oznámení (notifikace) nebezpečných chemických látek
- Komunikace s Agenturou ECHA
- Stanovení fyzikálně-chemických vlastností pro účely CLP, ADR a RID (bod vzplanutí, hořlavost, samozápalnost, výbušné vlastnosti, relativní teplota samozápalu pevných látek)

Více informací naleznete na:
http://vec.vsb.cz/cz/centrum-inef/regionalni-a-vyukove-centrum-reach-a-chemicke-bezpecnosti.html

ORGANIZAČNÍ VÝBOR SJEZDU

Kamila Kočí (předsedkyně)
Lucie Obalová
Vladimíra Plačková
Martin Mucha
Jiří Pavlovský
Václav Slovák
Bedřich Smetana
Viktor Milata

VĚDECKÝ VÝBOR SJEZDU

Jan John (předseda)
Mária Omastová (místopředsedkyně)
Dana Kričfaluši
Pavel Matějka
Oldřich Pytela
Petra Šulcová
Jitka Ulrichová
Tomáš Wágner
Kamil Wichterle

SEKCE SJEZDU A JEJICH GARANTI

1. **Anorganická a materiálová chemie**
   Tomáš Wágner

2. **Analytická a fyzikální chemie**
   Pavel Matějka

3. **Organická chemie a polymery**
   Oldřich Pytela

4. **Životní prostředí, potravinářství a toxikologie**
   Jitka Ulrichová

5. **Výuka a historie chemie**
   Dana Kričfaluši

6. **Termická analýza**
   Petra Šulcová

7. **Průmyslová chemie a inženýrství**
   Kamil Wichterle

Vážení účastníci 66. sjezdu českých a slovenských chemických společností, milí čtenáři,

srpnové číslo Chemických listů je opět věnováno abstraktům přednášek a posterům, které tvoří program 66. sjezdu českých a slovenských chemických společností. Jeho organizací byla Českou společností chemickou pověřena ostravská pobočka a záštitu sjezdu převzala Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava. Generální sponzorem sjezdu je BorsodChem MCHZ, s.r.o.

Během třídenního sjezdového jednání bude představeno celkem 155 odborných příspěvků, z nichž 75 bude prezentováno formou přednášky a 80 formou plakátového sdělení. Příspěvky jsou rozděleny do 7 odborných sekcí a jednotlivé odborné sekce jsou v péči odborných garantů sekcí.

Letošní sjezd chemiků bude zahájen přednáškou pana profesora Ing. Ľudovíta Jelemenského, DrSc. ze Slovenské technické univerzity v Bratislavě s názvem „Příprava inženýra chemie vs. potřeby praxe“. Pan profesor je proděkanem Fakulty chemické a potravinářské technologie, zástupcem ředitele Ústavu chemického a environmentálního inženýrství, členem pracovní skupiny " Loss Prevention of the Process Industries" Evropské federace chemických inženýrů (EFCE) a člen výkonného výboru Slovenské společnosti chemického inženýrství.

Druhým plenárním řečníkem bude pan profesor RNDr. Miroslav Raab, CSc. Mnoho let byl vědeckým pracovníkem Ústavu makromolekulární chemie Akademie věd ČR, nyní je v důchodu. Nadále však spolupracuje se svým mateřským ústavem a také s Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně, Technickou univerzitou v Liberci a Vysokou školou hotelovou v Praze. Kromě patentů a vědeckých publikací v mezinárodních časopisech uveřejnil řadu populárních článků v češtině a několikrát vystoupil v rozhlase a v televizi. Jeho úspěšná kniha „Materiály a člověk, netradiční úvod do soudobé materiálové vědy“ je stále aktuální. Přednáška pana profesora Raaba nese název „Molekulární gastronomie – přívětivá část chemie“.

Poslední, ale neméně zajímavou, plenární přednášku přednese nositel slavného jména, pan profesor Ing. Kamil Wichterle, DrSc., který je autorem celé řady patentů, dlouhá léta působil na Ústavu chemických procesů Akademie věd ČR a nyní je již dvacátým rokem na VŠB - Technické univerzitě Ostrava, kde 16 let vedl katedru chemie. Přednáška je věnována jeho otci a má krásný název „Vývoj chemie a technologie ve XX. století; Případ Otto Wichterle“.

Již tradičně proběhne v rámci sekce Analytická chemie před odbornou porotou soutěž o Cenu Shimadzu, kde deset mladých chemiků představí formou krátkých ústních sdělení výsledky své práce.

Přejeme všem účastníkům, aby se jim v prostorách Nové Auly VŠB - Technické univerzity Ostrava dobře přednášelo a diskutovalo. Věříme, že si na sjezd uchováte pěkné vzpomínky a že si vás město Ostrava získá svou atmosférou a svými zajímavostmi a vy se do něj budete rádi vracet. Mnoho úspěchů ve vaší vědecké a pedagogické práci vám za organizační výbor sjezdu přejí

Kamila Kočí
Lucie Obalová

PL-01
PRÍPRAVA INŽINIERA CHÉMIE *vs.* POTREBY PRAXE

ĽUDOVÍT JELEMENSKÝ

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko
ludovit.jelemensky@stuba.sk

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie (FCHPT) ako jediná fakulta svojho druhu v Slovenskej republike má špecifické postavenie vo vzťahu k celej šírke spektra chemického, potravinárskeho, farmaceutického a spotrebného priemyslu a v ekológii. Fakulta vychováva kvalitných odborníkov pre celé spektrum chemického, potravinárskeho, farmaceutického a kozmetického priemyslu, ako aj v mnohých oblastiach záchrany objektov kultúrneho dedičstva a životného prostredia.

O kvalite a potrebe našich absolventov svedčí aj minimálna nezamestnanosť, pretože absolventi všetkých študijných programov v bakalárskom a hlavne v inžinierskom stupni sú schopní spojiť silný všeobecný prírodovedný základ s inžinierskym pohľadom a s poznatkami o chemických a biologických materiáloch, prírodných a syntetických polyméroch, čo im zabezpečuje veľkú univerzálnosť pri uplatnení sa vo vedeckej a priemyselnej praxi. Aby schopnosť absolventov aplikovať prírodovedné a inžinierske poznatky v praxi bola efektívnejšie, novo akreditované inžinierske študijné programy obsahujú predmety, v ktorých sa študentom dáva priestor na realizáciu aplikovať ich poznatky na riešenie reálnych úloh z praxe a zároveň aj sa učiť pracovať v tíme. Kľúčové predmety sú technologické projekty, letná odborná prax a aj diplomové práce, pričom ťažiskovým predmetom je letná prax, ktorú každý študent musí absolvovať v prvom ročníku inžinierskeho štúdia v minimálnej dĺžke 3 týždne a výsledky praxe prezentovať pred odbornou komisiou na fakulte a ak je možnosť aj v samotnom podniku. Zavedenie týchto predmetov do študijných program vyžaduje kvalitnú spoluprácu fakulty s podnikmi. Z toho dôvodu FCHPT zriadila Priemyselnú radu, v ktorej sú zastúpení významní odborníci z podnikov, výskumu a firiem v oblasti chémie, chemickej technológie a potravinárstva. Zámerom priemyselnej rady je užšie prepojiť akademický výskum a vzdelávanie s potrebami odberateľov našich absolventov. Jej hlavným cieľom je vytvorenie kvalitnejšej spolupráce FCHPT s priemyslom za účelom skvalitnenia výchovy absolventa do praxe.

PL-02
MOLEKULÁRNÍ GASTRONOMIE – PŘÍVĚTIVÁ TVÁŘ CHEMIE

MIROSLAV RAAB

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

Vědecký pokrok nastává často v těch oblastech, kde se jednotlivé vědecké disciplíny stýkají nebo – ještě lépe – překrývají. Příkladem takové nové interdisciplinární vědy je molekulární gastronomie. Vznikla v osmdesátých letech dvacátého století ve Francii. Společně ji založil chemik Hervé This a fyzik Nicholas Kurti. Tito badatelé si uvědomili, že mezi klasickou potravinářskou chemií na jedné straně a tradičním uměním kuchařským na straně druhé existuje „území nikoho“. Umístili do chemické laboratoře moderní kuchyňskou linku a začali analyticky zkoumat chemické přeměny při tepelné nebo mechanické úpravě potravin. Podrobili kritické analýze mnoho kuchařským pravidel, která se empiricky předávají z generace na generaci, jak mezi profesionálními kuchaři, tak i mezi zkušenými hospodyněmi. Nicholas Kurti jednou prohlásil: „Je paradoxní, že známe přesně teplotu uprostřed vzdálených planet, ale nevíme, jaká je teplota uprostřed nákypu, který se peče v troubě. A jaký by správně měl být teplotní gradient, aby se nákyp podařil.“ Molekulární gastronomie pak na základě teoretických představ postupně navrhla netradiční kuchařské postupy a metody přípravy zcela nových pokrmů s neobvyklou konzistencí nebo kombinací barev, chutí a vůní.

Bylo pak už jen otázkou času, kdy se o spolupráci v nové oblasti vědy přihlásí špičkoví šéfkuchaři v Paříži, Londýně a dokonce i v Praze. Odvážní kuchaři nyní nabízejí „zážitkovou gastronomii“ založenou na molekulárním vaření. Připravují nezvyklá jídla pomocí kapalného dusíku, tuhého oxidu uhličitého, oxidu dusného a gelů z mořských řas. Nabízejí třeba zmrzlinu z olivového oleje a čokolády připravenou v kapalném dusíku nebo překvapivou kombinaci čokolády s feferonkou. Zde se vlastně gastronomie stýká také s psychologií.

V poslední době jsou už v běžném prodeji kompletní sady pro domácí molekulární vaření. Obsahují základní chemické nádobí, potřebné chemikálie a ovšem i názornou příručku o chemických jevech v kuchyni. Pod dohledem dospělých si tak mohou i děti od osmi let vyzkoušet přípravu neobvyklých jídel a překvapit své spolužáky a rodiče. Přitom si jakoby mimochodem uvědomí, že chemie může být velmi zajímavá, atraktivní, chutná a voňavá věda.

Molekulární gastronomie tak má nyní dvě tváře: Tu teoretickou, která popisuje kuchyňskou chemii pomocí rovnic a vzorců a tu praktickou, jejíž výsledky se objeví přímo na talíři. Vědeckou úroveň molekulární gastronomie ostatně prokazuje rozsáhlý přehledný článek, který už před časem zveřejnil Peter Barham se spolupracovníky v prestižním mezinárodním časopise Chemical Review.

Cílem této přednášky je ukázat východiska molekulární gastronomie a také, jak pomáhá zlepšovat obraz chemie před veřejností. Bude doplněna praktickou ukázkou a ochutnávkou.

LITERATURA

1. Raab M.: *Molekulární gastronomie aneb molekuly, které vaříme, jíme a pijeme*. Dauphin, v tisku.
2. Mikeš V.: *Proč se klepou řízky. Chemie v kuchyni*. Dokořán, Praha 2008.
3. Barham P. a kol.: Chem. Rev. *2010*, 2313.
4. This H.: *Les secrets de la casserole*. Berin, Paris 1993.

PL-03
VÝVOJ CHEMIE A TECHNOLOGIE VE XX. STOLETÍ; PŘÍPAD OTTO WICHTERLE

KAMIL WICHTERLE

VŠB- Technická univerzita Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava Poruba.
kamil.wichterle@vsb.cz

V roce 2013, kdy by se Otto Wichterle mohl dožít 100 let, se jeho osobě věnovala poměrně značná pozornost. Obvyklé, poněkud zjednodušené tvrzení, že jeho hlavní zásluhou je vynález kontaktních čoček, není ani pravdivé ani přesné. Vynalezl však v tomto směru zajímavou třídu biokompatibilních polymerů[1], přišel s originálním a s velkou nedůvěrou přijímaným nápadem, zkonstruovat z pružného materiálu optickou čočku, vypracoval několik původních technik její výroby, a zasloužil se výrazně o její klinické testování a následnou komercializaci. Řada oslavných článků se zaměřila na peripetie jeho života politických postojů za měnících se politických systémů. Nebyla zapomenuta ani jeho krátkodobá, avšak hluboce inovativní pedagogická činnost. O všech těchto skutečnostech se dá najít spousta faktů v memoárech[2], které naklepal v editoru T602 jako důchodce ve volných chvílích osmdesátých let. Mírná ironie, se kterou se tam vyjadřoval o různých prominentech režimu, mu stačila k tomu, že na starší verzi textu ani po převratu již ničeho neměnil. Napsal ty paměti s fenomenální přesností, přestože nikdy neshromažďoval papíry. Nějak si svou činnost ale vždy dokumentoval, podobně jako v laboratoři, jednoduchými zápisy a kartičkami rozměru A7, ve kterých se obdivuhodně vyznal natolik, že nikdy nemusel totéž dělat zbytečně vícekrát. Memoáry jsou dobře čtivé i pro laika, protože se o své hlavní činnosti chemika Otto Wichterle vyjadřuje jen zlehka.

Referát se bude obracet k chemickému publiku, takže se bude snažit chemickou stránku životopisu OW akcentovat, ukázat na tom zásadní vývoj, kterým chemie a technologie v průběhu významné části XX. století prošla, a na druhé straně předvést, jaký vliv měl tento vývoj na vnímavého jedince.

Dobré jazykové a všeobecné vzdělání byly základem pro volnější výběr vysoké školy, na rozdíl od starších dědiců rodinné firmy, kterým byla vybrána strojařina a komerční inženýrství. Volba chemie na pražské ČVUT se ukázala jako velmi šťastná, zejména proto, že se OW brzy dostal do inspirativního prostředí laboratoří renesanční osobnosti významného profesora Emila Votočka. Tam si osvojil laboratorní dovednosti a po absolvování studia zde nastoupil jako asistent. Ve věku 24 let obhájil doktorskou práci a ve 27 letech podal žádost o habilitaci. Tuto karieru však přerušila německá okupace a uzavření vysokých škol. Jako několik podobných následujících zlomů v profesním životě, vedl k novým inspiracím ve výzkumu a vědě. Po praxi s chemií cukrů a později s vinylovými sloučeninami[3], zaměstnání ve zlínském Výzkumném ústavu firmy Baťa vzbudilo jeho zájem o zvolna se rozvíjející obor polymerací. Z pobytu u Baťů OW ještě vytěžil nutnost doučit se (jako šestý cizí jazyk) angličtinu, a ovládnout patentování. Se zkušeností salónního organického chemika, který dovedl připravit kvalitní surovinu, podařilo se mu zakrátko vyvinout vlákno (winop, později silon) na bázi kaprolaktamu (ačkoliv sám autor nylonu Carothers takovou možnost vyloučil). Tento materiál byl českým vedením tajen, paradoxně podobně jako analogický německý perlon. Postupně byl vybudován poloprovoz a po skončení války se rychle začala budovat průmyslová výroba laktamu, polymerace i následující spřádání. Československo se tak záhy dostalo ke světové špičce polymerní chemie. Poválečná léta patřila k hektickému období OW, kdy paralelně učil chemii na pražské i brněnské technice i univerzitě, vydal učebnice anorganické i organické chemie a současně byl výrazně angažován v projekci a záběhu průmyslových výrob. Ty učebnice doporučuji přečíst. Jsou sice postaveny na aplikaci jednoduchých elektrických sil mezi atomy, avšak dodnes tento model nevede k žádným výrazně chybným závěrům, a zůstává elegantně pochopitelným ve srovnání s těžkopádností modernějších koncepcí. Vzácným je propojení zajímavých vztahů chemie s technologiemi a s chemií fyzikální.

Laboratorní výzkum posléze věnoval převážně problémům polymerů. Prosadil důraz na tuto problematiku na VŠCHT, v roce 1958 však byl z důvodů nesouhlasu vedení s jeho věcným přístupem k výuce, neberoucím v úvahu politické aspekty a sovětské „zkušenosti“, ze školy vypuzen. Výhodu však shledal v tom, že se pak mohl plně věnovat výzkumu modifikací polyamidů a metod jejich přípravy na půdě Akademie. Markantním výsledkem byla technologie alkalické polymerace objemných tvarovaných výrobků ve formách, díky čemuž bylo rozhodnuto zřídit Ústav makromolekulární chemie. V té době inicioval také hledání biokompatibilních vodou bobtnajících polymerů, kde klasickým produktem byla poly-HEMA (2-hydroxyethyl-methakrylát), se širokým použitím v medicíně. Transparentní verze byla následně použita jako materiál kontaktních čoček.

Další období jeho práce poněkud uhnulo k technologiím výroby kontaktních čoček, intraokulárních čoček a dalších lékařských přípravků. Byla radost vidět jeho všestrannou fenomenální manuální zručnost. Mnoho úsilí věnoval i čistě strojnímu vývoji potřebných zařízení a přípravků, a také komercializaci technologií. K chemii se vracel hlavně tehdy, když šlo o možné modifikace příslušných materiálů a technologie jejich výroby. Nicméně, až do svých těsně nedožitých 85 let života byl (i po několika infarktech a mozkové příhodě) stále schopen si okamžitě vybavit klasická chemická fakta a zařazovat k nim nové poznatky. A díky své hravosti a kombinační schopnosti na tomto základě také dovedl s vysokou pravděpodobností předpovídat i chování značně neobvyklých systémů. Otto Wichterle představoval typ široce rozkročeného průkopníka, jakých ve XX. století, kdy se věda a výzkum stávaly doménou velkých týmů, postupně ubývalo.

Dovednosti chemiků, ceněné v XXI. století, jsou poněkud úže specializované – a je to trochu na škodu.

LITERATURA

1. Wichterle O., Lím D.: Nature *185*, 117 (1960).
2. Wichterle O.: *Vzpomínky*. 4. vyd., Academia, Praha 2007.
3. Hudlický M.: Coll. Czech. Chem. Commun. *58*, 2229 (1993).

1L-01
NUCLEOPHILIC AND ELECTROPHILIC SUBSTITUTIONS IN DICHLORINE-CONTAINING IRON(II) CLATHROCHELATE

RASTISLAV ŠÍPOŠ[a]*, ALEKSEI B. BURDUKOV[b], MIKHAIL A. VERSHININ[b], NATALIE V. PERVUKHINA[b], ILIA V. ELTSOV[c]

[a] Dept. of Inorganic Chemistry, FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, [b] ikolaev Institute of Inorganic Chemistry SB RAS, 3 Lavrent'ev Av., 630090 Novosibirsk, Russia, [c] Novosibirsk state university, Pirogova St. 2, 630090 Novosibirsk, Russia
sipos.rastislav@stuba.sk

Several different clathrochelates were prepared by nucleophilic substitution and electrophilic addition in boron-capped tris-dioximate iron(II) clathrochelates. Clathochelate ***III*** was prepared i) by electrophilic addition of PhC(O)H to the diaminoglyoximate bis-α-benzildioximate iron(II) clathrochelate ***I*** (insert); ii) by nucleophilic substitution of chlorine with PhC(NH)NH_2 in the dichloroglyoximate analog ***II***. Some other clathrochelates were derived from ***II***; the products were characterized by UV-VIS, NMR spectra and X-ray crystallography.

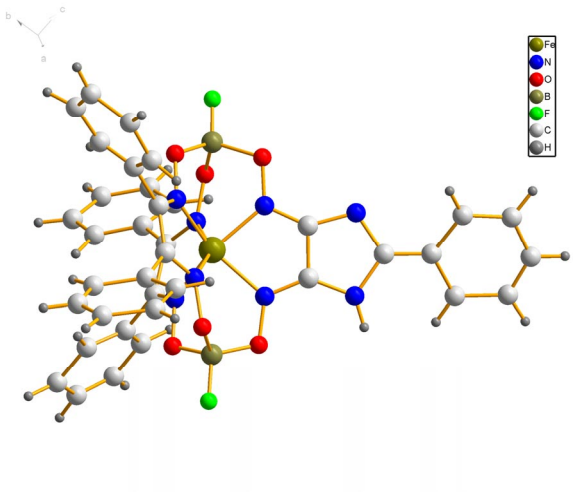


Fig. 1. **Molecular structure of the prepared clathochelate *III***

The authors gratefully acknowledge support of the VEGA Agency project 1/0985/12 and RFBR grants 13-03-90907, 13-03-00702.

1L-02
NEHYDRODROLYTICKÉ SYNTÉZY ALUMINOFOSFÁTŮ Z ORGANOSLOUČENIN FOSFORU A HLINÍKU

JÁN PODHORSKÝ[a,b]*, ZDENĚK MORAVEC[a], JIŘÍ PINKAS[a,b]

[a]Ústav chemie Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno, [b]CEITEC MU, Kamenice 5, 625 00 Brno
327941@mail.muni.cz

Aluminofosfáty jsou skupinou sloučenin zahrnujících mnoho různých struktur, které se vyznačují Al-O-P vazebným motivem a jsou tvořeny zejména tetraedry AlO_4 a PO_4 (cit.[1]). Pro tyto sloučeniny je charakteristické pravidelné vnitřné uspořádání a vysoký měrný povrch, což je předurčilo k tomu aby se uplatnily v katalýze[2–4].

V naší práci jsme připravovali materiály na bázi aluminofosfátů reakcemi $EtAlCl_2$ s různými alkylfosfáty a alkylfosfity se snahou získat co nejlepší povrchové vlastnosti. Produkty byly charakterizovány dostupnými fyzikálně-chemickými metodami – NMR, IR, SEM, povrchovou a termickou analýzou.

Tato práce vznikla za podpory grantů CZ.1.05/1.1.00/02.0068, CZ.1.07/2.3.00/30.0037

LITERATURA

1. Yu J., Xu R.: Acc. Chem. Res. *36*, 481 (2003).
2. Yuan H., Liu X., Ren J., Shen L.: Chinese J. Chem. Eng. *21*, 627 (2013).
3. Lertjiamratn K., Praserthdam P., Arai H., Panpranot J.: Appl. Catal. A *378*, 119 (2010).
4. Sreenivasulu P., Nandan D., Kumar M., Viswanadham N.: J. Mater. Chem. A *1*, 268 (2013).

1L-03
PROPERTIES CHARACTERIZATION OF MODIFIED HEMP HURDS

NADEŽDA ŠTEVULOVÁ, IVANA SCHWARZOVÁ*, EVA SINGOVSZKÁ

Ústav environmentálního inžinierstva, Stavebná fakulta, Technická univerzita v Košiciach, Vysokoškolská 4, 042 00 Košice, Slovensko
ivana.schwarzova@tuke.sk

Nowadays, using renewable resources instead of non-renewable is very current topic in developed countries. The use of alternative and environmentally friendly materials like natural fibres was studied in many researches[1]. This paper deals with the possibilities of using alternative materials into building construction. The great importance is attached to the industrial hemp, especially to the woody part of hemp plant called hemp hurds as a reinforcement for composite materials for the purpose of construction[2]. Hemp hurds is a prospective building material because of its unique properties (exceptional

thermal insulation, antiseptic, acoustic and mechanical properties).

This article reviews the results of the properties characterization of chemically and physically modified hemp hurds by using FTIR. In this paper, the measurement results of important technical parameters of hemp fibres are presented.

Hemp fibres consist of mainly crystalline cellulose as well as hemicellulose, lignin and waxy substances. Despite of many advantages, natural fibres have also disadvantages as their high moisture sorption and their

heterogeneity, which leads to a weak interface between the fibres and the matrix and a poor transfer of the applied stress between the materials. Many research projects have been devoted to the enhancement of the adhesion at the fibres – matrix interface, using chemical modifications of the fibres surface, physical treatment or using coupling agents[1].

IR measurements of hemp fibres properties after several chemical and physical treatments indicate that each considered treatment has a direct action onto the fibre surface. Observing the spectra, we found that a partial removal of hemicellulose, lignin and removal of waxes and oil was performed.

The authors are grateful to the Slovak VEGA Grant Agency for financial support of the project 1/0231/12.

REFERENCES

1. Troedec M., Rachini A., Peyratout C., Rossignol S., Max E., Kaftan O., Fery A., Smith A.: J. Colloid Interface Sci. *356*, 303 (2011).
2. Sedan D., Pagnoux C., Smith A., Chotard T.: J. Eur. Ceram. Soc. *28*, 183 (2008).

1L-04
SUCCESSFUL OXIDATION OF R_2P-X LIGANDS BY ELEMENTAL TELLURIUM

LUKÁŠ JEREMIAS[a]*, MICHAL BABIAK[a,b], VÁCLAV KUBÁT[a], ZDENĚK TRÁVNÍČEK[c], JOSEF NOVOSAD[a,c]

[a] Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kotlářská 2, 611 37 Brno, [b] Central European Institute of Technology, Masaryk University, Kamenice 5, 625 00 Brno, [c] Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Palacky University, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc
ljeremi@mail.muni.cz

One of the possible pathways to prepare metal tellurides is decomposition of single source precursors, which are often coordination compounds of selected main group and transition metals containing $[R_2P(Te)NP(Te)R_2]^-$ ligands[1]. The oxidation of R_2PXPR_2 compounds (X = $(CH_2)_n$, NH, etc; R = alkyl, aryl) by elemental chalcogen leading to dichalcogeno $R_2P(E)XP(E)R_2$ species (E = O, S and Se) has been well known for a long time[2,3], while analogous reactions with elemental tellurium have been described first by our reaserch group in this year[4].

The successful syntheses of $Ph_2P(Te)(CH_2)_nP(Te)Ph_2$ (n = 2-6) as well as $EtPh_2PTe$ and Et_2PhPTe ligands by direct oxidation of starting phosphorous compounds ($Ph_2P(CH_2)_nPPh_2$, $EtPh_2P$ and Et_2PhP, respectively) by elemental tellurium are reported. The reaction conditions, X-ray structures of the compounds, NMR spectra (^{31}P and ^{125}Te) and comparison with lighter chalcogen derivatives will be discussed in detail.

Single Crystal X-ray Diffraction Core Facility of CEITEC – Central European Institute of Technology under CEITEC – open access project, ID number LM 2011020, funded by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic under the activity „Projects of major infrastructures for research, development and innovations".

REFERENCES

1. Ritch J. S., Afzaal M., Chivers T., O'Brien P.: Chem. Soc. Rev. 36, 1622 (2007).
2. Dean P. A. W.: Can. J. Chem. *57*, 754 (1979).
3. Bhattacharyya P., Novosad J., Phillips J., Slawin A. M. Z., Williams D. J., Woollins J. D.: J. Chem. Soc. Dalton Trans. *1995*, 1607.
4. Jeremias L., Babiak M., Kubát V., Calhorda M. J., Trávníček Z., Novosad J.: R. Soc. Chem. Adv. *4*, 15428 (2014).

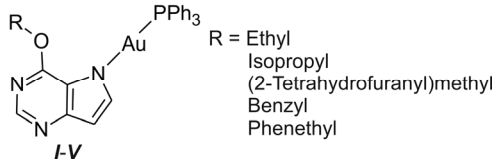
1L-05
IN VITRO ANTICANCER ACTIVITY OF GOLD(I) COMPLEXES WITH 9-DEAZAHYPOXANTHINE DERIVATIVES

JANA GÁLIKOVÁ[a], ZDENĚK DVOŘÁK[b], ZDENĚK TRÁVNÍČEK[a]

[a] Department of Inorganic Chemistry, RCPTM, Faculty of Science, Palacký University, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, [b] Department of Cell Biology and Genetics, RCPTM, Faculty of Science, Palacký University, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc
zdenek.travnicek@upol.cz

Negative side effects of commercially used anticancer platinum-containing drug *cisplatin*, *cis*-$[Pt(NH_3)_2Cl_2]$, have led to intensive searching for other transition metal complexes, which could exhibit antitumor activity comparable, or better, to *cisplatin* and also avoid its negative side effects. Therefore, a full range of gold complexes is currently being investigated as a promising group of anticancer agents[1].

In this work, a series of gold(I) complexes with the general formula $[Au(PPh_3)(L_n)]$ ***I-V*** (Scheme 1) involving O^6-substituted derivatives of 9-deazahypoxanthine (L_n) and triphenylphosphine, fully characterized by various techniques, were tested for their *in vitro* cytotoxic activity against eight human cancer lines, *i.e.* breast carcinoma, osteosarcoma, lung



Scheme 1. **Structural formula of $[Au(PPh_3)(L_n)]$ *I–V***

carcinoma, malignant melanoma, cervix epitheloid carcinoma, ovarian carcinoma, ovarian carcinoma resistant to *cisplatin* and prostate carcinoma. The results showed that the prepared complexes exhibit significant *in vitro* cytotoxicity, in some cases even in submicromolar concentrations (*e.g.* IC_{50} = 0.6 μM).

We acknowledge the financial support from CZ.1.07/2.3.00/30.0004 and CZ.1.05/2.1.00/03.0058.

REFERENCE

1. Tiekink E. R. T.: Crit. Rev. Oncol. Hematol. *42*, 225 (2002).

1L-06

PREPARATION OF NEW COORDINATION COMPOUNDS OF (1-AMINO-1-METHYL-ETHYL) PHOSPHONIC ACID WITH SOME d-METALS AND URANYL ION

IAROSLAV DOROSHENKO[a,b], MICHAL BABIAK[a,b], JIRI PINKAS*[a, b]

[a] *Department of Chemistry, Masaryk University, Kotlarska 2, 611 37 Brno,* [b] *Central European Institute of Technology (CEITEC), Masaryk University, 625 00 Brno*
jpinkas@chemi.muni.cz

Because of their different properties and structural varieties chemistry of phosphates is one of the central topics in material science for many years. Also related phosphonate materials are widely and rapidly studied and used in different fields and applications. They can be used as adsorbents, ionic exchangers, ionic conductors and in catalysis[1] etc. Possibility of existence of strong P–C bond in phosphonates makes us possible to diversify their structures, to introduce substituent groups with interesting properties or another coordination group that would allow us to use these compounds in crystal engineering.

In this work new coordination compounds of early known [2] (1-amino-1-methyl-ethyl)phosphonic acid with Fe^{2+}, Fe^{3+}, Co^{2+}, Ni^{2+}, Cu^{2+} and UO_2^{2+} were synthesized. Usual metals salts (nitrates, chlorides and sulfates) were used in a role of precursors. Reactions were carried out in the water and methanol media. Obtained compounds were studied by IR-spectroscopy, TG/DSC analysis and nitrogen adsorption BET analysis of specific surface. Crystal structures of crystalline samples were measured by mono-crystal X-ray diffraction analysis.

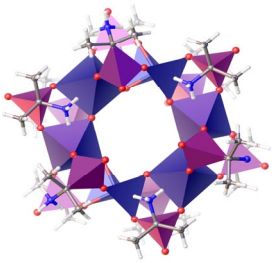


Fig. 1. **X-ray crystal structure of six-nuclear complex of Fe^{3+} with (1-amino-1-methyl-ethyl)phosphonic acid**

This work was supported by CEITEC - Central European Institute of Technology (CZ.1.05/1.1.00/02.0068) and GACR P207/11/0555.

REFERENCES

1. Clearfield A., Demadis K. D.: *Metal Phosphonate Chemistry: From Synthesis to Applications*. RSC Publishing, Cambridge 2012.
2. Kratochvil J., Necas M., Petricek V., Pinkas J.: Inorg. Chem. *45*, 6562 (2006).

1L-07

MULTISTEP RESONANCE ENERGY TRANSFER IN COMPLEX SYSTEMS BASED ON ORGANIC DYES AND LAYERED SILICATE

SILVIA BELUŠÁKOVÁ[a], JURAJ BUJDÁK[a,b]

[a] *Comenius University in Bratislava, Faculty of Natural Sciences, Department of Physical and Theoretical Chemistry, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava 4,* [b] *Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava 45*
belusakova@nic.fns.uniba.sk

Resonance energy transfer (RET) is a phenomenon occurring in a nanometer scale. It is a significant part of photosynthetic processes in plants. This work was focused on multistep, cascade RET occurring in complex systems based on inorganic carrier, synthetic saponite, and the mixture of adsorbed xantene, pyronine and oxazine dyes. RET was characterized by various methods of fluorescence spectroscopy. Selection of the dyes, their concentration and chemical modifications of the materials were designed in order to achieve significant RET yields. In preliminary experiments, hybrid materials based on colloidal systems were investigated. The results helped to design the preparation of the second group of samples, thin solid films. Efficient multistep RET between the molecules of up to six different laser dyes was achieved in the most of the prepared films. The effects of the concentration of dye molecules intercalated in the films on RET efficiency and the role of the alkylammonium (AA) cations to suppress dye molecular aggregation were investigated. The presence of AA cations brought about to the reduction of dye molecular aggregation in the colloids, which was reflected in the increase of overall fluorescence. Results from fluorescence anisotropy measurements and time-resolved fluorescence spectroscopy confirmed the presence of RET in the majority of studied systems. The multicomponent materials based on inorganic layered carrier, organic dyes and hydrophobic surfactants are cheap and suitable for excitation energy transfer and manipulation on molecular level. Such materials have potential to be applied as components in future solar cells.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-0291-11, Grant Agency VEGA (2/0107/13, 1/0943/13), and grant UK/16/2014.

1L-08
$Ag_3(SO_3F)_4$ - A RARE EXAMPLE OF A MIXED-VALENCE SALT OF Ag(I)/Ag(II)

TOMASZ MICHAŁOWSKI

Faculty of Chemistry, University of Warsaw, Pasteura 1, 02-093 Warsaw, Poland

Ag^{II} is a rather rare cation – just about one hundred of its compounds were reported. Even more of a *terra incognita* is the chemistry of mixed-valence silver^{I}/silver^{II} species. Only five such compounds were prepared so far: $[Ag^{II}(tmc)(BF_4)]$ $[Ag^{I}_6(C_2)(CF_3CO_2)_5(H_2O)]\cdot H_2O$ (tmc=1,4,8,11-tetramethyl-1,4,8,11-tetraazacyclo-tetradecane)[1], ill-characterized Ag_9F_{16}[2] and three salts of superacids: $Ag^{I}_2Ag^{II}(SO_3F)_4$ - first reported in 1978 by Aubke[3] and structurally characterized in 2011 (ref.[4]), $Ag^{I}_2Ag^{II}(SbF_6)_4$ (ref.[5]), and $Ag^{I}_4Ag^{II}_5(PO_2F_2)_{14}$ (ref.[6]). The most interesting one of those is the black $Ag_3(SO_3F)_4$ which exhibits 1D antiferromagnetism and it's crystal structure is monoclinic: $P2_1/c$, a=5.33665(3) Å, b=12.94784(8) Å , c=19.59695(12) Å, β=100.6388(5)°, V=1330.95 Å (ref.[3,4]). The product is most conviniently obtaied using silver(I) fluorosulfate and bromine fluorosulfate[4]:

$$3\ AgSO_3 + BrSO_3F \rightarrow Ag(I)_2Ag(II)(SO_3F)_4 + ½\ Br_2$$

An alternative pathway involves slow spontaneous decomposition of $Ag(II)(SO_3F)_2$ in HSO_3F. The compound has been characterized by a number of methods including elemental (combustion) analysis for S & F content, chromate titration for Ag content, mid- and far-infrared (MIR, FIR) and Raman spectroscopy, simultaneous thermal analysis (thermogravimetric analysis coupled with differential scanning calorimetry and evolved gas analysis, TGA/DSC/EGA), powder X-ray diffraction, magnetometry and electron paramagnetic resonance.

REFERENCES

1. Wang Q. –M., Lee H. K., Mak T. C. W.: New J. Chem. *26*, 513 (2002).
2. Bartlett N.: personal communication to W. Grochala (2001).
3. Leung P. C., Aubke F.: Inorg. Chem. *17*, 1765 (1978).
4. Michałowski T., Malinowski P., Derzsi M., Mazej Z., Jagličić Z., Leszczyński P., Grochala W.: Eur. J. Inorg. Chem. *16*, 2508 (2011).
5. Mazej Z., et al., manuscript in preparation (2014).
6. Malinowski P., Grochala W., manuscript in preparation (2014).
7. Grochala W., Hoffman R.: Angew. Chem. Int. Ed. *40*, 2742 (2001).

1L-09
KOVALENTNÍ IMOBILIZACE NANOČÁSTIC STŘÍBRA NA TEXTILIÍCH

MARTINA KARLÍKOVÁ*[a], JANA SOUKUPOVÁ[a], OLGA BALZEROVÁ, KLÁRA ŠAFÁŘOVÁ[b], LIBOR KVÍTEK[a]

[a] *Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc,*
[b] *Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc*
martina.karlikova@upol.cz

Rezistence bakterií vůči antibiotikům se stává pro lidskou populaci stále větší hrozbou. Výzkum se tak obrací k hledání možných alternativ, nových materiálů, vykazujících jednak vysokou antibakteriální aktivitu a zároveň nízkou nebo prakticky žádnou rezistenci infikujících organismů vůči nim. Tyto dvě důležité podmínky splňují nanočástice stříbra[1,2].

