

## 7P-01

## QSPR METODA PRO URČENÍ BIOLOGICKÉ AKTIVITY REAKTIVÁTORŮ ACETYLCHOLIN-ESTERASY INHIBOVANÉ PESTICIDY

ZDEŇKA KOLSKÁ<sup>a</sup>, KAMIL KUČA<sup>a,b</sup> a DANIEL JUN<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita J. E. Purkyně, České Mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem, <sup>b</sup>Centrum pokročilých studií, Fakulta vojenského zdravotnictví, Univerzita obrany, Třebešská 1575, 500 03 Hradec Králové  
zdenka.kolska@ujep.cz, kucakam@pmfhk.cz, jun@pmfhk.cz

Vlastnosti jakýchkoli chemických látek, tedy i těch, které mohou mít využití jako reaktivátory acetylcholinestasy (dále jen AChE), mohou být určeny experimentálními technikami. V posledních letech se objevují pracoviště, která se snaží vyvinout nové metody pro určení těchto parametrů neexperimentálně<sup>1,2</sup>. Tzv. odhadové či výpočetní postupy byly vyvinuty již pro odhad řady fyzikálně-chemických parametrů, jak pro čisté látky, tak pro směsi<sup>3</sup>. Tyto modely jsou vhodné všude tam, kde není možné provádět experimentální stanovení, např. tam, kde přicházíme do kontaktu s nebezpečnými látkami nebo sloučeninami, které se za podmínek měření rozkládají nebo tam, kde množství získané látky není dostatečné pro uskutečnění experimentu.

Neexperimentální postupy je možné rozdělit do dvou skupin. První je označována jako QPPR metody (Quantity-Property-Property-Relationship), kde je hledaná vlastnost dána do vztahu s některou známou veličinou látky.

Druhá skupina odhadových metod je známa jako tzv. QSPR (Quantity-Structure-Property-Relationship). Tyto metody vycházejí pouze ze znalosti chemické struktury látek bez nutné znalosti dalších parametrů a odhadují vlastnost sloučeniny jen na základě chemické struktury. Jedním z těchto postupů jsou tzv. strukturně příspěvkové metody.

Biologická aktivita několika reaktivátorů (o koncentraci  $1 \cdot 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$ ) AChE inhibovaná různými pesticidy byla odhadnuta navrženými příspěvkovými metodami.

Tato práce vznikla za podpory grantu č. IAA 400720710 Grantové agentury AV ČR.

## LITERATURA

1. Dohnal V., Kuča K., Jun D.: J. Appl. Biomed. 3, 139 (2005).
2. Castilho M. S., Guido R. V. C., Andricopulo A. D.: Lett. Drug Des. Disc. 4, 106 (2007).
3. Poling B. E., Prausnitz J. M., O'Connell J. P.: *The Properties of Gases and Liquids*, 5. vyd. McGraw-Hill, New York 2001.

## 7P-02

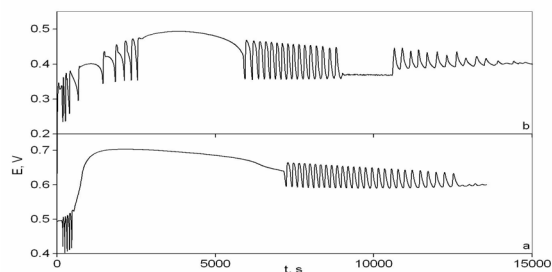
## ŠTUDIUM VPLYVU PERTURBANTOV NA NEKATALYZOVANÚ OSCILAČNÚ REAKCIU FENOLU S BROMIČNANOM V KYSLOM PROSTREDÍ

OEGA GRANČIČOVÁ a ANNA OLEXOVÁ

Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prirodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, Bratislava  
grancicova@fns.uniba.sk, olexova@fns.uniba.sk

Zdanlivo jednoduchá reakcia fenolu s bromičnanom v prostredí kyseliny sírovej sa chová v relatívne úzkom intervale koncentrácií reaktantov a kyseliny ako typický nekatalyzovaný bromičnanový oscilátor s prekvapujúco rozmanitým dynamickým chovaním<sup>1</sup> s 2 sériami oscilácií oddelenými neoscilačnou fázou. K objasneniu pôvodu os-cilácií redox potenciálu môže napomôcť štúdium oscilá-tora v prítomnosti rôznych perturbantov:

a/ tetrabutylamónny ión vytvára iónové páry s aniónmi ako aj asociáty s dostatočne hydrofóbnymi neutrálnymi molekulami<sup>2,3</sup>. Tieto efekty sa odrážajú prostredníctvom zmeny rýchlosti niektorej čiastkovej reakcie v zmene tvaru oscilácií prvej série a doby ich trvania, b/ t-butanol mení relatívnu permitivitu prostredia a pôsobí ako lapač OH radikálov. S rastúcou koncentráciou tohto perturbantu dochádza najprv k zániku druhej série oscilácií a potom k postupnému poklesu počtu oscilácií prvej série.



Obr. 1. Časová závislosť redox potenciálu systému [fenol] = 0,004 mol dm<sup>-3</sup>, [BrO<sub>3</sub><sup>-</sup>] = 0,025 mol dm<sup>-3</sup>, 1,5 mol dm<sup>-3</sup> H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>: a – 0, b – 0,005 mol dm<sup>-3</sup> Bu<sub>4</sub>NClO<sub>4</sub>

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

## LITERATÚRA

1. Adamčíková E., Farbulová Z., Ševčík P.: New J. Chem. 25, 487 (2001).
2. Mbuna J., Takayanagi T., Oshima M., Motomizu S.: J. Chromatogr., A 1022, 191 (2004).
3. Steiner S. A., Watson D. M., Fritz J. S.: J. Chromatogr., A 1085, 170 (2005).

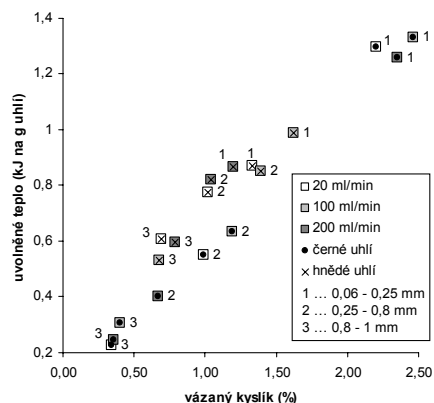
## 7P-03

VLIV RYCHLOSTI PROUDÍCÍ ATMOSFÉRY  
A ZRNITOSTI NA CHEMISORPČNÍ FÁZI OXIDACE  
UHLÍ

VÁCLAV SLOVÁK a BOLESLAV TARABA

Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská Univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava  
vaclav.slovak@osu.cz, boleslav.taraba@osu.cz

S využitím neizotermní simultánní termogravimetrie a diferenční skenovací kalorimetrie TG/DSC byl studován vliv rychlosti proudícího vzduchu na oxidaci vzorků hnědého a černého uhlí o různé zrnitosti. Sledovaný teplotní interval (150–250 °C u hnědého resp. 150–300 °C u černého uhlí) odpovídá chemisorpční fázi oxidace uhlí projevující se zvyšováním hmotnosti a uvolňováním tepla. Pro oba vzorky uhlí byla provedena série měření při třech rychlostech proudění vzduchu (20, 100 a 200 ml min<sup>-1</sup> v peci s objemem 200 ml) a pro tři zrnitostní frakce (0,06–0,25; 0,25–0,8; 0,8–1 mm).



