



# **70. SJEZD ČESKÝCH A SLOVENSKÝCH CHEMICKÝCH SPOLEČNOSTÍ**

**ZLÍN**

**9. – 12. září 2018**

Pořádající organizace:

**Česká společnost chemická  
Slovenská chemická spoločnosť**

Sborník příspěvků

## ORGANIZAČNÍ VÝBOR SJEZDU

doc. Ing. Stanislav Kafka, CSc. (předseda organizačního výboru)  
prof. Ing. Jan John, CSc. (místopředseda organizačního výboru)  
prof. Ing. Peter Šimon, DrSc. (místopředseda organizačního výboru)  
RNDr. Helena Pokorná (tajemnice)  
prof. RNDr. Jitka Ulrichová, CSc.  
prof. RNDr. Pavel Drašar, DSc.  
prof. Ing. Petra Šulcová, Ph.D.  
prof. RNDr. Vojtěch Adam, Ph.D.  
doc. Ing. Tomáš Navrátil, PhD.  
doc. RNDr. Václav Slovák, Ph.D.  
prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.  
Ing. Alena Vlková  
Ing. Radmila Řápková

## VĚDECKÝ VÝBOR SJEZDU

prof. Ing. Antonín Klásek, DrSc. (předseda vědeckého výboru)  
doc. Mgr. Robert Vícha, Ph.D. (místopředseda vědeckého výboru)  
prof. RNDr. Jan Hlaváč, Ph.D.  
prof. Ing. Vladimír Šindelář, Ph.D.  
prof. Ing. Petra Šulcová, Ph.D.  
RNDr. Pavel Zachař, CSc.  
prof. Ing. Martin Zatloukal, Ph.D. DSc.  
prof. RNDr. Hana Čtrnáctová, CSc.  
prof. RNDr. Ivan Holoubek, CSc.  
doc. RNDr. Miroslav Fojta, CSc.  
doc. Ing. Tomáš Navrátil, PhD.  
doc. Ing. Jaromír Lederer, CSc.  
prof. Ing. Vladimír Sedlařík, Ph.D.  
doc. Ing. et Ing. Ivo Kuřitka, Ph.D. et Ph.D.  
prof. Ing. Tomáš Wágner, DrSc.  
prof. Ing. František Buňka, Ph.D.

## MÍSTNÍ ORGANIZAČNÍ VÝBOR SJEZDU

Ing. Michal Rouchal, Ph.D. (předseda místního organizačního výboru)  
Ing. Zdeňka Prucková, Ph.D.  
Ing. Roman Kimmel, Ph.D.  
Ing. Michal Kovář

## SEKCE SJEZDU A JEJICH GARANTI

- 1. Anorganická chemie**  
prof. Ing. Tomáš Wágner, DrSc.
- 2. Organická chemie**  
prof. RNDr. Jan Hlaváč, Ph.D.
- 3. Analytická chemie**  
doc. RNDr. Miroslav Fojta, CSc.
- 4. Elektrochemie a další oblasti fyzikální chemie**  
doc. Ing. Tomáš Navrátil, Ph.D.
- 5. Supramoleculár chemistry**  
prof. Ing. Vladimír Šindelář, Ph.D.
- 6. Chemie životního prostředí**  
prof. RNDr. Ivan Holoubek, CSc.
- 7. Potravinářská a agrikulturní chemie**  
prof. Ing. František Buňka, Ph.D.
- 8. Termická analýza**  
prof. Ing. Petra Šulcová, Ph.D.
- 9. Polymery, biomateriály a biokompozity**  
prof. Ing. Vladimír Sedlařík, Ph.D.
- 10. Nanotechnologie a pokročilé materiály**  
doc. Ing. et Ing. Ivo Kuřitka, Ph.D. et Ph.D.
- 11. Reologie**  
prof. Ing. Martin Zatloukal, Ph.D. DSc.
- 12. Chemické vzdělávání a historie chemie**  
prof. RNDr. Hana Čtrnáctová, CSc.  
RNDr. Pavel Zachař, CSc.
- 13. Průmyslová chemie**  
doc. Ing. Jaromír Lederer, CSc.