Naše pozornost byla zaměřena na antibakteriální modifikaci textilních tkanin nanočásticemi stříbra s využitím různě větvených struktur polyethyleniminu (PEI), kovalentně kotvících nanočástice stříbra na povrchu dané textilie. Takto upravené materiály disponují velkým aplikačním potenciálem především ve zdravotnictví a jemu přidružených oborech, kde je kladen velký důraz na sterilitu prostředí.

Modifikovány byly tři druhy tkanin – bavlna, polypropylen a polyester. Byla provedena rozsáhlá studie podpořená řadou snímků ze skenovacího elektronového mikroskopu, sledující vliv reakčních podmínek na morfologii a vlastnosti imobilizovaných částic.

Tato práce byla podpořena projekty OP VaVpI reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0058, OPVK CZ.1.07/2.3.00/20.0056, TAČR TE01010218 a TE02000006, dále pak vnitřním grantem UP Olomouc PrF_2014032.

LITERATURA

1. Panáček A., Kvítek L., Prucek R., Kolář M., Večeřová R., Pizúrová N., Sharma V. K., Nevěčná T., Zbořil R.: J. Phys. Chem. B *110*, 16248 (2006).
2. Jones C. M., Hoek E. M. V.: J Nanopart Res. *12*, 1531 (2010).

1L-10
TERMODYNAMICKÁ PREDIKCE STABILITY GaN A InN ZAHRNUJÍCÍ POVRCHOVÉ EFEKTY

JINDŘICH LEITNER, DAVID SEDMIDUBSKÝ

Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6
leitnerj@vscht.cz

Při zahřívání nitridů prvků A^{III} (A^{III} = Al, Ga, In) dochází k jejich rozkladu dle rovnice $A^{III}N(s) = A^{III}(l) + ″N_2(g)$. Závislost rozkladné teploty T_d na tlaku dusíku v okolní atmosféře byla studována experimentálně i teoreticky s využitím termo-

dynamických dat zúčastněných látek. V případě GaN a InN jsou v literatuře uváděny velmi rozdílné hodnoty jejich slučovacích entalpií, což při výpočtech vede k odlišným závislostem $T_d = f(p_{N2})$.

Cílem našeho příspěvku je podrobná analýza vlastních[1–4] i z literatury převzatých termodynamických dat pro GaN a InN a výběr konzistentní sady hodnot, které byly dále využity pro stanovení věrohodných závislostí $T_d = f(p_{N2})$. Příslušné výpočty byly provedeny jak pro makroskopické systémy, tak pro systémy nanostrukturované, u kterých byl zahrnut vliv všech povrchových/mezifázových efektů, které polohu rovnováhy významně ovlivňují. Při výpočtech byly uvažovány dvě různé prostorové konfigurace: (*i*) nanokapky taveniny na rovinném povrchu tenké vrstvy nitridů a (*ii*) nanokapky taveniny na nanovláknech nitridů. Povrchové energie kapalných kovů byly převzaty z literatury, pro pevné nitridy byly odhadnuty pomocí empirické metody *broken-bond*. Hodnoty mezifázové energie na rozhraní (s)-(l) byly odhadnuty na základě měření kontaktních úhlů Ga(l) na GaN(s) a In(l) na InN(s).

Získané výsledky dokumentují zvýšení rozkladných teplot v případě první uvažované konfigurace a snížení pro druhé prostorové uspořádání ve srovnání se systémy makroskopickými.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 13-20507S.

LITERATURA

1. Leitner J., Strejc A., Sedmidubský D., Růžička K.: Thermochim. Acta *401*, 169 (2003).
2. Leitner J., Maršík P., Sedmidubský D., Růžička K.: J. Phys. Chem. Solids *65*, 1127 (2004).
3. Sedmidubský D., Leitner J.: J. Cryst. Growth *286*, 66 (2006).
4. Sedmidubský D., Leitner J., Svoboda P., Sofer Z., Macháček J.: J. Thermal. Anal. Calorimetry *95*, 403 (2009).

1L-11
RŮST KRYSTALŮ V TENKÝCH VRSTVÁCH $(GeS_2)_x(Sb_2S_3)_{1-x}$

JAROSLAV BARTÁK[a], VERONIKA PODZEMNÁ[a], JIŘÍ MÁLEK[a], BART J. KOOI[b]

[a] Katedra fyzikální chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, ČR, [b] Fakulta matematiky a přírodních věd, Univerzita Groningen, Nijenborgh 4, 9747 AG Groningen, Nizozemí
j-bartak@seznam.cz

Chalkogenidová skla jsou intenzivně studována díky svým jedinečným vlastnostem (vysoký index lomu, propustnost v infračervené oblasti, vysoká fotocitlivost,…). Díky svým rozmanitým vlastnostem mohou být objemové vzorky a tenké vrstvy chalkogenidových skel využity v široké řadě optických a optoelektronických systémů a přístrojů (čočky, optická vlákna, …), v různých elektrických a paměťových spínačích, nebo například ve vysokokapacitních paměťových mediích (CD, DVD, Blue-Ray Disc)[1,2]. Všechny tyto aplikace jsou různým způsobem spojeny s procesem krystalizace. Znalost kinetiky krystalizace je důležitá jak pro přípravu skelného materiálu, tak pro jeho využití v praxi. Například v záznamových médiích je kryzalizace základním procesem sloužícím k zápisu a uchování dat[3].

Isotermní růst krystalů v tenkých vrstvách pseudobinárního systému $(GeS_2)_x(Sb_2S_3)_{1-x}$ byl studován pomocí optické mikroskopie s využitím vysokorychlostní kamery. Lineární závislost velikostí krystalů na době temperace ukazuje na růst řízený kinetikou růstu krystalů na rozhraní krystal-kapalina. Kombinací růstových dat s viskozitními[4] bylo možné navrhnout vhodný růstový model[5], který popisuje experimentální data.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury ČR v rámci grantu P106/11/1152 a projektu CZ.1.07/2.3.00/20.0254 "ReAdMat - Research Team for Advanced Non-Crystalline Materials" spolufinancovaným Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

LITERATURA

1. Raoux S., Welnic W., Ielmini D.: Chem. Rev. *110*, 240 (2010).
2. Mehta N.: J. Sci. Ind. Res. *65*, 777 (2006).
3. Wuttig M., Yamada N.: Nature Mater. *6*, 824 (2007).
4. Shánělová J., Koštál P., Málek J.: J. Non-Cryst. Solids *352*, 3952 (2006).
5. Jackson K.A., Uhlmann D.R., Hunt J.D.: J. Cryst. Growth *1*, 1 (1967).

1L-12
NANOČÁSTICE STŘÍBRA (AgNPs) – SYNTÉZA, MODIFIKACE A JEJICH ANTIBAKTERIÁLNÍ AKTIVITA

MARTIN SIVERA, LIBOR KVÍTEK, ALEŠ PANÁČEK

Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 779 00 Olomouc
MartinSivera@seznam.cz

V současné době jsou příprava a aplikace nano-materiálů klíčovým tématem ve výzkumu a vývoji. Nanočástice stříbra (AgNPs) představují jeden z nejvíce komerčně zajímavých materiálů díky jejich výrazné antibakteriální aktivitě. Jsou využívány k povrchové úpravě zdravotnického materiálu (např. umělých srdečních chlopní, katetrů a endoprotéz)[1,2]. Nanočástice stříbra se velmi hojně využívají v textilním průmyslu, kde jsou přidávány do textilií a stávají se součástí koncových produktů (např. triček, spodního prádla a ponožek). Dále nanočástice nalezneme ve filtračních materiálech, kde se podílí na zvýšení efektivity filtračního procesu[2,3].

Nanočástice stříbra jsou syntetizovány převážně pomocí metod založených na chemické redukci stříbrného prekurzoru vhodnou látkou. Výsledné vlastnosti připravených nanočástic je možné ovlivnit přídavkem průmyslových případně přírodních látek.

Cílem této práce bylo studium vlivu vybraných látek na přípravu a vlastnosti nanočástic stříbra. Jako modifikátory/

stabilizátory byly použity např. želatina, hyaluronát sodný, dextran, sérový hovězí albumin, xantanová guma a kyselina polyakrylová. Řada z těchto látek má sama o sobě redukční účinky, případně byla použita v kombinaci s osvědčenými redukčními látkami (maltóza, tetrahydridoboritan sodný) nebo fyzikálními metodami (mikrovlnný ohřev, ultrazvuk).

Tato práce vznikla za podpory grantu OP VaVpI CZ.1.05/2.1.00/03.0058,OPVK CZ.1.07/2.3.00/20.0056, TAČR TA03010799 a vnitřního grantu UP Olomouc PrF_2014032.

LITERATURA

1. Kvítek L. Panáček A., Soukupová J., Kolář M., Večeřová R., Prucek R., Holecová M., Zbořil R.: J. Phys. Chem. B. *112* (2008).
2. Kvítek L., Prucek R., Panáček A., Novotný R., Hrbáč J., Zbořil R.: J. Mat. Chem. *15*, (2005).
3. Wei D., Sun W., Qian W., Ye Y., Ma X.: Carbohydr. Res. *334* (2009).

1L-13
$AgInSe_2$-CONJUGATED POLYMER HYBRID SYSTEMS FOR ENERGY APPLICATIONS

DINESH PATHAK[a]*, TOMAS WAGNER[a], JEAN-MICHEL NUNZI[b]

[a] Department of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentska 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic, [b] Physics Department, Chemistry Department, Queen's University, Kingston, ON, Canada
dineshpathak80@gmail.com

Blends of MdPVV.PCBM.AIS were investigated for Photovoltaic applications. $AgInSe_2$ powder was synthesized by sealing and heating the stoichiometric constituents in evacuated quartz tube ampule. Fine grinded AIS powder was dispersed in MD-MOPVV and PCBM with and without surfactant. Different concentrations of these particles were suspended in the polymer solutions and spin casted onto ITO glass. Morphological studies have been performed by atomic force microscopy and optical microscopy. SEM images of these blends also suggest uniformly dispersed AIS in polymer matrix. The blend layers were also investigated by various techniques like XRD, UV-VIS optical spectroscopy, AFM, PL, after a series of various optimizations with polymers/ concentration/deposition/ suspension/surfactants etc. XRD investigation of blend layers shows clear evidence of AIS dispersion in polymers. Diode behavior and cell parameters also revealed it.

Bulk hetrojuction hybrid Photovoltaic device Ag/MoO_3/ MdPVV.PCBM.AIS/ZnO/ITO were fabricated and tested with standard solar simulator and device characterization system. The best performance and photovoltaic parameters, we obtained was an open-circuit voltage of about V_{oc} 0.54 V and a photocurrent of I_{sc} 117 micro A and an efficiency of 0.2 percent using a white light illumination intensity of 23 mW/cm^2. Our results are encouraging for carrying further the fourth generation inorganic organic hybrid bulk hetrojuction photovoltaics research for energy. More optimization with spinning rate/Thickness/solvents/ depositions rates for active layers etc. are being carried out for improved photovoltaic response of these bulk hetrojunction devices, which are believed to play an important role in future technology. Further efficiency enhancements are expected following optimization and a better fundamental understanding of the internal electron dynamics and corresponding interfacial engineering.

The Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic, Project CZ.1.07/2.3.00/30.0021 "Strengthening of Research and Development Teams at the University of Pardubice", financially supported this work. This article was written with support of Technology Agency of the Czech Republic, project TE 1010022, FLEXPRINT.

1L-14
OPTICKY INDUKOVANÁ DIFÚZE Ag DO TENKÝCH AMORFNÍCH VRSTEV SYSTÉMU Ge-Ga-S

SILVIYA VALKOVA[a]*, TOMÁŠ WÁGNER[a], MARTIN PAVLIŠTA[a], JAN PŘIKRYL[a], MILAN VLČEK[b], LUDVÍK BENEŠ[c], MILOŠ KRBAL[a]

[a] Univerzita Pardubice; Fakulta chemicko-technologická, Katedra obecné a anorganické chemie, Studentská 95, 532 10 Pardubice, [b] Ústav makromolekulární chemie Akademie věd České republiky a Univerzity Pardubice; Studenská 85, 532 10 Pardubice, [c] Univerzita Pardubice; Fakulta chemicko-technologická; Společná laboratoř chemie pevných látek, Studentská 95, 532 10 Pardubice
silviedivalko@centrum.cz

Jedním z nejrychleji se vyvíjejících odvětví nových informačních technologií, je výzkum moderních paměťových systémů.

CBRAM[1] (Conductive bridging random access memory) jsou paměťi se spínáním přes vodivé můstky[2], které používají vysokou iontovou vodivost některých materiálů (Ag, Cu), vysoce rozpustných v pevných elektrolytech. Jedním z důležitých faktorů, které určují kvalitu paměti, je zde výběr vhodného elektrolytu. V této práci byly jako potenciální elektrolyt zkoumány tenké vrstvy skelného systému Ag/Ge-Ga-S.

Přímou syntézou z velmi čistých prvků byly připraveny objemové vzorky o složení $Ge_{28-x}Ga_xS_{72}$. Metodou PLD byly z daných objemových vzorků připraveny řady tenkých vrstev o různých tloušťkách a různém obsahu Ga. Připravené tenké vrstvy byly charakterizovány a následně podrobeny opticky indukované difúzi Ag[3].

Studie změn ve struktuře a optických vlastnostech dopovaných Ag/$Ge_{28-x}Ga_xS_{72}$ tenkých vrstev ukazují maximální množství rozpuštěného Ag vzhledem k tloušťce vrstev a obsahu Ga ve skelné matrici.

Autoři děkují Evropskému sociálnímu fondu a Ministerstvu školství mládeže a tělovýchovy České Republiky za finanční podporu projektu CZ.1.07/2.3.00/20.0254 "ReAdMat - Výzkumný tým pro pokročilé nekrystalické materiály".

Děkují také MEYS CR KONTAKT II projektu číslo LH14059 a projektům AV0Z500505, P204/11/0832 a P106/11/0506 za finanční podporu.

LITERATURA

1. Kozicki M. N., Mitkova M.: J. Non-Cryst. Solids *352*, 1986 (2006).
2. Abe K., Takebe H., Morinaga K.: J. Non-Cryst. Solids *212*, 143 (1997).
3. Wágner T., Frumar M.: *Optically-induced diffusion and dissolution of metals in amorphous chalcogenides*, v: Photoinduced metastability in amorphous semiconductors, (A. Kolobov), str. 196–216. Wiley-VCH, Weinheim 2003.

1L-15

STAGES IN RESISTIVE SWITCHING OF MEMORY CELLS BASED ON CHALCOGENIDES AND NANOPOROUS AAO

BO ZHANG, JAKUB KOLÁŘ, JAN M. MACÁK, TOMÁŠ WÁGNER

Department of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Nam. Cs. Legii 565, 530 02 Pardubice
st44389@student.upce.cz

Many metal-insulator-metal systems show electrically induced resistive switching effects and have therefore been proposed as the basis for future non-volatile memories[1]. Its structure is relatively simple and electrical performances are promising. Two types of resistive switching memory cells are designed. One is based on an ionic conductor Ag_xAsS_2 supported by the Ag-filled porous AAO (Anodic Aluminum Oxide) membrane, which achieves differences of 6 orders of magnitude in the resistivities of the „on“ and „off“ memory state. The other is ionic conductor Ag_xAsS_2 supported by the silver layer on the glass substrate, which shows 2 orders differences, as demonstrated in our recent work[2].

Resistive switching was studied on the experimental setup consisting of optical microscope connected to a resistivity measurement unit. Dependences of resistivities of “on” and “off” states for both cell types on number of cycle were recorded. The resistive switching behavior varied with time. This evolvement of resistive switching might be induced by diffusion or depletion of Ag ion within the region of electrode, as described in this work.

Grant project CZ.1.07/2.3.00/20/0254 “ReAdMat – Research Team for Advanced Non-Crystalline Materials” realized by ESF and Ministry of Education, Youth and Sports of The Czech Republic within ECOP for financial support and project MEYS Kontakt II-LH14059.

REFERENCES

1. Waser R., Aono M.: Nature Mater. *6*, 833 (2007).
2. Kolar J., et al. : J. Mater. Chem. C *2*, 349 (2014).

1P-01
HYPOXANTIN A JEHO DERIVÁTY JAKO LIGANDY V KOMPLEXECH PLATINY

LUCIE HANOUSKOVÁ, RADKA KŘIKAVOVÁ, ZDENĚK TRÁVNÍČEK

Katedra anorganické chemie, RCPTM, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc
radka.krikavova@upol.cz

Komplexní sloučeniny platiny s označením *cisplatina* a *oxaliplatina* jsou celosvětově užívány v klinické praxi jako léčiva pro léčbu nádorových onemocnění. Použití těchto látek však přináší celou řadu nežádoucích vedlejších účinků[1]. V rámci provedené práce byla syntetizována řada derivátů těchto léčiv obecného strukturního typu *cis*-$[PtX_2(L)_2]$ a $[Pt(ox)(L)_2]$ (X = Br, I; H_2ox = kyselina šťavelová) ve snaze připravit potenciálně biologicky aktivní látky. Použitými ligandy (L) byly různě substituované deriváty hypoxantinu, které mohou samy o sobě vystupovat jako inhibitory enzymů cyklin-dependentních kinas a *O*6-guanin-DNA-alkyltransferas, které se účastní procesů buněčného dělení[2,3]. Vybrané komplexy obecného složení *cis*-$[PtX_2(L)_2]$ byly podrobeny testování *in vitro* cytotoxicity na lidských nádorových liniích prsního adenokarcinomu (MCF-7) a osteosarkomu (HOS).

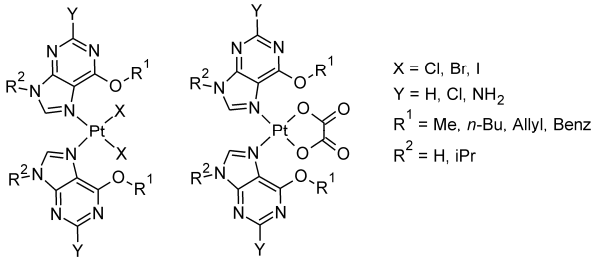


Schéma 1. **Obecné vzorce připravených komplexních sloučenin**

Tato práce vznikla za podpory projektů CZ.1.05/2.1.00/03.0058, *PrF_2013_015; PrF_2014_009.*

LITERATURA

1. Gielen M., Tiekink E. R. T.: *Metallotherapeutic Drugs and Metal-based Diagnostic Agents*, Wiley, 2005.
2. Furet P.: Curr. Med. Chem. Anti-Cancer Agents *3*, 15 (2003).
3. Rabik C. A., Njoku M. C., Dolan M. E.: Cancer Treat. Rev. *32*, 261 (2006).

1P-02
PRÍPRAVA A ŠTRUKTÚRA 4-AMINOBENZOÁTU ZINOČNATÉHO

KATARÍNA HOMZOVÁ[a]*, KATARÍNA GYÖRYOVÁ[a], MARIÁN KOMAN[b], ZUZANA VARGOVÁ[a]

[a] Ústav chemických vied, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesova 11, 041 54 Košice, [b] Oddelenie anorganickej chémie UACHaM FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
katarina.homzova@student.upjs.sk

Karboxyláty zinku sú objektom intenzívneho skúmania už niekoľko rokov. Ich dôležitosť sa odráža v syntéze nových koordinačných zlúčenín na báze aromatických karboxylátov s bioaktívnymi ligandami (napr. kofeín, teofylín atď.). Karboxylátový anión sa môže koordinovať monodentátnym alebo bidentátnym spôsobom[1]. K najčastejším tvarom koordinačných polyédrov aromatických karboxylátov zinku patria tetraéder, trigonálna bipyramída a oktaéder[2].

Reakciou vodnej suspenzie $ZnCO_3$ a etanolového roztoku kyseliny 4-aminobenzoovej sme pripravili $[Zn(4\text{-}NH_2C_6H_4COO)_2]_n \cdot 0{,}5\ C_2H_5OH$. Zlúčeninu sme identifikovali a charakterizovali IČ spektroskopicky a vyriešili sme jej štruktúru. Zlúčenina kryštalizuje v ortorombickej kryštalografickej sústave v priestorovej grupe $P2_12_12_1$ s chromoforom ZnO_3N_2. Koordinačný polyéder má tvar mierne deformovanej trigonálnej bipyramídy. V ekvatoriálnej rovine sú na atóm zinku bidentátnym chelátovým spôsobom koordinované dva atómy kyslíka z karboxylátového aniónu a monodentátne koordinovaný atóm kyslíka z druhého karboxylátového aniónu. V axiálnej rovine sú na atóm zinku koordinované dva atómy dusíka z dvoch aminoskupín z benzoátového ligandu.

Táto práca vznikla z podpory projektu KVARK – Kvalita vzdelávania a rozvoj kompetencií doktorandov a postdoktorandov UPJŠ, č. 26110230084

LITERATÚRA

1. Krajníková A., Gyepes R., Győryová K.: J. Chem. Crystallogr. *40*, 650 (2010).
2. Melník M., Győryová K., Skoršepa J., Holloway C. E.: J. Coord. Chem. *35*, 179 (1995).

1P-03
STUDIUM JÍLOVÝCH ČÁSTIC S KOVY PRO POLYMERNÍ NANOKOMPOZITY

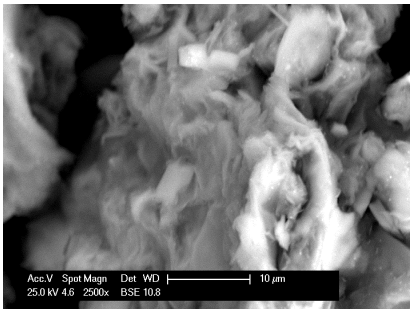
DOMINIK HONĚK[a], MARIANNA HUNDÁKOVÁ[a,b], LUCIA ROYUMOVÁ [a,b], GRAŽYNA SIMHA MARTYNKOVÁ[a,b]

[a] Centrum nanotechnologií, [b] IT4 Innovations Centre of Excellence, VŠB-Technická univerzita Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava
dominik.honek.st@vsb.cz

Přírodní jílové minerály jsou velmi dobře mofikovatelné a proto jsou vhodné jako fukční nanoplniva pro různé druhy kompozitů. Polymerní nanokompozity s jílovými nanočástice-

mi modifikovány kovem skýtaji možnost využití v aplikacích kde se požaduje vlastnosti příslušející jak kovům (vodivost elektrická a tepelná, magnetické vlastnosti) tak polymerům[1–4].

Tato studie se zaměřila na modifikaci jílových minerálů v nanorozměrech (silikátová vrstva jílu je tenká 0,98 nm) kovy a to mědi a kobaltu za účelem aplikace do polymerního nanokompozitu s dobrými vodivostními charakteristikami. Jako nosný jíl byl využit montmorillonit a vermikulit pro kovy. Metodou mokré cesty z roztoku byly kovy interkalovány do jílového mezivrství, což bylo potvrzeno metodou rentgenové difrakce. Z původní hodnoty mezirovinné vzdálenosti d_{001} = 1,2 nm monoionní Na formy vzrostla hodnota na 1,4nm kovové formy.



Obr. 1. **Obrázek ze skenovacího elektronového mikroskopu částice montmorillonitu modifikované mědí**

Šetrným pozvolným sušením vznikly v aktívních místech silikátového subtrátu částice kovů velikosti pod 1 µm.

Kovové prekompozity montmorillonitu a vermikulitu byly následně modifikovány malými molekulami amoniových kationtů, pro lepší kompatibilitu s polymerní matricí. Jako polymerní matrice byl zvolen sulfonovaný tetrafluoroethylen.

Vliv nanoplniv na vlastnosti nanokompozitu byl studován metodami pro strukturní analýzu materiálu: rentgenovou práškovou difrakcí, a infračevernou spektroskopií s Frourierovou transformací. Doplňující metodou pro studium morfologie povrchu byla skenovací elektronové mikroskopie.

Částice silikátů byly shledány dobře dispergovany v tenké polymerní vrstvě a z difuzních píků záznamů z rentgenové difrakce konstatujeme, že došlo i delaminaci vrstevnatého materiálu, což umožní lépe využit vlastnosti interkalovaných a ukotvených kovových částic.

Tato práce vznikla za podpory projektu IT4 Innovations Centre of Excellence reg.č.cz. 1.05/1.1.00/02.0070.

LITERATURA

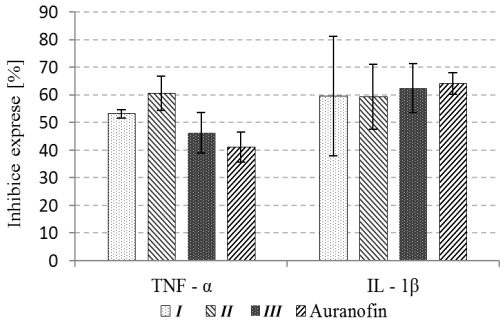
1. Simha Martynková G., Buchtík O., Plevová E., Barabaszová K., Holešová S., Valášková M.: J. Sci. Conf. Proc. 2, 42 (2010).
2. Simha Martynková G., Valášková M., Čapková P., MatějkaV.: J. Colloid Interface Sci. *313*, 281 (2007).
3. Valášková M., Simha Martynková G., Matějka V., Barabaszová K., Plevová E., Měřínská D.: Appl. Clay Sci. *43*, 108 (2009).
4. Simha Martynková G., Valášková M.: *Modified Vermiculite and Kaolinite Precursors for Nanocomposites*, in: Nanocomposites: Preparation, Properties and Performance, Nova Publishers, 225-239, ISBN: 978-1-60456-798-4 (2008).

1P-04
ZLATNÉ KOMPLEXY OBSAHUJÍCÍ DERIVÁTY HYPOXANTINU S *IN VITRO* PROTIZÁNĚTLIVOU AKTIVITOU

JAKUB HUTYRA, RADKA KŘIKAVOVÁ, JAN HOŠEK, JÁN VANČO, ZDENĚK TRÁVNÍČEK

Katedra anorganické chemie, RCPTM, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc
radka.krikavova@upol.cz

Významným lékem proti revmatoidní artritidě je komplexní sloučenina zlata *Auranofin*, [Au(AcTG)(PEt_3)] (AcTG = acetylovaná thioglukosa)[1,2]. V návaznosti na úspěch *Auranofinu* bylo připraveno 9 zlatných komplexů obecného složení [Au(L_n)(PPh_3)], kde L_n představuje deprotonovaný derivát hypoxantinu. Je známo, že deriváty hypoxantinu jsou inhibitory cyklin-dependentních kináz[2] a jsou tedy vhodnými biologicky aktivními látkami pro použití jako ligandy v komplexních sloučeninách. U připravených Au(I) komplexů byla testována protizánětlivá aktivita sledováním exprese prozánětlivých cytokinů TNF-α a IL-1β u lipopolysacharidem stimulované zánětlivé reakce leukemických buněk THP-1. Vybrané komplexy vykazují srovnatelné nebo lepší výsledky inhibice exprese TNF-α a IL-1β než *Auranofin*. U komplexů je také studována jejich *in vitro* cytotoxicita vůči vybraným lidským nádorovým liniím. Výsledky budou diskutovány v rámci prezentace.



Obr. 1. **Inhibice exprese cytokinů TNF-α a IL-1β pro komplexy [Au(L_{1-3})(PPh_3)],** kde L_1 = *O*6-butylhypoxantin (***I***), L_2 = *O*6-benzylhypoxantin (***II***) a L_3 = 2-chlor-*O*6-benzylhypoxantin (***III***)

Tato práce vznikla za podpory projektů CZ.1.05/2.1.00/03.0058, *PrF_2013_015; PrF_2014_009.*

LITERATURA

1. Sutton B. M.: Gold Bull. *19*, 15 (1986).
2. Shaw III F. C.: Chem. Rev. *99*, 2589 (1999).
3. Legravend M., Grierson D. S.: Bioorg. Med. Chem. *14*, 3987 (2006).

1P-05
ZETA - POTENTIAL CHARACTERIZATION OF VERMICULITE NANOCOMPOSITES

KARLA ČECH BARABASZOVÁ*, PAVEL KALIVODA

Nanotechnology Centre, VŠB-Technical University of Ostrava, 17. listopadu 15/2172, 708 33 Ostrava-Poruba
karla.barabaszova@vsb.cz

The vermiculite nanocomposites are particular materials with defined particle size and surface. Their unique properties are mainly determined their ability to aggregation or agglomeration. The surface charge is one of the most important characteristics not only particles, which are possible to study their behaviour at different enviroments, liquids especially[1].

The zeta potential is the most interesting and very important surface property, which give information about total surface charge and it's exploited to assessing of physical stability in liquid mediums[2]. The particle system with large surface energy in liquid medium have tendency for decrease of this energy, which faces, that in case collision's between particles can be expect the agglomeration or aggregation process[3]. The rate of aggregation process is given especially by electric surface properties of particles (surface charge) and behaviour of Debye layer on the surface of vermiculite nanocomposite particles.

This work was supported by the project No. CZ.1.05/1.1.00/02.0070 – IT4 Innovations Centre of Excellence project and project No. SP2014/39 – Functional nanostructured materialas.

REFERENCES

1. Hosokawa M., Nogi K., Naito M. Yokoyama T.: *Nanoparticle technology handbook*. 1st ed. 622 p. Elsevier, Netherlands 2007.
2. Kirby B. J., Hasselbrink E. F.: Zeta potential of microfluidic substrates: Theory, experimental techniques, and effet on separations. Electrophoresis *25* (2004).
3. Čech Barabaszová K., Valášková M.: Characterization of vermiculite particles after different milling techniques. Powder Technology *239* (2013).

1P-06
CHARAKTERIZACE NEKOVALENTNĚ FUKCIONALIZOVANÝCH UHLÍKATÝCH NANOTRUBIČEK

JIŘÍ KARAS, MARCEL MIKESKA, DANIELA PLACHÁ*, GRAŽYNA SIMHA MARTYNKOVÁ

Centrum nanotechnologií, Vysoká škola báňská-Technická Univerzita, Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava-Poruba
daniela.placha@vsb.cz

Uhlíkaté nanotrubičky mají, pro své unikátní vlastnosti, širokou oblast aplikací, např. v oblasti lékařských věd, senzorů, kompozitních materiálů, elektronických a optických zařízeních apod[1]. Původní uhlíkaté nanotrubičky se vyznačují hydrofobním povrchem, ve vodném prostředí tvoří shluky a jsou obtížně dispergovatelné. Některé z výše uvedených aplikací vyžadují úpravu hydrofobních povrchů nanotrubiček, tak aby byly umožněny jejich interakce s okolním prostředím, například v biomedicínských aplikacích s fyziologickým prostředím. Modifikace povrchů nanotrubiček se provádí pomocí kovalentních nebo nekovalentních funkcionalizací.

Nekovalentní funkcionalizace povrchu nanotrubiček je neinvazivním způsobem úpravy povrchu nanotrubiček, který na rozdíl od kovalentní funkcionalizace, nevede k narušení celistvé struktury nanotrubiček. K funkcionalizaci se používají surfaktanty a vybrané polymery, které na základě fyzikálních interakcí vytvoří na povrchu trubiček povlak.

Pro nekovalentní funkcionalizaci povrchu byly použity vícestěnné uhlíkaté nanotrubičky (Nanocyl NC 7000). Funkcionalizace byla provedena s využitím surfaktantů (hexadecyltrimethylammonium bromid, hexadecylpyridinium bromid, dodecylsulfát sodný) a polymerů (polyethylenglykol, chitosan, Tween). Vzniklé materiály byly charakterizovány s využitím metod elektronové mikroskopie, Ramanovy spektroskopie, FTIR a termické gravimetrie a následně porovnány z hlediska návrhu vhodnosti daného materiálu pro vybrané biologické a medicínské aplikace, s využitím metod molekulového modelování.

Tato práce vznikla za podpory projektu evropského regionálního rozvojového fondu IT4Innovations Centre of Excellence (CZ.1.05/1.1.00/02.0070) a SGS SP2014/93.

LITERATURA

1. Ali-Boucetta H., Kostarelos K.: Adv. Drug. Deliv. Rev. *65*, (2013).

1P-07
KORÓZIA TiB_2 V TAVENINE KF-AlF_3 S PRÍDAVKOM Al_2O_3

MARTIN KONTRÍK*[,a], FRANTIŠEK ŠIMKO[a], DAGMAR GALUSKOVÁ[b], DUŠAN GALUSEK[b]

[a]Ústav Anorganickej chémie, SAV, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava 45, [b] Vitrum Laugaricio - Centrum kompetencie skla, spoločné pracovisko ÚACH SAV, TnU AD a FChPT STU, Trenčín
martin.kontrik@savba.sk

V súčasnosti sa výskum v oblasti výroby hliníka intenzívne zameriava na zefektívnenie procesu výroby, najmä v oblastiach znižovania spotreby elektrickej energie, zníženia produkcie odpadov a zvýšenia čistoty výsledného produktu[1]. Trend vo vývoji smeruje k využitiu elektrolytu s nízkou teplotou topenia a nahradeniu konvenčných grafitových elektród, elektródami z inertných materiálov[2–6].

Táto práca sa zaoberá skúmaním vplyvu zmesi KF-AlF_3-Al_2O_3, ako kandidáta na nízkotopiaci sa elektrolyt, na koróziu diboridu titánu. Použila sa zmes s kryolitovým pomerom CR=1,3 (CR = n_{KF}/n_{AlF3}) a s prídavkom 4,5 hm.% Al_2O_3. Korózne experimenty boli vykonávané metódou statických testov pri teplote 680 °C.

Materál vynikajúco odolával koróznemu prostrediu. Pri

vizuálnom pozorovaní vzorky nevykazovali významné poškodenie, ani po 100 hodinovom experimente. Na vzorkách bola sledovaná zmena hmotnosti pred a po koróznych testoch. Pozoroval sa nárast hmotnosti pri všetkých aplikovaných výdržiach, ktorý môže byť pripísaný reakcii materiálu s taveninou za vzniku koróznych produktov, usadených v póroch vzorky. Priemerný nárast hmotností na všetkých vzorkách bol približne 4 %.

Povrch vzoriek sa analyzoval skenovacím elektrónovým mikroskopom s využitím EDX analýzy. Výraznejšie korózne napadnutie bolo pozorované až na vzorke po 100 hodinovej expozícii v časti vzorky ponorenej v tavenine. Korózia v tomto mieste mala škvrnitý charakter. Časti vzoriek v oblasti na rozhraní medzi hladinou taveniny a atmosférou, ako aj nad ňou neboli výraznejšie napadnuté. Výsledky pozorovaní metalografického výbrusu vzoriek potvrdzujú predchádzajúce zistenia.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0460-10, Slovenskou grantovou agentúrou VEGA na základe zmluvy č. VEGA 2/0116/14 a Centrom excelentnosti pre keramiku, sklo a silikátové materiály, ITMS kód 26220120056, na základe Operačného programu pre výskum a vývoj financovaný z Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

LITERATÚRA

1. Grjotheim K., Welch B. J.: *Aluminium Smelter Technology – a Pure and Applied Approach*, Aluminium- Verlag, 2nd. ed., 1988.
2. Qing-Yu L., Lie L., Jian-hong Y., Yan-qing L., Hong-qiang W, Yong-gang L.: The Minerals, Metals and Materials Society and ASM International (38A), 2358 (2007).
3. Qing-Yu L., Yan-qing L., Yong-gang L., Lie L., Jian-hong Y., Jing F., Ye-xiang L.: Light Metals, 327 (2004).
4. Yang J., Hryn J. N., Davis B. R., Roy A., Krumdick G. K., Pomykala J. A. Jr.: Light Metals, 321 (2004).
5. Pawlek R.: Light Metals, 377 (2010).
6. Jie L., Xiao-jun L., Yan-qing L., Qing-yu L., Ye-xiang L.: J. Minerals Metals, Mater. Soc. *60*, 1543 (2008).