Obr. 1. Závislost tepla uvolněného při oxidaci uhlí na hmotnostním podílu vázaného kyslíku

Byla prokázána korelace mezi hodnotou uvolněného tepla a množstvím vázaného kyslíku (obr. 1), kterou lze aproximovat lineárním průběhem ( $R^2 = 0,937$ , směrnice =  $0,51 \pm 0,07$ ). Těsný charakter závislosti indikuje, že rychlost proudící atmosféry prakticky nemá vliv na změnu distribuce tepla generovaného při oxidaci vzorku. Vliv rychlosti atmosféry neprokázala ani analýza rozptylu na hladině významnosti 0,05. Naopak je evidentní vliv zrnitosti – s rostoucí velikostí uhelných částic klesá intenzita chemisorpce kyslíku na uhlí a tento vliv je výraznější u méně porézního černého uhlí.

Hodnota směrnice korelační přímky vypovídá, že při chemisorpci 1 molu kyslíku (O) se uvolní (nezávisle na typu uhlí a jeho zrnitosti)  $816 \pm 112$  kJ tepla. Přes značnou experimentální chybu můžeme tuto hodnotu porovnat s energií vazby karbonylové skupiny C=O ( $732$  kJ mol<sup>-1</sup>). Právě karbonyly tak můžeme označit za pravděpodobné produkty chemisorpčního působení kyslíku na uhlí.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 105/06/0630.

## 7P-04

MATEMATICKÝ MODEL HYDRODYNAMIKY TOKU  
V PRAVOÚHLÉM KANÁLKU S VÝPLNÍ VE TVARU  
SÍTKYFRANTIŠEK VLASÁK<sup>a</sup>, ROMAN KODÝM<sup>a</sup>,  
DALIMIL ŠNITA<sup>b</sup> a KAREL BOUZEK<sup>a</sup><sup>a</sup> Ústav anorganické technologie, <sup>b</sup> Ústav chemického inženýrství, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6

roman.kodym@vscht.cz, karel.bouzek@vscht.cz

Problematika hydrodynamiky toku (HT) v kanálu s výplní se dotýká celé řady chemických procesů. Jedná se především o procesy řízené přenosem hmoty, v nichž hraje rovnoměrnost HT klíčovou roli z hlediska výkonu zařízení. Typickým příkladem procesu tohoto typu je elektrodiálýza (ED). Základní jednotku ED tvoří pravoúhlý kanál, jehož protilehlé stěny tvoří iontově selektivní membrány. V místech kanálu se sníženou intenzitou toku zpracovávaného roztoku, a tím sníženou intenzitou přenosu hmoty, dochází k jeho lokálnímu odsolení. To vede v konečném důsledku ke snížení proudové účinnosti děje. Vlivem intenzivního elektrostatického pole může navíc dojít rovněž k poškození membrán. V praxi je v současnosti tento problém řešen použitím výplně kanálu ve formě polymerní sítky. Ta podporuje intenzivní promíchávání kapaliny a společně s distributory rovnoměrnost toku kapaliny v pracovní části kanálu. Síťka současně plní funkci opory zajišťující trvalou průchodnost kanálu. Se stále rostoucí kapacitou ED zařízení se neúměrně zvyšují náklady spojené s experimentální optimalizací HT uvnitř těchto zařízení. Vhodné řešení uvedeného problému nabízí matematické modelování.

Je zřejmé, že exaktní popis HT v uvedeném zařízení představuje trojrozměrnou (3D) úlohu. Řešení tohoto modelu je však na dostupné výpočetní technice realizovatelné pouze ve velmi omezeném objemu kanálu představujícím zlomek procent průmyslového zařízení. Především z tohoto důvodu nebyl doposud obdobný matematický model v literatuře popsán. V rámci této práce byl uvedený model navržen, implementován a validován za použití experimentálních dat získaných na odpovídajícím laboratorním zařízení.

Navržený model řeší uvedený problém prostorovou redukcí problému z 3D na 2D. Tento přístup je umožněn strukturou sítky tvořenou dvěma vrstvami různě orientovaných vláken. Skutečnou modelovou doménu tak lze rozdělit na dvě fiktivní 2D vrstvy. V každé z nich je upřednostňován tok roztoku ve směru dané orientací vláken. Zachování 3D charakteru toku je umožněno výměnou roztoku mezi oběma vrstvami. Model HT vychází z obecné Navierovy-Stokesovy rovnice (N-S). Anisotropie sítky je zohledněna v modifikovaném Darcyho zákoně, který zahrnuje dva empirické hydraulické koeficienty. Právě ty zvyhodňují proudění kapaliny ve směru podél vláken. Modelové rovnice byly řešeny metodou konečných prvků v prostředí COMSOL Multiphysics.

Tato práce vznikla za finanční podpory Akademie věd ČR v rámci grantu číslo 105 050 161.

## 7P-05

**PRÍPRAVA A ŠTÚDIUM MONOVRSTIEV  
SUBSTITUOVANÝCH CYKLODEXTRÍNOV  
HMOTNOSTNOU SPEKTROMETRIOU  
SEKUNDÁRNYCH IÓNOV**

**LADISLAV RÁBARA<sup>a</sup>, MONIKA ARANYOSIOVÁ<sup>b,c</sup>  
a DUŠAN VELIČ<sup>b,c</sup>**

<sup>a</sup> Univerzita sv. Cyrila a Metoda, Fakulta prírodných vied, nám. J. Herdu 2, 917 01 Trnava, <sup>b</sup> Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, <sup>c</sup> Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovensko  
ladislav.rabara@ucm.sk

Tvorba samoposkladaných monomolekulových vrstiev (angl. self-assembled monolayer; SAM) adsorbovaním zlúčenín na rovinné povrchy sú jedným z výrobných postupov nanotechnológií. Vrstvy vznikajú na základe interakcií medzi adsorbovanou látkou a povrchom substrátu, podľa charakteru síl sa rozoznáva fyzikálna, polárna a chemická adsorpcia. SAM možno pripraviť ponorením substrátu pokrytého zlatým filmom do roztoku *n*-alkántiolu. Tioderivát sa chemisorpčne viaže na zlatý film, rovnomerné rozmiestnenie nastáva vďaka samoorganizačnej schopnosti daného systému<sup>1</sup>. V menšej miere sa používajú vetvené alebo aromatické alkántioly<sup>2</sup>.