## **Vážení a milí účastníci 70. sjezdu chemiků, vážení a milí čtenáři,**

Zlín se v roce 2018 stává dějištěm sjezdu chemiků již potřetí. Poprvé to bylo v roce 1958, kdy se v tehdejším Gottwaldově konal 18. sjezd Československé společnosti chemické, a podruhé v roce 1997, kdy se ve Zlíně uskutečnil 50. sjezd chemických společností. Zatímco už jen stěží najdeme pamětníka 18. sjezdu, z pěti stovek účastníků jubilejního 50. sjezdu se někteří přihlásili i k účasti na Sjezdu v pořadí sedmdesátém, pro jehož uskutečnění poskytla své prostory Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně (UTB).

Shodou okolností na 70. sjezd chemiků připadl rok stého výročí zřízení samostatného československého státu. Nejvýznamnější události v historii českých zemí a Slovenska se staly v letech s osmičkou na konci. V té souvislosti se nabízí uvést některé významné události z historie české a slovenské chemie a společenství českých a slovenských chemiků, ke kterým došlo v „osmičkových“ letech.

V roce 1828 profesor pražské Karlo-Ferdinandovy univerzity Jan Svatopluk Presl, tvůrce českého názvosloví v řadě oborů přírodovědy včetně chemie, vydal první díl spisu *Lučba čili chemie zkusná*. Všechny Preslovy názvoslovné návrhy se neujaly, ale položil základy rozlišování oxidačního čísla pomocí přípon a stále používáme některé názvy prvků, které vytvořil (například vodík, draslík, vápník, uhlík, kyslík). Spolkem českých chemiků, který na konci 19. století silně zasahoval do řady zemských hospodářských otázek, bylo zřízeno několik komisí pro řešení speciálních problémů, mezi nimi v roce 1888 komise pro jednotné metody zkoušení strojených hnojiv a v roce 1898 komise celní. V roce 1888 na České vysoké škole technické profesor Preis zavedl cvičení ve stechiometrických výpočtech, které dodnes jako sůl potřebuje velká část studentů na začátku studia chemie. V listopadu 1918, jen necelý měsíc po vyhlášení československého státu, bylo Českou chemickou společností podáno Národnímu shromáždění podrobně vypracované memorandum navrhuující vybudování chemické sekce v ministerstvu průmyslu, která by jako ústředí chemického průmyslu zajišťovala jeho žádoucí rozvoj. Krátce po vzniku Československa také vzešel z řad členů návrh, aby byly změněny stanovy Společnosti tak, aby působnost Společnosti byla vyznačena pro celou republiku a nikoliv jen pro české země. Společnost v roce 1918 měla 623 členy. V roce 1928 byla zahájena reorganizace Československé společnosti chemické, jejíž ústředí bylo v Praze. Bylo rozhodnuto, že Společnost se bude nadále skládat ze tří poboček – české, moravsko-slezské a slovensko-podkarpatskoruské se sídly v Praze, Brně a Bratislavě. To se uskutečnilo v roce 1929. Založením pobočky v Bratislavě začíná historie dnešní Slovenské chemické společnosti. Na 24. – 26. září 1938 byl připravován sjezd Československé společnosti chemické, který se měl uskutečnit v Bratislavě, avšak známé politické události v té době jeho konání znemožnily.

Odbornou náplní 70. sjezdu chemiků je šest plenárních přednášek a jednání ve 13 sekcích, v jehož programu je více než 120 ústních sdělení a prezentace více než 100 posterů. Do uvedeného počtu ústních sdělení jsou zahrnuta představení výsledků prací mladých chemiků v soutěži o Cenu Shimadzu, která proběhne tradičně v rámci sekce Analytická chemie (10 prací) a v soutěži Metrohm Young Chemist Award zařazené do programu sekce Elektrochemie a další oblasti fyzikální chemie (9 prací). Další mladí aktivní účastníci sjezdu budou soutěžit o Cenu rektora UTB za nejlepší přednášku a o Cenu děkana Fakulty technologické UTB za nejlepší poster. Na Sjezdu proběhne také setkání mladých českých a slovenských chemiků, na němž se představí Sekce mladých chemiků pod záštitou České společnosti chemické a Slovenské chemické společnosti.