1P-08
SONOCHEMICKÁ A SOLVOTERMÁLNÍ PŘÍPRAVA FOSFOREČNANŮ KOVŮ

MICHAELA KUCHAŘOVÁ[a], ALEŠ STÝSKALÍK[a,b], JIŘÍ PINKAS[a,b]*

[a] Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno, [b] CEITEC MU, Masarykova univerzita, Kamenice 5, 625 00 Brno
jpinkas@chemi.muni.cz

V této práci jsme se zaměřili na přípravu fosforečnanů kovů sonochemickou a solvotermální metodou. Připravenými látkami byly konkrétně fosforečnany uranu, yttria a železa. Fosforečnany uranu mohou být potenciálně využity k přepracování a uložení radioaktivního odpadu[1,2]. Fosforečnany yttrité jsou široce využívanými materiály zejména v optice[3]. Posledně jmenované fosforečnany železa, ve formě směsných sloučenin, nacházejí využití v elektrotechnice v lithno-iontových bateriích[4].

Pro jejich přípravu jsme jako prekurzory použili octany nebo acetylacetonátové komplexy zmíněných kovů. Jako rozpouštědla a zároveň reaktanty sloužily různé alkylfosfáty. Produkty byly charakterizovány vybranými fyzikálně-chemickými metodami: IR, PXRD, DLS, SEM, termickou a elementární analýzou.

S využitím uvedených metod přípravy, při nichž reakce probíhají za extrémních podmínek[5], jsme získali produkty s částicemi o velikosti desítek až stovek nanometrů.

Tato práce vznikla za podpory grantu CEITEC (CZ.1.05/1.1.00/02.0068) a GAČR P207/11/0555.

LITERATURA

1. Doroshenko I.: *Diplomová práce*. Masarykova univerzita, Brno 2013.
2. Žůrková J.: *Diplomová práce*. Masarykova univerzita, Brno 2013.
3. Luo Q., Shen S., Lu G., Xiao X., Mao D., Wang Y.: J. Mater. Chem. *19*, 8079 (2009).
4. Bilecka I., Hintennach A., Djerdj I., Novák P., Niederberger M.: J. Mater. Chem. *19*, 5125 (2009).
5. Pinkas J., Reichlova V., Zboril R., Moravec Z., Bezdicka P., Matejkova J.: Ultrason. Sonochem. *15*, 257 (2008).

1P-09
VLIV PŘÍPRAVY NA BAREVNÉ VLASTNOSTI PEROVSKITOVÉHO PIGMENTU

PETRA LUŇÁKOVÁ, KATEŘINA VILUŠINSKÁ, MIROSLAV TROJAN, JAKUB TROJAN

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra anorganické technologie, Doubravice 41, 532 10 Pardubice
petra.lunakova@student.upce.cz

Mezi dosud nejpoužívanější žluté, oranžové a červené pigmenty se řadí chromany olovnaté. Jsou proto hledány nové anorganické pigmenty, které eliminují použití těžkých kovů, a jenž by svojí barevností i ostatními pigmentovými vlastnostmi žluté a oranžové pigmenty nahradily. Za takové sloučeniny lze označit látky, jejichž podstatou je $BaCO_3$, u kterého lze vhodným dopováním docílit výrazné změny barevných vlastností a také zvýšené termické stability.

Perovskit $CaTiO_3$ je tmavě hnědý až černý, průsvitný až průhledný, kovově lesklý, nedokonale štěpný minerál s nerovným až lasturnatým lomem. Byl pojmenován po ruském mineralogovi Lvu Aleksejeviči von Perovskim[1]. Je to jedna z nejčastěji se vyskytujících struktur, se kterou se lze setkat u pevných látek anorganického charakteru. Kubická mřížka je ideální strukturou u perovskitových sloučenin, jejichž obecný vzorec je ABX_3, kde kationt A je výrazně větší a může mít oxidační číslo +1 až +3, zatímco kationt B je menší a má oxidační číslo +3 až +5. X označuje aniont, což bývá nejčastěji O^{2-}, ale i karbidy, nitridy nebo halogenidy[2].

Byly připraveny žluté a zelené pigmenty na základě směsi oxidu SnO_2 s $BaCO_3$ a $BaSO_4$. Pro syntézu pigmentů

byl do směsí přidán také Tb_4O_7 a SiO_2. Pigmenty byly získány klasickým, dvoustupňovým způsobem a suspenzním mísením surovin. Barevné vlastnosti těchto pigmentů byly měřeny na spektrofotometru ColorQuest XE v barevném prostoru CIE *L*a*b** ve viditelné oblasti světla. Byla proměřena velikost částic a pro charakterizaci byla použita rentgenová difrakční analýza.

Tato práce vznikla za podpory IGA Univerzity Pardubice SGSFChT_2014002.

LITERATURA

1. Twu J., Gallagher P. K.: *Properties and applications of perovskite- type oxides, Preparation of Bulk and Supported Perovskites*, kap. 1, s. 10. Marcel Dekker, INC., New York 1993.
2. Pena M. A., Fierro J. L. G.: Chem. Rev. *101*, 2000 (2001).

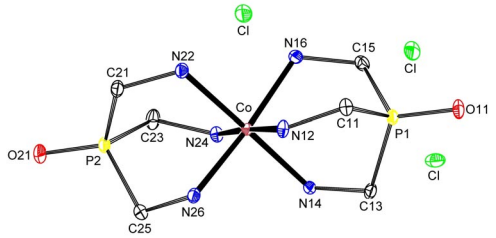
1P-10
KOMPLEXY TRIS(AMINOMETHYL)FOSFIN-OXIDU JAKO TEMPLÁTY PRO SYNTÉZU KRYPTANDOVÝCH SYSTÉMŮ

MONIKA PAÚROVÁ, IVANA CÍSAŘOVÁ, JAN KOTEK, PETR HERMANN, IVAN LUKEŠ

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra anorganické chemie, Hlavova 8, 128 43 Praha 2
monika.paurova@natur.cuni.cz

Syntéza, studium a charakterizace nových kryptandových ligandů je poměrně zajímavou oblastí koordinační chemie. Makrobicyklické ligandy můstkované přes vhodné tripodální skupiny (fosfinoxidové, uhlíkové, dusíkaté) a lineární (symetrické, nesymetrické) spojky nabízejí širokou paletu laditelnosti vlastností vzniklých komplexů. Největší důraz je kladen zejména na velikost koordinační kavity, a termodynamickou stabilitu a kinetickou inertnost kryptandových systémů. Tyto látky pak mohou najít uplatnění např. na poli metallokatalýzy nebo v medicínských zobrazovacích technikách.

Mezi syntetické cesty jak připravit tyto makrobicyklické ligandy patří obvykle metoda velkého zředění (vyžadující práci s velkými objemy reakčních směsí) a nebo templátová syntéza s vhodnými acyklickými prekurzory. Druhý zmíněný přístup je obvykle synteticky příjemnější. Jako templátové prekurzory určené pro další syntézy byly připraveny a studovány komplexy tris(aminomethyl)fosfinoxidu (TAMPO) s ionty přechodných kovů. Ligand byl zkoumán zvláště z hlediska termodynamické stability svých komplexů metodou potenciometrické titrace. Byly získány hodnoty protonizačních konstant ligandu a konstant stability komplexních částic s ionty Cu^{II}, Zn^{II}, Ni^{II} a Co^{II}. Prostorové uspořádání tripodální skupiny pro případné navázání lineárních spojek bylo v některých případech potvrzeno pomocí rentgenostrukturní analýzy.



Obr. 1. **Rentgenová struktura $[Co(TAMPO)_2]Cl_3$.** Vodíkové atomy nejsou pro přehlednost zobrazeny

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR P207/11/1437.

1P-11
SIMULÁCIA KORÓZNEHO CHOVANIA ZLIATINY INCOLOY 800H/HT VO FLUORIDOVOM PROSTREDÍ

VILIAM PAVLÍK, MARTIN KONTRÍK, FRANTIŠEK ŠIMKO, MIROSLAV BOČA

Ústav anorganickej chémie, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava
viliam.pavlik@savba.sk

Vo fluoridových taveninách sa zliatiny nedokážu pasivovať v dôsledku silnej reaktivity fluóru. Ich správanie v koróznom médiu sa prejavuje iným mechanizmom, tzv. prednostnou koróziou. V prípade niklových zliatin všeobecne korodujú prímesy ako chróm, železo, molybdén, wolfrám, niób a podobne. Ak je tavenina-korózne médium priebežne nasýtená iónmi, ktoré sú za obyčajných podmienok hlavnou koróznou zložkou, je možné predpokladať, že rovnováha sa posunie na stranu reaktantov a korózny úbytok zliatiny bude v konečnom dôsledku nižší.

Cieľom práce bolo pozorovať chovanie zliatiny Incoloy 800 H/HT (48Fe-29Ni-20Cr) v simulovanom koróznom prostredí fluoridovej taveniny LiF-NaF-KF (46,5-11,5-42 mol.%). Testoval sa vplyv umelých prídavkov vybraných fluoridov kovov (CrF_3, FeF_3, FeF_2, CoF_2, NiF_2) vo fluoridovej tavenine. Teplota taveniny pod argónovou atmosférou bola 680 °C. Čas výdrže na danej teplote sa pohyboval okolo 8 hodín.

Na vyhodnotenie sa použila vážková analýza a metóda pozorovania povrchu SEM-EDX.

Zistilo sa, že so zvyšujúcim množstvom umelo pridaných fluoridov kovov sa úbytok zliatiny zvyšoval. V prípade prídavku 5 mol.% fluoridu chromitého sa váhový úbytok znížil v porovnaní s jeho prídavkami od 0,3 mol.% až po 3,4 mol.%. SEM-EDX analýzou sa zisitlo, že prednostne sa zo zliatiny vylučoval chróm a železo, pričom v zliatine vznikla vrstva obohatená niklom. Zistila sa aj istá závislosť úbytku zliatiny od použitých umelých prídavkov fluoridov z pohľadu poradia prvkov v elektrochemickom rade napätia. Toto zistenie môže mať veľký technologický význam.

Táto práca vznikla za podpory Slovenskej grantovej agentúry VEGA č. 02/0095/12 a č. 02/0116/14.

1P-12

VLIV ANORGANICKÝCH NANOPLNIV NA BÁZI JÍLOVÝCH MINERÁLŮ A UHLÍKATÝCH MATERIÁLŮ NA TEPELNÉ VLASTNOSTI POLY(*N*-VINYLKAPROLAKTAMU)

LENKA PAZOURKOVÁ[a,b], JANA ZDRÁLKOVÁ[a,b], GRAŽYNA SIMHA MARTYNKOVÁ[a,b]

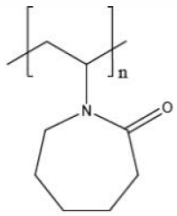
[a] *Centrum nanotechnologií,* [b] *IT4 Innovations Centre of Excellence, VŠB-Technická univerzita Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava*
lenka.pazourkova@vsb.cz

Poly(*N*-vinylkaprolaktam)[1] je neionogenní, voděrozpustný, neadhezivní, termosenzitivní a biokompatibilní polymer, který patří do skupiny poly-*N*-vinylamidových polymerů[2]. Termosenzitivní polymery jsou rozpustné ve studené vodě, ale kolabují a dochází ke srážení nad určitou teplotu. Při dosažení teploty fázového přechodu dochází k náhlé změně v konformaci, rozpustnosti a hydrofilně-hydrofóbní rovnováze[3]. V průběhu tepelného zatěžování tohoto polymeru bylo prokázáno, že při 380 °C dochází k nepřiměřeně velkému úbytku hmotnosti. Maximální ztráta hmotnosti je okolo 430 °C (cit.[1]). Abychom zabránili těmto nežádoucím jevům je vhodné polymer obohatit o plnivovou složku s lepšími tepelnými charakteristikami.

Jednou z možností je využití modifikovaných jílových minerálů v nanorozměrech (silikátová vrstva jílu je tenká 0,98 nm). Nejběžněji využívané jílové minerály jako plniva do polymerů jsou ze skupiny smektitů (montmorillonit), vermikulitů a kaolinu (halloysit). Tyto minerály ovlivňují především mechanické vlastnosti a tepelnou stabilitu polymerů[4–6].

Další možností plniva jsou nanouhlíkaté materiály ovlivňující mechanické a tepelné vlastnosti polymerů. Vykazují především zlepšení tepelné stability a vylepšení pevnostně-mechanických parametrů výsledného polymerního nanokompozitu oproti čistým polymerním látkám[7,8].

Tato práce studuje vliv jílových minerálů a uhlíkatých materiálů na tepelnou stabilitu poly (*N*-vinylkaprolaktamu). Pozitivní vliv nanoplniv na vlastnosti nanokompozitu byl studován metodami pro strukturní analýzu materiálu: rentgenovou práškovou difrakcí, a infračevernou spektroskopií s Frourierovou transformací, hmotnostní změny za tepelného zatěžování se stanovily termogravimetrickou analýzou. Doplňující metodou pro studium morfologie povrchu byla skenovací elektronové mikroskopie.



Obr. 1. **Poly(*N*-vinylkaprolaktam)[1]**

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR SP2014/82 a projektu IT4 Innovations Centre of Excellence reg.č.cz. 1.05/1.1.00/02.0070.

LITERATURA

1. Kozanoğlu S., Özdemir T., Usanmaz A.: J. Macromol. Sci., Part A: Pure Appl.Chem. *48*, 467 (2011).
2. Cheng S. C., Feng W., Pashikh I. I., Yuan L. H., Deng H. C., Zhou Y.: Radiat. Phys. Chem. *63*, 517 (2002).
3. Schmaljohann D.: Adv. Drug Delivery Rev. *58*, 1655 (2006).
4. Blumstein A.: J. Polym. Sci., A 3, 2665 (1965)
5. Wang L., Wang X., Chen Z., Ma P.: Appl. Clay Sci. *75–76*, 74 (2013).
6. Mingxian L., Zhixin J., Demin J., Changren Z.: Prog. Polym. Sci., v tisku
7. Barreto C., Altskär A., Fredriksen S., Hansen E., Rychwalski R. W.: Eur. Polym. J. *49*, 2149 (2013).
8. Kaczmarek H., Podgórski A.: Polym. Degrad. Stab. *92*, 939 (2007).

1P-13

ZINC AND CADMIUM SULPHIDE NANOCOMPOSITES WITH MONTMORILLONITE: PREPARATION AND PHOTOCATALYTIC ACTIVITY

PETR PRAUS[a], PETR KOVÁŘ[b]

[a] *Department of Chemistry, VŠB-Technical University of Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava,* [b] *Department of Chemical Physics and Optics, Charles University in Prague, Faculty of Mathematics and Physics, Ke Karlovu 3, 121 16 Prague 2*
petr.praus@vsb.cz

ZnS and CdS nanoparticles were precipitated by reactions of zinc and cadmium acetate with sodium sulphide in the presence of the cationic surfactant cetyltrimethylammonium bromide (CTAB). The nanoparticles with the radii of 2.0–2.2 nm were obtained. ZnS and CdS nanoparticles had the hexagonal and cubic structure, respectively. The dispersions of ZnS, CdS nanoparticles and CTAB were studied by laboratory and molecular modelling methods. Based on zeta potentials measurements and results of molecular simulations ZnS and CdS nanoparticles were found to be covered by CTAB arranged into bilayers forming positively charged micelles.

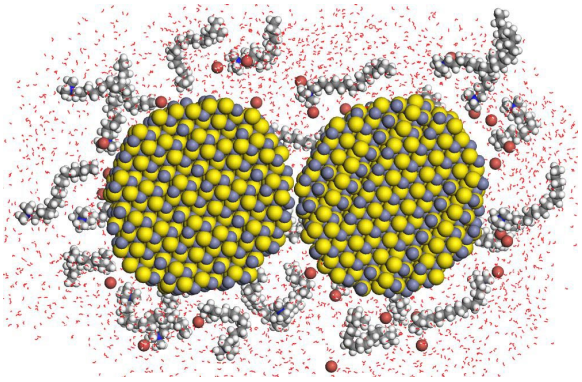


Fig. 1. **Cross section of ZnS nanoparticles in water environment surrounded by CTAB**

These micelles were immobilized on particles of the clay mineral montmorillonite (MMT). ZnS and CdS nanoparticles were mostly deposited in micro- and mesopores of MMT that were closed during drying. The resulting nanocomposites contained 4–7 wt. % of ZnS, resp. CdS. The MMT nanocomposites along with free ZnS and CdS nanoparticles were applied for the photocatalytic decomposition of phenol[1], nitrous oxide[2] and photocatalytic reduction of carbon dioxide[3,4]. Using free nanoparticles as well as the nanocomposites the 90% efficiency of the phenol decomposition was achieved. For the reduction of CO_2 the nanocomposites were more suitable. They provided 5–6 fold higher efficiency than the commercial TiO_2 catalyst (Evonik P25) in production of hydrogen and methane. In case of the N_2O decomposition ZnS nanoparticles and the ZnS-MMT nanocomposite were also more efficient (80 %) then TiO_2 (57 %).

This work was financially supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic in the "National Feasibility Program I", project LO1208 "TEWEP".

REFERENCES

1. Praus P., Matys J., Kozák O.: J. Braz. Chem. Soc. *23*, 1900 (2012).
2. Obalová L., Šihor M., Praus P., Reli M., Kočí K.: Catal. Today *230*, 61 (2014).
3. Kozák O., Praus P., Kočí K., Klementová M.: J. Colloid Interface Sci. *352*, 244 (2010).
4. Praus P., Kozák O., Kočí K., Panáček A., Dvorský R.: J. Colloid Interface Sci. *360*, 574 (2011).

1P-14
PREPARATION OF $Zn_xCd_{1-x}S$ NANOPARTICLES AND THEIR PHOTOCATALYTIC

LADISLAV SVOBODA, PETR PRAUS*
Department of Chemistry, VŠB-Technical University of Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava, Czech Republic
petr.praus@vsb.cz

Semiconductor $Zn_xCd_{1-x}S$ nanoparticles (NPs) were prepared by precipitation procedure at room temperatures. Mixtures of zinc and cadmium cations were precipitated by sodium sulphide in the presence of cetyltrimethylammonium bromide (CTAB) creating micelles into which nanoparticles were encapsulated and protected against agglomeration[1]. The ratio of Zn:Cd composition in $Zn_xCd_{1-x}S$ was changed in range from x=0 to x=1 with the step 0.1. Energy gaps were determined from measured UV-Vis spectra by the Tauc method[2]. Radii of the nanoparticles were calculated using dependence of gap energy on radius of semiconductor quantum dots involving quantum confinement effect. Electron transmission microscopy was used to confirm calculated sizes of prepared nanoparticles (Fig. 1).

The photocatalytic activity of prepared $Zn_xCd_{1-x}S$ nanoparticles has been tested by degradation of methylene blue solution under UV-light irradiation with maximum emission wavelength at 365 nm. The best results in photocatalytic activity was found for composition $Zn_{0.6}Cd_{0.4}S$ in which band gap energy is close to energy of photons of light used for excitation in photocatalytic experiments.

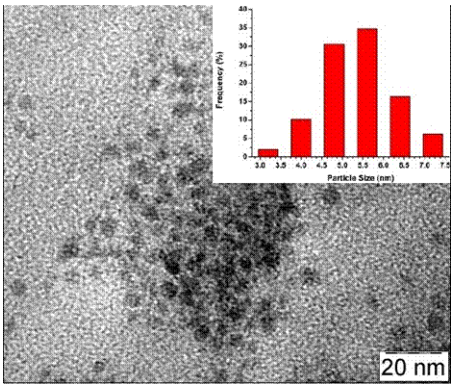


Fig. 1. **TEM analysis of $Zn_{0.3}Cd_{0.7}S$ nanoparticles with size distribution histogram**

This work was supported by the Czech Science Foundation (P107/11/1918), by the Regional Materials Science and Technology Centre (CZ.1.05/2.1.00/01.0040) in Ostrava and by VŠB-Technical University of Ostrava (student's grants SP2013/56).

REFERENCES

1. Praus P., Dvorský R., Horínková P., Pospíšil M., Kovář P.: J. Colloid Interface Sci. *377.1*, 58 (2012).
2. Tauc J., Grigorovici R., Vancu A.: Physica Status Solidi (b) *15*, 627 (1966).

1P-15
ŠTÚDIUM J-MAGNETOŠTRUKTÚRNYCH KORELÁCII

BEATA VRANOVIČOVÁ*, ROMAN BOČA, VIERA MRÁZOVÁ

Katedra chémie, Fakulta prírodných vied Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave, nám. J. Herdu 2, 917 01 Trnava, Slovenská republika
beata.vranovicova@ucm.sk

Vzťah medzi štruktúrou koordinačných zlúčenín a ich magnetickými vlastnosťami sa študuje už niekoľko dekád. Štruktúra sa na jednej strane charakterizuje niektorými významnými väzbovými vzdialenosťami alebo väzbovými uhlami. Na druhej strane sa pohľad na magnetické vlastnosti redukuje na hodnotu konštanty izotropnej interakcie (J alebo 2J podľa definície člena Hamiltoniánu). Predmetom nášho skúmania sú tradičné J-magnetoštruktúrne korelácie v komplexoch prechodných kovov (napr. medi, železa, kobaltu, chrómu a mangánu), týkajúce sa vzťahu J = f(p), kde p je štruktúrny parameter[1].

Nové možnosti skúmania J-magnetoštruktúrnych korelácii poskytuje použitie chemometrie. Spracovaním zozbieraných štruktúrnych a magnetických údajov z literatúry, moder-

nými prostriedkami a využitím programu Statgraphics, sa dajú získať mnohopočetné korelačné vzťahy[2].

Veľkou motiváciou pre ďalšie štúdium korelácii najmä v dvojjadrových komplexoch Fe(III) sú aj ich prediktívne možnosti pri skúmaní vlastností proteínov ako sú feritin a hemosiderin[3].

Tato práce vznikla za podpory grantu VEGA 1/0073/13.

LITERATÚRA

1. Kahn O.: *Molecular Magnetism*. VCH, Weinheim 1993.
2. Puterová-Tokárová Z., Mrázová V., Kožíšek J., Valentová J., Vranovičová B., Boča R.: Polyhedron *70*, 52 (2014).
3. Gorun S. M., Lippard S. J.: Inorg. Chem. *30*, 1625 (1991).

1P-16
MECHANOAKTIVACE $CaSnSiO_5$

MARCELA ZVONKOVÁ, JANA LUXOVÁ, JAKUB TROJAN, MIROSLAV TROJAN

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra anorganické technologie, Doubravice 41, 532 10 Pardubice
zvonkova.marcela@gmail.com

Práce je zaměřena na přípravu pigmentů typu $CaSnSiO_5$ s dopujícími prvky vybraných lanthanoidů a chromem. Jedná se o malayaity cíničité povahy s monoklinickou krystalovou strukturou[1,2]. Jejich barevné chování závisí na použití daného typu keramické glazury[3–5]. Vzorky byly připraveny, zhomogenizovány a mlety po dobu pěti hodin s následnou kalcinací při teplotách 1200 až 1450 °C.

Zkoumané vzorky byly připraveny v různých koncentracích suchým způsobem přípravy reakcí v pevné fázi. Čistota použitých výchozích látek byla v rozmezí 96–99 %. Kalcinace reakční směsi v korundových kelímcích v elektrické peci trvala čtyři hodiny s rychlostí náběhu teploty v peci 10 °C/min. Mletí probíhalo v achátových miskách v jednopozicovém planetovém mlýnku "pulverisette 6" Fritsch (Fritsch GmbH, SRN) při rychlosti 200 otáček za minutu po dobu pěti hodin. Výsledný mlecí efekt byl dán pohybem koulí a mletého materiálu po vnitřní stěně mlecí nádoby a rázem koulí na mletý materiál a protilehlou vnitřní stěnu mlecí nádoby. Hermetické těsnění mezi mlecími nádobami a víkem zaručilo bezeztrátové mletí. Barevné vlastnosti testovaných vzorků byly sledovány při aplikaci do keramické glazury P07410 a nanesením na lesklý bílý fotografický papír ve formě tenkého filmu v organické matrici. Hodnoty barevných souřadnic L, a*, b* byly změřeny pomocí ColorQuestu XE (HunterLab, USA). Velikost částic byla vyhodnocena v jejich práškové formě na Mastersizer 2000/MU (Malvern Instruments, VB).

Ze získaných laboratorních testů vyplývá, že mechanoaktivace výrazně ovlivňuje velikost zrn připravených pigmentů.

Tato práce vznikla za podpory projektu IGA Univerzity Pardubice, SGFChT 04.

LITERATURA

1. Alexander J. B., Flinter B. H.: Mineral. Mag. *32*, 622 (1965).
2. Higgins J. B., Ribbe P. H.: Am. Mineral. *62*, 7 (1977).
3. Eppler R. A.: Am. Ceram. Soc. Bull. *66*, 1600 (1987).
4. Eppler R. A.: *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology* 6, 877-892 (1992)
5. Escardino L., Mestre S., Feliu C., Jodar P., Diaz L.: Br. Ceram. Trans. *101*, 213 (2002).

2L-01
MODERNÍ METODY IZOLACE A PROFILOVÁNÍ ROSTLINNÝCH HORMONŮ CYTOKININŮ

PETR TARKOWSKI[a], ONDŘEJ NOVÁK[a], JAKUB KOŘISTKA[a], Lucie HALENKOVÁ[a], PAVEL JAWOREK[a], TIBOR BÉRES[a], YU-QI FENG[b], MIROSLAV STRNAD[a]

[a] *Centrum Regionu Haná pro biotechnologický a zemědělský výzkum, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc,* [b] *Katedra analytické chemie, Univerzita Wuhan, 430072 Wuhan, Čína*
petr.tarkowski@upol.cz

Rostlinné hormony cytokininy hrají klíčovou roli při regulaci mnoha vývojových procesů v rostlinách. Tyto signální molekuly regulují v koordinaci s dalšími hormony buněčné dělení, diferenciaci buněk, apikální dominanci, metabolickou aktivitu pletiv, stárnutí listů apod. Strukturně se jedná a N6-substituované deriváty adeninu. V rostlinných pletivech se tyto látky vyskytují v několika formách (volné báze, ribosidy, glykosidy, nukleotidy), které se významně liší svojí biologickou aktivitou a tudíž i funkcí. Na rozdíl od produktů primárního metabolismu a naprosté většiny sekundárních metabolitů se rostlinné hormony vyskytují ve velmi nízkých koncentracích (fmol – pmol/g čerstvé hmoty). Rostlinné pletivo představuje komplexní směs látek, které mají často podobnou strukturu či fyzikálně chemické vlastnosti jako cytokininy. Dnes je známo více než padesát různých cytokininů, včetně *cis/trans* či polohových isomerů[1]. Všechny výše uvedené skutečnosti vedou k potřebě používat dostatečně selektivní a mimořádně citlivé metody chemické analýzy cytokininů[2]. Předmětem této prezentace je přehled moderních izolačních metod a metod koncové analýzy, které se v posledních letech uplatňují při profilování cytokininů přirozeně se vyskytujících v rostlinách a bakteriích. Jedná se zejména mikroextrakční metody (mikroextrakce na pevné fázi, mikroextrakce polymerním monolitem) a spojené techniky LC-MS/MS a CE-MS/MS či CE-LIF.

LITERATURA

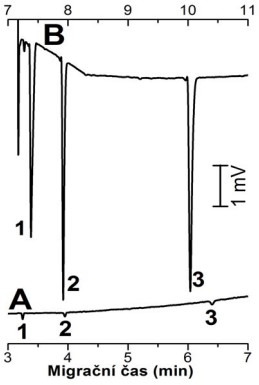
1. Tarkowski P., Doležal K., Strnad M.: Chem. Listy *98*, 834 (2004).
2. Tarkowski P., Ge L., Young J. W. H., Tan S. N.: Trends Anal. Chem. *28*, 323 (2009).

2L-02
ON-LINE PREKONCENTRACE KLINICKÝCH VZORKŮ V KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZE

PETR TŮMA

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

Mezi přednosti kapilární elektroforézy (CE) patří vysoká separační účinnost, krátká doba separace a snadná úprava vzorků před instrumentální analýzou. V kombinaci s běžnými detektory, UV-Vis fotometrický nebo vodivostní, vykazuje CE vysoké limity detekce na úrovni 10^{-5} mol/l, které do značné míry limitují její široké využití v klinické analýze. Tuto nevýhodu lze překonat použitím prekoncentračních technik, pomocí nichž se klinické vzorky zakoncentrují přímo v separační kapiláře. Krevní plasma, moč, mozkomíšní mok nebo mikrodialyzáty tkání jsou před CE analýzou ředěny vodou nebo přídavkem organického rozpouštědla z důvodu potlačení vysoké vodivosti klinických vzorků. Takto upravené vzorky lze dávkovat do kapiláry ve velkém množství a analyty zakoncentrovat elektrickým polem na rozhraní vzorek/separační elektrolyt. Touto metodikou byly stanoveny neurotransmitery (glycin, glutamát a GABA) v mikrodialyzátech mozku[1,2] nebo antidiabetikum metformin v moči a krvi[3] s limity detekce na úrovni 10^{-8} mol/l.



Obr. 1. **Elektroferogram 10^{-5} mol/l směsi neurotransmiterů, GABA (1), glycin (2) a glutamát (3), rozpuštěných v 75% acetonitrilu s přídavkem 20 mM NaCl.** Běžné dávkování vzorku do kapiláry – 1,4 % z délky kapiláry (A), vysoké dávkování – 98 % z délky kapiláry (B). Separační elektrolyt, 4 mol/l kyselina octová; kapilára, 60 µm id, 43 cm délka, 28 cm k bezkontaktnímu vodivostnímu detektoru; 25 kV

Tato práce vznikla za podpory Univerzity Karlovy v Praze, projekty PRVOUK P31 a UNCE 204015/2012.

LITERATURA

1. Tůma P., Soukupová M., Samcová E., Štulík K.: Electrophoresis *30*, 3436 (2009).
2. Tůma P., Šustková-Fišerová M., Opekar F., Pavlíček V., Málková K.: J. Chromatogr. A *16*, 94 (2013).
3. Tůma P.: J. Chromatogr. A *1345*, 207 (2014).

2L-03
VYUŽITIE ANALYTICKYCH METÓD PRI ANALÝZE LIEČIV V POTRAVINÁCH

JOZEF SOKOL

Univerzita sv. Cyrila a Metóda, Fakulta prírodných vied v Trnave, J. Herdu 2, 917 01 Trnava
jozef.sokol@ucm.sk

Legislatívne nariadenia tykajúce sa problematiky rezíduí liečiv v potravinách živočíšneho pôvodu majú za úlohu chrá-

niť zdravie spotrebiteľa. Sú stále prísnejšie a náročnejšie z hľadiska tzv. maximálnych reziduálnych limitov (MRL). Preto aj nové metódy stanovenia rezíduí liečiv sa musí sa realizovať na takých úrovniach, aby vedeli spoľahlivo detegovať a stanoviť hodnoty na úrovni MRL. Tento trend sa realizuje na viacerých úrovniach, a to znižovaním medze stanoviteľnosti analytických metód pod hodnotu MRL na úrovni ppb až ppt, zdokonaľovaním a zavádzaním nových metód, vývojom kvalitnejšej prístrojovej techniky a využívaním predkoncentračných techník.

Medzi diagnostické metódy kontroly rezíduí liečiv patria:

- mikrobiologické metódy (štvorplatňová metóda, Staar metóda, Delvo test, Premi test,
- imunochemické metódy (Charm test),
- chemické metódy (kvapalinová chromatografia, tenkovrstvová chromatografia, kapilárna elektroforéza a hmotnostná spektrometria v kombinácii so separačnými metódami.

Vyber správnej extrakčnej metódy a predkoncentračnej techniky má priamy dopad na výťažnosť metódy. Najviac využívanou prekoncentračnou technikou je extrakcia na tuhej fáze (SPE). Extrakcia za pomoci McIlvainovho tlmivého roztoku a techniky SPE na kolónkach s fázou C_{18} sa používala pri stanovení tetracyklínov. Pri stanovovaní tylozínu sa extrakt acetonitrilu a vody zakoncentrovaval na kolónkach s fázou $C_{18,}$ a taktiež pri stanovovaní penicilínov, kde sme zakoncentrovavali vyextrahované penicilíny vo fosfátovom tlmivom roztoku. Na chromatografickú separáciu antibiotík sa najčastejšie používajú kolóny na baze reverzných fáz, ako sú C_{18} a C_8. Ako mobilné fázy sa používajú tlmivé roztoky v kombinácii s acetonitrilom a metanolom. Pre tetracyklíny: acetonitril-metanol-0,01 M vodný roztok kyseliny šťaveľovej, acetonitril-0,01 M roztok kyseliny fosforečnej pre tylozín. Najviac používanými detekčnými technikami v kvapalinovej chromatografii rezíduí antibiotík sú UV detekcia, fluorescenčná detekcia, hmotnostná spektrometria a prípadne elektrochemická detekcia. Najväčším prínosom v posledných rokoch je metóda kvapalinovej chromatografie a hmotnostnej spektrometrie, ktorá sa využíva za účelom konfirmácie rezíduí liečiv, zároveň posúva detekčné limity k nižším hodnotám.

Príspevok vznikol za podpory grantu VEGA č. 1/0233/12.

LITERATÚRA

1. Sokol J., Matisová E.: J. Chromatogr. A *669*, 75 (1994).
2. Dudrikova E., Sokol J., Nagy J.: J. AOAC Int. *82*(6), 1 (1999).

2L-04

DETEKCE LIDSKÉHO IMUNOGLOBULINU G Z KAPKY KRVE POMOCÍ MAGNETICKÉHO NANOKOMPOZITU A POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE

ANNA BALZEROVÁ, ARIANA FARGAŠOVÁ, ZDENKA MARKOVÁ, VÁCLAV RANC*, RADEK ZBOŘIL*

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

Imunoglobuliny jsou proteiny, které mají klíčovou úlohu při obraně organismu proti cizím objektům, jako jsou viry nebo bakterie. V lidském těle se vyskytuje pět tříd imunoglobulinů (A, G, M, E a D). Imunoglobulin G (IgG) má nejmenší poloměr a jako jediný ze všech tříd je schopen proniknout placentou k nenarozenému dítěti, a tím ho chránit[1]. Koncentrace IgG v krvi zdravého dospělého člověka je přibližně 10 g l^{-1}, ale mění se v závislosti na zdravotním stavu. Běžně se k detekci IgG používají imunologické metody jako ELISA (Enzyme-Linked Immunosorbent Assay) a metody od ní odvozené nebo separační metody, jako je elektroforéza a kapalinová chromatografie v kombinaci s hmotnostní spektrometrií. Tyto metody mají mnoho výhod, jako je vysoká citlivost a robustnost, ale jsou časově a materiálově náročné[2]. Z tohoto důvodu je stále vysoká poptávka po nových metodách nebo materiálech, které by byly schopny selektivně stanovit imunoglobuliny i při velmi nízkých koncentracích.

Jednou z metod potenciálně využitelných v této oblasti je povrchem zesílená Ramanova spektroskopie (SERS). Účinnou kombinací této techniky a účelně navrženého nanokompozitu obsahujícího magnetické jádro a nanočástice stříbra povrchově modifikované pomocí antiIgG byla vyvinuta procedura pro stanovení IgG ve vzorcích krve získaných tzv. „finger prick“ metodou. Přítomnost potenciální nespecifické interakce komponent vzorku s aktivním povrchem stříbra byla minimalizována úplnou blokací tohoto povrchu pomocí ethylaminu. Díky magnetickým vlastnostem nanokompozitu je možné jednoduše zakoncentrovat a odseparovat cílovou látku (IgG) ze složité matrice (krev) a díky nanočásticím stříbra ji snadno stanovit pomocí SERS. V porovnání s metodami sendvičového typu je použití jediného nanokompozitu velmi jednoduché a při analýze nedochází k chybám způsobeným nespecifickými interakcemi.

Tato práce byla podpořena projekty OP VaVpI reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0058, OPVK CZ.1.07/2.3.00/20.0056, TAČR TA03011368 a vnitřním grantem UP Olomouc PrF_2014032.

LITERATURA

1. Shakib F., v knize: *The Human IgG subclasses: molecular analysis of structure, function, and regulation,* s. 316. Pergamon Press, Oxford 1990.
2. Dobson R., Topping J., Giovannoni G.: J. Medical Virology *85*, 128 (2013).