V tomto príspevku sú opísané SAM z cyklohextrínov (CD), ktoré sú použité pre ich komplexačné vlastnosti. CD-SAM sú vytvárané so zámerom inklúzie hosťovských látok vo vytvorenej 2D matici hostiteľských molekúl. Rovnomerne usporiadané cyklohextríny ukotvené na substráte tvoria povrchový čip, ktorý môže slúžiť ako chemický senzor<sup>3</sup> alebo pamäťová jednotka. Použité sú: alfa-CD, beta-CD, gama-CD, 6-monodeoxy-6-monotio-beta-cyklohextrín a heptakis(6-*O*-*t*-butyldimetylsilyl)-2,3-di-*O*-acetyl)-beta-cyklohextrín.

Postup prípravy zahŕňa optimalizáciu koncentrácie, času nanášania a spôsobu premývania vytvárajúcej monovrstvy. CD-SAM sú charakterizované hmotnostnou spektrometriou sekundárnych iónov<sup>4</sup>. V hmotnostných spektrách je sledované zastúpenie molekulových iónov daného CD a jeho fragmentov.

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

## LITERATÚRA

1. Ulmann A., v knihe: *An Introduction to Ultrathin Organic Films: from Langmuir-Blodgett to Self-Assembly*. Academic Press, Boston 1991.
2. Auditore A., Tuccitto N., Quici S., Marzani G., Puntoriero F., Campagna S., Liciardello A.: *Appl. Surf. Sci.* 231-232, 314 (2004).
3. Yang Y., Yang X., Liu Y. L., Liu Z. M., Yang H. F., Shen G. L., Yu R. Q.: *J. Photoch. Photobio. A* 171, 141 (2004).
4. Vickermann J., Briggs D., v knihe: *ToF-SIMS: Surface Analysis by Mass Spectrometry*. Surface Spectra & IM Publications, Chichester 2001.

## 7P-06

**INFLUENCE OF MONOMER CONCENTRATION,  
TEMPERATURE AND IONIZATION ON THE FREE  
RADICAL PROPAGATION RATE COEFFICIENTS OF  
METHACRYLIC ACID POLYMERIZED IN AQUEOUS  
PHASE**

**LUCIA UČŇOVÁ<sup>a</sup>, DUŠAN CHORVÁT JR.<sup>b</sup>, MAREK  
STACH<sup>a</sup>, and IGOR LACÍK<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Polymer Institute of the Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, <sup>b</sup> International laser centre, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovak Republic  
lucia.ucnova@savba.sk, igor.lacik@savba.sk

Industrial polymers are primarily prepared by free radical polymerization. For setting up the required properties of the resulting polymer and for modeling the polymerization process, it is necessary to know the reaction mechanism and to describe the polymerization process with reliable rate coefficients. The advent of pulsed laser initiated techniques in the 1990-ties has helped to understand the free radical polymerization. Improvement of the situation for propagation rate coefficients,  $k_p$ , occurred after employing the IUPAC-recommended pulsed-laser polymerization in conjunction with size-exclusion chromatography (PLP-SEC)<sup>1</sup>. Recently, the PLP-SEC technique has been applied for measuring the  $k_p$  for water-soluble monomers polymerized in aqueous solution. Water is a specific solvent which exhibits various types of interactions which need to be considered in describing the kinetics and mechanism of polymerization in the aqueous phase.

Methacrylic acid (MAA) has been identified as a model monomer for studies into the propagation kinetics in the aqueous phase in both non-ionized and ionized forms<sup>2</sup>. This contribution deals with further studies into  $k_p$  dependence on monomer concentration, degree of ionization and temperature. Polymerizations were carried out in the temperature range from 6 to 80 °C, MAA concentration range from 5 to 40 °C and degree of MAA ionization from 0 to 1 using various neutralization agents. A general observation was that  $k_p$  strongly depends on both degree of ionization and MAA concentration. The obtained data are discussed in view of the internal friction in the transition state structure for the propagation step, which reflects the barriers to the internal motions resulting from the electrostatic and hydrogen bonded interactions of growing radical chain-end with the transition state environment, which is expressed in the pre-exponential Arrhenius parameter. Some effects on the activation energy cannot be excluded.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-51-03790.*

## REFERENCES

1. Olaj O. F., Schnöll-Bitai I., Hinkelmann F.: *Makromol. Chem.* 188, 1689 (1987).
2. Beuermann S., Buback M., Hesse P., Kukuckova S., Lacik I.: *Macromol. Symp.* 248, 41 (2007).

## 7P-07

## A STOCHASTIC MODEL OF CALCIUM-INDUCED CALCIUM RELEASE IN CARDIAC MYOCYTE

PAVOL PETROVIČ<sup>a</sup>, ALEXANDRA ZAHRADNÍKOVÁ<sup>b</sup>, IVAN ZAHRADNÍK<sup>b</sup>, and IVAN VALENT<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Department of Physical and Theoretical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dol. CH1-310, 842 15 Bratislava, <sup>b</sup> Institute of Molecular Physiology and Genetics, Slovak Academy of Sciences, Vlárská 5, 833 34 Bratislava, Slovakia  
petrovicp@fns.uniba.sk

The transduction of information from the cell membrane (sarcolemma) to the myofibrils is mediated by  $\text{Ca}^{2+}$  ions during contraction of heart muscle. After depolarization of the cell membrane in heart myocyte,  $\text{Ca}^{2+}$  influx through the voltage dependent DHPR channels from the extracellular compartment to the dyadic cleft leads to an increase of  $\text{Ca}^{2+}$  concentration that induces opening of calcium-dependent ryanodine receptor channels (RyRs) on the juxtaposed membrane of the sarcoplasmic reticulum (SR) in a nonlinear process known as calcium-induced calcium release (CICR). Opening of the RyRs causes massive release of  $\text{Ca}^{2+}$  from the SR to cytoplasm resulting in cell contraction. In the presented model we numerically simulate the stochastic dynamics of DHPR and RyR gating in the 3D space of the dyadic cleft upon depolarization of the plasma membrane, using the Monte Carlo algorithm<sup>1</sup>. RyRs are coupled in a cluster of 1–49 RyRs with a mutual distance of 28 nm between neighboring RyRs. DHPR channels are accidentally distributed on plane at a distance of 12 nm from the SR membrane. Interactions among the channels are due to diffusion of  $\text{Ca}^{2+}$ , which is described by the set of time-dependent PDEs. For solving this problem we used Vectorizable Local Uniform Grid Refinement (VLUGR3) solver for PDEs in 3D. Each computational run is repeated 10 000×, representing the activity of the ~10 000 Ca release units present in a single cell.

The model showed gained and graded SR release current ( $I_{SR}$ ) in response to the DHPR trigger (3.9 nA peak/76 pA per cell at 0 mV for 49 RyRs in a cluster and 7 DHPR channels).  $I_{SR}$  achieved its peak value in 4.5 ms after membrane depolarization, and then it was significantly reduced to 0.6 nA within 15 ms due to  $\text{Ca}^{2+}$  dependent inactivation of RyRs. The SR  $\text{Ca}^{2+}$  release was rapidly terminated (in 2.5 ms) when the depolarizing pulse (20 ms) ended. This simplified representation will be extended to a complex model of excitation-contraction coupling by linking with a reaction-diffusion model of the dyadic cleft<sup>2</sup>.