70. sjezd je svého druhu také přípravou na rok 2019, který vyhlásila UNESCO Mezinárodním rokem periodické soustavy chemických prvků (blíže viz <https://www.iypt2019.org>). Pro účastníky a všechny členy chemických společností by měl být výzvou k zamyšlení, jak více popularizovat chemii v široké veřejnosti.

Věřím, že 70. sjezd chemiků splní očekávání jeho účastníků, ať už jde o inspirace pro další vědeckou, případně pedagogickou, práci, příjemná setkání se známými kolegy a přáteli, seznámení s novými kolegy a vytvoření nových přátelských vztahů, či obecně příjemný pobyt. Všem čtenářům tohoto čísla časopisu Czech Chemical Society Symposium Series přeji, aby jim posloužilo jako cenný zdroj informací a inspirací pro jejich tvořivou práci.

Stanislav Kafka



## PL-01 ATOMIC CATALYSTS

JIRÍ JANATA

School of Chemistry and Biochemistry, Georgia Institute of Technology, Atlanta, Georgia, 30332-0400, U. S. A.  
jiri.janata@chemistry.gatech.edu

To prepare materials with theoretically predicted properties has been a dream of scientists since the creation of materials science as a separate discipline. Such materials would find applications in catalysis and in rational design of selectivity of chemical sensors. Of particular interest are precious metals. It is known that their behavior is dictated not only by their chemical properties but also by their size. That has been the overarching goal of the modern materials science – the *nanomaterials*. When they are created by the *top-down* approach, the discussion is focused on their size, which leads to a logical division between properties of bulk and surface atoms in the nanoparticle. However, when the size of a nanoparticle reaches only a few atoms that distinction is no longer valid. This is where classical physics crosses over to quantum physics and individual electronic structures of atoms must be taken into account. It was experimentally demonstrated that coinage metal clusters show distinct odd-even oscillation patterns of the highest occupied molecular orbital (HOMO) level when the number of Au cluster atoms is below 10 (ref.<sup>1</sup>) as shown in Fig. 1.

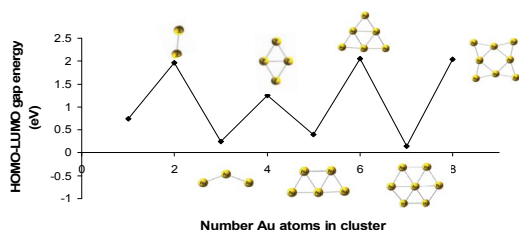


Fig. 1. Quantized „Odd – Even“ effect observed in atomic gold clusters

A cyclic and scalable way of depositing atom-by-atom is necessary. Atomic layer deposition is a widely used vacuum-based technology to prepare thin films of various compositions with Ångström precision based on a cyclic reaction scheme. However, the random nature of the precursor-surface interaction leads to an inevitable cluster or particle distribution, therefore no control on atomicity can be achieved. Ideally, one must therefore find a substrate with isolated specific sites that feature a high affinity towards metal precursors. In that case, the excess precursor could be removed, the bound precursor complex could be reduced, and the specific site could be reactivated for the next atom deposition cycle. Such a site was found to be the protonated imine site ( $pK_a=5.5$ ) of the conjugated polymer polyaniline (PANI) which shows an extraordinary affinity on the order  $K_{eq}=10^{10}$  with metal halide anions<sup>2</sup>. Therefore, aqueous acidic solutions containing metal halide anions can be used to specifically attach the latter to such imine bonds. A rinsing step can then remove the unbound metal halide anions and