2L-05
VLIV STÁRNUTÍ DISPERZE NANOČÁSTIC STŘÍBRA NA JEJICH POUŽITÍ V POVRCHEM ZESÍLENÉ RAMANOVĚ SPEKTROSKOPII

ARIANA FARGAŠOVÁ, ROBERT PRUCEK, ANNA BALZEROVÁ, MICHAELA SOPÚCHOVÁ, ALEŠ PANÁČEK, LIBOR KVÍTEK, RADEK ZBOŘIL

Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, PřF UP, tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc
ariana.fargasova@upol.cz

V posledních několika desetiletích se nanočástice stříbra (AgNPs) staly běžnou součástí moderní civilizace díky jejich optickým, magnetickým, elektronickým a v neposlední řadě antibakteriálním vlastnostem. Na základě těchto unikátních vlastností se pak v nanosvětě objevují zcela nové fenomény a zcela nové formy hmoty, od kterých se pak odvíjí jejich využití pro mnohé aplikace. AgNPs našly mimo jiné zejména uplatnění jako substrát v povrchem zesílené Ramanově spektroskopii (SERS).

Jako nejběžnější substráty pro SERS jsou využívány AgNPs připravené redukcí citrátem sodným[1] nebo borohydridem sodným[2], které však díky hůře opakovatelnému postupu přípravy často poskytují nereprodukovatelné SERS výsledky.

Uvedená práce se proto zabývá sledováním dlouhodobé časové stability nanočástic stříbra, připravených redukcí amoniakálního komplexu stříbrných iontů D-maltosou. Experimenty byly prováděny na základě měření průměrné velikosti částic a zaznamenáváním UV/Vis spekter. Kromě těchto parametrů byla také sledována hodnota pH a hodnota vodivosti po dobu téměř jednoho roku. Současně, u takto připravených AgNPs, byla sledována efektivita zesílení signálu v rámci SERS měření.

Tato práce vznikla za podpory projektů OP VaVpI reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0058, OPVK CZ.1.07/2.3.00/20.0056, TAČR TA03011368 a vnitřního grantu UP Olomouc (PřF_2014_032).

LITERATURA
1. Lee P. C., Meisel D.: J. Phys. Chem. *86*, 3391 (1982).
2. Greighton J. A., Blatchford C. G., Albrecht M. G.: J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2 *75*, 790 (1979).

2L-06
STUDIUM PŘÍPRAVY VRSTEV NANOČÁSTIC STŘÍBRA ZA VYUŽITÍ STUDENÉ PLAZMY PRO POVRCHEM ZESÍLENOU RAMANOVU SPEKTROSKOPII (SERS)

JAKUB VLČEK, LUBOMÍR LAPČÍK, ALEŠ PANÁČEK*

Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc
jakub.vlcek@upol.cz

Zejména pro své specifické optické vlastnosti jsou nanočástice stříbra využívány při tvorbě senzorů a také v posledních letech jako substrát pro povrchem zesílenou Ramanovu spektroskopii. Studená atmosférická plazma je v současnosti intenzivně studována, zejména pro její využití v povrchové chemii při čištění povrchů, aktivaci povrchů a depozici tenkých filmů[1,2].

Cílem naší práce bylo optimalizovat proces ošetření skleněného substrátu studenou atmosférickou plazmou generovanou pomocí difuzního koplanárního povrchového barierového výboje (DCSBD). Následně byly úspěšně připraveny tenké filmy nanočástic stříbra na skleněném substrátu. Depozice tenkých filmů byla prováděna metodou ponoření substrátu do disperze koloidního stříbra (deep coating) a také pomocí metody spin coating. Tyto vrstvy byly poté aplikovány jako substrát pro povrchem zesílenou Ramanovu spektroskopii (SERS).

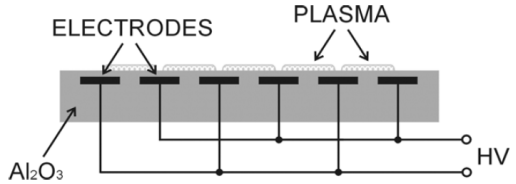


Schéma 1. **Elektrodový systém u DCSBD[1]**

Tato práce byla podpořena projekty OP VaVpl reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0058 a vnitřním grantem UP Olomouc PrF_2014032.

LITERATURA
1. Prucek R., Panáček A., Fargašová A., Ranc V., Mašek V., Kvítek L., Zbořil R.: CrystEngComm. *2242-2248*, 13 (2011).
2. Černák M., Černáková L., Hudec I., Kováčik D., Zahoranová A.: Eur. Phys. J.: Appl. Phys. *22806*, 47 (2009).

2L-07
INFLUENCE OF SILVER NANOPARTICLES ON RAMAN RESONANCE EFFECT IN LIQUID WATER

PAULINA FILIPCZAK, MARCIN KOZANECKI

Department of Molecular Physics, Lodz University of Technology, Zeromskiego 116, 90-924 Lodz, Poland
Student Section of Polish Chemical Society
paulina.filipczak.nano@gmail.com

Resonance effect is a phenomenon that strongly enhance Raman signal from the sample and strictly depends on excitation wavelength. It occurs when an incident electromagnetic wave interacts not only with vibrational, but additionally with electronic states. This phenomenon was observed for various organic as well as inorganic compounds.

Raman resonance effect in liquid water was demonstrated by Pastorczak et al.[1]. Polarized Raman spectroscopy showed that the intensity ratio of two main components with maxima around 3200 and 3400 cm^{-1} (assigned to strongly and loosely hydrogen-bonded water molecules, respectively) de-

pends on the excitation wavelength in the visible range. It was also shown, that the Raman resonance effect in water directly corresponds to the supramolecular structure of liquid water.

Noble metal (gold, silver) nanoparticles have been successfully applied for Surface Enhanced Raman Spectroscopy (SERS). Significant increase in Raman signal found for many organic molecules adsorbed on expanded metal surface put attention on SERS as a very sensitive analytical technique allowing to study single molecules. Because of this fact, currently, SERS technique is more willingly used in interesting studies on the field of medicine, biology, biochemistry or crystallography[2].

In this work studies on Raman resonance effect in water solutions of silver nanoparticles (AgNPs) synthesized according to the formula proposed by Frank et al.[3] will be presented. Investigations concern the impact of AgNPs for water vibrational spectra. Additionally influence of AgNPs size will be discussed.

This work was financially supported from grant no. 2013/09/B/ST4/03010.

REFERENCES

1. Pastorczak M., Kozanecki M., Ulański J.: J. Phys. Chem. A *112*, 10705 (2008).
2. Le Ru E. C., Blackie E., Meyer M., Etchegoin P. G.: J. Phys. Chem. C *111*, 13794 (2007).
3. Frank A. J., Cathcart N., Maly K. E., Kitaev V.: J. Chem. Educ. *87*, 1098 (2010).

2L-08
CHRONOPOTENCIOMETRICKÉ STANOVENIE KYSELINY ASKORBOVEJ V BIOLOGICKÝCH MATERIÁLOCH

ESTERA RÁBAROVÁ, ERNEST BEINROHR

Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave, Nám. J. Herdu 2, 917 01 Trnava
estera.rabarova@ucm.sk

Kyselina askorbová (KA) je prírodný antioxidant chrániaci živé organizmy pred pôsobením voľných kyslíkových radikálov. Ich účinkom sa najskôr oxidujú hydroxylové skupiny na uhlíkoch v polohe 3 a 4 furánového kruhu za vzniku kyseliny dehydro-askorbovej[1]. V ostatnom období je snaha vyvinúť nové metódy stanovenia KA v rôznorodých biologických vzorkách.

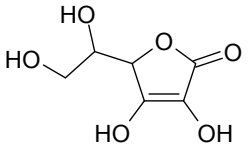


Schéma 1. **Chemická štruktúra kyseliny askorbovej**

Chronopotenciometria sleduje zmenu potenciálu pracovnej elektródy v čase pri nanútenom konštantnom prúde. V našej práci sme použili prietokový systém obsahujúci elektrochemickú celu so zabudovaným trojelektródovým systémom a s makropórovitou uhlíkovou elektródou na vývoj novej metódy stanovenia KA.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0073/13.

LITERATÚRA

1. Deutsch J. C.: Anal. Biochem. *255*, 1 (1998).
2. Beinrohr E.: *Prietokové elektroanalytické metódy v praxi*, kap. 6, s. 112. 2 THETA, Český Těšín 2013.

2L-09
VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ BROMAZEPAMU NA MENISKEM MODIFIKOVANÉ STŘÍBRNÉ PEVNÉ AMALGÁMOVÉ ELEKTRODĚ

PETR SAMIEC*, ZUZANA NAVRÁTILOVÁ

Ostravská univerzita v Ostravě, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava
p13171@student.osu.cz

Bromazepam (BZ) se průmyslově vyrábí jako léčivo pod obchodním názvem Lexaurin. V lékařské praxi se BZ používá k léčbě úzkostí, tenze a insomnie[1,2]. Ke stanovení této látky byla použita voltametrická technika DPV (diferenční pulzní voltametrie) v tříelektrodovém zapojení. Přítomnost azomethinové funkční skupiny a její snadná redukovatelnost umožnuje použít pracovní elektrodu typu meniskem modifikované stříbrné pevné amalgámové elektrody (m-AgSAE)[3]. Mezi výhody použití pevných elektrod na bázi amalgámů patří jejich minimální toxicita, snadná manipulace a stabilita[4].

Léčivo Lexaurin (BZ 3 mg) bylo použito pro výrobu zásobního roztoku BZ ($1\cdot10^{-3}$ mol l^{-1}) v methanolu. Jako optimální prostředí pro stanovení BZ bylo vybráno prostředí směsi Brittonova-Robinsonova pufru a methanolu (9:1) o hodnotě pH 2, ve kterém byly proměřovány koncentrační závislosti v rozmezí řádů 10^{-7} až 10^{-5} mol l^{-1}. Opakovaným měření BZ v optimálním prostředí byla dokázána stabilita proudové odezvy pracovní elektrody m-AgSAE. Takto připravený zásobní roztok BZ není stálý a voltametrické měření je zapotřebí provést ihned po přípravě roztoku.

Tato práce byla vypracována v rámci grantu SGS identifikační číslo SGS05/PřF/2014.

LITERATURA

1. Podilsky G., Berger-Gryllaki M., Testa B., Pannatier A.: J. Liq. Chromatogr. *34*, 878 (2008).
2. www.sukl.cz/download/spc/SPC93736.doc, staženo 24.4.2014.
3. Correia dos Santos M. M., Famila V., Simões Gonçalves M. L.: Anal. Bioanal. Chem. *374*, 1074 (2002).
4. Fischer J., Vaňourková L., Daňhel A., Vyskočil V., Čížek K., Barek J., Pecková K., Yousypchuk B., Navrátil T.: Int. J. Electrochem. Sci. *2*, 226 (2007).

2L-10
NEVŠEDNÍ ÚČINNOST ULTRAJEMNÝCH SUPERPARAMAGNETICKÝCH NANOČÁSTIC OXIDŮ ŽELEZA PŘI ODSTRAŇOVÁNÍ ARSENIČNANOVÝCH IONTŮ Z VODNÉHO PROSTŘEDÍ

MARTINA KILIANOVÁ, ROBERT PRUCEK, JAN FILIP, JAN KOLAŘÍK, LIBOR KVÍTEK, ALEŠ PANÁČEK, JIŘÍ TUČEK, RADEK ZBOŘIL

Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc
Martina.Kilianova@upol.cz

Arseničnany, vyskytující se ve vodních zdrojích, představují nemalé riziko pro lidské zdraví. Za účelem jejich odstraňování byly objeveny rozličné technologie, z nichž jedna využívá široké nabídky vhodných sorpčních materiálů. Nanočástice oxidu železa, jako sorbenty, jsou hojně využívány díky jejich vysoké ploše povrchu a možnosti manipulace s nimi pomocí vnějšího magnetického pole[1,2]. Pro odstraňování iontů arsenu z vodného prostředí byly v našem případě připraveny ultrajemné nanočástice oxidu železa s úzkou velikostní distribucí, a to za využití ekonomicky nenáročné a jednoduché metody syntézy[3]. Adsorpční kapacita tohoto sorbentu byla zvýšena kvůli jeho mezoporézní povaze vznikající díky silným magnetickým interakcím, jež se vyvíjí mezi nanočásticemi.

Kompletního odstranění arseničnanů bylo dosaženo již při využití poměru Fe/As blížící se 20/1 a při pH v rozmezí od 5 do 7,6. Za těchto podmínek byly arseničnany kompletně odstraněny během prvních několika minut experimentu. Mezi sorpčními nanosystémy založenými na oxidech železa toto uspořádání vykazovalo nejvyšší Freundlichův adsorpční koeficient a rovnovážnou sorpční kapacitu za daných podmínek reakce.

S ohledem na jednoduchou a nízkonákladovou přípravu sorbentu, vysoký výnos reakce, téměř monodisperzní charakter, superparamagnetické chování při pokojové teplotě a silnou magnetickou odezvu při použití malých magnetických polí mohou být tyto syntetizované nanočástice oxidu železa považovány za slibného kandidáta k využití v oblasti odstraňování nežádoucích toxických polutantů z různých reálných vodních systémů[4,5].

Tato práce vznikla za podpory projektů OP VaVpI CZ.1.05/2.1.00/03.005, OPVK CZ.1.07/2.3.00/20.0056, AV ČR KAN115600801, GAČR GAP304/10/1316 a vnitřního grantu UP Olomouc PřF_2013_031.

LITERATURA

1. Prucek R., Heřmánek M., Zbořil R.: Appl. Catal., A *366*, 325 (2009).
2. Prucek R., Tuček J., Kilianová M., Panáček A., Kvítek L., Filip J., Kolář M., Tománková K., Zbořil R.: Biomaterials *32*, 4704 (2011).
3. Cho K. H., Sthiannopkao S., Pachepsky Y. A., Kim K. W., Kim J. H.: Water Res. *46*, 5535 (2011).
4. Tuček J., Zbořil R., Petridis D.: Nanotechnol. *6*, 962 (2006).
5. Kilianová M., Prucek R., Filip J., Kolařík J., Kvítek L., Panáček A., Tuček J., Zbořil R.: Chemosphere *93*, 2690 (2013).

2L-11
ODSTRANĚNÍ SLOUČENIN ARSENU POMOCÍ MATERIÁLU NA BÁZI ŽELEZA

JAN KOLAŘÍK, ROBERT PRUCEK, ZDENĚK MARUŠÁK, RADEK ZBOŘIL

Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, PřF UP, tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc
jan.kolarik@upol.cz

Arsenitany a arseničnany představují pro životní prostředí velkou hrozbu, především díky svým značným toxickým účinkům, které byly známy už v 5. st. př.Kr.[1] Antropogenní znečištění arsenem zasahuje do všech sfér životního prostředí. Největší rizika přináší znečištění vody (podzemní i povrchové). Arsen našel své využití v celé řadě oborů od zemědělství po farmakologii[2]. Specie As(III) jsou více mobilní a hlavně toxičtější než arseničnany. Z toho důvodu je lepší oxidovat As (III) na méně toxický As(V).

Železan draselný K_2FeO_4 je šetrný k životnímu prostředí a má silné oxidační účinky. Fe(VI) spontánně reaguje s vodou a vytváří molekulární kyslík. V reakci s vodou je Fe(VI) rychle redukován na Fe(III). Další výhodou Fe(VI) je vznikající oxid železitý, který slouží jako dobrý adsorbent. Tyto oxidační a sorpční účinky Fe(VI) umožňují velmi efektivní čištění kontaminovaných vod[3].

Cílem této práce bylo prozkoumat proces sorpce sloučenin arsenu pomocí Fe(VI). Zároveň byla porovnána účinnost sorpce sloučenin arsenu na sorbenty maghemitu, $KFeO_2$ a K_2FeO_4. Cílem bylo také prozkoumat kinetiku sorpce, závislost sorpce na množství použitého sorbentu a závislost na pH. Pro Fe(VI) byla také zkoumána účinnost sorpce As(V) a As (III).

Tato práce vznikla za podpory projektů OP VaVpI reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0058, TAČR TE01020218 a vnitřního grantu UP Olomouc (PřF_2014_032).

LITERATURA

1. Greenwood N. N., Earnshaw A.: Chemistry of Elements, (1989).
2. Smith E., Naidu R., Alston A. M.: *Advances in Agronomy*, *149–195*, 64 (Academic Press, 1998).
3. Sharma V. K.: Environ. Res. *143–156*, 6 (2002).

2L-12
STUDIUM TEXTURNÍCH A ADSORPČNÍCH PARAMETRŮ UHLÍKATÝCH ADSORBENTŮ

TOMÁŠ ZELENKA

Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava
tomas.zelenka@osu.cz

Přírodní uhlí a uměle syntetizované uhlíkaté aerogely jsou předmětem mnoha studií, které uplatňují tyto materiály při odstranění polutantů z životního prostředí[1,2]. Tento aplikační potenciál je však do značné míry určen texturními ukazateli daného adsorbentu, které je nezbytné kvantitativně posoudit vhodnými metodami[3].

Adsorpční metody z plynné fáze (nejčastěji N_2, CO_2) představují nejrozšířenější způsob popisu texturních charakteristik, zejména pak stanovení specifického povrchu adsorbentů[3]. Byl zjištěn povrch mikropórů uhlíkatých materiálů v rozsahu 160–1320 $m^2 g^{-1}$ (ze sorpce CO_2), specifický povrch BET pak 5–860 $m^2 g^{-1}$ (ze sorpce N_2). Ukazatel hodnoty povrchu byl také stanoven NMR relaxační technikou, která představuje unikátní přístup k postihnutí porézního systému pevných látek bez aproximace tvaru částic či sušení vzorku, po kterém již materiál nereprezentuje svůj původní stav.

Cílem příspěvku je posoudit vzájemnou relaci mezi texturními charakteristikami uhlíkatých látek zjištěnými konvenčními sorpčními technikami a NMR metodou. Tyto parametry budou reflektovány na adsorpční chování olovnatých iontů z vodného prostředí.

Tento příspěvek byl podpořen z projektů CZ.1.05/2.1.00/03.0100, LO1208, SGS02/PřF/2014, 02508/2013/RRC.

LITERATURA

1. Pentari D., Perdikatsis V., Katsimicha D., Kanaki A.: J. Hazard. Mater. *168*, 1017 (2009).
2. Kadirvelu K., Goel J., Rajagopal C.: J. Hazard. Mater. *153*, 502 (2008).
3. Gil A., Gandía L.M.: Chem. Eng. Sci. *58*, 3059 (2003).

2L-13
KŘÍDLATKA – ALTERNATIVA PRO ČIŠTĚNÍ VOD?

MAREK MUCHA[a,b]*, JIŘÍ KALINA[a,b]

[a] Katedra chemie, [b] Environmentální centrum, Přírodovědecká fakulta Ostravské univerzity, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava
marek.mucha@osu.cz

Kontaminace povrchových vod léčivy[1] či těžkými kovy[2] je vážný environmentální problém. Řešením je adsorpce na různé typy sorbentů, například na aktivní uhlí[3]. Většina sorbentů vykazuje odpovídající sorpční vlastnosti, naproti tomu jsou poměrně drahé.

Účelem této práce bylo otestovat jeden z možných levných sorbentů – sušenou křídlatku, což je všudypřítomný plevel, takže její pořizovací náklady jsou nízké (náklady za pokosení, usušení a případné podrcení).

Sorpční vlastnosti sušené drcené křídlatky byly testovány na kyselině acetylsalicylové (léčivo Aspirin) a Pb^{2+} iontech. Dosažené výsledky (sorpční kapacita 0,08 mmol/g, resp. 14,48 mg/g pro kyselinu acetylsalicylovou a 0,25 mmol/g, resp. 52,1 mg/g pro Pb^{2+} ionty) dokazují, že křídlatka díky svému poměru sorpční kapacita/cena je levným sorbentem využitelným při čištění vod.

Regenerace použitého sorbentu představuje další významný krok vedoucí k rychlému a levnému čištění vod. Určitou alternativu představuje také jeho likvidace či další využití.

Tato práce byla vypracována v rámci grantu sgs01/PřF/2014, projektu IET reg. č. CZ.1.05/2.1.00/03.0100 financovaného ze strukturálních fondů EU, projektem TEWEP id. č. LO1208 z Národního programu udržitelnosti NPU I a projektem Moravskoslezského kraje reg. č. 02508/2013/RRC.

LITERATURA

1. Bu Q., Wang B., Huang J., Deng S., Yu G.: J. Hazard. Mater. *262*, 189 (2013).
2. Asberry H. B., Kuo Ch., Gung Ch., Conte E. D., Suen S.: Microchem. J. *113*, 59 (2014).
3. Behera S. K., OH S. Y., Park H. S.: Int. J. Environ. Sci. Technol. *9*, 85 (2012).

2L-14
EFFECT OF POLYDISPERSITY ON FLOW-INDUCED COALESCENCE IN MOLTEN POLYMER BLENDS

JOSEF JŮZA, IVAN FORTELNÝ*

Institute of Macromolecular Chemistry ASCR, Heyrovského nám. 2, 162 06 Prague 6
fortelny@imc.cas.cz, juza@imc.cas.cz

Properties of immiscible polymer blends are determined, among others, by their phase structure. Flow-induced coalescence is a special case of coalescence – one of processes running during the phase structure evolution, when the driving force is a difference in matrix flow velocities in various places. We have concentrated on description of the step when droplet approach is slowed down by resistance of the matrix film trapped between the droplets, which can deform. Influence of the matrix resistance is quantified by coalescence probability (efficiency), P_c, defined as a ratio of droplets collisions number in presence of the matrix resistance to their number when any interaction till the collision is absent.

Practically, the course of coalescence can only be described using larger or smaller approximations. It was studied by several authors. The most commonly used Janssen and Meijer[1] model implies droplets flattening due to matrix resistance; it provides a droplet-size dependence of P_c for a pair of equal droplets decreasing rapidly to zero above certain droplet size. This also applies to droplet pair in more precise model by Rother and Davis[2].

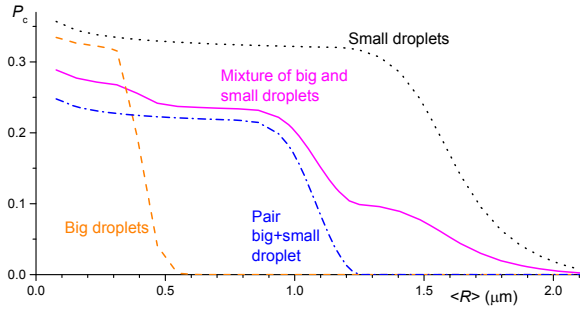


Fig. 1. **Dependence of coalescence efficiency on average droplet size for equally sized droplets, a pair and mixture of droplets of 2 sizes**

The calculation in our recent work[3] has shown that mixtures containing droplets of different size exhibit broader range of P_c decrease from full value to zero, as shown in Fig. 1.

This work was supported by the grant GA ČR P106/11/1069.

REFERENCES

1. Janssen J. M. H., Meijer H. E. H.: Polym. Eng. Sci. *35*, 1766 (1995).
2. Rother M. A., Davis R. H.: Phys. Fluids *13*, 1187 (2013).
3. Fortelný I., Jůza J.: Macromol. Mater. Eng., DOI: 10.1002/mame.201400050 (2014).

2L-15
COPPER COMPLEXES WITH BIOLOGICALLY ACTIVE NITROGEN LIGANDS – AN EPR STUDY IN FROZEN WATER/METHANOL SOLUTIONS

MILAN MAZÚR*, LUCIA HUSÁRIKOVÁ, MARIÁN VALKO

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak Technical University, Radlinského 9, 812 37, Bratislava, Slovakia
milan.mazur@stuba.sk

Seventy years ago, Prof. E. K. Zavoisky (Kazan, Russia) discovered the phenomenon of electron paramagnetic resonance (EPR). Since 1944, EPR spectroscopy represents a powerful technique used in the areas of chemistry, physics, material science, biology, pharmacy and medicine. The presented contribution deals with investigation of copper complexes with selected biologically active ligands in the frozen water/methanol solutions by an EPR spectroscopy.

The sets of copper complexes containing 3,5-di, 4-, or 5-chlorosalicylic acids (*X*-ClsalH) and Cu(II) salts (copper acetate, $Cu(ac)_2$ or copper sulphate, $CuSO_4$) and *N*-donor ligands (3-pyridylmethanol (ronicol), *N*,*N'*-diethylnicotinamide (denia), with varying concentration (ligand-to-metal ratio, *x*) [$Cu(ac)_2$(aq) or $CuSO_4$(aq) + 2 (*X*-ClsalH(solv)) + *x*(*N*-donor ligand(solv))], where *X* = 3,5-di, 4-, 5- and *x* = 0, 1, 2, 4, 6, 8, 12, 16, were prepared. The effects of two copper(II) salts (containing anions of different basicity) and six *N*-donor ligands with varying ligand-to-metal ratio on the formation of resulting complexes were studied by EPR spectroscopy in the frozen water/methanol solutions at low temperature of 98 K.

In the case of copper complexes containing ronicol and denia, well-resolved ^{14}N superhyperfine splitting lines in the perpendicular part of the second- and third- derivative axially symmetric Cu(II) EPR spectra indicated that nitrogens could be coordinated to the central Cu(II) ions in the equatorial plane. The trend in *g*-values ($g_{\|} > g_{\perp} > 2.0023$) indicates that the unpaired electron is localized on the d_{x2-y2} orbital on copper ion. Comparing ronicol- *vs*. denia- containing complexes, it is obvious that: (*i*) both *g*-factors ($g_{\perp}$, $g_{\|}$) are systematically higher and copper parallel hyperfine splittings ($A_{\|}$) are systematically lower in denia containing complexes for both copper(II) salts; (*ii*) the both *g*-factor ($g_{\perp}$, $g_{\|}$ - more sensitive) values decrease (eventually remain constant at their minimal values) and copper parallel hyperfine splitting ($A^{Cu}_{\|}$) values increase (eventually remain constant at their maximal values) when ligand-to-metal ratio, increase; (*iii*) the resolution and signal intensity of the nitrogen perpendicular superhyperfine splitting lines in the Cu(II) EPR spectra increase (for ronicol more progressively) when ligand-to-metal ratio increase, being saturated at higher ligand concentrations. Such information cannot be obtained by EPR spectroscopy of powder samples of given copper complexes.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract Nos. (APVV-0202-10 and APVV-0339-10) and Scientific Grant Agency of the Slovak Republic (Projects VEGA 1/0765/14 and VEGA 1/0289/12).

2L-16
OPTIMIZATION OF PHENOLIC COMPOUNDS EXTRACTION FROM *Triticum spelta* L.

VIERA MRÁZOVÁ, MÁRIA MALIAROVÁ

Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, University of SS. Cyril and Methodius, Nam. J. Herdu 2, 917 01 Trnava, Slovakia
viera.mrazova@ucm.sk

Spelt (*Triticum spelta* L.), one of the major feed and food grains in ancient Europe, is considered a low-input crop, suitable for growing without the use of pesticides, in harsh ecological conditions and in marginal areas of cultivation[1]. Renewed interest in this crop has been developing in recent years because of the increasing demand for unconventional foods and low-input agriculture, its outstanding stress resistance, and quality performance[2]. Spelt is an interesting genetic resource for the search of useful genes for plant breeding of modern wheat varieties[3]. Useful traits of spelt include resistance to diseases[2], high levels of grain protein and mineral nutrients[4], early flooding tolerance and winter hardiness.

Response surface methodology (RSM) enables evaluation of the effects of several process variables and their interactions on response variables. RSM is based on the fit of empirical models to the experimental data obtained in relation to

experimental design. Toward this objective, linear or square polynomial functions are employed to describe the system studied and, consequently, to explore experimental conditions until its optimization[5].

The optimum conditions for extraction of phenolic compounds from spelt using response surface methodology were determined. A three-factor and central composite design in three blocks consisting of 17 experimental runs was used to investigate the effects of three independent variables, namely solvent composition, extraction temperature and time on the antioxidant capacity and phenolic compounds content.

This work was supported by grant VEGA1/0073/13.

REFERENCES

1. Bonafaccia G., Galli V., Francisci R., Mair V., Skrabanja V., Kreft I.: Food Chem. *68*, 437 (2000).
2. Campbell K. G.: Plant Breeding Rev. *15*, 187 (1997).
3. Guzman C., Caballero L., Moral A., Alvarez J. B.: Genet. Resour. Crop Evol. *57*, 721 (2010).
4. Gomez-Becerra H. F., Erdem H., Yazici A., Tutus Y., Torun B., Ozturk L., Cakmak I.: J. Cereal Sci. *52*, 342 (2010).
5. Teofilo R. F., Ferreira M. M. C.: Quim. Nova *29*, 338 (2006).

2S-01
VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ ORGANICKÝCH POLUTANTŮ NA NETRADIČNÍCH ELEKTRODÁCH A VÝZKUM JEJICH INTERAKCE S DNA

ANDREA HÁJKOVÁ

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Univerzitní výzkumné centrum UNCE „Supramolekulární chemie", Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2
andrea.hajkova@natur.cuni.cz

S rozvojem průmyslu se zvyšuje i znečištění životního prostředí toxickými látkami, pro jejichž sledování a stanovení je zapotřebí vyvíjet citlivé analytické metody. Voltametrické techniky jsou pro tento účel více než vhodné, především pro svoji citlivost a finanční nenáročnost[1]. V této studii byl jako modelový organický polutant vybrán 2-aminofluoren-9-on (2-AFN). Jedná se o biologicky aktivní látku vykazující genotoxické účinky[2].

Nanomolární koncentrace 2-AFN lze stanovit pomocí adsorpční rozpouštěcí voltametrie na visící rtuťové kapkové minielektrodě (HMDmE). Pro stanovení pikomolárních koncentrací byla využita kombinace účinné prekoncentrační techniky a následného voltametrického stanovení[3].

Vzhledem k neopodstatněným avšak existujícím obavám z toxicity kovové rtuti věnujeme systematickou pozornost netoxickým rtuťovým amalgamovým elektrodám. Rtuťovým meniskem modifikovaná stříbrná pevná amalgamová elektroda (m-AgSAE) byla využita pro citlivé voltametrické stanovení 2-AFN (cit.[2]), při kterém bylo dosaženo srovnatelných mezí stanovitelnosti jako na HMDmE. Pro uspokojení rostoucí poptávky po miniaturizovaných měřících zařízeních byl úspěšně vyvinut nový miniaturizovaný elektrodový systém s m-AgSAE jako pracovní elektrodou. Hlavními výhodami tohoto prototypu je možnost jednoduchého měření přímo v terénu a stanovení analytu v mikrotitrační destičce ve vzorcích o objemu 100 µl.

Jelikož přibývá genetických onemocnění způsobených nepatrnými změnami ve struktuře DNA po interakci s organickými polutanty, je nutné mít k dispozici i metody schopné toto poškození sledovat a zkoumat. Proto byl v této studii vyvinut nový elektrochemický DNA biosenzor založený na elektrodě ze skelného uhlíku, který se při výzkumu interakce 2-AFN s DNA osvědčil jako jednoduchý, rychlý a levný nástroj pro detekci poškození DNA *in vitro*.

Tato práce vznikla v rámci specifického vysokoškolského výzkumu (SVV 2014-260084) za finanční podpory Grantové agentury ČR (P206/12/G151) a Grantové agentury Univerzity Karlovy v Praze (GAUK 430214/2014/B-CH/PrF).

LITERATURA

1. Vyskočil V., Barek J.: Curr. Org. Chem. *15*, 3059 (2011).
2. Hájková A., Hraníček J., Barek J., Vyskočil V.: Electroanalysis *25*, 295 (2013).
3. Hájková A., Vyskočil V., Barek J.: Chem. Listy *107*, 234 (2013).

2S-02
STANOVENÍ SENZORICKY VÝZNAMNÝCH LÁTEK DESTILÁTŮ PLYNOVOU CHROMATOGRAFIÍ S HMOTNOSTNÍ DETEKCÍ

MARTINA HRABALÍKOVÁ

Centrum polymerních systémů, Univerzitní institut, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Nad Ovčírnou 3685, 760 01 Zlín
hrabalikova@ft.utb.cz

Analýza senzoricky významných látek je jedním z nejdůležitějších kroků při hodnocení kvality alkoholických nápojů. Je známo, že běžné destiláty (jako je slivovice, rum, whisky a další) obsahují řadu takovýchto senzoricky významných sloučenin, kam patří například ethylestery, vyšší alkoholy, aldehydy a ketony, laktony, těkavé fenoly. Mnohé z těchto sloučenin jsou společné pro různé destiláty, avšak liší se analyticky, pokud jde o jejich relativní množství[1].

Tato práce se zabývá kvalitativním a kvantitativním stanovením senzoricky významných látek v ovocných destilátech. Za tímto účelem byla vyvinuta metoda stanovení senzoricky významných látek s použitím separace na plynovém chromatografu a následné detekce hmotnostním detektorem (Shimadzu GCMS-QP 2010 Ultra). Pro samotnou analýzu byl proveden nástřik kapalného vzorku studenou jehlou přímo na kolonu a nástřik plynné fáze vzorku odpařené nad jeho povrchem.

Výsledky ukazují, že použitá metoda stanovení senzoricky významných látek je velmi vhodná svou rychlostí, nepotřebou úpravy vzorku a tím snížení rizika ztráty stanovovaných látek, jako je tomu například u extrakčních technik.

Získaná data byla korelována s výsledky senzorické analýzy destilátů za účelem návrhu optimalizace jejich výroby ve spolupráci s významným českým producentem alkoholických nápojů.

LITERATURA

1. Pino J. A., Fajardo M.: Int. J. Food Sci. Technol. *994*, 46 (2011).

2S-03
STANOVENÍ SELENU KOMBINOVANOU TECHNIKOU UV-FOTOCHEMICKÉHO GENEROVÁNÍ TĚKAVÝCH SLOUČENIN A ATOMOVÉ ABSORPČNÍ SPEKTROMETRIE S KŘEMENNÝM ATOMIZÁTOREM

MARCELA RYBÍNOVÁ, VÁCLAV ČERVENÝ, PETR RYCHLOVSKÝ

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Hlavova 8/2030, 128 43 Praha 2
rybinova@natur.cuni.cz

UV-fotochemické generování těkavých sloučenin představuje zajímavou alternativu k uživatelsky oblíbenému chemickému generování s borohydridem (nejčastěji s $NaBH_4$). Jedná se o dynamicky se rozvíjející techniku v oblasti analytické chemie, která může zaujmout nenáročností co se instru-

mentace a spotřeby chemikálií týče či dosaženými vysokými citlivostmi a nízkými detekčními limity. Oproti zmíněnému chemic-kému generování odpadají nesnáze spojené s redukčním činidlem a jeho nestabili-tou i omezenou čisto-tou, zvy-šuje se také odolnost vůči některým interferentům. Jak již název techniky napovídá, k přeměně specií vybraných prvků z roztoku na jejich těkavé formy dochází v důsledku působení UV záření na vzorek. Klíčovou roli přitom zastávají také nízkomole-kulární organické kyseliny jako je např. kyse-lina mravenčí či octová[1].

V rámci studie bylo vytyčeno několik cílů. V prvé řadě bylo nutné sestavit aparaturu a optimalizovat experi-mentální podmínky pro generování. Pozornost byla věnována zejména hlavní součásti systému, generátoru těkavých sloučenin. Testováno bylo několik variant, kdy základ vždy tvořila rtuťová UV-lampa a k ní přichycená reakční trubice. Jako materiál reakční cívky byly zkoušeny teflonové hadičky a křemenné kapiláry různých rozměrů. Zjištěny byly základní charakteristiky, validační studie pokračovala analýzou certifikova-ného referenčního materiálu. V dalších krocích byla provedena interferenční studie, studována byla i účinnost přeměny analytu na těkavé produkty.

Za modelový analyt byl pro práci vybrán selen patřící mezi zástupce klasických hydridotvorných prvků. Současně je to i zajímavý prvek pro lidský organismus; v závislosti na přijímané koncentraci je buď esenciální či toxický, přičemž hranice rozlišují-cí tyto dva stavy je poměrně úzká. Prakticky byl navrženou technikou stanovován obsah selenu v potravinových do-plňcích a ve vzorcích pitných vod.

Práce vznikla za podpory projektů Univerzity Karlovy v Praze SVV 260084/2014, UNCE #42 a GAUK 228214.