## REFERENCES

1. Fall C. P., Marland E. S., Wagner J. M., Tyson J. J.: *Computational Cell Biology*. Springer 2002.
2. Valent I., Zahradníková A., Pavelková J., Zahradník I.: *Biochim. Biophys. Acta* 1768, 155 (2007).

## 7P-08

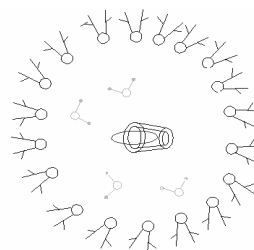
SYSTÉM KUMARÍN /  $\beta$ -CYKLODEXTRÍN / MICELA: FLUORESCENČNÁ SPEKTROSKOPIA

EDUARD JÁNĚ<sup>a</sup>, MICHAL ŽITŇAN<sup>a</sup>, IGNÁC BUGÁR<sup>b</sup>, OĽGA GRANČÍČOVÁ<sup>a</sup> a DUŠAN VELIČ<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, <sup>b</sup> Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 842 15 Bratislava, SR  
eduardj1@azet.sk

Fluorescenčná spektroskopia sa môže zaradiť medzi najcitlivejšie metódy na detegovanie látok. Rádovo sú merateľné koncentrácie  $10^{-8}$  mol  $\text{dm}^{-3}$ . Princíp fluorescenčnej spektroskopie je založený na meraní emitovaného žiarenia. Látka absorbuje elektromagnetické žiarenie, ktoré ju vyexcituje, potom časť svojej energie molekula neradiačne odovzdá okoliu (relaxuje). Následne emituje elektromagnetické žiarenie, ktoré je možné merať. Nameraný signál má určitú polohu emisného maxima, ktorá sa vplyvom prostredia mení. Táto skutočnosť umožňuje sledovať zmeny prostredia v okolí molekuly.

Naším cieľom bolo vytvoriť supermolekulový systém zobrazený na obr. 1. Kumarín s cyklodextrínom vytvorí supermolekulový komplex. Okolo neho sa nachádza uzavretá voda v reverznej micelle.



Obr. 1. Supermolekulový komplex kumarín,  $\beta$ -cyklodextrín, micela

Z našich doterajších výsledkov vyplýva, že časť molekúl kumarínu prenikla do heptánu, čo rozpúšťadlo pre reverznú micelu, o čom nám svedčí emisné maximum pri 435 nm. Ďalšia časť sa zabudovala medzi nepolárne reťazce uhlíkovodíkov surfaktantu. Tu pozorujeme emisné maximum pri 462 nm. Časť molekúl sa uzavrela v reverznej, ktorej emisné maximum sa nachádza pri 507 nm. Cieľom práce bolo sledovať solvatačný efekt na supermolekulové systémy. Zmenou veľkosti micel môžeme meniť množstvo vody v okolí systému kumarín/ $\beta$ -cyklodextrín.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/2447/05, APVT-20-029804 a APVV-0491-07.

## LITERATÚRA

1. Lakowicz R. J.: *Principles of Fluorescence Spectroscopy*. Kluwer Academic Plenum Publishers, New York 1995.

**7P-09**  
**REKONŠTRUKCIA TOPOLOGIE CHROMOZÓMU**  
**METÓDOU CCC S VYUŽITÍM ANALÝZY ŠUMU**  
**VSTUPNÝCH DÁT**

**EVA SMREKOVÁ a IVAN VALENT**

*Prírodovedecká fakulta Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovensko  
 smrekova@fns.uniba.sk*

Procesy ako sú génová expresia, DNA reparácia, či časovanie replikácie sú viazané na priestorovú organizáciu chromatinového vlákna chromozómu. Pre objasnenie chromozómovej konformácie bola pripravená metóda umožňujúca určenie priestorovej konformácie chromozómov (Capturing Chromosome Conformation, CCC<sup>1</sup>) za predpokladu známej sekvencie báz. Na základe pravdepodobnosti interakcie (cross-linking) dvojíc vybraných bodov sledovaného objektu je vytvorená matica, tzv. distančná tabuľka. Ďalším matematickým spracovaním tejto matice je možné určiť priestorové súradnice daných bodov objektu. Táto metodológia bola aplikovaná na chromozóm III v kvasinkách *Saccharomyces cerevisiae*<sup>1</sup>, kde boli potvrdené kvalitatívne vlastnosti organizácie tohto chromozómu, ktorý sa ukázal ako otvorený zakrivený kruh.

Experimentálne dáta sú spravidla zaťažené značnými chybami a úspešná rekonštrukcia priestorovej topológie chromozómu je podmienená efektívnou filtráciou experimentálneho šumu.

Cieľom komplexného projektu je analýza konformácie mitochondriálneho chromozómu kvasiniek v rôznych fázach bunkového cyklu. V predkladanej práci sme sa zaoberali analýzou čiastkového problému – zostrojením 3D modelu objektu. Hlavným cieľom bolo overiť spoľahlivosť navrhutej matematickej metódy<sup>1</sup> a preskúmať ďalšie možnosti filtrácie šumu metódami lineárnej algebry. Nami pripravený počítačový program využíva generovanie šumu pre simulovanie experimentálnych dát, a to generovaním náhodných čísel s normálnym rozdelením<sup>2</sup>. Analýza sa zameriava na vplyv použitia generátora bieleho, šedého a iných šumov, ktoré sa líšia rozložením spektrálnej hustoty<sup>3</sup>. Ďalej sa zaoberá vplyvom odstránenia šumu pomocou choleskeho dekompozície a dekompozície na singulárne hodnoty.

Z tejto analýzy je možné získať informácie o najvhodnejšom usporiadaní konkrétneho praktického experimentu, ktorý nám poskytne dáta pre prípravu 3D modelu skúmaného objektu a jeho 3D zobrazenia pomocou anaglyfickej snímky.

**LITERATÚRA**

1. Dekker J., Rippe K., Dekker M., Kleckner N.: *Science* 295, 1306 (2002).
2. Criado C.: *Phys. Rev. E* 60, 3361 (1999).
3. <http://socrates.berkeley.edu/~phylabs/bsc/Supplementary/NoiseGenerator.html>.

**7P-10**  
**VLIV ZÁŘENÍ NA KOVOVÉ SLOUČENINY**  
**VE VODNÝCH ROZTOCÍCH**

**JAN BÁRTA, MILAN POSPÍŠIL a VÁCLAV ČUBA**

*ČVUT v Praze – FJFI, Břehová 7, 115 19 Praha 1  
 bartaja4@fjfi.cvut.cz*

V posledním desetiletí bylo intenzivně zkoumáno chování částic o velikosti menší než 1  $\mu\text{m}$ , jejichž vlastnosti jsou dosti odlišné od vlastností velkých částic příslušných prvků nebo sloučenin a velmi silně závisí na velikosti a tvaru. Příkladem může být zvýšená katalytická aktivita<sup>1</sup>, tepelná vodivost<sup>2,3</sup>, snížená teplota tání<sup>4</sup> apod. Jedním ze způsobů přípravy kovových nanočástic je radiační redukce roztoků solí tohoto kovu, kdy oxidující produkty radiolýzy vody (např. OH $\cdot$ ) jsou vychytávány vhodnými scavengery a redukující meziproducty jako H $\cdot$ , e $^-_{aq}$  reagují s kovovými ionty. Aby nedošlo ke koagulaci částic do příliš velkých shluků, přidává se do roztoku povrchově aktivní látka – stabilizátor.