a reducing agent can be used to form elemental metal. *The key point here is that PANI at such conditions will be in the conducting emeraldine salt state and act as a reducing agent for the metal halide itself*<sup>3</sup>. As a result, the exposure to metal halide anions will result in an uncontrolled and spontaneous reduction resulting in the formation of metal nanoparticles. The problem of spontaneous reduction was solved by *maintaining a potential of +0.8 V (vs. Ag/AgCl/1M KCl//) at the PANI film throughout the first half cycle (Fig. 2, Steps I and II)*<sup>4</sup>. In this way, the PANI emeraldine salt is oxidized to pernigraniline salt form, which cannot reduce the bound metal halide anions. After removal of excess precursor anions from the solution (Step III), the reduction can be simply carried out by relaxing the potential applied to PANI back to  $-0.2$  V at which point the bound precursor anion is reduced to one metal atom (Step IV). Thus, the simultaneous control of composition of the solution and the potential of the PANI matrix are the key elements of this process, as is shown in Fig. 2 for the specific case of Au atom-by-atom deposition.

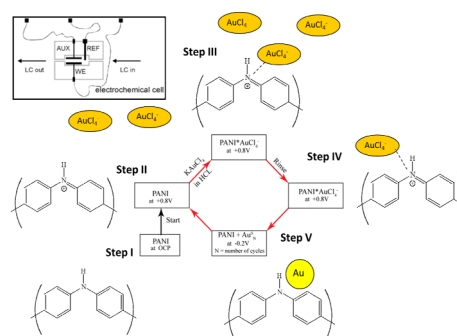


Fig. 2. Cyclic deposition of gold atoms in polyaniline. Insert shows potential control of the PANI film

In the general formula of the PANI\* ( $M_mN_n$ ) isolation matrix M and N are metals and m and n are the numbers of individual atoms<sup>5</sup>. Up to seven atoms ( $m+n \leq 7$ ) have been incorporated at specific PANI sites, resulting in quantized electrocatalytic behavior. Selective electrooxidation of lower aliphatic alcohols on Pt electrodes coated with such materials has been demonstrated<sup>6,7</sup>.

## REFERENCES

- Taylor K. J., Pettiettehall C. L., Cheshnovsky O., Smalley R. E.: *J. Chem. Phys.* **96**, 3319 (1992).
- Hatchett D. W., Josowicz M., Janata J., Baer D. R.: *Chem. Mater.* **11**, 2989 (1999).
- Saheb A., Smith J. A., Josowicz M., Janata J., Baer D. R., Engelhard M. H.: *J. Electroanal. Chem.* **621**, 238 (2008).
- Jonke A. P., Josowicz M., Janata J., Engelhard M. H.: *J. Electrochem. Soc.* **157**, P83 (2010).
- Jonke A. P., Josowicz M., Janata J.: *Catal. Lett.* **143**, 1261 (2013).
- Jonke A. P., Steeb J. L., Josowicz M., Janata J.: *Catal. Lett.* **143**, 531 (2013).
- Schwartz I. T., Jonke A. P., Josowicz M., Janata J.: *Catal. Lett.* **143**, 777 (2013).

**PL-02****METABOLOMIKA – NOVÁ, EFEKTIVNÍ STRATEGIE PRO HODNOCENÍ KVALITY POTRAVIN A OCHRANU ZDRAVÍ POPULACE****JANA HAJŠLOVÁ, VOJTĚCH HRBEK, VÍT KOSEK, KAMILA HŮRKOVÁ, JANA PULKRABOVÁ**

*Ústav analýzy potravin a výživy, Fakulta potravinářské a biochemické technologie, VŠCHT Praha, Technická 3, 166 28 Praha 6, Česká republika  
jana.hajslova@vscht.cz*