LITERATURA

1. Guo X., Sturgeon R. E., Mester Z., Gardner G. J.: Anal. Chem. *75*, 2092 (2003).

2S-04
STUDIUM KINETIKY A MECHANISMU ROZKLADU ORGANOFOSFOREČNÝCH PESTICIDŮ NA REAKTIVNÍCH SORBENTECH POMOCÍ MODERNÍCH ANALYTICKÝCH INSTRUMENTÁLNÍCH METOD

MARTIN ŠŤASTNÝ

Fakulta životního prostředí, Univerzita J. E. Purkyně, Králova výšina 3132/7, 400 96 Ústí nad Labem

Pesticidy jsou velmi významnou skupinou látek znečišťujících životní prostředí.

Látky s pesticidními účinky mohou zahrnovat širokou skupinu chemických látek lišících se svým chemickým chováním v životním prostředí. Významnou skupinu pesticidů představují insekticidy ze skupiny organofosforečných látek, které tvoří rozsáhlou skupinu organických sloučenin fosforu[1].

Postupně byly identifikovány i negativní vlivy organofosforečných pesticidů na lidské zdraví spočívající v inhibici účinku enzymu acetylcholinesterázy (AChE)[2].

V poslední době se proto zvyšují požadavky na vývoj technologií pro účinnou a řízenou likvidaci přebytků těchto látek. Postupně byly nalezeny unikátní povrchové vlastnosti materiálů na bázi nanokrystalických oxidů (TiO_2, ZnO, Fe_3O_4, CeO_2 aj.), které jsou schopné rozkládat extrémně nebezpečné chemické látky (např. soman nebo sarin) na netoxické nebo málo toxické sloučeniny[3].

Mechanismy degradace pesticidů lze studovat pomocí nejrůznějších instrumentálních technik, jako jsou např. kapalinová chromatografie s UV-Vis detekcí (HPLC-UV, HPLC-DAD) nebo hmotnostně spektrometrickou detekcí (HPLC-MS), metodami GC-MS či metodami spektrometrickými (FTIR, Ramanova spektrometrie), nebo mikroskopickými (SEM, TEM, HRTEM apod.)[4,5].

Pro sledování a identifikaci organofosforečných pesticidů a jejich hlavních degradačních produktů byly použity dva systémy HPLC:

HPLC systém Merck/Hitachi (Tokio, Japonsko). Kapalinový chromatograf s vysokotlakým čerpadlem LaChrom L-7100 (Merck/Hitachi), smyčkovým dávkovačem Rheodyne 7125 se smyčkou 20 µl, vakuovým odplyňovacím zařízení a UV detektorem LaChrom L-7400 (Merck/Hitachi) pracujícího při vlnové délce 230 nm. Měření bylo prováděno na koloně Luna (Phenomenex, Torrance, CA, USA) 150 × 4,6 mm, se stacionární fází PFP, 5 µm, průtok mobilní fáze 1 ml min^{-1}. Mobilní fázi tvořilo 80 % methanolu a 20 % vody.

HPLC systém DIONEX UltiMate 3000 s kolonou Hibar 125 × 4 mm plněnou stacionární fází Purospher STAR, RP 18, 5 µm, endcapped (Merck). Teplota kolony během analýzy byla 30 °C. Mobilní fáze obsahovala 85 % methanolu a 15 % vodného roztoku kyseliny octové (1%), průtok byl 1 ml min^{-1}. Detektor DAD pracující při vlnové délce 296 nm.

Mechanismy degradace pesticidů lze výhodně studovat pomocí nejrůznějších instrumentálních technik, jako jsou např. kapalinová chromatografie s UV/VIS detekcí nebo hmotnostně spektrometrickou detekcí (HPLC-MS), metodami GC-MS či metodami spektrometrickými (FTIR, Ramanova spektrometrie).

Kromě stanovení vlastních pesticidů bylo žádoucí identifikovat a kvantifikovat potenciální degradační produkty, které mohou vykazovat řádově vyšší toxicitu pro vyšší organismy.

Jako nejvýhodnější se jevilo použití metod HPLC s UV/VIS detekcí. Sledování degradace pesticidů pomocí těchto metod je dostatečně rychlé, robustní a citlivé. Byly dosaženy limity detekce (LOD) řádově v rozsahu 1,4–5,7 mg dm^{-3}. Meze stanovitelnosti (LOQ) se pro tyto metody pohybovaly v rozsahu 4,5–18,9 mg dm^{-3}.

Předpokládá se, že převládajícím degradačním mechanismem je nukleofilní substituce S_N2 na centrálním atomu fosforu, nicméně existence jiných mechanismů, byť minoritních, je více než pravděpodobná[5].

Samostatné odborné práce studentů FŽP UJEP jsou podporovány v rámci projektu Modernizace výuky technických a přírodovědných oborů na UJEP se zaměřením na problematiku ochrany životního prostředí (ENVIMOD), který je podporován MŠMT v rámci programu OPVK, č. projektu CZ.1.07/2.2.00/28.0205.

LITERATURA

1. Allen D. W., Tebby J. C.: *Organophosphorus Chemistry*. Royal Society of Chem. *30* (2000).

2. Mohebbi G. H. et al.: Am.-Eurasian J. Toxicol. Sci. *3*, 3 (2011).
3. Gleiter H.: Nanostruct. Mater. *6*, 3 (1995).
4. Dong M. W.: *Modern HPLC for Practicing Scientists*. Wiley, New York 2006.
5. Janos P. et al.: J. Rare Earths *32*, 4 (2014).

2S-05
NOVÝ PŘÍSTUP V KLINICKÉ DIAGNOSTICE KARCINOMU PANKREATU A KOLOREKTA: CHIROPTICKÁ SPEKTROSKOPIE KREVNÍ PLASMY

MICHAL TATARKOVIČ*, VLADIMÍR SETNIČKA

Ústav analytické chemie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
Michal.Tatarkovic@vscht.cz

Onemocnění karcinomem pankreatu a kolorekta způsobují celosvětově jednu z nejvyšších mortalit na nádorová onemocnění[1,2]. Její příčinou je fakt, že tato onemocnění bývají často diagnostikována až v pokročilém stádiu. Stávající diagnostické postupy jsou invazivní a pro raná stádia buď neexistují (karcinom pankreatu) nebo vykazují nízkou spolehlivost (kolorektální karcinom)[2].

V průběhu řady onemocnění (včetně nádorových) dochází k určitým změnám v sekundární a terciární struktuře proteinů. Právě na odhalení těchto změn mohou být využity chiroptické metody – elektronový cirkulární dichroismus (ECD) a Ramanova optická aktivita (ROA). Chiroptické metody, které jsou na tyto změny citlivé, tak přináší navíc další strukturní informace oproti metodám Ramanovy a infračervené spektroskopie testovaných v posledních letech. Tento uvedený přístup je zcela nový, a pokud je nám známo, chiroptické metody prozatím nebyly (mimo naší laboratoř) použity pro analýzu reálných biologických vzorků, jako je krevní plasma[3,4].

V naší práci jsme se zabývali analýzou krevní plasmy pacientů trpících karcinomem pankreatu a kolorekta. Spolu s pacienty byly analyzovány vzorky věkově odpovídajících kontrolních jedinců. Pro analýzu byly využity metody ECD a ROA doplněné o Ramanovu a infračervenou spektroskopii. Získaná data byla vyhodnocena za využití vícedimenzionálních statistických metod s cílem odlišit kontrolní jedince od jedinců nemocných. U karcinomu pankreatu bylo analyzováno více jak 50 vzorků, kde se podařilo dosáhnout sensitivity a specifity vyšší než 90 %. Podobných výsledků po analýze více jak 30 vzorků se podařilo dosáhnout i u kolorektálního karcinomu.

Již dosažené výsledky poukazují na vysoký potenciál chiroptických metod pro diagnostické účely. Uvedený přístup by v budoucnu mohl podpořit včasnou a minimálně invazivní diagnostiku těchto nádorových onemocnění.

Tato práce vznikla za podpory grantu MZ ČR č. NT13259-3, z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT č.20/2014 a GA ČR (P208/11/0105).

LITERATURA

1. Siegel R., Ma J., Zou Z., Jemal A.: Ca-Cancer J. Clin. *64*, 9 (2014).
2. Petruželka L.: Zdravotnické noviny – Postgraduální medicína, číslo 6 (2009).
3. Tatarkovič M., Fišar Z., Raboch J., Jirák R., Setnička V.: Chirality *24*, 951 (2012).
4. Synytsya A., Judexová M., Hrubý T., Tatarkovič M., Miškovičová M., Petruželka L.: Anal. Bioanal. Chem. *405*, 5441 (2013).

2S-06
VÝVOJ OFF-LINE SPOJENÍ KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZY S MOLEKULOVOU A PRVKOVOU HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIÍ

IVA TOMALOVÁ[a], PAVLA FOLTYNOVÁ[a], VIKTOR KANICKÝ[a,b], JAN PREISLER[a,b]*

[a] Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta MU, [b] Středoevropský technologický institut, CEITEC MU
preisler@chemi.muni.cz

Metaloproteiny, komplexy proteinů s ionty kovů, hrají důležitou roli v řadě biochemických procesů živých organismů; jsou např. přítomné v aktivních místech enzymů nebo zodpovědné za detoxifikaci. Nejen z tohoto důvodu je komplexní charakterizace těchto biomolekul důležitá pro jejich studium.

V této práci představujeme vývoj nového bioanalytického přístup pro analýzu metalobiomolekul. Tento přístup je založen na tzv. off-line spojení jediného experimentu separace v kapalné fázi s dvěma komplementárními detekčními technikami: molekulovou hmotnostní spektrometrií (s laserovou desorpcí a ionizací za účasti matrice, MALDI MS) a prvkovou hmotnostní spektrometrií (s ionizací indukčně vázaným plazmatem s laserovou desorpcí za účasti substrátu, SALD ICP MS). MALDI jako měkká ionizační technika umožňuje detekci a identifikaci celých molekul a obvykle nespotřebuje více než ≈ 3 % vzorku z jednotlivých frakcí, SALD ICP MS tak následně dovoluje ze stejných frakcí získat informaci o kvalitě a kvantitě přítomných kovů, a při znalosti stechiometrie i proteinů.

Vyvinutá metoda je představena na analýze směsi metalothioneinů z králičích jater. Metaloproteiny byly separovány kapilární elektroforézou při neutrálním pH, frakce (2 s, 20 nL) byly naneseny na speciálně vyvinutý PETG terčík pokrytý zlatou nanovrstvou a převrstveny roztokem matrice pro MALDI. Následná MALDI MS poskytla v závislosti na použité matrici informaci o proteinových apoformách nebo komplexech proteinů s kovy. SALD ICP MS umožnilo kvantifikaci a identifikaci přítomných kovů.

Potenciál vyvinutého off-line spojení separace s oběma MS technikami spočívá především v oddělení jednotlivých kroků nejen v čase, ale i prostoru. Analýza jediného běhu separace současně brání chybám, které mohou vzniknout při opakování separačního kroku. Nanesení a archivace frakcí separace na vhodný nosič také dovoluje po-separační úpravy vzorku bez ovlivnění rozlišení separace.

Tato práce vznikla za podpory projektů CEITEC (CZ.1.05/1.1.00/02.0068), GA ČR (GAP206/12/0538) a programu „Zaměstnáním čerstvých absolventů doktorského studia k vědecké excelenci" (CZ.1.07/2.3.00/30.0009).

LITERATURA

1. Tomalová I., Foltynová P., Kanický V., Preisler J.: Anal. Chem. *86*, 647 (2014).

2S-07
STUDY OF ANTIMICROBIAL PEPTIDES BY CAPILLARY ELECTROMIGRATION METHODS

TEREZA TŮMOVÁ[a,b], LENKA MONINCOVÁ[a], VÁCLAV ČEŘOVSKÝ[a], VÁCLAV KAŠIČKA[a]

[a] *Institute of Organic Chemistry and Biochemistry AS CR, v.v.i., Flemingovo sq. 2, 166 10 Prague 6,* [b] *Institute of Chemical Technology, Technická 5, 166 28 Prague 6*
tumova@uochb.cas.cz

Antimicrobial peptides (AMPs) are broadly studied compounds with the potential to replace conventional antibiotics[1]. AMPs have been isolated from various species, e.g. from insects, frogs or mammals. At our Institute, novel antimicrobial peptides from the bee *Halictus sexcinctus* were recently isolated and characterized. These peptides and their analogues, named halictines, are composed of 10 to 12 amino acid residues with frequent occurrence of basic amino acids (His, Lys, Arg); their secondary structure is alpha-helix[2]. For their quantitative and qualitative analysis, separation and characterization, high-performance capillary electromigration methods (zone electrophoresis, affinity electrophoresis, isotachophoresis and micellar electrokinetic chromatography) have been applied. These methods possess a great potential for investigation of peptides[3]. In addition to purity control of synthetic or isolated AMPs, they have been employed also for determination of important physico-chemical parameters of halictines, such effective and ionic mobilities, effective charges, Stokes radii, isoelectric points, acid dissociation constants of their ionogenic groups and stability constants of their complexes with various ligands, e.g. glycopeptide antibiotics and boronic acids. For study of such complexes, physiological pH was chosen. In this case, the fused silica capillary was coated with polybrene to suppress sorption of basic peptides to the inner capillary wall[4].

The work was supported by the Czech Science Foundation (projects nos. P206/12/0453, 13-17224S) and by the ASCR (Research Project RVO 61388963).

REFERENCES

1. Zasloff M.: Nature *415*, 389 (2002).
2. Monincová L., Buděšínský M., Slaninová J., Hovorka O., Cvačka J., Voburka Z., Fučík V., Borovičková L., Bednárová L., Straka J., Čeřovský V.: Amino Acids *39*, 763 (2010).
3. Kašička V.: Electrophoresis *35*, 69 (2014).
4. Li M. X., Liu L., Wu J.-T., Lubman D. M.: Anal. Chem. *69*, 2451 (1997).

2S-08
VYUŽITÍ PYROLÝZNÍ PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE S HMOTNOSTNÍ DETEKCÍ PŘI KVANTITATIVNÍ ANALÝZE POLYMERNÍCH PŘÍSAD

MIROSLAVA URBÁNKOVÁ

Centrum polymerních systémů, Univerzitní institut, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Nad Ovčírnou 3685, 760 01 Zlín
urbankova@ft.utb.cz

Tato práce je zaměřena na kvantitativní analýzu biologicky aktivních látek esenciálních olejů (linalool, 4-allylanisol a *trans*-anethol), které byly termoplastickým způsobem zakomponovány do matrice nízkohustotního polyethylénu za účelem dosažení jeho antimikrobiálních vlastností.

V rámci této studie byly připravené polymerní kompozity kvantitativně analýzovány pomocí pyrolýzní plynové chromatografie s hmotnostní detekcí (Py/GC/MS). Pyrolýza (Multi-Shot Pyrolyzer EGA/PY-3030D) byla provedena při teplotě 300 °C a k separaci byla použita kolona Ultra ALLOY-PY2 (30 m × 0,25 mm × 0,5 μm). Detekce byla provedena pomocí MS s jednoduchým kvadrupólem. Celková doba analýzy činila 36 min.

Výsledky Py/GC/MS analýzy kompozitů vykazují dobrou korelaci s výsledky analýzy extraktů těchto kompozitů naměřených pomocí GC/MS, z čehož tedy vyplývá vhodnost této metody pro kvalitativní i kvantitativní analýzu přísad polymerů, neboť zde odpadá velká časová i materiální náročnost extrakce polymerních kompozitů pro následné stanovení jinou analytickou metodou např. vysoce účinnou kapalinovou chromatografií, plynovou chromatografií popř. UV/VIS spektroskopií.

2S-09
MOŽNOSTI VYUŽITÍ TERMICKÉ ANALÝZY PŘI STUDIU PYROLÝZY ORGANICKÝCH XEROGELŮ

PETRA VESELÁ*, VÁCLAV SLOVÁK

Ostravská univerzita v Ostravě, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava
petra.vesela@osu.cz

Uhlíkaté aerogely, xerogely a kryogely jsou nanostrukturní materiály, jejichž příprava se skládá ze tří kroků: polykondenzace organických prekurzorů, sušení a pyrolýzy. Cílem příspěvku je představit možnosti použití termické analýzy při studiu pyrolýzního kroku přípravy uhlíkatých xerogelů, které budou demonstrovány zejména na příkladech dusíkem dopovaných resorcinol-formaldehydových xerogelů.

TGA v propojení s MS umožňuje rozlišit jednotlivé kroky pyrolýzního procesu s ohledem na uvolňované plyny a objasnit tak mechanismus pyrolýzy. Pyrolýzní proces lze rozdělit do 3 kroků, přičemž první odpovídá vypařování rozpouštědla a nezreagovaného formaldehydu. Druhý krok lze charakterizovat vývinem těkavých látek, při posledním kroku lze detekovat uvolněné produkty karbonizačního procesu (CO_2, H_2). Na základě detekovaných *m/z* signálů lze odhado-

vat stupeň proregování výchozích složek i míru zabudování dusíkatého atomu do konečného materiálu.

Na základě termogravimetrických křivek měřených při různých rychlostech ohřevu lze objasnit kinetiku pyrolýzy. Pro dusíkem dopované vzorky byla promocí isokonverzní Starinkovy metody zjištěna závislost zdánlivé aktivační energie na stupni přeměny. První dva kroky pyrolýzy (definované na základě studia mechanismu pyrolýzy) lze charakterizovat nižšími hodnotami zdánlivé aktivační energie, zatímco krok třetí hodnotami vyššími.

Získané poznatky z termoanalytických měření mohou být dány do souvislosti s výsledky z adsorpčních experimentů na uhlíkatých materiálech. Bylo zjištěno, že vyšší úbytek při pyrolýze souvisí s vyšší adsorpční schopností pro ionty těžkých kovů. Na základě MS dat lze odhadnout optimální teplotu pyrolýzy s ohledem na požadavek zabudování dusíkatého atomu, který je důležitý pro adsorpci iontů těžkých kovů.

TGA/DSC-MS analýzu lze použít i pro hodnocení uhlíkatých vzorků připravených pyrolýzou v prostředí amoniaku.

2S-10
VYUŽITÍ ORIENTUJÍCÍCH MEDIÍ VE STRUKTURNÍ ANALÝZE CALIX[4]ARENŮ

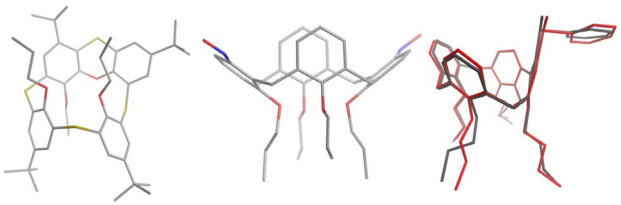
LUKÁŠ VRZAL, HANA DVOŘÁKOVÁ

Laboratoř NMR spektroskopie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
lukas.vrzal@vscht.cz

Tato práce je věnována využití metody měření reziduálních dipolárních interakcí (RDC) ke studiu konformace a dynamického chování nových inherentně chirálních derivátů calix[4]arenů. RDC je anizotropní přímá dipól-dipólová interakce, kterou nelze pozorovat v isotropním roztoku, protože je její vliv vyprůměrován vlivem rychlých molekulárních reorientací. Částečným zorientováním látky ve vnějším magnetickém poli lze vliv této interakci znovu zavést do NMR spekter jako příspěvek ke skalární interakční konstantě. Velikost této interakce je závislá na vzdálenosti interagujících jader a na jejich orientaci ve vnějším magnetickém poli, skrývá tedy v sobě informaci o vzájemném prostorovém uspořádání jednotlivých dvojic interagujících jader. Zatímco v oblasti strukturní biologie se tato metoda standardně využívá ke studiu prostorové struktury biomolekul v roztoku, u malých organických molekul rozpustných v organických rozpouštědlech je její využití zatím sporadické.

Nejdříve byla testována nedávno publikovaná kapalně krystalická orientující media na bázi polyglutamátů a polyacetylenů na modelovém dipropoxycalix[4]arenu s ohledem na snadnost přípravy vzorku a míru zavedené orientace, resp. malé rozšíření NMR signálů. Vhodná media byla poté využita k určení nebo upřesnění prostorové struktury tří typů nových inherentně chirálních derivátů calix[4]arenů. Ve všech případech se jednalo o struktury, které se nepodařilo určit dosud dostupnými metodami NMR (NOE, *J*-interakce).

Metodou měření RDC byla jednoznačně určena 1,2-střídavá konformace fenoxanthiinového derivátu thiacalix[4]arenu (obr. 1A). V případě dinitroso- substituovaného calix[4]arenu bylo zjištěno, že se látka vyskytuje v jedné ze



Obr. 1. **Struktury tří typů nových inherentně chirálních derivátů calix[4]arenu získané metodou měření RDC.** Na obr. 1C je pro srovnání šedě vyobrazena struktura z X-RAY analýzy

dvou možných zploštělých kónických konformací – s nitroso skupinami na odkloněných aromatických kruzích[1] (obr. 1B). Analýzou RDC byla také upřesněna rentgenová struktura 2-pyridylsulfoxidového calix[4]arenu s intramolekulárním přemostěním *meta* pozic[2] (obr. 1C).

Tato práce vznikla za podpory grantu P207/12/2027.

LITERATURA

1. Vrzal L., Flídrová K., Tobrman T., Dvořáková H., Lhoták P.: Chem. Commun., v tisku.
2. Holub J., Eigner V., Vrzal L., Dvořáková H., Lhoták P.: Chem. Commun. *49*, 2798 (2013).

2P-01
STUDIUM SORPCE KOVŮ NA STRUSKÁCH

LENKA BLÁHOVÁ, VERONIKA MALÁ

Ostravská univerzita v Ostravě, Přírodovědecká fakulta, KCH, 30. dubna 22, 702 00 Ostrava
lenka.blahova23@gmail.com veronika.mala7@seznam.cz

Struska je anorganický, vícesložkový materiál získaný jako sekundární produkt metalurgických procesů. Chemické i fázové složení jednotlivých strusek se liší, převážně jsou strusky tvořeny CaO, SiO_2, Al_2O_3 a MgO (cit.[1–3]).

Práce se zabývá sorpcí kationtů mědi, zinku, olova a kadmia z vodného roztoku v závislosti na úpravě pH sorpčního prostředí a změny struktury (výpalem) samotné strusky. Byly využity dva typy vysokopecních strusek, struska granulovaná a pemzová a jejich vypálené ekvivalenty. Výpal strusek byl proveden v muflové peci při 1000 °C po dobu 3 h a následné chlazení probíhalo v exsikátoru. Původní i vypálené strusky byly charakterizovány pomocí IR, RTG.

Sorpce byla prováděna z vodných roztoků kationtů kovů při laboratorní teplotě, v poměru 1 : 100 (struska : sorpční roztok). Doba sorpce byla 6 h v případě Zn a Cu a 8 h pro Cd a Pb, kdy již došlo k ustavení sorpční rovnováhy. pH sorpčního prostředí bylo upravováno na hodnotu 4 pomocí 0,1 M roztoků HNO_3 a NaOH. Suspenze byly filtrovány a koncentrace kovů v roztoku po sorpci byly stanoveny metodou atomové absorpční spektrometrie. Typ sorpční isotermy byl určen pomocí linearizovaných forem Langmuirovy a Freundlichovy isotermy a byla určena sorpční kapacita strusek.

Porovnáním sorpčních vlastností strusek za různých podmínek na dodaných typech strusky a jejich vypálených ekvivalentech lze říci, že na sorpční vlastnosti strusky má především vliv její typ, výpal a pH roztoku kovu.

LITERATURA

1. Das B., Prakash S., Reddy P. S. R., Mirsra V. N.: Resour., Conserv. Recycl. *50*, 40 (2007).
2. Pláček V., v knize: *Možnosti zpracování odpadů po důlní a metalurgické činnosti*, s. 113, VŠB-TU, Ostrava 2005.
3. Hübner A., Chvátal V.: Hutnické Aktuality *29*, 3 (1988).

2P-02
SURFACE ACTIVATION OF MESOPOROUS ORDERED SILICA MATERIALS BY ALUMINUM AND RHODIUM, THEIR CHARACTERIZATION AND CATALYTIC ACTIVITY FOR N_2O DECOMPOSITION

LENKA KUBOŇOVÁ[a], LUCIE OBALOVÁ[a]*, DAGMAR FRIDRICHOVÁ[a], PEGIE COOL[b]

[a] VSB-TU Ostrava, Centre of Environmental Technology, 17. listopadu 15, Ostrava, Czech Republic, [b] University of Antwerp, Laboratory of Adsorption and Catalysis, Department of Chemistry, Universiteitsplein 1, B-2610 Wilrijk, Belgium
lucie.obalova@vsb.cz

Three different mesoporous ordered silica materials such as MCM-41, MCM-41 with aluminum and SBA-15 were prepared. Samples with aluminum (2–3 wt.%) grafted on the surface by molecular designed dispersion method (MDD) and aluminum (2–5 wt.%) incorporated into MCM-41 were synthesized. In further step, rhodium (1.3–2.9 wt.%) was used as an active metal for the catalytic reaction of N_2O decomposition. The possible interaction of rhodium acetylacetonate complexes as precursors with the surface of supports by hydrogen bonding versus ligand exchange mechanism were tested by infrared spectroscopy and thermogravimetric analysis. Prepared catalysts were characterized by nitrogen sorption, electron-probe microanalysis, energy dispersive X-ray analysis, temperature programmed reduction of hydrogen, temperature programmed desorption of ammonia and UV-vis-diffuse reflectance (DR) spectroscopy.

The activity of catalysts was in the order Al (incorporated)-MCM-41+Rh > MCM-41+Al(grafted) +Rh > SBA-15+Rh ≈ MCM-41+Rh. The role of different supports influencing the properties of active sites created by rhodium ions is discussed.

This work was financially supported by Grant Agency of the Czech Republic (project no. P106/14-13750S) and by Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic in the "National Feasibility Program I", project LO1208 "Theoretical Aspects of Energetic Treatment of Waste and Environment Protection against Negative Impacts" and by the project of specific research SP2014/88, VSB–TU Ostrava.

2P-03
KATALYZÁTORY NA BÁZE CNTs PRE PYROLÝZNU KONVERZIU METÁNU NA VODÍK

B. ERDELYI*[a], R. ORIŇÁKOVÁ[a], A. ORIŇÁK[a], D. VELIČ[b]

[a] Katedra fyzikálnej chémie, PF UPJŠ v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice, [b] Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, UK v Bratislave, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava 4
branislaverdelyi1@gmail.com

Uhlíkové nanorúrky (CNTs) so svojimi vlastnosťami spĺňajú kritéria ako nosič kovových častíc v katalytických procesoch. Hlavnou výhodou je schopnosť homogenného rozmiestnenia častíc na povrchu a zachovanie nanorozmeru, čo zvyšuje hodnotu merného povrchu[1]. Preto sme porovnávali katalytickú aktivitu tzv. kov-CNTs katalyzátorov v priamom rozklade metánu v neoxidačnej atmosfére.

Mokrou impregnačnou metódou je možné pripraviť tento typ katalyzátora, kde soli kovov slúžia ako prekurzory kovových častíc. Po aktivácii a prečistení CNTs v roztoku silných kyselín HNO_3 a H_2SO_4 (pomer 3:1)[2] s prídavkom etanolu (pridávame z dôvodu zníženia hydrofóbnosti CNTs, len po kvapkách, lebo prebieha búrlivá reakcia), nasleduje samotné naviazanie kovov v alkalickom prostredí s etanolom a formaldehydom, ako redukčným činidlom. Práve tieto pomery reagencií ovplyvňujú výslednú štruktúru a veľkosť častíc naviazaných na CNTs (cit.[3]).

CuCNTs a ZnCNTs katalyzátory mali aktivitu podobnú samotným CNTs, najviac do dvadsať cyklov (vo všetkých prípadoch: 1,5 ml CH_4 na cyklus, návažok katalyzátora

v pyrolýznom reaktore 1 mg, teplota 900 °C, tlak 101,3 kPa). Maximálny výťažok v prípade CuCNTs bol 14 %, ZnCNTs mal 19,5 % a CNTs len 12,7 %. V prípade ZnCuCNTs katalyzátora bola výťažnosť najlepšia (49 %), čo bolo dvoj až trojnásobne lepšie ako u troch spomínaných katalyzátoroch. Práve kombinácia dvoch kovov predĺžila životnosť katalyzátora na viac ako 110 cyklov. Vo všetkých prípadoch bola pozorovaná nevyhnutná deaktivácia, spôsobená blokovaním aktívnych miest, ktorej priebeh popisuje mocninová klesajúca funkcia.

Tato práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0211/12.

LITERATÚRA

1. Tavasoli A., Taghavi S.: J. Energy Chem. *22*, 747 (2013).
2. Su S. H., Chiang W. T., Lin C. C., Yokoyama M.: Physica E. *40*, 2322 (2008)
3. Yang H., Liao PH.: Appl. Catal., A *317*, 226 (2007).

2P-04
ODBÚRAVANIE CHOLESTEROLU NA POVRCHU TiO_2: SIMS - ŠTÚDIA

MICHAL PROCHÁZKA*[a], DUŠAN VELIČ[a,b]

[a] *Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, KFTCh, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava,* [b] *Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava*
prochazkam@fns.uniba.sk

Nanokryštalický oxid titaničitý (nc-TiO_2) je polovodičový fotokatalyzátor. Na jeho povrchu vznikajú vplyvom UV žiarenia veľmi reaktívne častice, ktoré môžu následne rozkladať iné látky nachádzajúce sa na povrchu nc-TiO_2. Aby tento proces prebiehal efektívne, musí na povrch nc-TiO_2 dopadať UV svetlo s dostatočnou intenzitou. Cieľom tejto práce bolo sledovanie degradácie cholesterolu, ako modelového príkladu organického znečistenia povrchu, na povrchu nc-TiO_2. Tenké filmy z nc-TiO_2 boli pripravené sedimentáciou nanoprášku na kremenné sklo. Tento typ skla bol vybraný z dôvodu, že prepúšťa svetlo aj v UV oblasti s dostatočnou intenzitou. Preto bolo možné systém cholesterol/nc-TiO_2/sklo ožarovať z hornej strany (zo strany cholesterolu) a aj zo spodnej strany (zo strany skla) a tieto výsledky porovnávať. V práci boli vzorky analyzované hmotnostnou spektrometriou sekundárnych iónov (SIMS) po ožarovaní UV LED diódou s vlnovou dĺžkou 365 nm každých 15 minút po dobu 2 hodín.

V hmotnostných spektrách je dobre stanovená závislosť znižovania intenzity píkov zodpovedajúcim fragmentom cholesterolu $[M–OH]^+$, $[M–H]^+$ a $[M–CH_3]^+$, v závislosti od dĺžky ožarovania vzoriek UV svetlom. Porovnaním intenzít píkov pri ožarovaní z hornej strany a zo spodnej strany je zrejmé, že pri ožarovaní zo spodnej strany je pokles o niečo menší, čo môže byť spôsobené znížením intenzity svetla prechodom cez vrstvu kremenného skla a tiež vrstvu nc-TiO_2. Avšak toto zníženie nie je veľmi veľké, a preto možno aj tento spôsob využívať na efektívnu degradáciu organických nečistôt na povrchu. Tento spôsob má výhodu v tom, že pri ožarovaní zo spodnej strany sa vylúči vplyv UV žiarenia na degradáciu niektorých látok na povrchu.

Táto práca vznikla za podpory grantov ERDF OP R&D, Project 'meta-QUTE- Centrum excelentnosti kvantových technológií', APVV-0491-07 a UK/66/2012.

LITERATÚRA

1. Prochazka M., Stupavska M., Jerigova M. , Velic D.: Surf. Interface Anal. *45*, 22 (2013).

2P-05
VPLYV POLARITY NANOPOVRCHU NA ADHÉZIU ŽIVÝCH BUNKOVÝCH LÍNIÍ

J. MACKO[a]*, R. ORIŇÁKOVÁ[b], A. ORIŇÁK[b], A. VALENČÁKOVÁ[c], D. HARVANOVÁ[d], J. RADOŇÁK[e]

[a] *Katedra fyzikálnej a teoretickej chemie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava 4,* [b] *Katedra fyzikálnej chémie, PF UPJŠ v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice,* [c] *Katedra biológie a genetiky, UVLF v Košiciach, Komenského 73, 041 81 Košice,* [d] *Združená tkanivová banka UPJŠ a UNLP, Tr. SNP 1, 040 11 Košice,* [e] *I. chirurgická klinika UPJŠ LF a UNLP, Tr. SNP 1, 040 11 Košice*
jmacko10@gmail.sk

Cieľom práce bolo unifikovať postupy štúdia adhézie bunkových línií na nanoobjektových substrátoch pokrytých vrstvou polyméru rôznej polarity. Substráty boli pripravené na kruhových terčíkoch z chirurgiskej nekorodujúcej ocele 316L.

V literatúre sa stretávame s faktom, že pozorovanie javu adhézie bunkových línií na nanoštrukturovaných substrátoch má potenciál pri skorej diagnostike kancerogénnych ochorení[1].

V prvom kroku bola na všetkých terčíkoch chronoamperometricky vylúčená vrstva niklu. Povrch niklovej vrstvy má štruktúru mnohostenných nanoobjektov s veľkosťou cca. 150 nm. Na nanorozmerný povrch niklu bola nanesená druhá vrstva polydimetylsiloxánu (PDMS) metódou spincoatingu tak, aby vytvorila monovrstvu a kopírovanla nanotopografiu substrátu[2]. Výsledkom boli dva typy povrchov s totožnou nanotopografiou, ale rôznou polaritou. Medzi mierou adhézie jednotlivých bunkových línií a hydrofobicitou boli pozorované výrazné rozdiely. Dermálne fibroblasty na niklovom nanoštrukturovanom povrchu adherovali dokonale, bolo pozorované symetrické rozťahovanie buniek. Na PDMS nanoštrukturovanom povrchu bola adhézia fibroblastov slabá, kolónie buniek boli takmer sférické. Bunky adenokarcinómu (HT-29) sa adhéziou značne líšili. Rozťahovanie bolo výraznejšie a nepravidelné. Aj v prípade PDMS povrchu boli bunky HT-29 adherované silnejšie ako fibroblasty a mali nepravidelný tvar. Experiment ukázal výrazne rozdiely v adhézií kancerogénnych a zdravých buniek na nanoobjektové substráty.

Pozorovanie adhézie buniek, vytváranie a unifikovanie postupov na štúdium adhezie buniek na nanobjektových substrátoch môže významne prispieť k medicískej diagnostike[2] kancerogénných ochorení.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0211/12, APVV-0280-11.

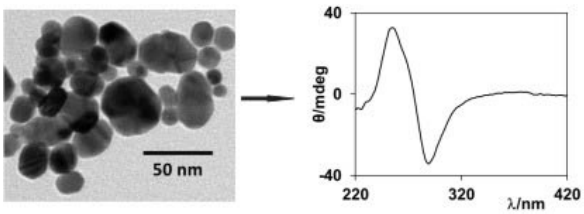
LITERATÚRA
1. Kwon K. W., Choi S. S., Lee S. H., Kim B., Lee S. N., Park M. C., Kim P., Hwang S. Y., Suh K. Y.: LabChip 7, (2007).
2. Hall D. B., Underhill P., Torkelson J. M.: Polymer Engineering and Science *38*, 12 (1998).

2P-06
CIRKULÁRNÍ DICHROISMUS CHIRÁLNÍCH NANOČÁSTIC STŘÍBRA

JAKUB KOKTAN, HELENA RYŠAVÁ, PAVEL ŘEZANKA*

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
Pavel.Rezanka@vscht.cz

Tato práce je zaměřena na cirkulární dichroismus (CD) chirálních nanočástic stříbra[1]. Nanočástice byly syntetizovány chemickou redukcí z dusičnanu stříbrného pomocí citronanu sodného nebo tetrahydridoboritanu sodného. Jednotlivými redukčními činidly byly získány nanočástice různých velikostí a tvarů. Chiralita částic (obr. 1) byla dosažena postsyntetickou modifikací L-cysteinem a jeho strukturními deriváty L-methylcysteinem a L-penicilaminem v koncentracích od $1 \cdot 10^{-3}$ mol/l do $1 \cdot 10^{-5}$ mol/l a při různých hodnotách pH (pH = 4, 7 a 10).