Byly studovány účinky záření gama, urychlených elektronů i UV záření na odvdzdušněné vodné roztoky CuSO<sub>4</sub> o koncentraci 10<sup>-3</sup> mol dm<sup>-3</sup> v 1,28 mol dm<sup>-3</sup> 2-propanolu (scavenger) a/nebo 10<sup>-5</sup> mol dm<sup>-3</sup> PVA (stabilizátor). Jako stabilizační činidlo byla vedle polyvinylalkoholu vyzkoušena také EDTA. Tvorba nanočástic mědi byla sledována spektrofotometricky, čistota a složení vyredukované mědi byly určeny rentgenovou difrakční analýzou.

Při ozáření urychlenými elektrony i gama zářením byl z roztoku obsahujícího zároveň scavenger a stabilizátor připraven fialový koloidní roztok mědi absorbující při vlnové délce 570 nm. Za přístupu kyslíku došlo k velmi rychlému rozpouštění koloidní mědi. Urychlené elektrony díky své vysoké energii způsobily vytvoření malého množství koloidní mědi i v roztoku, který neobsahoval 2-propanol – funkci scavengeru zřejmě za těchto podmínek částečně převzal PVA. Ve filtrátu z ozářených roztoků byla rentgenovou difrakcí potvrzena kovová měď znečištěná oxidy mědi.

**LITERATURA**

1. Rostovshchikova T. N., Smirnov V. V., Kozhevnikov V. M., Yavsin D. A., Zabelin M. A., Yassievich I. N., Gurevich S. A.: *Appl. Catal., A* 296, 70 (2005).
2. Eastman J. A., Choi S. U. S., Li S., Yu W., Thompson L. J.: *Appl. Phys. Lett.* 78, 718 (2001).
3. Xuan Y., Li O.: *Int. J. Heat Fluid Flow* 21, 58 (2000).
4. Dick K., Dhanasekaran T., Zhang Z., Meisel D.: *J. Am. Chem. Soc.* 124, 2312 (2002).

**7P-11**  
**2D PHOTON-ECHO SIGNAL CALCULATIONS**  
**OF PARTIALLY CHARGE-TRANSFER DIMERS**

**VOJTECH SZÖCS<sup>a</sup> and TIBOR PÁLSZEGI<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>*Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina CH2, 842 15, Bratislava,*  
<sup>b</sup>*International Laser Center, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovakia*  
 szocs@fns.uniba.sk

The comparison of Frenkel and charge-transfer exciton contributions to the heterodyne-detected electronic 2D two-pulse photon-echo (2D-2P-PE) signal of coupled dimers has been approached numerically.

Our present study is an enlargement of our recent analytical results<sup>1</sup>, where 2D-2P-PE heterodyne-detected signals of symmetric coupled dimers (SD) have been analyzed. In [1], the one- and two-exciton states of SD are described by local one-excited monomeric MOs based VB configurations ("Frenkel excitons").

For more strongly interacting monomers, also the charge-transfer MO-VB configurations have to be taken into account (see e.g. [2]). As a starting point of our 2D-2P-PE numeric calculations, we have chosen a special case of PTCDA dimer, where the projections of one-exciton MO states into VB contributions are well described<sup>2</sup>.

The VB configurations to the two-exciton states have been chosen as simple as possible: (i) the one-excited local and charge transfer states and (ii) two-excited local contributions. These configurations are dominant in PTCDA-like molecules. For exactness, the problem of the VB description of two-exciton states is based on the exact projection of MO states into VB configurations (see e.g. in ref<sup>3</sup>).

*The work was supported by the the Slovak Ministry of Education (Vega project No. 1/0046/08).*

**REFERENCES**

1. Szöcs V., Pálszegi T., Lukeš V., Sperling J., Milota F., Jakubetz W., Kauffmann H. F.: *J. Chem. Phys.* 124, 124511 (2006).
2. Hoffmann M.: *Frenkel and Charge-Transfer Excitons in Quasi-One-Dimensional Molecular Crystals with Strong Intermolecular Orbital Overlap*, PhD Thesis, Dresden, (2000).
3. Shaik S.: *J. Am. Chem. Soc.* 103, 3692 (1981).

**7P-12**  
**ZPŮSOB STUDIA VLIVU IONIZUJÍCÍHO ZÁŘENÍ**  
**NA AKTIVITU ENZYMŮ**

**TEREZA PAVELKOVÁ, VÁCLAV ČUBA a VILIAM MŮČKA**

*ČVUT v Praze, FJFI, Břehová 7, 115 19 Praha 1*  
 pavelier@fjfi.cvut.cz

Vzhledem k rozšiřujícím se aplikacím radioterapeutických metod nabývá studium vlivu záření na látky přítomné v organismu stále větší význam. V této práci byla studována enzymatická aktivita katalázy a peroxidasy (HRP) po jejich ozáření ionizujícím zářením. Ozáření se provádělo radionuklidovým zdrojem <sup>60</sup>Co Gammacell 220 s dávkovým příkonem 8 Gy/h.

Enzymatická aktivita katalázy byla měřena katalytickým rozkladem peroxidu vodíku za konstantní teploty a tlaku. Tato metoda je již řadu let využívána při studiu vlastností tuhých oxidových, sulfidových a kovových katalyzátorů. Její podstatou je sledování kinetiky rozkladné reakce měřením objemu kyslíku uvolňujícího se během reakce<sup>1</sup>. Měření bylo provedeno tak, že byl do roztoku katalázy ve fosfátovém pufru temperovaného na 37 °C přidán roztok peroxidu vodíku. Po uzavření aparatury byl měřen čas nutný k uvolnění definovaného objemu kyslíku. Postupně byly nalezeny optimální koncentrace katalázy i peroxidu vodíku tak, aby reprodukovatelnost i opakovatelnost výsledků byla co nejlepší. Studium vlivu ionizujícího záření na roztoky katalázy o různé koncentraci potvrdilo, že s rostoucí dávkou v intervalu 4–956 Gy aktivita enzymu klesá. Dále bylo prokázáno, že s rostoucí koncentrací enzymu vliv záření na degradaci katalázy klesá, což je patrné zejména při malých dávkách záření.