Obr. 1. **Snímek z transmisního elektronového mikroskopu nanočástic stříbra a jejich spektrum CD v UV oblasti po modifikaci L-cysteinem**

V těchto systémech bylo UV/Vis absorpční spektroskopií kvantifikováno množství navázaného L-cysteinu a nebo jeho derivátů a z naměřených hodnot byly diskutovány vztahy mezi navázaným množstvím látky na povrchu částic, její strukturou a vznikem CD signálu v UV/Vis oblasti. Spektroskopické stanovení koncentrace analytů bylo provedeno po reakci s činidly 1-fluor-2,4-dinitrobenzenem nebo toluen-4-sulfonyl-chloridem.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 20/2014).

LITERATURA
1. Řezanka P., Koktan J., Řezanková H., Matějka P., Král V.: Colloids Surf., A *436*, 961 (2013).

2P-07
DEGRADACE LUTEINU V ČASE

BARBORA HRVOLOVÁ, JIŘÍ KALINA

Ostravská univerzita v Ostravě, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava
B.Hrvolova@seznam.cz

Lutein patří k významné skupině bioaktivních látek zvané karotenoidy. Karotenoidy se skládají z isoprenoidních jednotek, jež utvářejí dlouhé alifatické konjugované systémy dvojných vazeb. Díky přítomnosti těchto konjugovaných dvojných vazeb podléhají karotenoidy, a tedy i lutein, isomerizaci. Isomerizace, jenž je považována za projev degradace, z *all-trans* formy na *cis* formy může být indukována mnoha vnějšími faktory (teplo, světlo).

Lutein má pro organismus několik důležitých funkcí: funkci pigmentační, fotoprotektivní či antioxidační. Jednou z jeho nejvýznamnějších vlastností je preventivní účinek proti degenerativnímu poškození makuly (AMD). Díky této vlastnosti se stal lutein v posledních letech velmi populární a začal se hojně přidávat do doplňků potravy. S tím souvisí i současné intenzivní studium jeho stability.

Cílem této práce bylo optimalizovat metodu detekce degradace luteinu. Vzorkem, jenž byl v této práci analyzován, byl methanolový roztok standardu luteinu (M= 568,87 g/mol, Sigma-Aldrich), který byl uskladněn po dobu jednohu roku při –15 °C. Tyto podmínky jsou dle návodu pro uskladnění standardu zcela nevhodné, a proto jsme předpokládali přítomnost degradačních produktů. Vzorek byl prvotně analyzován dle LC/MS metody vycházející z práce[1] a následně byla odzkoušena a optimalizována metoda přímého nástřiku (FIA).

Tento příspěvek je podpořen z projektu SGS06/ PřF/2014.

LITERATURA
1. Aman R., Biehl J., Carle R., Conrad J., Beifus U., Schieber A.: Food Chem. *92*, 753 (2005).

2P-08
PLS MODELY VIACROZMERNEJ KALIBRÁCIE PRI STANOVENÍ OBSAHU KUMARÍNU A JEHO METABOLITOV V ZMESI FLUORESCENČNOU SPEKTROSKOPIOU

ROMAN POLÁČEK*, PAVEL MÁJEK, JANA SÁDECKÁ

Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
pavel.majek@stuba.sk

Prírodná látka kumarín (2*H*-chromén-2-ón) sa vyskytuje: v korení z tonkových bôbov, v škorici, vanilke, levanduli, a v rôznych liečivých rastlinách: komonica lekárska a komonica biela. Ako prírodná aróma sa používa v gastronómii. Vysoké dávky kumarínu prijaté jedlom sú karcinogénne a môžu tiež spôsobiť poškodenie obličiek.

Maximálne množstvo kumarínu v potravinách stanovila Európska komisia na 2 mg kumarínu na kg (cit.[1]). Pôsobením niektorých druhov plesní a húb sa mení kumarín cez 4-hydroxykumarín na dikumarol, ktorý má silné antikoagulačné vlastnosti. Ich výskyt v potravinár-skych produktoch je zakázaný[1].

Táto práca je zameraná na vypracovanie metódy stanovenia kumarínu a jeho metabolitov súčasne viac-rozmernou kalibráciou. Z nameraných synchrónnych fluorescenčných spektier zmesí kumarínu, 4-hydroxy-kumarínu a dikumarolu v intervale vlnových dĺžok 200 až 400 nm s konštantným rozdielom vlnových dĺžok 70 až 90 nm sa získali údaje, z ktorých sa skonštruovali kalibračné modely. PLS1 modelom, možno koncentráciu analytov stanoviť jednotlivo po zložkách a PLS2 modelom sa koncentrácia analytov vypočíta súčasne. Najvhodnejší model sa vybral porovnaním predikčných vlastností oboch modelov.

Táto práca vznikla vďaka podpore v rámci OP Výskum a vývoj pre projekt: Kompetenčné centrum inteligentných technológií pre elektronizáciu a informatizáciu systémov a služieb, ITMS 26240220072, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0797-11.

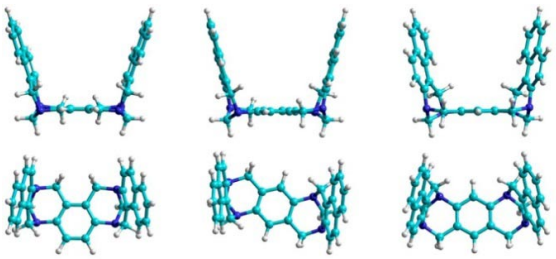
LITERATÚRA

1. Regulation (EC) No 1334/2008 of the European Parliament No 1601/91, Regulations (EC) No 2232/96 and (EC) No 110/2008 and Directive 2000/13/EC. Official Journal of the European Union 2008 L354/34, 15.

2P-09
KVANTOVĚ CHEMICKÉ VÝPOČTY A MULTIVARIAČNÍ VYHODNOCENÍ SPEKTROMETRICKÝCH DAT PRO ANALÝZU INTERAKCE SUPRAMOLEKULÁRNÍHO RECEPTORU S ROZPOUŠTĚDLEM

MILAN JAKUBEK[a], VÁCLAV PARCHAŇSKÝ[a,b], JAKUB SEDLÁČEK[a], BOHUMIL DOLENSKÝ[a]

[a] Ústav analytické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 160 00 Praha 6, [b] Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i., Flemingovo nám. 2, 160 00 Praha 6
parchansky@uochb.cas.cz



Multivariační metody v poslední době pronikají do rozličných oblastí chemie. Jedním z využití těchto metod je snížení počtu rozměrů problému. Zatímco vyhodnocovat změny chemického posunu dvaceti píků v průběhu NMR titrace jeden po druhém může být složité, tyto metody nám umožní podobně chovající se píky snadno identifikovat a vyhodnotit změny po skupinách.

Jelikož byly píky u zkoumaných látek předem přiřazeny k příslušným atomům, je možné snadno pozorovat, které oblasti molekuly jsou rozpouštědlem ovlivňovány stejně a které různě. Tuto informaci lze využít jako vodítko k charakterizaci interakce a vysvětlení výsledků titrací supramolekulárního receptoru s analytem v různých rozpouštědlech.

V prezentované práci byla zkoumána závislost chemických posunů molekulární pinzety na poměru rozpouštědel ve směsi. Pro zkoumání byly využity techniky NMR a Ramanovy spektroskopie. Naměřená data byla pro jejich maximální využití vyhodnocena multivariačně. Výsledky byly porovnány s kvantově chemickým výpočtem a budou využity k charakterizaci interakce molekulární pinzety s rozpouštědlem a jeho vlivu na komplexační rovnováhy.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 20/2014).

2P-10
FLUORESCENCE STUDY OF DPTAP AND HYALURONIC ACID MIXTURES

JANA SZEWIECZKOVÁ, FILIP MRAVEC, MILOSLAV PEKAŘ

Centre for Materials Research, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118, 612 00 Brno
xcszewieczkovaj@fch.vutbr.cz

Pyrene is widely used as a fluorescence probe suitable for measuring CMC (critical micellar concen-tration) of surfactants[1,2]. Sigmoidal decrease of emission polarity index, EmPI (intensities ratio of first and third emission band of pyrene emission spectra) is observed and CMC is obtained as a point of inflection.

The aim of this work was to study aggregation behaviour of cationic liposomes of DPTAP (dipalmitoyltrimethylammonium-propane) in the presence of hya-luronic acid (HyA) of different molecular weight (M_w).

At the beginning, CMC of DPTAP was measured using fluorescence spectroscopy – concentration series of DPTAP had to be prepared. Then, certain amout of HyA was added to DPTAP solutions. This experiment was performed with HyA of various molecular weights (137, 458 and 1697 kDa).

In the presence of HyA, an abrupt increase of pyrene EmPI was observed after CMC and on the wall of the vial the precipitate was formed (Fig. 1a). It has occured at the same concentration range of DPTAP for all studied mixtures (different M_w of HyA).

In the end, mixture of DPTAP and HyA was prepared – with higher concentration of each component but at the same ratio of these species. Big amount of precipitate was formed (shown on Fig. 1b).

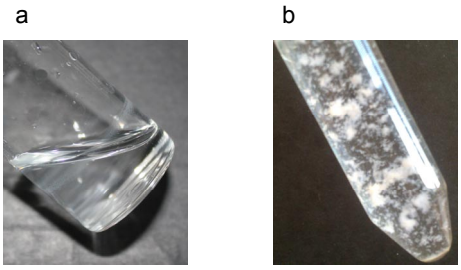


Fig. 1. **Precipitates formed after addition of HyA to DPTAP**

This work has been supported by Ministry of Education, Youth and Sports, Project LO1211.

REFERENCES
1. Aguiar J., Carpena P., Molina-Bolívar J. A., Ruiz C. C.: J. Colloid Interface Sci. *258*, 1 (2003).
2. Lakowicz J. R., in the book: *Principles of Fluorescence Spectroscopy*, p. 954. Springer, Baltimore 2006.

2P-11
THE USE OF GAS CHROMATOGRAPHY FOR DETERMINATION OF RESIDUAL *tert*-BUTANOL IN DRIED SYSTEMS OF HYALURONAN AND FLUORESCENCE PROBES

PETRA MICHALICOVÁ, TEREZA BORŮVKOVÁ, FILIP MRAVEC, JOSEF ČÁSLAVSKÝ, MILOSLAV PEKAŘ

Centre for Material Research, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkynova 118, 612 00 Brno, Czech Republic
xcmichalicovap@fch.vutbr.cz

Hyaluronan is a native biopolymer with hydrophilic character, which contains on its chain also hydrophobic areas. Due to the prevalent hydrophilicity these parts are protected by organized water molecules[1]. The method of drying was used to open up the hydrophobic parts for interactions with hydrophobic fluorescence probes. During the preparation of samples for drying *tert*-butanol (TBA) was added. TBA was used to increase the process of dissolution of hydrophobic probe and also contribute to higher homogenization of the samples. The process of drying was followed by rehydratation of the samples. As a measuring method for studying of interaction in the system the fluorescence spectroscopy was used.

The problem uprise if residual part of TBA remains in the sample due to ist hydrophobic organic character, which can significantly affect the result of fluorescence measurement. The amount of residual TBA was determined by headspace extraction with gas chromatography detection.

The studied systems hyaluronan–fluorescence probe (perylene) cointained 20 vol.% of TBA before drying. Hyaluronan used for these experiments had three different values of molecular weight (100 kDa; 400 kDa; 1,4 MDa) and concentration after drying and rehydratation was 1 g dm^{-3}. Concentration of perylene was $5\cdot10^{-6}$ mol dm^{-3}. After drying the samples were rehydrated with 20 ml of deionized water. The results showed concentration of TBA in studied samples 0,002 mg mL^{-1} – 0,005 mg mL^{-1}.

This work was supported by the Materials Research Centre at FCH BUT- Sustainability and Development, REG LO1211, with financial support from National Programme for Sustainability I (Ministry of Education, Youth and Sports).

REFERENCES
1. Vandamme E., De Baets S., Steinbüchel A., in book: *Biopolymers – Polysaccharides 1*. s. 379–406. Wiley, 2002.

2P-12
KVALITATIVNÍ A KVANTITATIVNÍ ANALÝZA SACHARIDŮ V HROZNECH A VÍNU POMOCÍ HPLC S MS A ELS DETEKCÍ

RICHARD ČMELÍK, DANA FLODROVÁ

Ústav analytické chemie AV ČR, Veveří 97, Brno 602 00
cmelik@iach.cz

Kvalitu vína ovlivňuje i jeho sacharidické složení, zejména pak dominantní glukosa a fruktosa, které tvoří většinu všech sacharidů obsažených ve zralých bobulích. V menší míře byly detekovány další monosacharidy (např. mannosa, galaktosa, xylosa, arabinosa, ribosa a rhamnosa) a oligosacharidy (např. laktosa, sacharosa, maltosa, trehalosa)[1]. Sledování oligosacharidů ve vínech nebyla dosud věnována odpovídající pozornost, třebaže se jedná o látky s fyziologickým, medicinským a potravinářským významem[2].

Cílem studie bylo vyvinout metodu pro rychlou analýzu obsahu a zastoupení jednotlivých sacharidů ve vzorcích vín, vinné šťávy a hroznů spočívající ve spojení izolačních (extrakce na pevné fázi – SPE), separačních (kapalinová chromatografie – HPLC) a detekčních (index lomu, rozptyl světla, hmotnostní spektrometrie) postupů. Z tohoto důvodu byly porovnány a optimalizovány kroky odstranění interferujících látek na SPE sorbentech (hilic a reverzní fáze), jeho rozdělení na různých stacionárních fázích (silikagel, aminová, amidová, grafitová) pro HPLC a výběr metody pro zajištění co nejnižšího limitu detekce.

Optimalizovaný postup využívá spojení neretentivní SPE na polymerní mixed-mode ionexové fázi (kombinující v jediném materiálu hydrofobní a iontové interakce), rozdělení na aminokoloně (která při gradientu 85 až 60 % acetonitrilu poskytovala dostatečné rozlišení sledovaných sacharidů a u redukujících nevykazovala nežádoucí rozlišení anomerů) s citlivou detekcí hmotnostním spektrometrem s ionizací elektrosprejem v obou iontových módech.

Rozdělení mono- a oligosacharidů a zakoncentrování druhých z nich bylo dosaženo za použití SPE na porézním grafitickém uhlíku.

Ve vzorcích vína pocházejících z vinařské oblasti Morava byly vedle stanoveného obsahu glukosy a fruktosy (0,35–1,33 mg/ml, resp. 0,17–7,24 mg/ml; vzorek od vzorku jejich vzájemný poměr silně kolísal: 0,40–8,77) detekovány z dalších sacharidů pouze ribosa a rhamnosa.

Tato práce vznikla za podpory grantu regionální spolupráce AV ČR R200311405.

LITERATURA

1. La Pera L., Di Bella G., Magnisi R., Lo Turco V., Dugo G.: Ital. Food Sci. *19*, 319 (2007).
2. Ducasse M.-A., Williams P., Meudec E., Cheynier V., Doco T.: Carbohydr. Polym. *79*, 747 (2010).

2P-13
DETERMINATION OF CYSTEINYLGLYCINE AND CYSTEINE IN PLASMA BY HPLC WITH UV DETECTION

JUSTYNA STACHNIUK*, KAMILA BOROWCZYK, RAFAŁ GŁOWACKI

Department of Environmental Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Lodz, 163 Pomorska Str, 90-236 Lodz, Poland
stachniuk.justyna@wp.pl

Thiol aminoacids play an important role in metabolic processes of all living creatures. That is why, their analytical control is very important in order to understand their physiological and pathological functions[1,2]. Among a variety of available methods, which allow to measure thiol concentrations, chemical derivatization utilizing a suitable labeling reagent followed by liquid chromatographic or electrophoretic separation with commonly used ultraviolet detection is the most reliable tool for sensitive and specific determination of thiol compounds in real world samples.

Nowadays, most of chromatographic procedures dedicated to hydrophilic thiol measurements exploit RP-HPLC and require mobile phases including ion-pairing reagents, such as alkyl sulphonates or trichloroacetic acid (TCA)[3] in order to enhance retention of such compounds. Unfortunately, it leads to some important disadvantages such as lengthening the equilibration time of the column and significantly growing up costs of analysis.

Here we present methodology which allows us the simultaneous determination of cysteine (Cys) and cysteinylglycine (Cys-Gly) in human plasma. The method is based on derivatization of thiols with 2-chloro-1-methylquinolinium tetrafluoroborate (CMQT) followed by chromatographic separation on XB-C18 Aeris PEPTIDE (150×4.6 mm, 3.6 µm) column from Phenomenex and UV detection at 355 nm. The cheap, easily available mobile phase, (water/acetonitrile) in reversed phase mode coupled with core-shell particle technology, simplifies the procedure and significantly reduces the column equilibration time which results in obtaining sharp peaks and shortening the time of HPLC analyses for Cys and Cys-Gly to just 2 min.

REFERENCES

1. Anderson A., Lindgren A., Hultberg B.: Clin. Chem. *41*, 361 (1995).
2. Refsum H., Smith A. D., Ueland P. M., Nexo E., Clarke R., McPartlin J., Johnston C., Engbaek F., Schneede J., McPartlin C., Scott J. M.: Clin. Chem. *50*, 3 (2004).
3. Kuśmierek K., Chwatko G., Głowacki R., Kubalczyk P., Bald E.: J. Chramotogr. B *879*, 1290 (2011).

2P-14
VOLTAMPÉROMETRICKÉ ŠTÚDIUM TRIAZÍNOVÝCH DERIVÁTOV

LADISLAV RÁBARA*

Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave, nám. J. Herdu 2, Trnava, 917 01, Slovensko
ladislav.rabara@ucm.sk

Triazínové deriváty sú významné pre svoju biologickú aktivitu predovšetkým ako fungicídy. Ich uplatnenie rastie aj v koordinačnej chémii ako multidentátne ligandy[1] pre komplexy s prechodnými kovmi. Majú potenciálne využitie aj pri opätovnom spracovaní použitého jadrového paliva[2]. Svojou štruktúrou sú analógom benzénového jadra, pričom ich aromatický šesťčlánkový cyklus sumárneho vzorca $C_3H_3N_3$ existuje v troch izoméroch.

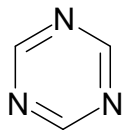


Schéma 1. **Chemická štruktúra 1,3,5-triazínu**

V tomto príspevku sú študované redoxné vlastnosti derivátov 1,3,5-triazínu metódou cyklickej voltampérometrie s trojelektródovým zapojením. Pre merania uskutočnené vo vodnom prostredí sa ako indikačná elektróda použila uhlíková pastová elektróda (CPE). Klasické diskové indikačné elektródy (Pt, Au, GC) sa skúšali v nevodných prostrediach.

Táto práca vznikla za podpory grantov APVV-0014-11 a VEGA 1/0233/12.

LITERATÚRA

1. Milata V., Claramunt R. M., Cabildo P., Santa María M. D., Cornago P., Infantes L., Cano F. H., Elguero J.: Heterocycles *55*, 905 (2001).
2. Hudson M. J., Drew M. G. B., Foreman M. R. S., Hill C., Huet N., Madic C., Youngs T. G. A.: Dalton Trans. *9*, 1675 (2003).

2P-15
ŠTÚDIUM INTERAKCIE PESTICÍDU ALACHLÓR S GUANOZÍNOM VYUŽITÍM ELEKTROCHEMICKÝCH A SPEKTRÁLNYCH METÓD

JANA SVÍTKOVÁ, ĽUBOMÍR ŠVORC, JÁN LABUDA

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

Alachlór je herbicíd, ktorý je súčasťou pesticídnych prípravkov proti lipnicovitým dvojklíčnolistým burinám[1].

Sledovanie účinku takýchto biologicky účinných látok vyžaduje nové analytické prístupy. V tomto štúdiu ide o uplatnenie bórom dopovanej diamantovej (BDD) elektródy na vyšetrenie interakcie alachlóru s povrchovo viazaným guanozínom prípadne oligonukleotidmi.

Po optimalizácii podmienok merania v roztoku elektrochemicky aktívneho redoxného indikátora ($1\cdot10^{-3}$ mol l^{-1} $[Fe(CN)_6]^{3-/4-}$) sa povrch BDD elektródy chemicky modifikoval guanozínom (4 µl, $c = 2\cdot10^{-4}$ mol l^{-1}). Následne sa modifikovaná BDD elektróda určitý čas inkubovala v prostredí alachlóru (c = $4{,}5\cdot10^{-4}$ až $4{,}5\cdot10^{-6}$ mol l^{-1}). S guanozínom modifikovanou elektródou bol pozorovaný cyklický voltampérogram (CV) s horším tvarom indikátora s väčšou potenciálovou separáciou píkov E_p (rozdiel potenciálov katodického a anodického píku) a nižším prúdom píku ako v prípade holej BDD elektródy. Po inkubácií modifikovanej elektródy v roztoku alachlóru sa tvar a parametre CV píku v závislosti od času inkubácie blížili k voltampérogramu získanému na holej BDD elektróde. Takéto štúdium s využitím viacerých analytických metód nám umožní charakterizáciu interakcie alachlóru s guanozínom. A to môže mať význam pre naviazanie biomolekúl na povrch elektródy a na štúdium interakcií s látkami, ktoré sa bežne vyskytujú v okolitom prostredí a vykazujú určité negatívne vplyvy na živé organizmy.

Autori ďakujú za podporu Vedeckej grantovej agentúre VEGA MŠ SR a SAV (projekt č. 1/0361/14 a 1/0051/13).

LITERATÚRA

1. Jacobs M., v knihe: *Unsafe sex: How endocrine disruptors work*, kap. 4, s. 54, United Kingdom 2001.

2P-16
SENZOROVÁ POLE PRO STANOVENÍ ANIONTŮ

MICHAL ŠÍDLO*, PŘEMYSL LUBAL, MAREK PERNICA

Masarykova univerzita, Kamenice 5, 625 00 Brno
175265@mail.muni.cz

Analýza vybraných aniontů (např. (pseudo)halogenidů, hydrogenuhličitanů, siřičitanů, fosforečnanů, atd.) ve vzorcích životního prostředí (ŽP) je důležitá úloha, a proto existuje potřeba vyvíjet rychlé, levné a praktické metody pro jejich stanovení. Organická činidla, např. azobarviva – 4-(2-pyridylazo)resorcinol (PAR), 1-(2-pyridylazo)-2-naphtol (PAN), jsou široce využívaná pro stanovení velkého počtu iontů kovů. Bohužel v některých případech je jejich stanovení rušeno přítomností interferujících aniontů, které mohou ovlivňovat změnu intenzity zbarvení, ev. luminiscence komplexu ion kovu-ligand. Bylo zjištěno, že změna optických vlastností vybraných kovových komplexů může být využita pro stanovení některých analytů aniontového charakteru. Pokud jsou tyto změny způsobené substituční reakcí analytu s kovovým komplexem dostatečné, tyto systémy pak mohou být využity k návrhu senzorového pole pro analýzu aniontů ve vzorcích ŽP. Tento příspěvek se zabývá využitím komplexů azobarviv s ionty kovů (např. Tl(III), Hg(II), Cd(II), Cu(II), atd.) pro analýzu výše uvedených aniontů. Algoritmus umělých neuronových sítí byl použit pro simultánní klasifikaci a stanovení analytů ve vybraných vzorcích[1].

Tato práce vznikla za podpory MŠMT ČR (MUNI/A/0972/2013, ME09065) a EU (CEITEC CZ.1.05/1.1.0/02.0068).

LITERATURA

1. Anzenbacher P. Jr., Lubal P., Bucek P., Palacios M. A., Kozelkova M. E.: Chem. Soc. Rev. *39*, 3954 (2010).

2P-17
PURIFIKACE VYBRANÝCH CYTOKININŮ POMOCÍ MIKROEXTRAKCE POLYMERNÍM MONOLITEM

JAKUB KOŘISTKA[a], LUCIE HALENKOVÁ[a], PAVEL JAWOREK[a], YU-QI FENG[b], PETR TARKOWSKI[a]*

[a] Centrum regionu Haná pro biotechnologický a zemědělský výzkum, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, [b] Department of Chemistry, Wuhan University, Wuhan, 430072, China
petr.tarkowski@upol.cz

Cytokininy (CK) jsou skupinou rostlinných hormonů nezbytných pro řízení růstu, vývojových procesů a reakcí na vnější podmínky u všech vyšších rostlin. Chemicky se jedná o N^6 substituované deriváty adeninu nesoucí isoprenoidní nebo aromatický postranní řetězec. Tato základní struktura bývá často modifikována, jsou známy mimo jiné různé typy konjugátů se sacharidy, CK nukleotidy, či 2-methylthio- deriváty. Jednotlivé formy CK se liší nejen svou biologickou aktivitou a funkcí, ale také fyzikálně-chemickými vlastnostmi, což spolu s jejich nízkou fyziologickou koncentrací (obvykle méně než 30 pmol/g čerstvé hmoty) komplikuje jejich analýzu[1].

Kritickým krokem při kvantitativní analýze CK nadále zůstává příprava vzorků. Tradiční technikou purifikace CK je extrakce na pevné fázi s využitím kombinace různých sorbentů, včetně imunoafinitních[2]. Rostoucí požadavky na stanovení CK z minimálního množství rostlinného materiálu při zachování či zlepšení citlivosti, vysokou propustnost a efektivitu přípravy vzorků a možnost stanovovat širokou škálu hormonů současně vedly k vývoji řady nových purifikačních metod[3]. Jedním z moderních přístupů je mikroextrakce polymerním monolitem (PMME), kterým je naplněna kapilární kolona[4].

Prezentovaná studie se zabývá aplikací PMME při purifikaci polárních CK nukleotidů a silně hydrofobních 2-methylthio- derivátů. Nukleotidy je možné efektivně izolovat s využitím boronátového afinitního monolitu. Konkrétně se jedná o kopolymer 3-akrylamidofenyl-1-borité kyseliny a ethylendimethakrylátu (AAPBA-co-EDMA), který s analytem reverzibilně utváří cyklický ester v závislosti na pH[5]. V případě 2-methylthio- CK se pak osvědčil kopolymer 2-akrylamido-2-methyl-1-propansulfonové kyseliny a ethylendimethakrylátu (AMPS-co-EDMA)[4]. Tento směsný sorbent váže analyt na principu kationtové výměny a zároveň hydrofobní interakce. PMME se pro obě skupiny CK jeví jako rychlejší a levnější alternativa k extrakci na pevné fázi, se kterou lze dosáhnout srovnatelného stupně přečištění a návratnosti.

LITERATURA
1. Galuszka P., Spíchal L., Kopečný D., Tarkowski P., Frébortová J., Šebela M., Frébort I., v knize: *Studies in Natural Product Chemistry*, svazek 34 – *Bioactive Natural Products*, kap. 6, s. 205-206 a 230. Elsevier, Amsterdam 2008.
2. Åstot C., Doležal K., Moritz T., Sandberg G.: J. Mass Spectrom. *33*, 892 (1998).
3. Tarkowská D., Novák O., Floková K., Tarkowski P., Turečková V., Grúz J., Rolčík J., Strnad M.: Planta, in press. DOI: 10.1007/s00425-014-2063-9.
4. Liu Z., Wei F., Feng Y.: Anal. Methods *2*, 1676 (2010).
5. Ding J., Mao L., Yuan B., Feng Y.: Plant Methods *9*, 13 (2013).

2P-18
STANOVENÍ DISOCIAČNÍCH KONSTANT NOVĚ SYNTETIZOVANÝCH PYRIDINIOVÝCH OXIMŮ

KAREL MUSIL, PAVEL BUČEK, VLASTIMIL DOHNAL

Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Hradec Králové, Rokitanského 62, 500 03 Hradec Králové
pavel.bucek@uhk.cz

Pyridiniové a bispyridiniové oximy jsou skupinou látek, které často vykazují antidotní vlastnosti vůči otravám organofosfáty či organofosfonáty. Některé z nich jsou využívány komerčně ve formě léků, například pralidoxim (***I***), obidoxim (***II***), HI-6 apod. Jejich absorpce a distribuce v organismu závisí rovněž na formě – zda je látka v disociované či nedisociované podobě. Zastoupení jednotlivých forem je dáno disociační konstantou. V této práci byly stanoveny disociační konstanty 13 známých i nově syntetizovaných pyridinových a bispyridiniových oximů na základě spektrofotometrických stanovení. K měření absorpčních spekter v UV/VIS oblasti byla použita konvenční metoda, kdy spektra analytů byla měřena v pufrech při 11 různých hodnotách pH a výsledky byly chemometricky zpracovány[1]. Vypočtené hodnoty byly porovnány s automatizovaným stanovením pomocí kapalinového chromatografu[2]. Výsledky obou stanovení byly ve velmi dobré korelaci, automatizované stanovení se vyznačovalo nižší směrodatnou odchylkou. Automatizované měření spekter pomocí kapalinového chromatografu je časově nenáročné a přesnější. Získané hodnoty pK_a mohou pomoci při cíleném návrhu látek s požadovanou hodnotou pK_a.

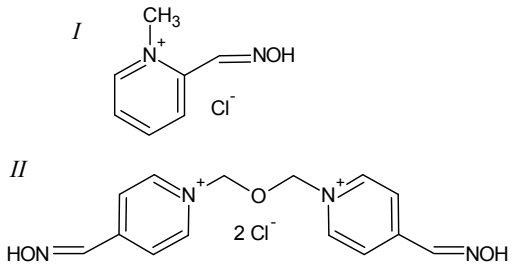


Schéma 1. **Pralidoxim (I), obidoxim (II)**

Práce vznikla za podpory grantu reg. č. CZ.1.07/2.3.00/45.0014 a projektu ESF č. CZ.1.07./2.3.00/30.0052.

LITERATURA
1. Jaumot J., Gargallo R., de Juan A., Tauler R.: Chemometr. Intell. Lab. *76*, 101 (2005).
2. Ando H., Heimbach T.: J. Pharm. Biomed. *16*, 31 (1997).

2P-19
A GREEN METHOD USING A MICELLAR SYSTEM FOR DETERMINATION OF COPPER IN BIOLOGICAL SAMPLES

SIMONA PROCHÁZKOVÁ*, RADOSLAV HALKO, LENKA OKENICOVÁ

Comenius University in Bratislava, Faculty of Natural Science, Department of Analytical Chemistry, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovakia
curmova@fns.uniba.sk

In this work, a new cloud point extraction (CPE) procedure was developed for the separation and pre-concentration of copper(II) in human urine samples. Copper plays an important role in environmental and health studies. In human body fluids, copper exists in various chemical forms such as copper ions Cu(II), Cu(I) and coordinated copper with protein.

The highest concentrations of copper are discovered in the brain and the liver. The central nervous system, the heart and bones exhibit high concentrations of copper as well. The increased copper content in the body is reflected in the genetic metabolic disease, Wilson's disease.

Chelate of metal ions with 2,9-dimethyl-1,10-phenanthroline (neocuproine) were extracted into the surfactant-rich phase of octylphenoxypolyethoxy-ethanol (Triton X-114) from samples. Neocuproine with Cu(I) produced yellow-orange hydrophobic chelate in a neutral or slightly acidic buffer solution (adjusted to pH 5.9). Cu(II) was reduced to Cu (I) ions by ascorbic acid as a weak reducer, which was a part of buffer solution. After phase separation, the enriched analytes were determined by flame atomic absorption spectrometry (FAAS). Factors affecting CPE, such as pH, reagent and surfactant concentrations, temperature, and incubation time were evaluated and optimized. Futhermore, the interference effect of some cations and anions was studied.

The proposed method has been applied for determination of trace amount of copper in human urine samples with satisfactory results.

This work was generously supported by the grant of project VEGA 1/0852/13, Grant Comenius University UK/308/2013 and the grant of project APVV-0583-11. This work is partially outcome of the project VVCE-0070.

2P-20
TERMODYNAMICKÉ A KINETICKÉ STUDIUM REAKCE Pd(II) IONTŮ S OXALÁTOVÝMI IONTY

RADOMÍR PILNÝ[a], ROMANA MICHALICOVÁ[a]*, PŘEMYSL LUBAL[a], LARS IVAR ELDING[b]

[a] *Masarykova univerzita, Kamenice 5, 62500 Brno, ČR,*
[b] *Lundská univerzita, P. O. Box 124,221 00 Lund, Švédsko*
r.michalicova@mail.muni.cz

Spektrofotometrické studium tvorby komplexu mezi $[Pd(H_2O)_4]^{2+}$ a štavelanovými (ox=$C_2O_4^{2-}$) ionty bylo prováděno ve vodném roztoku při proměnné teplotě a iontové síle. Termodynamické parametry ($\log_{10} K_{1\,H} = 3{,}38 \pm 0{,}08$, $\Delta H^0 = -33 \pm 3$ kJ mol^{-1}, $\Delta S^0 = -48 \pm 11$ J K^{-1} mol^{-1}, $T = 298{,}2$ K, $I = 1{,}00$ M $HClO_4$) byly stanoveny pro následující reakci:

$$[Pd(H_2O)]^{2+} + H_2ox \Leftrightarrow [Pd(H_2O)(ox)] + 2H_3O^+$$

Konstanty stability pro komplexy $[Pd(H_2O)_2(ox)]$ a $[Pd(ox)_2]^{2-}$ ($\log_{10} \beta_1^0 = 9{,}04 \pm 0{,}06$, $\log_{10} \beta_2^0 = 13{,}1 \pm 0{,}3$) byly stanoveny při nulové iontové síle a teplotě 298,2 K a vypočteny pomocí SIT teorie z jejich závislosti na iontové síle roztoku. Vznik $[Pd(H_2O)_2(ox)]$ komplexu lze popsat dvoukrokovým reakčním mechanismem, kde rychlost určující krok je tvorba monodentátního komplexu $[Pd(H_2O)_3(ox)]^+$ s H_2ox a Hox^- species, který lze popsat parametry pro rovnovážnou reakci ($\log_{10} K_{1H}' = 1{,}15$, $\Delta H^0 = -3$ kJ mol^{-1}, $\Delta S^0 = -12$ J K^{-1} mol^{-1}), které jsou stejného řádu jako termodynamická data pro vznik Pd(II) komplexů s jinými monodentátními ligandy obsahujícími karboxylovou skupinu[1,2]. Tento reakční krok je následován uzavřením chelátového kruhu za vzniku termodynamicky stabilního 1:1 komplexu, jehož rovnovážná konstanta je $\log_{10} K_{1H,rc} \approx 2{,}19$. Chelátový efekt jako důsledek zvýšené stability $[Pd(H_2O)_2(ox)]$ komplexu lze vysvětlit dominancí enthalpického příspěvku (~ 75 %) ve srovnání s entropickým (~ 25 %) což je opačný jev než byl pozorován pro většinou kovových komplexů.

Tato práce vznikla za podpory MŠMT ČR (MUNI/A/0972/2013), Švédského Institutu a EU (CEITEC CZ.1.05/1.1.0/02.0068).

LITERATURA

1. Shi T., Elding L. I.: Inorg. Chem. *36*, 528 (1997).
2. Lubal P., Elding L. I.: J. Sol. Chem. *35*, 769 (2006).

2P-21
IDENTIFIKÁCIA ŠTRUKTÚR NA BÁZE CYKLODEXTRÍN-ŽELEZO POMOCOU SIMS ANALÝZY

SOŇA HALÁSZOVÁ[a]*, MONIKA JERIGOVÁ[a,b], DUŠAN VELIČ[a,b]

[a] *Prírodovedecká fakulta UK, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava,* [b] *Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava*
sona.halaszova@gmail.com

Jedným z hlavných cieľov supramolekulovej chémie je syntéza supramolekulových štruktúr, ktoré majú odlišné vlastnosti od východiskových látok. Tieto vlastnosti môžu viesť k uplatneniu supramolekulových štruktúr ako kompaktné informačné zariadenia na ukladanie dát pre budúce generácie počítačov alebo ako vysokovýkonné katalyzátory v priemyselných procesov. Nanoštruktúry na báze železa sú lákadlom pre nanotechnológie vďaka ich fyzikálnym a chemickým vlastnostiam[1–3]. Nové možnosti prináša aj štúdium tvorby a spôsobov prípravy nanovrstiev. Samousporiadané monovrstvy na báze cyklodextrínov možno využiť na tvorbu supramolekulového komplexu, pričom druhou zložkou komplexu sú práve nanočastice kovu.

Tvorba vzniknutých supramolekulových nanoštruktúr sa charakterizovala pomocou hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov. Princípom tejto techniky je bombardovanie povrchu vzorky pulzným fokusovaným zväzkom primárnych iónov na báze tekutého kovu (Bi+) s energiou 15 až 25 keV.