Pro měření aktivity peroxidázy byla zavedena standardní metoda využívající UV-VIS spektrofotometrie<sup>2</sup>. K roztoku peroxidázy ozáření dávkami 12–572 Gy záření gama byl přidán 3,3',5,5'-tetramethyl-benzidin (TMB) v acetátovém pufru, peroxid vodíku a po inkubaci kyselina chlorovodíková. Poté byla měřena absorbance roztoku při vlnové délce 450 nm. I zde bylo prokázáno, že navrženou metodikou lze s dostatečnou přesností, reprodukovatelností a opakovatelností stanovit závislost enzymatické aktivity na aplikované dávce záření.

**LITERATURA**

1. Můčka V.: *Radiat. Phys. Chem.* 30, 293 (1987).
2. Kachlíková J.: *Bakalářská práce*. MÚ Brno, 2006.

## 7P-13

## EXPLICITNE KORELOVANÉ R12 METÓDY

STANISLAV KEDŽUCH<sup>a</sup>, JOZEF NOGA<sup>a,b</sup>,  
JÁN ŠIMUNEK<sup>b</sup> a SEIICHIRO TEN-NO<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Ústav anorganickej chémie, Slovenská akadémia vied, Bratislava, <sup>b</sup> Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedská fakulta UK, Bratislava, SR, <sup>c</sup> Graduate School of Information Science, Nagoya University, Japan  
uachksta@savba.sk

V kvantovej chémii je veľmi obmedzujúcim problémom principiálna nemožnosť analytického riešenia Schrödingrovej rovnice pre viacelektrónové systémy. Čiastočným riešením tohto problému je zavedenie aproximácie jedoelektrónového modelu, v ktorom sa elektróny pohybujú v priemernom poli ostatných elektrónov (orbitálna predstava). V skutočnosti elektróny dosiahnu energeticky výhodnejší stav, ako im to umožňuje priemerné pole. Rozdiel medzi skutočnou energiou a energiou jedoelektrónového modelu sa nazýva korelačná energia. Korelačné metódy vylepšujú popis jedoelektrónového modelu zahrnutím Slaterových determinantov zodpovedajúcim excitovaným stavom do rozvoja vlnovej funkcie. Takýto prístup však nedostatočne popisuje interakcie elektrónov pri malých vzdialenostiach (elektrónový hrot<sup>1</sup>), čoho dôsledkom je veľmi pomalá konvergencia konvenčných korelačných metód k presnej hodnote. Už od začiatkov kvantovej chémie je známe, že na korektný popis elektrónového hrotu je potrebné do rozvoja vlnovej funkcie explicitne zahrnúť člen medzielektrónovej vzdialenosti  $-r_{12}$  (cit.<sup>2</sup>). Zahrnutie  $r_{12}$  člena do vlnovej funkcie je metodologicky a výpočtovo náročné najmä kvôli výskytu mnohoelektrónových integrálov, ktorých použitie v reálnych výpočtoch je prakticky nerealizovateľné. Prvá z prakticky použiteľných metód je založená na tzv. R12 prístupe<sup>3</sup>. Tento prístup umožnil implementáciu veľmi presných metód, ktoré sú porovnateľne výpočtovo náročné ako konvenčné korelačné metódy.

V prezentovanej práci rozširujeme R12 prístup o nový variant „C“ (cit.<sup>4</sup>), ktorý nevyžaduje použitie integrálov obsahujúcich komutátor medzi operátorom kinetickej energie a korelačným faktorom. Tieto integrály boli veľmi aproximatívny a súčasne výpočtovo najnáročnejší krok, čo limitovalo použiteľnosť R12 prístupu len na malé systémy. Preto nová R12/C metóda poskytuje presnejšie výsledky, je výpočtovo menej náročná a umožňuje aplikáciu R12 prístupu aj smerom k väčším systémom. V práci sme sa tiež venovali zavedeniu korelačného faktora v exponenciálnom tvare (Slaterov geminál) namiesto doteraz používaného lineárneho faktora, ktorý obsahuje aj vyššie ako len lineárne  $r_{12}$  členy.

## LITERATÚRA

1. Kato T.: Commun. Pure Appl. Math. 10, 151 (1957).
2. Hylleraas E. A.: Z. Phys. 54, 347 (1929).
3. Kutzelnigg W.: Theor. Chim. Acta 68, 445 (1985).
4. Kedžuch S., Milko M., Noga J.: Int. J. Quantum Chem. 105, 929 (2005).

## 7P-14

## MODELOVANIE OPTICKÝCH VLASTNOSTÍ STRIEBORNÝCH NANOČASTÍC

TIBOR PÁLSZEGI<sup>a</sup>, ATTILA GAÁL<sup>b</sup>, IGNÁC BUGÁR<sup>a</sup>, VOJTECH SZÖCS<sup>c</sup>, LENKA FIALOVÁ<sup>d</sup>,  
IGNÁC CAPEK<sup>d</sup>, MIROSLAV MICHALKA<sup>a</sup>  
a FRANTIŠEK UHEREK<sup>a</sup>

<sup>a</sup> International Laser Centre, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, <sup>b</sup> Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Comenius University, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava, <sup>c</sup> Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava 4, <sup>d</sup> Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovakia  
tiborbask@gmail.com

Cieľom našich výpočtov elektrónových procesov vo sférických kovových nanočasticiach striebra je modelovanie dynamiky ich optických vlastností, získateľných pomocou ultrakrátkočasovej pump-probe laserovej optickej spektroskopie<sup>1,2</sup>. Sféricke kovové nanočastice sú obalené surfaktantom, ktoré sa nachádzajú v koloidnom roztoku organického rozpúšťadla. Vo výpočtoch sa uvažuje aj elektrón-elektrónový rozptyl, ale keďže časové rozlíšenie experimentálnej aparatury je 100 fs, sústredíme sa hlavne na elektrón-fonónový rozptyl a na prevod tepla do okolia. Modelovanie časovej zmeny nelineárnej absorpcie bolo uskutočnené pre nanočastice priemerom od 5 do 15 nm, pre rôzne energie laserového pulzu. Počiatočná teplota elektrónov závisí od veľkosti nanočastice, ako aj od priemeru excitujúceho laserového zväzku a má vplyv na tepelnú relaxáciu, teda na procesy s tým spojené. Experimentálne sa získava časová závislosť parametra  $\Delta\tau/\tau$ , kde  $\tau$  reprezentuje transmitanciu, a môže byť vyjadrená pomocou účinného prierezu absorpcie  $\sigma(\omega, T)$  pomocou vzťahu<sup>1,2</sup>

$$\frac{\Delta\tau}{\tau} = -\frac{3}{2\pi a^2} [\sigma(\omega, T) - \sigma(\omega, T_0)]$$

kde  $a$  je priemer častice,  $\omega$  je frekvencia a  $T$  je teplota. Teplotná a frekvenčná závislosť absorbného prierezu je vyjadrená vzťahom

$$\sigma(\omega, T) = s(a) \frac{\gamma(T)/2}{[\omega - \omega_{sp}(T)]^2 + [\gamma(T)/2]^2}$$

kde  $s(a)$  je normalizačný prefaktor závislý od priemeru častice,  $\omega$  je frekvencia,  $\omega_{sp}$  je frekvencia povrchového plazmónu a  $\gamma$  je šírka rezonancie. Teoretické modelovania optických vlastností sférických kovových nanočastíc majú prispieť k porozumeniu dynamike elektrónov v mezoskopických objektoch<sup>3</sup>.

## LITERATÚRA

1. Voisin C., Del Fatti N., Christofilos D., Vallee F.: J. Phys. Chem., B 105, 2264 (2001).
2. Hervieux P. A., Benabbas A., Halte V., Bigot J. Y.: Eur. Phys. J. D 24, 185 (2003).
3. Kreibig U., Vollmer M.: *Optical Properties of Metal clusters*. Springer-Verlag, Berlin 1995.

## 7P-15

STANOVENIE ASOCIAČNÝCH KONŠTÁNT  
SUPRAMOLEKULOVÝCH KOMPLEXOV NA BÁZE  
FLUORESCENČNÝCH FARBÍVMARIÁN MATEJDES<sup>a</sup> a MARIÁN JANEK<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina CH1, 842 15 Bratislava, <sup>b</sup> Technologický inštitút, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 13 Bratislava, Slovenská republika  
matejdes@pobox.sk, marian.janek@savba.sk

Táto práca je venovaná štúdiu podmienok tvorby inkluzívneho komplexu medzi vybranými hosťovskými molekulami ako  $\alpha$ -,  $\beta$ - a  $\gamma$ -cyklodextríny (CD) a stanoveniu rovnovážnych konštánt komplexácie s fluorescenčnými farbivami (napr. kumarín C522) vo vodnom prostredí. Takéto komplexy predstavujú stéricky ohraničené – „confined“ (host/guest) systémy s požadovanými spektrálnymi a fluorescenčnými vlastnosťami<sup>1,2</sup>. V ďalšom kroku sa pripravené komplexy použijú na modifikáciu povrchov vrstevnatých silikátov napr. montmorillonitu, za účelom prípravy funkcionalizovaných nanokompozitných tenkých vrstiev s fluorescenčnými vlastnosťami. Pripravené host/guest komplexy sú študované pomocou fluorescenčnej spektrometrie a tenké vrstvy sa charakterizujú pomocou infračervenej (IČ) a ďalej IČ („terahertzovej“) spektroskopie tak, aby umožnili sledovanie zmien spektier na základe podmienok ich prípravy.

V súlade s literatúrnymi údajmi<sup>3</sup>, zvyšovanie koncentrácie  $\beta$ -cyklodextrínu spôsobilo zvýšenie intenzity fluorescencie kumarínu. Takéto správanie fluorescenčných molekúl je spôsobené tým, že po vzniku inkluzívneho komplexu dochádza z časti, alebo úplne desolvatácii týchto molekúl. Stratou hydratačného obalu sa znižuje miera nežiarivej relaxácie, čím dochádza k zvýšeniu populácie elektrónovo excitovaných stavov, a tým aj k zvýšeniu intenzity fluorescencie. Namerané hodnoty intenzity fluorescencie v závislosti od koncentrácie  $\beta$ -cyklodextrínu sa vyhodnotili pomocou Benesi-Hildebrandovho vzťahu. Pre merania fluorescenčných spektier kumarínu C522 bolo použité excitačné žiarenie o vlnovej dĺžke  $\lambda_{\text{ex}} = 415$  nm. Lineárnou regresiou získaná asociačná konštanta pre inkluzívny komplex kumarín C522 s  $\beta$ -cyklodextrínom vo vodnom prostredí pri laboratórnej teplote 20 °C je  $K_{\text{C522} \cdot \beta\text{-CD}}^{20^\circ\text{C}} = 701,7 \pm 16,8 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1}$ .

Táto práca je podporovaná vedeckou grantovou agentúrou VEGA číslo 1/4457/07.

## LITERATÚRA

1. Angelova A., Ringard-Lefebvre D., Baszkin, A.: J. Colloid Interface Sci. 212, 275 (1999).
2. Martin Del Valle E. M.: Process Biochem. 39, 1033 (2004).
3. Sen P., Roy D., Mondal S. K., Sahu K., Ghosh S., Bhattacharyya K.: J. Phys. Chem., A. 109, 9716 (2005).

## 7P-16

ŠTÚDIUM PRÍPRAVY NANOKOMPOZITOV  
Z „HOST - GUEST“ INTERKALÁTOV KAOLINITU  
A HALLOYZITUTOMÁŠ ZACHER<sup>a</sup> a MARIÁN JANEK<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina CH1, 842 15 Bratislava, <sup>b</sup> Technologický inštitút, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 13 Bratislava, Slovenská republika  
zachy7@gmail.com, marian.janek@savba.sk

Hľadanie nových aplikácií minerálov s neexpandujúcou štruktúrou napríklad kaolinitu a halloyzitu ako prekurzorov pre ekonomicky rentabilné organicko-anorganické nanomateriály vyžaduje ich cieľnú chemickú modifikáciu ktorá by významne vylepšila funkčnosť týchto materiálov. V tejto štúdiu je pojednávané o príprave nového organicko – anorganického hybridného nanomateriálu na báze kaolinitu pripraveného interkaláciou Kumarínu C522 prostredníctvom guest – displacement reakcie použitím host – guest interkalátu s dimetylsulfoxidom (DMSO)<sup>1</sup>. Pripravený materiál bol charakterizovaný metódami ako röntgenová difrakcia (XRD), infračervená spektroskopia s Fourierovou transformáciou (FTIR) a termálnou analýzou (TA)<sup>2</sup>. Morfológia častíc bola pozorovaná rastrovacím elektrónovým mikroskopom (SEM).

Z porovnania IČ spektier jednotlivých interkalátov vidno, že v dôsledku host-guest a guest-displacement reakcií došlo v kaolinite k zmene intenzít a polôh AlAlOH valenčných vibračných pásov najmä v oblasti 3700-3600  $\text{cm}^{-1}$ , čo tiež indikuje interakciu Kumarínu C522 s povrchovými OH skupinami kaolinitu. Detekcia absorbných pásov sice potvrdzuje prítomnosť organických molekúl na povrchu anorganickej tuhej fázy avšak jej prítomnosť v medzivrství jednoznačne potvrdzujú len röntgenové difrakčné záznamy z ktorých vyplýva, že došlo k zmene pozície prvého bazálneho reflexu kaolinitu na základe interkalácie s DMSO a následne s Kumarínom C522. Vzdialenosť bazálnych rovín štartovacieho kaolinitu vzrástla interkaláciou DMSO z 0,72 nm na 1,12 nm, čím je jednoznačne potvrdený stup molekúl DMSO do medzivrstvia. Difrakčné záznamy ukazujú, že sa dosiahla približne 100% interkalácia kaolinitu s DMSO. Rovnako sa potvrdila interkalovateľnosť kumarínu C522 pričom hodnota bazálnej vzdialenosti 0,84 nm indikuje pravdepodobne planárne usporiadanie molekúl v medzivrství kaolinitu.

Táto práca je podporovaná vedeckou grantovou agentúrou VEGA číslo 1/4457/07.