V hmotnostných spektrách cyklodextrínu boli identifikované fragmenty kationizovaného cyklodextrínu $C_{42}H_{70}O_{35}Na^+$ a $C_{42}H_{70}O_{35}K^+$. Hmotnostné spektrá nanočastíc železa pripravených pomocou laserovej ablácie potvrdili prítomnosť železa (Fe^+) vo vzorke a taktiež prítomnosť oxidov železa $Fe_xO_y^+$. V hmotnostných spektrách vzorky obsahujúcej cyklodextrín a nanočastice železa boli identifikované fragmenty zodpovedajúce vytvoreniu komplexu $C_{42}H_{67}O_{35}NaFe^+$ a $C_{42}H_{67}O_{35}KFe^+$.

Pomocou hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov bola preskúmaná fragmentácia cyklodextrínu a výskyt komplexu cyklodextrín/nanočastice železa. Merania boli uskutočnené v pozitívnej aj v negatívnej polarite. Ďalšou výhodou bolo vysoké vákuum v hlavnej komore, rovnako ako aj v predkomore, čo zaručilo inertné prostredie merania.

Táto práca vznikla za podpory grantov ERDF OP R&D, Project 'meta-QUTE-Centrum excelentnosti kvantových technológií', APVV-0491-07, NanoNet2 a UK/461/2013.

LITERATÚRA

1. Iwamoto T., Ishigaki T.: J. Phys. *1*, 441 (2013).
2. Amendola W., Riello P., Meneghetti M.: J. Phys. Chem., C *4*, 115 (2011).
3. Al-Mamun S. A., Nakajima R., Ishigaki T.: J. Colloid Interface Sci. *1*, 392 (2013).

2P-22
FLUORESCENČNÁ SPEKTROSKOPIA SUPRAMOLEKULOVÝCH KOMPLEXOV CYKLODEXTRÍNOV A KUMARÍNU C153

MARIANNA GREGOVÁ TRENČANOVÁ*, DUŠAN VELIČ[a,b]

[a] *Prírodovedecká fakulta UK, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava,* [b] *Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava*
trencanova@fns.uniba.sk

Skúmali sme fluorescenčné vlastnosti inklúznych supramolekulových komplexov na báze kumarínu c153/β-cyklodextrín (c153/β-CD) a jeho modifikácie 6-deoxy-6-thio-β-cyclodextrín (c153/β-CD-SH) vo vodnom roztoku. Substitúciou OH- skupín v cyklodextríne boli pozorované rôzne zmeny vo vlastnostiach cyklodextrínu[1]. Motiváciou bolo zistiť, či a ako substitúcia SH- skupiny za OH- skupinu ovplyvní supramoelkulový komplex s kumarínom, prípadne zmení polaritu kavity cyklodextrínu a solvatačné podmienky celého systému. Pre veľmi nízku rozpustnosť c153 vo vode (10^{-5}M), sme použili fluorescenčné techniky, ktoré majú vysokú citlivosť.

Pomocou statickej fluorescenčnej spektroskopie sme namerali excitačné a emisné spektrá, kde sme stanovili maximálnu vlnovú dĺžku excitácie 420–425 nm a pozorovali modrý posun fluorescencie o 15 nm do hodnoty 548 nm pre β-CD a 525 nm pre β-CD-SH. Pre β-CD-SH ochádzalo ku markantnejšiemu poklesu ako pre β-CD Stokesovho posunu z hodnoty 5 900 cm^{-1} až o 1 400 cm^{-1} v závislosti od narastajúcej koncentrácie cyklodextrínu. S narastajúcou koncentráciou CD intenzita spektier stúpala.

Pre jednotlivé supramolekulové komplexy sme stanovili relaxačné časy τ_1 a τ_2. τ_1 vypovedá o relaxácii „živej vody“ a teda o správaní molekúl vody v blízkosti fluoroforu a τ_2 popisuje tz. „bulk water“ čiže molekuly vody vo väčšej vzdialenosti, ktoré sa nezúčastňujú na interakcií v takej veľkej miere a môže poukazovať aj na cyklodextrínovú kavitu, či ďalšie solvatačné vrstvy[2]. Pomocou časovo-rozlíšenej fluorescenčnej spektroskopie sme stanovili relaxačné časy τ_1 3 a 7 ps pre spektrá do 50 ps. Dochádzalo ku spomaľovaniu relaxácie kumarínu c153 v prítomnosti β-CD-SH.

Zistili sme, že prítomnosť SH- ako menej polárnej skupiny voči OH- skupine, stabilizuje supramolekulový komplex spôsobuje zmeny polarity kavity daného cyklodextrínu a spôsobuje dané posuny. Je možné, že dochádza ku tvorbe iného komplexu ako 1:1.

Táto práca vznikla za podpory grantov ERDF OP R&D, Project ‘meta-QUTE-Centrum excelentnosti kvantových technológií’, APVV-0491-07, NanoNet2 a UK/380/2014.

LITERATÚRA

1. Roy D., Mondal S. K., Sahu K., Ghosh S., Sen P., Bhattacharyya K. J.: Phys. Chem. A *109*, 7359 (2005).
2. Zhong D., Zewail A. H.: Chem. Phys. Lett. *503*, 1 (2011).

2P-23
ŠIROCE DOSTUPNÁ POTENCIOMETRIE SE SPECIÁLNÍM MODULEM, ZNÁMÝMI I NOVÝMI (AMALGAMOVÝMI, ŠPIČKOVÝMI) ČIDLY

LADISLAV NOVOTNÝ

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 573, 532 10 Pardubice
nvt.l@seznam.cz

Aplikace široce dostupných a využitelných potenciometrických měření a sestavy dle názvu článku a patentů jeho autora – např. dle obr. 1 i s běžným (dokonce i s „kapesním“ levným – 5 až 8 USD) voltmetrem-multimetrem, s pH vpichovou elektrodou a zejména se speciálním novým napájecím a interfaceovým modulem (NIM) ve dvou verzích, síťové nebo bateriové – s jedním nebo více konektory.

Obr. 1.

Obr. 2.

Příklad použ. 11 měrných čidel (obr. 2) a to zprava → doleva: pravá pětice elektrod – plastové špičkové elektrody („plastic tip sensors“ – viz[1–3] či „glass/ceramic tip“[3] ad.) na bázi dříve[1–3] i průběžně testovaných materiálů těla elektrod PVC, teflonu, poly-ethylenu, -propylenu, -styrenu, -vinylacetátu, skla, keramiky aj. a s růz. aktiv. materiály čidel[3,2] (i objemu µl, nl ap.) – kovovými, amalgamovými, kompozit. amalgamovými, nekovovými (C, aj.), hybridními, kompozitními, modifikovanými, polymerními aj.; uprostřed ISE; levá pětice – kombinace obdob. materiálů – jiná provedení.

Význam mají použité materiály, povrchy, tvary, postupy, zavádění inertních či speciálních plynů do nebo nad roztok, podmínky, ap.; studium toho pokračuje.

Závěr: Široce využitelná, běžně dostupná měření a systémy, známé i nové možností aplikací. Možná miniaturizace a nízká cena – i v těchto verzích výsledky srovnatelné s většími, náročnějšími a dražšími systémy.

LITERATURA

1. Novotný L.: J. Electroanal. Chem. *88*, 161 (1978).
2. Novotný L.: *CSc., DrSc.,* AV ČR, Praha 1981, 1998.
3. Novotný L.: PUV 7103-1997, 2007-19501; PV 5193-1976, 2001-1, 2006-600, Praha.

3L-01
MOŽNOSTI SYNTETICKÝCH POLYMERŮ PŘI CÍLENÉ TERAPII A DIAGNOSTICE

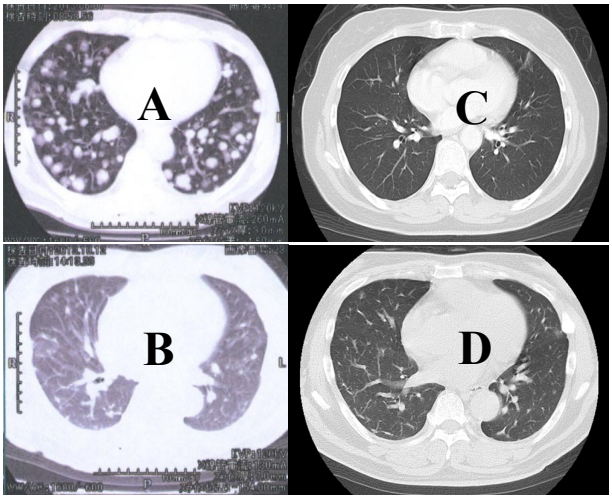
KAREL ULBRICH

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

Současná medicína má k disposici širokou škálu léčiv, která účinně pomáhají při léčbě většiny známých nemocí. Přesto zůstává celá řada onemocnění, u kterých je léčba klasickými léčivy doprovázena nežádoucími účinky poškozujícími pacienta, nebo je jen velmi málo účinná (např. chemoterapie nebo radioterapie při léčbě nádorových onemocnění). Tato práce prezentuje výsledky vývoje cíleně působících terapeutik určených pro léčbu nádorových onemocnění a případně jejich diagnostiku.

Vazba cytotoxických látek (kancerostatik) na vhodný vodorozpustný polymerní nosič umožňuje nejen ovlivnit farmakokinetiku a farmakodynamiku léčiva, ale zajišťuje dobrou rozpustnost jinak nerozpustných léčiv, snižuje jejich toxické účinky na zdravou tkáň a hlavně umožňuje zacílit léčivo na místo požadovaného terapeutického efektu, v případě nádoru na nádor, nádorovou buňku, nebo dokonce její organely.

Účinnost polymerního léčiva závisí nejen na volbě vhodného kancerostatika a způsobu jeho připojení k polymernímu nosiči, ale i na správné volbě směrující struktury a hlavně i struktury a architektury polymerního nosiče. Cíleného účinku na nádor, především vaskularizovaný solidní nádor, může být dosaženo díky akumulaci polymerního nosiče v nádorech způsobené EPR efektem (Enhanced Permeability and Retention)[1], cíleného účinku na jednotlivé nádorové buňky a jejich organely pak pomocí struktur schopných rozpoznat membránové receptory těchto buněk a interagovat s nimi (protilátky a jejich fragmenty, oligopeptidy a pod.)[2]. Multivalentnost polymerních nosičů umožňuje i připojení dalších struktur, jako jsou isotopové a nebo fluorescenční značky, umožňující sledování osudu polymerního léčiva v organismu.



Obr. 1. **CT zobrazení plic pacienta s metastázami prostatického nádoru.** A: před léčbou; B: po podání 2 dávek; C: po 5ti dávkách; D: po 6ti dávkách polymerního pirarubicinu

Účinnost cíleného směrování polymerních léčiv a jejich protinádorová aktivita úzce souvisí s molekulovou hmotností a architekturou nosiče. Dostatečně vysoká molekulová hmotnost nosiče zajistí prodlouženou cirkulaci léčiva v krevním řečišti, jeho účinnou akumulaci v cílovém nádoru a vhodná struktura spojky mezi nosičem a léčivem nádorově specifické uvolnění aktivního léčiva pouze v nádoru. Na ÚMCH AV ČR byla připravena polymerní léčiva na bázi kopolymerů *N*-(2-hydroxypropyl)methakrylamidu a doxorubicinu nebo pirarubicinu a dalších kancerostatik, u kterých je uvolňování léčiva z nosiče řízeno pH-senzitivní hydrolýzou v nádoru. Léčba myších modelových nádorů těmito léčivy nevykazuje žádné vedlejší efekty a vede až k vyléčení všech pokusných zvířat. Účinek polymerního pirarubicinu byl testován i u terminálních pacientů v Japonsku a bylo ukázáno, že účinky získané u zvířecích modelů jsou do značné míry převoditelné i na člověka (obr. 1).

Tato práce vznikla za podpory prémie „Praemium Academiae“, udělené Akademií věd ČR.

LITERATURA

1. Maeda H., Nakamura H., Fang J.: Adv. Drug Delivery Rev. *65*, 71 (2013).
2. Ulbrich K., Šubr V.: Adv. Drug Delivery Rev. *62*, 150 (2010).

3L-02
THE APPLICATION OF BICOMPONENT POLYMERIC FIBRES FOR COLLECTION OF HAZARDOUS CHEMICAL SUBSTANCES

EVA RUŽINSKÁ

Technical University in Zvolen, Masaryka 24, 960 53 Zvolen, Slovakia
eva.ruzinska@tuzvo.cz

Hazardous substances present in the environment are large group of pollutants affecting human health[1,4]. Activities aiming at limiting of harmful substances emissions (from group of volatile organic compounds-VOCs, e.g. BTX, formaldehyde, emision of carcinogenic dust aerosols from beech wood $PM_{2,5}$), occuring in processes of wood surface finishing, require solving of complicated technological problems[4].

Bicomponent synthetic fibers (PP/PA6/MAH)[7] are a group of advanced materials that have expanded range of conventional fiber-forming polymers[2,5] not only in various industrial, but also in construction applications[6], e.g. as innovative soundproofing[7] particularly filter materials and they are applicable in the elimination of hazardous substances in air, in industrial technology and also in the wood processing industry – to install separation equipments at the facilities of surface treatment of wood[3,4].

Were prepared by modified bicomponent fibres (PP/PA6M) with a variable content interfacial agent (1–4 wt.% MAH)[2]. Morphological structure of the prepared

bicomponent fibers was evaluated by methods: infrared absorption spectroscopy, reflection electron microscopy, X-ray crystalography and mercury porosimetry[4].

From the results of the evaluation of characteristics of morphological structure experimental prepared bicomponent fibers revealed that with the increasing share of interfacial agent (2 wt.% MAH) in to modified bicomponent fibres showed an increase in the volume of the pores and hence the greater the ability to bind to its pattern of emission of dangerous chemicals aerosols of VOCs from surface finishing of wood and collection of particle matters of dust hard wood species in the finalisation of processes of wood processing.

Reaearch was supported of Slovak Ministry of Education, KEGA, proj. 023-TUZ- 4/2012: „Hazardous substances in the environmental technology".

REFERENCES

1. Jablonski M., Ružinská E., Swietliczny M.: *Synthetic polymers and coatings in woodworking industry.* Textbook. Publ. WULS SGGW Warsaw, 247 ps. (2009).
2. Ružinská E.: Chem. Listy *104*, 507 (2010).
3. Ružinská E.: *Plastics and coatings in woodworking industry.* Monography. Publ. TU Zvolen, 166 ps. (2005).
4. Ružinská E., Krajewski K. J.: Annals of Warsaw University of Life Science *84*, 132 (2013).
5. Toray K. K.: Chem. Abstr. *18*, No. 102, 76 (1985).
6. Berger W., Fischer P.: Textiltechnik *35*, 293 (1985).
7. Shimizu J., Okui N., Yamamoto T.: Sen. I. Gakkaishi 48, (1992).

3L-03
MEMBRÁNY NA BÁZI VYSOCE VĚTVENÝCH POLYIMIDŮ OBSAHUJÍCÍCH ADITIVA

PETR SYSEL*, EVGENIA MINKO, JAN VYŠOHLÍD

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

Polyimidy jsou polymery s řadou vyhledávaných užitných vlastností. Zachovávají si vysokou mechanickou, chemickou a dielektrickou stabilitu v teplotním rozmezí –150 až 200 °C. Tyto vlastnosti předurčují polyimidy k využití zejména v (mikro)elektronice, leteckém průmyslu a v posledním období i jako polymerních membrán pro separaci plynných směsí. Propustnost plynů plochými, neporézními polyimidovými membránami závisí hlavně na difuzi a rozpustnosti transportovaných médií v daném materiálu. Úroveň uvedených parametrů, ale i dělicí schopnost (selektivitu) membrány, lze ovlivnit strukturou polymeru nebo přídavkem vhodného aditiva k takovému polymeru[1,2].

V této práci byla strukura polyimidů ovlivňována volbou kombinace výchozích monomerů. Byly zjištěny několikanásobně vyšší koeficienty propustnosti vodíku, oxidu uhličitého, kyslíku a dusíku membránou z vysoce větveného polyimidu na bázi 4,4´-oxydiftalanhydridu a 4,4´,4´´-triaminotrifenylmethanu ve srovnání s tou z lineárního polyimidu, na bázi 4,4´-oxydiftalanhydridu a 4,4´-diaminodifenylmethanu.

Při přídavku oxidů, zejména křemičitého, do membrán z vysoce větveného polyimidu došlo při nižších obsazích (do 10 hm.%) většinou k poklesu koeficientů propustnosti plynů ve srovnání s membránou ze samotného vysoce větveného polyimidu v důsledku bariérového efektu, s nárůstem (do 20 až 30 hm.%) pak k jejich pozvolnému nárůstu z důvodu narušení uspořádanosti polymerních řetězců. Na vyhovující adhezi mezi polyimidem a aditivy lze soudit i z toho, že nedocházelo k významnějšímu poklesu dělicí schopnosti, naopak v některých případech byla srovnatelná s těmi nadprůměrnými uváděnými v literatuře. Byl sledován i vliv přípravy membrán obsahujících aditiva na jejich vlastnosti.

Modifikované vysoce větvené polyimidy byly též testovány jako membrány pro dělení racemických směsí.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR P106/12/0569.

LITERATURA

1. Liaw D.-J., Wang K.-L., Hwang Y.-C., Lee K.-R., Lai J.-Y., Ha C-S.: Prog. Polym. Sci. *37*, 907 (2012).
2. Voit B. I., Lederer A.: Chem. Rev. *109*, 5924 (2009).

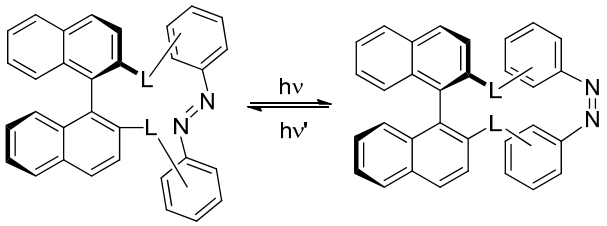
3L-04
BINAFTYLOVÉ CHIROPTICKÉ PREPÍNAČE

MARTIN PUTALA*, JURAJ FILO, LUKÁŠ KERNER, ANNA KICKOVÁ, RÓBERT MIŠICÁK

Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovenská republika
putala@fns.uniba.sk

Svetlom prepínané molekulové stroje sú predmetom intenzívneho záujmu pre možnosť ich uplatnenia v oblasti optického spracovania a ukladania dát. Jednou zo stratégií, ako zabezpečiť nedeštruktívne čítanie informácie, je využitie chiroptických vlastností[1]. Fotochrómne diaryldiazény pri ožarovaní podliehajú *trans-cis* izomerizácii, sprevádzanej významnou zmenou ich molekulovej geometrie. Toto ich správanie sa dá využiť na konštrukciu chiroptických prepínačov v kombinácii s binaftylovou jednotkou ako konformačne citlivou chirálnou štruktúrou (so zmenou dihedrálneho uhla bez naftalénovými jadrami).

Prezentované budú naše výsledky, ktoré sme dosiahli pri syntéze, charakterizácii a konformačnej analýze makrocyklických prepínačov na báze fotochrómnych diazénov a binaftylovej chirálnej jednotky, navzájom prepojených rôznymi mostíkmi. Pri syntéze týchto prepínačov boli zistené zaujímavé poznatky o tandemovom priebehu Sonogashirovej[2] a Heckovej[3] reakcie na binaftyle. V porovnaní s doteraz publikovanými výsledkami binaftyl-diazénových prepínačov s flexibilnými propán-1,3-diyldioxy-mostíkmi[4], naše deriváty s rigidnejšími akrylamidovými[3] a močovinovými mostíkmi vykazujú výraznejšiu chiroptickú odozvu pri prepínaní: prepínanie intenzity CD signálu až do pomeru 1:3 v prípade zlúčeniny s akrylamidovým mostíkom alebo až prepínanie znamienka CD signálu u zlúčeniny s močovinovým mostíkom.



L: -O-[CH$_2$]$_n$-O-, -CH=CH-CO-NH-, -NH-CO-NH-

Konformačná analýza *trans*- a *cis*-foriem výpočtovými metódami pomohla vysvetliť podstatu pozorovaných zmien v CD spektrách pri prepínaní.

Tento článok bol vytvorený realizáciou projektu „Centrum excelentnosti pre návrh, prípravu a diagnostiku nanoštruktúr pre elektroniku a fotoniku 2 (NanoNet2)", na základe podpory operačného program Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja."

LITERATÚRA

1. Feringa B. L., Browne W. R. (ed.): *Molecular Switches*. Vol. 1. Wiley-VCH, Weinheim 2011.
2. Kasák P., Brath H., Krascsenicsová-Poláková K., Kicková A., Moldovan N., Putala M.: Coll. Czech. Chem. Commun. *72*, 1139 (2007).
3. (a) Kicková A., Horváth B., Kerner L., Putala M.: Chem. Pap. *66*, 101 (2013). (b) Kerner L., Filo J., Kicková A., Putala M.: *rukopis v príprave.*
4. (a) Kawamoto M., Aoki T., Wada T.: Chem. Commun. *2007*, 930. (b) Takaishi K., Kawamoto M., Tsubaki K., Wada T.: J. Org. Chem. *74*, 5723 (2009). (c) Kawamoto M., Shiga N., Takaishi K., Yamashita T.: Chem. Commun. *2010*, 8344. (d) Takaishi K., Kawamoto M., Tsubaki K., Furuyama T., Muranaka A., Uchiyama M.: Chem. Eur. J. *17*, 1778 (2011). (e) Takaishi K., Muranaka A., Kawamoto M., Uchiyama M.: J. Org. Chem. *76*, 7623 (2011). (f) Takaishi K., Muranaka A., Kawamoto M., Uchiyama M.: Org. Lett. *14*, 276 (2012).

3L-05
NEW SEMICONDUCTORS CONTAINING DITHIENO [3,2-b:2′,3′-d]PYRROLE (DTP) UNITS FOR ORGANIC ELECTRONIC DEVICES

RENATA RYBAKIEWICZ, KAMIL KOTWICA, LUKASZ SKORKA, MALGORZATA ZAGORSKA

Faculty of Chemistry, Warsaw University of Technology, Noakowskiego 3, 00664 Warsaw, Poland
rrybakiewicz@ch.pw.edu.pl

The HOMO and LUMO levels of organic semiconductors can be precisely tuned through selection of appropriate electron donor (D) and acceptor (A) units, resulting in different absorption and emission spectra as well as in the type of conductivity[1]. In particular, the combination of strong donors and strong acceptors can lead to materials simultaneously exhibiting low ionization potentials and high electron affinities that, in turn, can lead to the possibility of facile injection of both holes and electrons at moderate potentials and, therefore, the possibility of ambipolar charge transport[2].

Dithienopyrrole (DPT) has been known as an important eletrodonating unit for synthesis of new semiconductors for organic electronic devices. DTP derivatives have recently attracted much attention because of its unique electronic and optoelectronic properties[3].

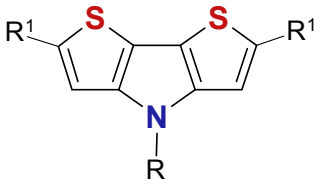


Fig. 1. **The structure of the functionalized dithieno[3,2-b:2′,3′-d] pyrrole (DTP)**

In the research described here new solution processable DA semiconducting molecules containing alkyl and aryl *N*-substituted dithieno[3,2-b:2′,3′-d]pyrrole were synthesized via Stille or Suzuki coupling.

Redox, spectroscopic and optical properties of these compounds were investigated, with the goal to establish their suitability for the fabrication of operating in air organic field effect transistors (OFETs) and other electronic and optoelectronic devices. DFT calculations predicted a high value of the electron affinity (EA) and a low lying LUMO level for these compounds. These findings were corroborated by cyclic voltammetry. Both theoretical and experimental values indicate that obtained compounds are promising candidates for the use in OFETs.

The research leading to these results has received funding from the Polish-Norwegian Research Programme operated by the National Centre for Research and Development under the Norwegian Financial Mechanism 2009-2014 in the frame of Project Contract No Pol-Nor/210704/43/2013. This work was supported by Wroclaw Centre for Networking and Supercomputing, under calculational Grant No. 283.

REFERENCES

1. Bujak P., Kulszewicz-Bajer I., Zagorska M., Maurel V., Wielgus I., Pron A.: Chem. Soc. Rev. *42*, 8895 (2013).
2. Zhang M., Tsao H. N., Pisula W., Yang C., Mishra A. K., Műllen K.: J. Am. Chem. Soc. *129*, 3472 (2007).
3. Yue W., Zhao Y., Shao S., Tian H., Xie Z., Geng Y., Wang F.: J. Mater. Chem. *19*, 2199 (2009).

3L-06

AN EASILY ACCESSIBLE INDANTHRONE – BASED ORGANIC SEMICONDUCTOR FOR ORGANIC ELECTRONICS

KAMIL KOTWICA[a], MARIUSZ MATERNA[a], DAMIAN WAMIL[a], RENATA RYBAKIEWICZ[a], ŁUKASZ SKORKA[a], PIOTR GUNKA[a], PIOTR BUJAK[a], BARBARA GOLEC[b], Jerzy Herbich[b], TOMASZ JAROCH[b], ROBERT NOWAKOWSKI[b], BEATA ŁUSZCZYNSKA[c], MAŁGORZATA ZAGÓRSKA[a], ADAM PROŃ[a]

[a] *Faculty of Chemistry, Warsaw University of Technology Noakowskiego 3, Warsaw,* [b] *Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences, Kasprzaka 44/52, Warsaw,* [c] *Faculty of Chemistry, Technical University of Lodz, Stefana Żeromskiego 116, Lodz, Poland*
kkotwica@ch.pw.edu.pl

Molecular crystalline semiconductors as alternative to conjugated polymers offer several intrinsic advantages as solution-processable electronic materials[1]. Indanthrone blue dye like diketopyrrolopyrrole and isoindigo, possess a very interesting fused aromatic conjugated core and can be used as a component of active layers in organic electronic and opto-electronic devices.

Unsubstituted indanthrone was obtained in a one-step fusion of 1-aminoantraquinone using potassium hydroxide. This dye is not soluble in organic solvents. From the technological point of view solution processability of organic semiconductors is of crucial importance because this property facilities the fabrication of devices using common solution-based techniques, easily adaptable to large surface substrates. Therefore, in the second step four alkyloxy (butyloxy, hexyloxy, octyloxy and decyloxy) substituents were attached to the indanthrone moiety via one pot tandem reduction of four keton groups and alkylation in the phase transfer catalysis conditions (Fig. 1).

Apart from solution processability, several interesting properties of indanthrones containing alkoxy solubilizing substituents should be pointed out. First, they readily crystallize yielding single crystals of good quality which allow for unequivocal determination of their crystal structure. Second, they form ordered, self-assembled monolayers on HOPG graphite as evidenced by STM studies. They show strong photo- and electroluminescence which can be exploited in the guest-host type LEDs. Finally, they show interesting and acid-dependent electrochemistry and spectroelectrochemistry.

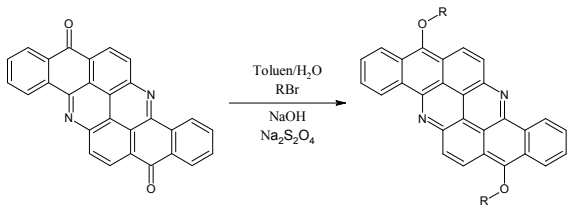


Fig. 1. **Synthesis of indanthrone derivatives**

This work has been financially supported by the FP-7, NoE/ICT, FLEXNET Contract No 247745, 2010 – 2012 and the European Union in the framework of European Social Fund through the Warsaw University of Technology Development Programme, realized by Center for Advanced Studies.

REFERENCE

1. Pron A., Gawrys P., Zagorska M., Djurado D., Demadrille R.: Chem. Soc. Rev. *39*, 2577 (2010).

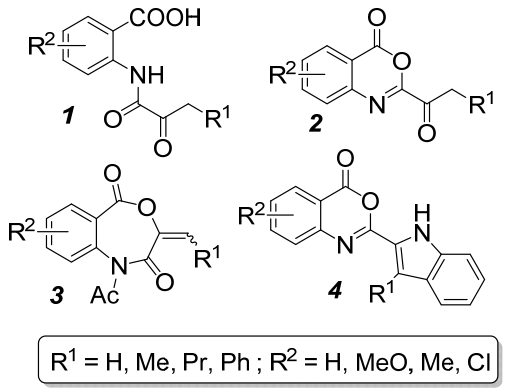
3L-07

REAKTIVNÍ HETEROCYKLICKÉ SLOUČENINY DOSTUPNÉ Z *N*-(α-KETOACYL)ANTHRANILOVÝCH KYSELIN

KAREL PROISL[a], ANNA SRHOLCOVÁ[a], MARTIN KUČERA[a], DAMIJANA URANKAR[b], JANEZ KOŠMRLJ[b], STANISLAV KAFKA*[a]

[a] *Fakulta technologická, Univerzita T. Bati ve Zlíně, Nám. T. G. Masaryka 275, 762 72 Zlín, Česká republika,* [b] *Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Univerza v Ljubljani, Aškerčeva 5, 1000 Ljubljana, Slovinsko*
kafka@ft.utb.cz

N-(α-Ketoacyl)anthranilové kyseliny ***1*** představují jednoduché sloučeniny, které jsou zajímavé jak z hlediska možných biologických účinků, tak z pohledu organického chemika, který v nich spatřuje vícefunkční prekurzory pro přípravu různých heterocyklických cílů. V neposlední řadě mohou být tato chemická individua potenciálně uplatnitelná v chemii komplexů či v konstituční dynamické chemii. Přístup ke studiu chemie *N*-(α-ketoacyl)anthranilových kyselin nám umožnila nedávno publikovaná metoda[1] jejich pohodlné přípravy oxidací 3-hydroxychinolin-2,4-dionů.



Vhodnými cyklodehydratacemi[2] je možné převést titulní kyseliny **1** na značně reaktivní heterocyklické systémy, přede-

vším benzoxazinony **2** a benzoxazepindiony **3** a s využitím Fischerovy indolové reakce také indoly **4**. Tyto sloučeniny podléhají zajímavým reakcím, které budou diskutovány. Některé *N*-acetylderiváty byly také prozkoumány jako acetylační činidla, podobně jako *N*-acylbenzotriazoly[3]. Reaktivita a využití sloučenin **2–4** bude diskutována.

Tato studie byla podpořena interním grantem UTB ve Zlíně IGA/FT/2014/010 a Veřejnou agenturou pro výzkumnou činnost Republiky Slovinska (projekt P1-0230-0103).

LITERATURA

1. Kafka S., Proisl K., Kašpárková, V., Urankar, D., Kimmel, R., Košmrlj, J.: Tetrahedron *69*, 10826 (2010).
2. Lingens F., Sproessler B.: Justus Liebigs Ann. Chem. *702*, 169 (1967).
3. Katritzky A. R., Suzuki K., Wang Z.: Synlett *2005*, 11.

3L-08
KAM KRÁČÍ FARMACEUTICKÝ PRŮMYSL

PAVEL HRADIL

Farmak a.s., Na vlčinci 16/3, 771 17 Olomouc
pavel.hradil@farmak.cz

V přednášce bude probrána v širších souvislostech současná situace ve farmaceutickém průmyslu a s ním spojeném průmyslu chemickém. Farmaceutický průmysl je zaměstnavatelem vysoce kvalifikované pracovní síly a dodává pacientům širokou škálu léčiv, z nichž mnohé jsou vysoce sofistikované a také velmi drahé. Zisky firem se pohybují v miliardách dolarů, jsou však silně závislé na podnikatelském prostředí států, ve kterých tyto subjekty působí. Vysoké částky jsou vynakládány na testování a klinické zkoušky nových látek i na řešení problémů pramenících z byrokratických omezení, jako je zavádění systému registrace chemických sloučenin „REACH“, podpora „zelené“ energie s následně vysokými cenami elektřiny. Velmi důležitou roli hraje i způsob zdanění, mzdové náklady v dané zemi a způsob financování zdravotní péče státem. Farmaceutický průmysl je bezprostředně spojen s úrovní školství, s jeho rozvojem a obecně s podporou vědy a základního výzkumu. Samostatnou otázkou, která je neoddělitelně s farmaceutickým průmyslem spojená, je ochrana duševního vlastnictví.

Tomu všemu se farmaceuticko-chemické firmy musí přizpůsobit a všem těmto aspektům bude během přednášky věnována pozornost. Bude rovněž probírán vliv globalizace, nárůst asijské konkurence i finanční krize a změny s tím spojené.

Na praktických příkladech budou ukázány změny ve vybraných nadnárodních firmách, ke kterým došlo v posledních letech a rovněž důvody a důsledky těchto změn.

Přestože řada problémů, které řeší výrobci originálních látek, je společná s firmami vyrábějícími generika, je zde i řada odlišností či protichůdných pohledů. Proto bude zvlášť diskutována situace výrobců originálních látek a zvlášť pro průmysl generický. Tento rozdílný pohled se dnes významně projevuje například v ochraně duševních práv (boj o znění patentové výjimky Bollar-Roche), kterému bude věnována samostatná pozornost. Bude diskutována exspirace hlavních patentů pro klíčová léčiva, jejich vliv na ekonomiku originálních i generických firem a změny na trhu, ke kterým to vede. V části přednášky, která bude věnována patentové politice, bude ukázán rozdílný pohled firem a akademických pracovišť financovaných státem na tuto oblast. Zvláštní pozornost bude věnována situaci na domácí průmyslové scéně. Budou diskutovány základní změny ve farmaceuticko-chemickém průmyslu za posledních 20 let. Vzhledem k masivním investicím státu, do školství, vědy a výzkumu, k němuž dochází v posledních letech v naší republice, se i toto v přednášce objeví.

V závěru budou zmíněna možná řešení, způsoby jak problémům mohou čelit výrobci i možné další směry, kterými se v budoucnosti toto odvětví bude vyvíjet.

3L-09
CHROMATOGRAPHY IN THE INDUSTRIAL ISOLATION OF NATURAL PRODUCTS

LADISLAV CVAK

TEVA, Ostravská 29, 747 70 Opava
ladislav.cvak@tevapharm.cz

Synthetic chemist devotes plenty of time to optimization of the chemical reaction and therefore the resulting reaction mixture usually contains the target compound in high concentration and high purity. Its isolation only by crystallization is the goal of each synthetic chemist and the involvement of chromatography in the process is regarded as his failure. However, the increasing requirements on the purity of Active Pharmaceutical Ingredients (API) made many synthetic chemists to change this attitude and chromatography becomes more and more the part of processes for API manufacture.

On the other hand, the isolation of natural compounds, especially natural drugs, represents the processing of complex mixtures where, very often, the target compound is a minor component, *e.g.* the extract of *Taxus* needles contains only 0.1 % of the target compound, paclitaxel, in the dryness. Therefore the industrial phytochemists like the chromatography as the main tool which can help them.

We in TEVA Opava (former Galena) utilize industrial chromatography for the manufacture of API of natural origin (isolated from herbal or fermentation biomass or semisynthetic) for more than 30 years. The utilization of chromatography will be demonstrated in the lecture on examples: ergot alkaloids, cyclosporine, paclitaxel, tacrolimus and some other. Discussed will be also the chromatography mode (normal versus reverse phase) and selection of solvents for the mobile phase from the industrial viewpoint (solvent recovery).

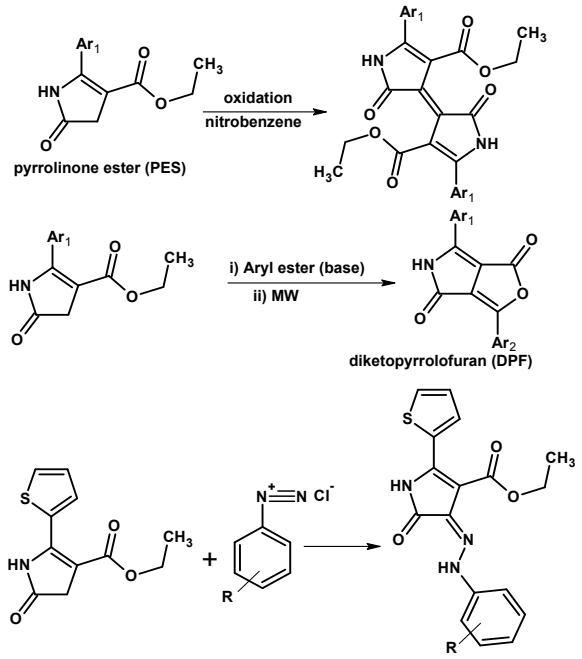
A short view will be also devoted to Liquid-Liquid Counter Current Chromatography and other processes which involve liquid-liquid partitioning.

3P-01
HIGH PERFORMANCE COLORANTS BASED ON PYRROLINONE ESTER

TAREK AYSHA[a,b]*, STANISLAV LUŇÁK Jr[c], RADIM HRDINA[a]

[a] *Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, 532 10 Pardubice, Czech Republic,* [b] *National Research Centre, Po. Code 12311, Dokki, Cairo, Egypt,* [c] *Materials Research Centre, Brno University of Technology, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic*
tarekaysha@hotmail.com

Ethyl-4,5-dihydro-5-oxo-2-aryl(1*H*)pyrrole-3-carboxylate (pyrrolinone ester) became very interesting intermediate with active methylene group in position 4 activated by carbonyl and ester groups. Thiophene analogue of this intermediate is the point of our interest to prepare new colorants for high performance properties. A condensation with esters, diazonium salt and a reaction with aromatic nitriles were carried out[1,2]. *N*-analogues of Pechmann dye with identical aryl groups in the 5,5´-positions and carboxy ester groups in the 3,3´-positions were synthesized by oxidative dimerization of the pyrrolinone esters[3]. Asymmetrical diketopyrrolofuran pigments were prepared.



Scheme 1. **The synthesis of colorants based on pyrrolinone ester**

We thank the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic for financial support (Project CZ.1.07/2.3.00/30.0021 "Enhancement of R&D Pools of Excellence at the University of Pardubice").

REFERENCES

1. Aysha T., Lunak S., Lycka A., Hrdina R.: Dyes Pigments *91*, 170 (2011).
2. Morton C.J.H., Riggs R.L., Smith D.M., Westwood N.J., Lightfoot P., Slawin A.M.Z.: Tetrahedron. *61*, 727 (2005).
3. Aysha T., Lunak S., Lycka A., Vynuchal J., Elias Z., Ruzicka A., Padelkova Z., Hrdina R.: Dyes Pigments *98*, 530 (2013).

3P-02
BENZO[*1,4*]OXAZEPIN-2,5-DIONY V ORGANICKÉ SYNTÉZE

ANNA SRHOLCOVÁ[a], MARTIN KUČERA[a], KAREL PROISL[a], JANEZ KOŠMRLJ[b], DAMIJANA URANKAR[b], STANISLAV KAFKA[a]*

[a] *Fakulta technologická, Univerzita T. Bati ve Zlíně, Nám. T. G. Masaryka 275, 762 72 Zlín, Česká republika,* [b] *Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Univerza v Ljubljani, Aškerčeva 5, 1000 Ljubljana, Slovinsko*
kafka@ft.utb.cz

Od první[1] přípravy benzo[1,4]oxazepindionu v roce 1912 až do současnosti byly téměř všechny studie[2–4] reaktivity těchto heterocyklů omezeny na jejich využití jako prekursorů pro přípravu derivátů chinazolinu. Během výzkumu sloučenin ***1*** jsme pozorovali jejich vysokou reaktivitu a také snadno probíhající hydrolysu, při které dochází k intramolekulární transacetylaci, vedoucí ke sloučeninám ***2***. Tento jev byl později pozorován i při reakcích těchto sloučenin s aminy. Zjištěná fakta nás vedla k hlubšímu prozkoumání reaktivity různě substituovaných benzo[1,4]oxazepindionů.

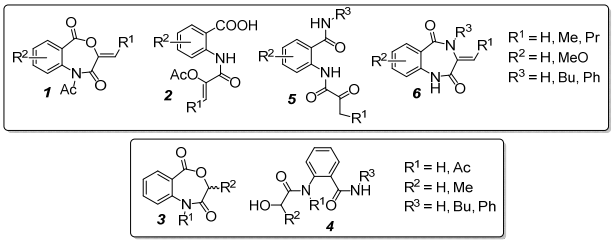


Schéma 1. **Struktury diskutovaných sloučenin 1 – 6**

Reakce titulních sloučenin ***1*** a ***3*** s aminy vedly ve většině případů k otevření benzoxazepinového kruhu a vzniku amidů ***4*** a ***5***. V některých případech však byla tato reakce doprovázena transacetylací, deacetylací či vznikem derivátu benzodiazepinu ***6***. Vznik naposled uvedených sloučenin nás motivoval ke zkoumání těchto reakcí, vzhledem k tomu, že deriváty benzodiazepinu jsou významné sloučeniny ve farmakochemii. Studium výše zmíněné transacetylace vedlo rovněž ke zjištění, že 1-acetylbenzo[1,4]oxazepindion (***3***, R^1 = Ac, R^2 = H) může sloužit jako atypické acetylační činidlo. Takový jev je znám[5] například u 1-acylbenzotriazolů.

Tato studie byla podpořena interním grantem UTB ve Zlíně IGA/FT/2014/010 a Veřejnou agenturou pro výzkumnou činnost Republiky Slovinska (projekt P1-0230-0103).

LITERATURA

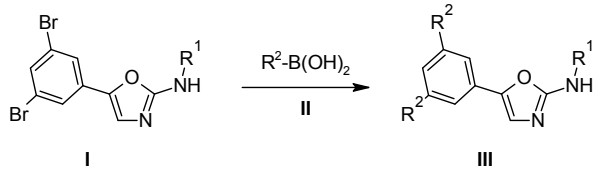
1. Riedel J. D.: Riedel's Ber. *1912*, 13; Chem. Zentr. I *1912*, 1773.
2. Bean C. M., Kenyon J., Phillips H.: J. Chem. Soc. *1936*, 303.
3. Uskokovic M., Iacobelli J., Toome V., Wenner W.: J. Org. Chem. *29*, 582 (1964).
4. Uskokovic M., Wenner W.: 3-Amino-2-(1-hydroxyethyl) -4-(3*H*)-quinazolinones. FR 1395924, 16 April 1965.
5. Katritzky A. R., Suzuki K., Wang Z.: Synlett *11*, 1656 (2005).

3P-03
CROSS-COUPLING REAKCIE SUBSTITUOVANÉHO 1,3-OXAZOLU

FRIDRICH GREGÁŇ[a], MILAN MELICHERČÍK[a]*, JURAJ SLOVÍK[a], ANDREJ BOHÁČ[b]

[a] Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita Mateja Bela, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica, [b] Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina CH-2, 842 15 Bratislava, Slovensko
Milan.Melichercik@umb.sk

Reakcie arylboronových kyselín, alebo ich esterov s aryl- a heteroarylhalogenidmi katalyzované komplexmi paládia v prítomnosti bázy (Sizuki-Miyaurova reakcia)[1] sú jedným z najvýznamnejších typov cross-coupling reakcií. Najpoužívanejším katalyzátorom je $Pd(Ph_3)_4$. V tejto práci sa cross-coupling reakcie aplikovali v syntéze 2,5-disubstituovaných 1,3-oxazolov, ktoré sa študujú najmä v súvislosti s ich antitumorovou aktivitou[2,3].



R^1 = 2-metoxy-5-etylsulfonylfenyl
R^2 = 4-metoxyfenyl; 4-trifluormetylfenyl; 2-metyl-4-metoxyfenyl; 2-trifluormetylfenyl; bifenyl-4-yl

Schéma 1. **Reakcie 2,5-disubstituovaných 1,3-oxazolov s arylboronovými kyselinami**

Cross-coupling reakcie (Schéma 1) na 3,5-dibrómfenylovej skupine zlúčeniny **I** (Schéma 1) sa realizovali v prebytku arylboronových kyselín za prítomnosti katalyzátora $Pd(Ph_3)_4$ a uhličitanu sodného v prostredí 1,2-dimetoxyetán : voda (2:1)[2,3]. Reakcie s jednotlivými arylboronovými kyselinami **II** (Schéma 1) sa uskutočnili pri teplote 100 °C počas 4–6 hodín (monitorovanie reakcie pomocou TLC). Výťažky získaných oxazolových derivátov **III** (Schéma 1) po prečistení stĺpcovou chromatografiou boli v rozmedzí 30–50 %. Štruktúra pripravených zlúčenín bola potvrdená interpretáciou ^{1}H NMR spektier a elementárnou analýzou. Zlúčeniny boli postúpené na farmakologické testovanie inhibície angiogenézy.

Táto práca vznikla za podpory VEGA grantu č. 1/0634/13.

LITERATÚRA

1. Suzuki A., Miyaura N.: Chem. Rev. *95*, 2457 (1995).
2. Chen P., Norris D., Haslov D. K.: Bioorg. Med. Chem. Lett. *13*, 1345 (2003).
3. Lintnerová L., Garcia-Caballero M., Gregáň F., Melicherčík M., Quesada A. R., Dobiaš J., Lác J., Sališová M., Boháč A.: Eur. J. Med. Chem. *72*, 146 (2014).

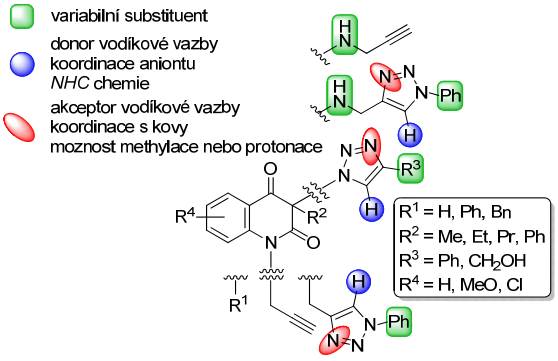
3P-04
SYNTÉZY TRIAZOLOVÝCH DERIVÁTŮ CHINOLIN-2,4(1*H*,3*H*)-DIONU

ROMAN KIMMEL[a]*, MARIANNA MOLNÁROVÁ[a], TEREZA DOSTÁLOVÁ[a], IVETA KAPAVÍKOVÁ[a], JANEZ KOŠMRLJ[b], STANISLAV KAFKA[a]

[a] Ústav chemie, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Náměstí T. G. Masaryka 275, 762 72 Zlín, Česká republika, [b] Katedra za organsko kemijo, Fakulteta za organsko kemijo in kemijsko tehnologijo, Univerza v Ljubljani, Aškerčeva 5, 1000 Ljubljana, Slovinsko
kimmel@ft.utb.cz

Od zveřejnění prvních prací[1,2], v nichž byly provedeny syntézy 1,2,3-triazolů cykloadiční reakcí azidosloučenin a terminálních alkynů za katalýzy měďnými sloučeninami, byla tato reakce využita k syntéze nespočetných sloučenin s 1,2,3-triazolovým uskupením v molekule. Díky jejich zajímavým vlastnostem nacházejí tyto sloučeniny uplatnění v řadě oblastí.

V návaznosti na studii[3], ve které jsme sérii 3-azidochinolin-2,4-dionů převedli reakcí s terminál-ními alkyny na odpovídající deriváty s triazolovým kruhem, jsme se zaměřili na syntézu derivátů chinolin-2,4-dionu se dvěma triazolovými kruhy v molekule. Vyzkoušeli jsme dva postupy pro převedení 3-chlorchinolin-2,4-dionů na deriváty s triazolylovou skupinou v poloze 3 a s triazolylmethylovou skupinou v poloze 1,



které zahrnují substituci atomu chloru azidoskupinou. Postup přípravy jiného typu titulních sloučenin zahrnuje převedení 3-chlorchinolin-2,4-dionů na 3-dipropargyl-aminoderiváty.

Tato studie byla podporována interním grantem UTB ve Zlíně č. IGA/FT/2014/010 financovaného z prostředků specifického výzkumu na vysokých školách a veřejnou agenturou pro výzkumnou činnost Republiky Slovinska (projekt P1-0230-0103).

LITERATURA

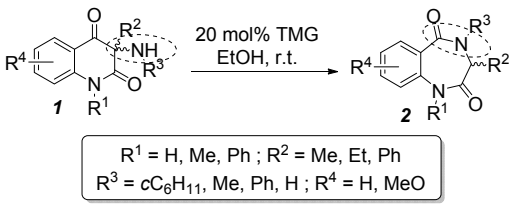
1. Rostovtsev V. V., Green L. G., Fokin V. V., Sharpless K. B.: Angew. Chem. Int. Ed. *41*, 2596 (2002).
2. Tornoe C. W., Christiensen C., Meldal M.: J. Org. Chem. *67*, 3057 (2002).
3. Kafka S., Hauke S., Salčinović A., Soidinsalo O., Urankar D., Košmrlj J.: Molecules *16*, 4070 (2011).

3P-05
BASICKY INDUKOVANÝ PŘESMYK 3-AMINOCHINOLIN-2,4-DIONŮ VEDOUCÍ K BENZO[*e*][*1,4*]DIAZEPIN-2,5-DIONŮM

FILIP KŘEMEN[a], ANNA SRHOLCOVÁ[a], KAREL PROISL[a], JANEZ KOŠMRLJ[b], DAMIJANA URANKAR[b], STANISLAV KAFKA[a*]

[a] Fakulta technologická, Univerzita T. Bati ve Zlíně, Nám. T. G. Masaryka 275, 762 72 Zlín, Česká republika, [b] Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, Univerza v Ljubljani, Aškerčeva 5, 1000 Ljubljana, Slovinsko
kafka@ft.utb.cz

Chemie chinolin-2,4-dionů byla během posledních let předmětem řady studií prováděných na Ústavu chemie FT UTB. V řadě z nich byly pozorovány kontrakce pyridinového kruhu na pětičlenný kruh[1–5], zatímco jeho expanze na sedmičlenný kruh byla zaznamenána jen ojediněle. V rámci našeho systematického výzkumu chinolin-2,4-dionů jsme zjistili, že působením vhodné base na substituované 3-aminochinolin-2,4-diony ***1*** vznikají odpovídající deriváty benzodiazepinu **2**.



Nový přístup k derivátům benzodiazepinu může najít aplikace v organické syntéze, proto jsme hledali optimální podmínky pro uvedenou reakci u jedné ze sloučenin ***1*** (R^1 = Me, R^2 = Ph, R^3 = *c*-C_6H_{11}, R^4 = H. Nejlepších výsledků bylo dosaženo při provedení reakce v ethanolu při laboratorní teplotě a při použití tetramethylguanidinu jako base. Tyto podmínky pak byly úspěšně uplatněny pro přípravu série benzodiazepindionů ***2*** přesmykem aminochinolindionů ***1***.

Struktury izolovaných produktů ***2*** byly určeny moderními metodami strukturní analýzy. V rámci příspěvku bude diskutována reaktivita zmíněných 3-aminochinolindionů, možné využití popisovaných transformací a návrh možného reakčního mechanismu.

Tato studie byla podpořena interním grantem UTB ve Zlíně IGA/FT/2014/010 a Veřejnou agenturou pro výzkumnou činnost Republiky Slovinska (projekt P1-0230-0103).

LITERATURA

1. Klásek A., Kořistek, K., Polis J., Košmrlj J.: Heterocycles *48*, 11 (1998).
2. Klásek A., Kafka, S.: J. Het. Chem. *35*, 2 (1998).
3. Kafka S., Klásek, J., Košmrlj J.: J. Org. Chem. *66*, 19 (2001).
4. Klásek A., Lyčka A., Mikšík, I., Růžička, A.: Tetrahedron *66*, 11 (2010).
5. Mrkvička V., Rudolf O., Lyčka A., Klásek A.: Tetrahedron *67*, 13 (2011).

3P-06
SYNTHESIS OF *p*-NITROPHENYL β-D-GLYCOSIDES OF DI- AND TRI SACCHARIDE OF XYLAN TYPE – THE SUBSTRATES FOR ENZYME ASSAYS

JÁN HIRSCH, MAREK BARÁTH, MIROSLAV KOÓŠ, PETER BIELY

Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava
chemhirs@savba.sk

Synthesis of oligosaccharides related to hemicelluloses of xylan type has been developed mainly for characterization of the structural features, physicochemical and various functional properties of these natural polysaccharides.

This contribution describes the synthesis of two model di- and trisaccharides of xylan type, namely *p*-nitrophenyl 4-*O*-(2-*O*-benzyl-β-D-xylopyranosyl)-β-D-xylopyranoside (***I***) and *p*-nitrophenyl 4-*O*-[2-*O*-(methyl-4-*O*-methyl-α-D-glucopyranosyluronate)-β-D-xylo-pyranosyl]-β-D-xylopyranoside (***II***) in order to serve as the chromogenetic substrates for testing of xylanase belongs to the GH5 family.

The starting point in the synthesis of disaccharide ***I*** was nucleophile *p*-nitrophenyl 2,3-di-*O*-benzoyl-β-D-xylopyranoside[1] which was coupled with 3,4-di-*O*-acetyl-2-*O*-benzyl-α,β-D-xylopyranosyl acetimidate (prepared from 1,3,4-tri-*O*-acetyl -2-*O*-benzyl-D-xylopyranose[2]). The final disaccharide ***I*** was obtained by deacylation of the isolated blocked disaccharide from the reaction mixture in a good yield. For preparation of model trisaccharide ***II***, related to 4-*O*-methylglucuronoxylan, the 3,4-di-*O*-acetyl-2-*O*-(methyl 2,3-di-*O*-acetyl-4-*O*-methyl-α-D-glucopyranosyluronate)-α,β-D-xylopyranosyl acetimidate[3] was used as a glycosylating agent in a coupling reaction with *p*-nitrophenyl 2,3-di-*O*-benzoyl-β-D-xylopyranoside. The protected trisaccharide isolated by chromatography after deacylation gave aimed ***II*** in a satisfactory yield. The structure of both model oligosaccharides ***I*** and ***II*** and also their precursors was confirmed by NMR spectroscopy.

This work was supported by the grants VEGA No. 2/0101/11 and 1/0962/12; Centre of Excellence-GLYCOMED and Centre of Excellence for Glycomics ITMS 26240120031, supported by the Research&Development Operational Programme funded by the ERDF.

REFERENCES

1. Takeo K., Ohguchi Y., Hasegawa R., Kitamura S.: Carbohydr. Res. *277*, 231 (1995).
2. Kováč P., Palovčík R.: Chem. Zvesti *31*, 98 (1977).
3. Hirsch J., Kooš M., Kováč P.: Carbohydr. Res. *310*, 145 (1998).

3P-07
PHOSPHOLIPIDS – COMPOUNDS FOR SPECIAL TASKS

MAREK KŁOBUCKI, CZESŁAW WAWRZEŃCZYK

Katedra Chemii, Uniwersytet Przyrodniczy
ul. C.K. Norwida 25/27, 50-375 Wrocław, Poland
marek.klobucki@gmail.com

Phospholipids are amphiphilic molecules that build cell membranes. Their structure is based on the glycerol backbone that is linked to a phosphate group coupled to the alcohol (hydrophilic part) and with fatty acids (hydrophobic part). Phospholipids can organize themselves in several forms (eg. lipid bilayer, liposomes or micelles). These unique properties affecting their wide application[1,2].

Among scientists around the world, there's interest in modified phospholipids. In contrast to natural products, they may show targeted, more attractive properties. In our research, we focuses on chemical and enzymatical modifications of phospholipids, particularly phosphatidylcholine.

Restructuring carried out by us are based on enzymatic hydrolysis and chemical transesterification of lipids in positions *sn*-1 , *sn*-2 and *sn*-3. So far, we synthesized the new phospholipids containing conjugated linoleic acid (CLA), betulin[3] or DHEA[4].

REFERENCES

1. Bhardwaj U., Burgess D. J.: Int. J. Pharmaceutics, *388*, 181 (2010).
2. Bringe N. A., Howard D. B., Clark D. R.: J. Food Science *61*, 19 (1996).
3. Tubek B., Smuga D., Smuga M., Wawrzeńczyk C.: Synth. Commun. *42*, 3648 (2012).
4. Smuga D., Smuga M., Świzdor A., Panek A., Wawrzeńczyk C.: Steroids *75*, 1146 (2010).

3P-08
SYNTÉZA 2-ARYLOYLHYDRAZINKARBOX-AMIDŮ, 1,2-DIACYLHYDRAZINŮ A 1,3,4-OXADIAZOLŮ JAKO POTENCIÁLNÍCH ANTIMIKROBIÁLNÍCH MOLEKUL

MARTIN KRÁTKÝ[a,*], JARMILA VINŠOVÁ[a], MARKÉTA KOMLÓOVÁ[a], JIŘINA STOLAŘÍKOVÁ[b]

[a] Kat. anorganické a organické chemie, Farmaceutická fakulta University Karlovy, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, [b] Laboratoř pro diagnostiku mykobakterií a tuberkulózu, Zdravotní ústav Ostrava, Partyzánské nám. 7, 702 00 Ostrava
martin.kratky@faf.cuni.cz

Nepříznivý nárůst rezistence přináší potřebu nových účinných antimikrobních léčiv. U *Mycobacterium tuberculosis*, původce tuberkulózy, byly kromě multilékově a extensivně rezistentních kmenů popsány i tzv. totálně rezistentní kmeny, necitlivé vůči všem zavedeným antituberkulotikům[1].

2-Isonikotinoylhydrazinkarboxamidy[2] a 2-(pyridin-4-yl)-1,3,4-oxadiazoly[3] byly jakožto deriváty isoniazidu studovány jako antimykobakteriální léčiva; některé z nich předčily parentní léčivo. Proto jsme připravili další obdobné deriváty INH a jeho analogů (Schéma 1), které podstoupily biologické hodnocení mj. vůči *M. tuberculosis* a atypickým mykobakteriím. Zjištěné minimální inhibiční koncentrace jsou v řádech mikromolů (MIC ≥ 1 μmol/L).

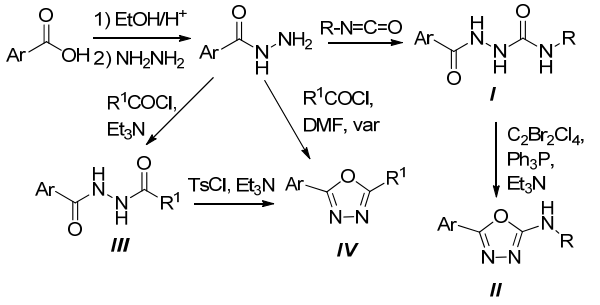


Schéma 1. **Příprava 2-aryloylhydrazinkarboxamidů *I*, 1,2-diacylhydrazinů *III* a substituovaných 1,3,4-oxadiazolů *II* a *IV*** (Ar = pyridin-4-yl, substituovaný fenyl; R a R^1 = alkyl, aryl)

Publikace je spolufinancovaná Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky. Registrační číslo projektu: CZ.1.07/2.3.00/30.0022.
Práce byla dále podpořena grantem IGA NT 13346 (2012).

LITERATURA

1. Zarir F. U.: Respirology *17*, 741 (2012).
2. Rychtarčíková Z., Krátký M., Gazvoda M., Komlóová M., Polanc S., Kočevar M., Stolaříková J., Vinšová J.: *Molecules* 19, 3851 (2014).
3. Navarrete-Vázquez G., Molina-Salinas G. M., Duarte-Fajardo Z. V., Vargas-Villarreal J., Estrada-Soto S., Gonzalez-Salazar F., Hernandez-Nunez E., Said-Fernandes S.: Bioorg. Med. Chem. *15*, 5502 (2007).

3P-09
AUTOSTABILIZOVANÉ ELASTOMERNÍ POLYURETHANY

JIŘÍ PODEŠVA, MARTIN HRUBÝ, JANA KOVÁŘOVÁ, JIŘÍ SPĚVÁČEK

Ústav makromolekulární chemie Akademie věd České republiky, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6
podesva@imc.cas.cz 6

Klasická stabilizace polyurethanů (PUR) i jiných polymerů spočívá ve fyzikálním přimíšení stabilizátorů do polymerní matrice. Tento postup přináší riziko, že – zejména za extrémních podmínek (vysoká teplota, omývání kapalinami) – část stabilizátoru se vypaří nebo vymyje. Již několik dekád se proto hledají způsoby, jak molekulu stabilizátoru kovalentními vazbami připojit k řetězci[1]. Již dříve se nám podařilo takto stabilizovat mj. PUR s polybutadienem jako měkkým segmentem, a to radikálovou adicí fenolického antioxidantu nesoucího skupinu SH na visící vinyly polybutadienové složky PUR[2].

Nyní jsme zabudovali fenolický antioxidant do řetězce PUR již při syntéze. Reakční směs obsahovala tyto složky: aromatický diisokyanát, nízkomolekulární polybutadien nesoucí na obou koncích řetězce OH skupiny a jeden ze dvou studovaných stéricky bráněných fenolických antioxidantů nesoucích dvě ekvivalentní alifatické OH skupiny (schéma 1), přičemž molární poměr skupin NCO a veškerých skupin OH byl přibližně 1,2. Zjednodušená struktura výsledného PUR je ve schématu 2.

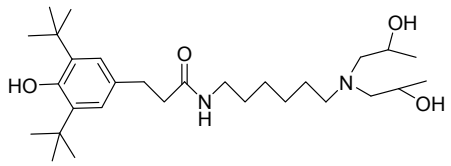


Schéma 1.

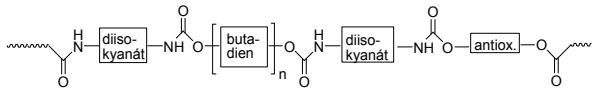


Schéma 2.

Molární poměr diolu nesoucího antioxidantovou strukturu a OH-telechelického polybutadienu v reakční směsi byl měněn v rozmezí 0 až 0,146. Termooxidační stabilita příslušných PUR produktů byla měřena metodou DSC ve vzduchu a vyjádřena jako nástupová teplota oxidace. Pro nulový obsah antioxidantu byla tato teplota 195 °C, pro nejvyšší obsah antioxidantu 228 °C. Takto zabudovaný antioxidant je tedy účinný.

LITERATURA

1. Lau W. W. Y., Qing P. J., v knize: *Desk reference of functional polymers* (Arshady R., ed.), Part 4, str. 621, Am. Chem. Soc., Washington, D. C. 1997.
2. Podešva J., Kovářová J., Hrdličková M., Netopilík M.: Polym. Degrad. Stabil. *94*, 647 (2009).

3P-10
PRÍPRAVA BLOKOVÝCH KOPOLYMÉROV NITROXIDMI RIADENOU KONTROLOVANOU RADIKÁLOVOU POLYMERIZÁCIOU

ĽUDMILA HRČKOVÁ, JOZEF KOLLÁR, ŠTEFAN CHMELA, EVA MACOVÁ, ALENA ŠIŠKOVÁ, DUŠAN BEREK

Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovenská republika
upollud@savba.sk

Kontrolovanou (živou) radikálovou polymerizáciou (Nitroxide Mediated Polymerization – NMP) v bloku boli syntetizované polyméry (PS, PMA) s cielenou architektúrou a pomerne úzkou distribúciou mólových hmotností. Ako regulátory mólovej hmotnosti sa použili rôzne deriváty na báze 2,2,5-trimetyl-4-fenyl-3-azahexán-3-nitroxid – TIPNO, ktorý patrí medzi najmodernejšie regulátory kontrolovanej radikálovej polymerizácie styrénov, akrylátov, akrylamidov a pod. Práve široká škála monomérov, pre ktoré je tento typ mediátora aplikovateľný, je veľkou výhodou oproti bežne používaným derivátom TEMPO. Pripravené deriváty obsahujú štruktúrnu jednotku stéricky tieneného amínu v kombinácii s dvoma rôznymi aromatickými chromofórmi, čo umožňuje kvantifikáciu aktívnych reťazcov pomocou absorpčnej resp. fluorescenčnej spektroskopie. Optimalizáciou podmienok reakcie ako teplota polymerizačnej reakcie, koncentrácia regulátora sa pripravili polyméry s vysokým stupňom živosti, t.j. počet značených polymérových reťazcov bol väčší ako 70 percent a s pomerne úzkou distribúciou mólových hmotností. Tieto polyméry sa použili pri postpolymerizácii s iným monomérom ako makroiniciátory pre prípravu blokových kopolymérov. Východiskové makroiniciátory aj pripravené kopolyméry boli charakterizované GPC, LC LCD, UV a IČ spektroskopiou.

Táto práca vznikla za finančnej podpory projektov APVV-0109-10 a VEGA 2/0167/14.

3P-11
TERMICKÉ A MECHANICKÉ VLASTNOSTI ZMESÍ VYSOKOHUSTOTNÉHO POLYETYLÉNU A ENKAPSULOVANÉHO PARAFÍNOVÉHO VOSKU

ZUZANA NÓGELLOVÁ[a], IGOR KRUPA[a,b], ZDENO ŠPITALSKÝ[a], KATARÍNA CSOMOROVÁ[a], IVICA JANIGOVÁ[a], MARTA MALÍKOVÁ[a], ONDREJ ŽIGO[a], M A ALI ALMAADEED[b]

[a] *Ústav polymérov SAV, Bratislava, Slovenská republika,*
[b] *Center for Advanced Materials, Qatar University, Doha, Qatar*
zuzana.nogellova@savba.sk

V tejto práci sú prezentované termické a mechanické vlastnosti kompozitov vysokohustotného polyetylénu a enkapsulovaného parafínového vosku. Parafín bol enkapsulovaný v procese emulznej polymerizácie v melamín-

formaldehydovej živici. Priemerná veľkosť častíc je 15 μm, podiel parafínu v kapsuliach je 43 hm.% Najvyšší obsah kapsúl v zmesi bol 60 hm.% Kompozity sa pripravovali dvojakým spôsobom: buď sa nasucho zmiešaná zmes priamo lisovala alebo sa pred lisovaním ešte nechala homogenizovať nad teplotou topenia polymérnej matrice. Ukázalo sa, že spôsob prípravy výraznejšie neovplyvňoval výsledné vlastnosti materiálov.

Termická stabilita zmesí bola študovaná metódou termogravimetrickej analýzy. Zistilo sa, že zmesi vykazujú výrazne nižšiu termickú stabilitu než čistá polymérna matrica. Z DSC analýzy vyplynulo, že jednotlivé zložky zmesí sú nemiešateľné. Entalpie topenia parafínu a polyetylénu su proporcionálne podielu jednotlivých zložiek v zmesiach. Prítomnosť parafínu viedla k výraznému zníženiu teploty topenia, čo indikuje plastifikačný efekt parafínu. Zmesi s parafínom vykazujú oproti čistej matrici nižšie parametre mechanických vlastností.

Táto práca vznikla za podpory Qatar National Foundation NPRP č.4-465-2-173 a Vedeckej grantovej agentúry Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu Slovenskej republiky a Slovenskej akadémie vied (projekt č. 2/0119/12).

3P-12

INCREASE OF ADHESION IN ADHESIVE JOINT PVC-POLYURETHANE ADHESIVE – MIDDLE DENSITY FIBERBOARD

IGOR NOVÁK, MARIAN VALENTÍN, JOZEF PRACHÁR, MATEJ MIČUŠÍK, IVAN CHODÁK, MÁRIA OMASTOVÁ

Polymer Institute SAS, Bratislava, Slovakia
Maria.Omastova@savba.sk

The aim of the work was the study of modification polyurethane (PUR) dispersions used as adhesives for 3D bonding of high glossy foils in the furniture industry. The hydrophobization additives were used in order to improve the wetting of bonding substrate – middle density fiberboard (MDF)[1]. The influence of additives was examined by the measurement of contact angle, shear strength of adhesive joint, tensile strength at break of adhesives films, and surface quality of adhesive joint. In relation to PUR dispersion modification also the influence of modification MDF surface by the barrier plasma was examined[2]. The results showed that the addition of hydrophobization additives improves the wetting properties of MDF with PUR dispersions and it has positive effect on surface quality of adhesive joint. The addition of oleic acid to polyurethane dispersion improves the wetting properties of PUR dispersion and has positive effect on surface quality of adhesive joint and also improves the shear strengths up to 2 wt.% of oleic acid. When the plasma treatment on MDF surface was applied the significant decrease of contact angles and an increase of the shear strengths were observed if the oleic acid was added to PUR adhesive. The combination of both modification methods do not increase adhesion.

Grant Agency VEGA, Ministry of Education of the Slovak Republic and Slovak Academy of Sciences (Grant No. 2/0199/14 and 2/0149/14).

REFERENCES

1. Acda M. N., Devera E. E., Cabangon R. J., Ramos H. J.: Intern. J. Adhesion Adhesives *32*, 70 (2012).
2. Kiguchi M., In book: *Chemical Modification of Lignocellulosic Materials*, (Hon D. N., ed.), p. 197. Marcel Dekker, New York 2005.

3P-13

INVESTIGATION OF BEECH WOOD MODIFIED BY RADIO-FREQUENCY PLASMA

IGOR NOVÁK[a], ANTON POPELKA[a,b], MÁRIA OMASTOVÁ[a], MARIAN VALENTÍN[a], MATEJ MIČUŠÍK[a], JOZEF PRACHÁR[a]

[a] Polymer Institute SAS, Bratislava, Slovakia, [b] Center for Advanced Materials, Qatar University, Doha, Qatar
Igor.Novak@savba.sk

The bonding of wood after discharge plasma surface modification is of considerable interest with the respect to construction of the strongest wood adhesive joints. Great efforts have been made in developing various kinds of furniture using wood or plastics veneers in adhesive joints wood-adhesive-veneer[1]. The radio-frequency (RF) discharge plasma at reduced pressure is currently an efficient method for modification of surface and adhesive properties of wood, and is considered as the 'green' ecologically friendly method[2]. Nanoscale changes to the surface of wood materials enable the changes in materials surface, while maintaining the desirable bulk material properties. The surface energy and its polar component of beech wood increased with time of plasma activation. The surface energy and its polar component of beech wood treated by RF plasma (180s) in air increased, and the polar component of the surface energy increased. If the longer activation time was applied, the changes of wood surface energy and its polar component were very small. This fact relates to saturation of wood surface with oxygen-containing functional groups due to modification by RF plasma. The shear strength of adhesive joint of beech wood modified by RF plasma in air with epoxy adhesive vs. modification time increased from 5.2 MPa (pristine sample) up to 8.2 MPa. The nanoindentation study of beech wood pre-treated by RF plasma for pristine beech wood illustrates a relative higher roughness. The RF plasma during ablation processes removes amorphous lignin layers on the wood surface, while the wood surface becomes smoother.

Grant Agency VEGA, Ministry of Education of the Slovak Republic and Slovak Academy of Sciences (Grant No. 2/0199/14).

REFERENCES

1. Acda M. N., Devera E. E., Cabangon R. J., Ramos H. J.: Intern. J. Adhesion Adhesives *32*, 70 (2012).
2. Moghadamzadeh H., Rahimi H., Assadolazadeh M., Hemmati A. R.: Inter. J. Adhesion Adhesives *31*, 816 (2011).

3P-14

IMPACT OF DENSITY OF CROSS-LINKING AND IONIC STRENGTH ON VOLUME PHASE TRANSITION OF THERMOSENSITIVE POLYMER HYDROGELS

KRYZSTOF PIECHOCKI*, M. N. OLEJNICZAK, M. KOZANECKI

Department of Molecular Physics, Faculty of Chemistry, Lodz University of Technology, Zeromskiego 116, 90-924 Lodz, Poland
182874@edu.p.lodz.pl

Stimuli responsive polymer hydrogels may be sensitive to physical (temperature, electrical or magnetic fields) and/or chemical factors (pH, ions, glucose, morphine and many other chemical compounds)[1]. An abrupt, reversible transition under a small change in environmental conditions is the most demanding behavior of such are also required. Recently, the special interest is focused on the thermo-responsive hydrogels exhibiting volume phase transition (VPT). They are synthesized from polymers with lower or upper critical solution temperature and have been successfully applied in many fields eg. as a carrier for controlled drug delivery into the living organisms.

Thermally induced VPT results from the weakening of polymer-water and simultaneously the strengthening of polymer-polymer interactions. These changes lead to sudden collapse of polymer network and to push out the water. This mechanism may accelerate the drug release process in a case of drug carrier systems.

In this work the biocompatible, non-toxic, thermosensitive hydrogels based on poly(2-(2-methoxyethoxyethyl) methacrylate) and poly(vinyl methyl ether) were studied. We concentrated on influence of polymer network density and concentration of selected non-steroidal anti-inflammatory drugs (aspirin, ibuprofen, naproxen) on VPT temperature. Thermo-Optical Analysis was used to solve this problem.

This project was supported by Polish National Science Center grant no. 2013/09/B/ST4/03010.

REFERENCE

1. Maeda Y., Kubota T., Yamauchi H.: Langumir *23*, 11259 (2007).