## LITERATÚRA

1. Letaief S., Detellier C.: Canadian J. Chem.-revue Canadienne de Chimie 86, 1 (2008).
2. Janek M., Emmerich K., Heissler S. and Nüesch R.: Chem. Mater. 19, 684 (2007).



## 7P-17

**INFLUENCING OF PROPERTIES OF MIXED OXIDE CATALYSTS USING HYDROGEN REDUCTION****DANIEL KOBLIHA, MILAN POSPÍŠIL, VÁCLAV ČUBA, and VILIAM MÚČKA***CTU in Prague, Faculty of Nuclear Science and Physical Engineering, Břehová 7, 115 19 Prague 1  
kobliha@fffi.cvut.cz*

The catalytic activity and selected physico-chemical properties of mixed oxide catalysts were studied. Hydrogen reduction was used as topochemical reaction to study chemical properties and reactivity of individual samples.

Set of NiO-TiO<sub>2</sub> catalysts containing variable amount of both components were prepared; the alcoholic solution of tetra-*N*-butyl orthotitanate was hydrolyzed by aqueous solution of ammonium nitrate. Precipitated titanium nitrate was carefully rinsed and dried. Subsequently, the precipitate was mixed with HNO<sub>3</sub> solution containing various amounts of nickel nitrate and aqueous solution of potassium hydroxide was slowly added into the mixture. Precipitate consisting of both nickel hydroxide and titanium hydroxide was formed. The solid mixture of hydroxides was washed, dried, carefully homogenized by grinding in agate mortar and calcinated for 5 hours at temperature 500 °C.

RTG diffraction measurements revealed crystalline structure of both oxides in the samples with different composition. Obtained data suggest, that used preparative method does not lead to formation of solid solution. Dependence of specific surface areas on sample composition is strongly non-monotonous and non-additive. This evidence suggests that prepared set of mixed catalysts has different properties than their simple mechanical mixture.

The non-monotonous dependence of the maximum reduction degree on the composition of the samples provides evidence that TiO<sub>2</sub> oxide significantly affects the reduction rate of the nickel oxide.

## REFERENCES

1. Pospíšil M., Cabicar J.: Collect. Czech. Chem. Commun. 39, 3056 (1974).
2. Pospíšil M., Čuba V., Poláková D.: J. Therm. Anal. Cal. 75, 35 (2004).
3. Pospíšil M., Hošek R., Silber R.: J. Therm. Anal. Cal. 66, 449 (2001).

## 7P-18

**SYNTEZA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA NANOČÁSTIC STŘÍBRA****DANA HŘÍVOVÁ***RG a ZŠ města Prostějova, Studentská 2, 796 40 Prostějov  
Astica.d.h@seznam.cz*

Z důvodu tvorby rezistence bakterií vůči antibiotikům v posledních několika letech opětovně narůstá zájem

o antibakteriální účinky stříbra především v oblasti lékařství. V současné době se však stříbro spíše než v iontové formě užívá ve formě nanočástic stříbra. Přestože je antibakteriální aktivita nanočástic stříbra prostudovaná poměrně široce, doposud nebyla jednoznačně zodpovězena otázka toxicity stříbrných nanočástic vůči složitějším eukaryotickým organismům.

Jedním z modelových eukaryotických organismů často používaných k testování toxicity je treпка velká (*Paramecium cadatum*) z důvodu nenáročného chovu a zároveň slouží jako bioindikátor znečištění vod. Proto byl pro určení míry toxicity nanočástic stříbra vybrán právě tento organismus.

Toxicita nanočástic stříbra byla testována na základní disperzi stříbra s pH 11,5. Následně pak byla testována upravená disperze stříbra s pH 8,1. Nakonec byl posuzován vliv toxických účinků stabilizovaných částic stříbra bílkovinou kaseinem. Z provedených experimentů byla určena toxická koncentrace nanočástic stříbra 3 mg L<sup>-1</sup> pro všechny typy testovaných disperzí stříbra. Avšak podle doby úhynu 50 % sledovaných organismů vykazovala nejvyšší toxicitu disperze stříbra s pH 11,5. Nanočástice stříbra obsažené v disperzi s pH 8,1 byly v porovnání s původní disperzí méně toxické, jelikož doby úhynu 50 % organismů byly delší. Nejdelší doby úhynu organismů byly zaznamenány pro nanočástice stříbra stabilizované kaseinem.

## 7P-19

**JE MOŽNÉ ZPŘESNIT EMPIRICKÝ POTENCIÁL NAHRAZENÍM MOCNINNÉ FUNKCE PRO REPULZI EXPONENCIÁLOU?****PAVEL POLCR<sup>a</sup> a PETR JUREČKA<sup>a,b</sup>***<sup>a</sup> Ústav organické chemie a biochemie, v.v.i. a Centrum biomolekul a komplexních molekulových systémů, Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6, <sup>b</sup> Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc  
pavel.polcr@seznam.cz*

Molekulová mechanika je jedním z nejsilnějších nástrojů, které má v současné době výpočetní chemik k dispozici. K molekulárně dynamickým simulacím se dnes používá řada komerčních balíků a jedním z nejoblíbenějších je program AMBER<sup>1</sup>. Přes jeho kvalitu se ale ukazuje, že výsledky mohou být někdy negativně ovlivněny tvarem funkce použité pro popis mezimolekulové repulze – Lennard-Jonesovým potenciálem. Právě možností nahrazení Lennard-Jonesova vztahu pro repulzi přesnější exponenciální funkcí jsme se zabývali v této práci. Parametry pro exponenciální repulzi byly získány jednoduchou konverzí z původních van der Waalsových parametrů pole Cornell a spol.<sup>2</sup>. Modifikované pole bylo testováno na vybraných geometriích cytosin dimeru, kde se ukázalo, že s malou úpravou parametrizace lze dosáhnout omezení nadměrně odpuzivých interakcí v příliš blízkých geometriích. Pokusili jsme se také navrhnout vhodné exponenciální parametry pro nejpoužívanější modely vody, TIP3P a SPC/E.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT č. 2E06029 "STM-Morava" a grantu MSM 6198959216.*

LITERATURA

1. Case D. A., Darden T. A., Cheatham III. T. E., Simmerling C. L., Wang J., Duke R. E., Luo R., Merz K. M., Pearlman D. A., Crowley M., Walker R. C., Zhang W., Wang B., Hayik S., Roitberg A., Seabra G., Wong K. F., Paesani F., Wu X., Brozell S., Tsui V., Gohlke H., Yang L., Tan C., Mongan J., Hornak V., Cui G., Beroza P., Mathews D. H., Schafmeister C., Ross W. S., Kollman P. A.: *AMBER 9*, University of California, San Francisco 2006.
2. Cornell W. D., Cieplak P., Bayly C. I., Gould I. R., Merz K. M., Jr., Ferguson D. M., Spellmeyer D. C., Fox T., Caldwell J. W., Kollman P. A.: *J. Am. Chem. Soc.* 117, 5197 (1995).