Dynamický rozvoj moderních instrumentálních technik se promítá i do zásadních změn přístupů k hodnocení kvality potravin, a to nejen pokud jde o zastoupení nutričně významných složek, ale také ve vztahu k jejich bezpečnosti a autenticitě. Obdobně lze potenciál současných technik aplikovat při hodnocení vlivů různých faktorů, jako je skladba diety či environmentálních (např. expozici kontaminantům) na metabolické pochody v živých organismech, které se promítají do složení biologických matic. Namísto dříve rutinně využívané 'cílové analýzy', která se zaměřovala pouze na sledování vybraných parametrů, se dnes v rostoucí míře uplatňuje necílový screening, který umožňuje komplexnější charakterizaci vyšetřované matrice, aniž by byla uplatněna nějaká a priori hypotéza, pokud jde o její složení. Na Ústavu analýzy potravin a výživy VŠCHT byla realizována v posledním desetiletí řada studií využívajících pro metabolický 'fingerprinting' či profilování různé instrumentální platformy sestávající z ultraúčinné chromatografie, plynové, kapalinové či superkritické fluidní (HRGC, UHPLC, SFC) ve spojení s tandemovou vysokorozlišovací spektrometrií (HRMS/MS). Pro další zvýšení rozlišení analytů nacházejících se v komplexních směsích je využívána iontová mobilita (IM). Je nutné zdůraznit, že významnou roli při interpretaci (velmi objemných) generovaných dat hrají sofistikované statistické metody multivariační analýzy. V rámci prezentace budou uvedeny příklady různých případových studií zaměřených na (i) hodnocení autenticity cenných koření a alkoholických nápojů; (ii) kvality tepelně namáhaných olejů či biopotravin; (iii) změny lipidomu plazmy při expozici environmentálním kontaminantům. Diskutovány budou i limitující aspekty využívaných analytických strategií a budoucí trendy.

**PL-03****DESORPČNÍ NANOELEKTROSPREJ – VÝVOJ IONTOVÉHO ZDROJE PRO HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRII****KAREL LEMR**

*Katedra analytické chemie-RCPTM, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká republika  
karel.lemr@upol.cz*

Desorpční nanoelektrosprej (desorption nanoelectrospray, nanoDESI) se řadí k ambientním ionizačním

technikám. Jejich éra započala v roce 2004, kdy byl popsán desorpční elektrosprej (desorption electrospray ionization, DESI)<sup>1</sup>. V roce 2005 následovala další z dnes rozšířených technik přímá analýza v reálném čase (direct analysis in real time, DART)<sup>2</sup>. Ambientní ionizační techniky jsou charakterizovány jako postupy ionizace, u nichž se neprovádí žádná nebo pouze jen velmi omezená předúprava vzorku. Přesněji zpracování vzorku spolu s ionizací probíhá v jednom analytickém kroku, což zjednodušuje pracovní postup. Dle zvolené techniky jsou látky ze vzorku bezprostředně před ionizací uvolňovány extrakcí kapalinou, tepelnou popř. chemickou desorpčí nebo laserovou ablací. Často se tak děje z dobře definovaného místa vzorku a lze získat obraz rozložení látek na analyzovaném povrchu. Samotná ionizace zahrnuje procesy analogické dějům v elektrospreji nebo při chemické ionizaci za atmosférického tlaku<sup>3</sup>. Možnosti ambientních ionizačních technik byly demonstrovány na řadě aplikací. Jako příklad lze zmínit forenzní a bezpečnostní aplikace při odhalování drog nebo při detekci výbušnin či chemických bojových látek<sup>4,5</sup>. Zajímavé je zobrazování otisků prstů vykreslením signálu drog<sup>4</sup> nebo hmotnostně spektrometrické zobrazování řezů tkání<sup>6</sup>. Ambientní ionizační techniky našly uplatnění při analýze jednotlivých buněk<sup>7</sup> a v mnoha dalších oblastech.

Zmíněný desorpční nanoelektrosprej byl vyvinut v naší laboratoři v roce 2006 a první výsledky byly publikovány v roce následujícím<sup>8</sup>. Zdroj využívá sprejovací kapiláru s vnitřním průměrem cca 2 μm a lze jej považovat za miniaturizaci desorpčního elektrospreje, u kterého se využívá kapilár s průměrem v desítkách mikrometrů. Rozdíly mezi zmíněnými iontovými zdroji jsou ale zásadnější. Desorpce v případě nanoDESI není podporována zmlžujícím plynem, který je považován za nezbytný pro úspěšnou analýzu pomocí DESI. Menší průtok sprejovací kapaliny u nanoDESI oproti DESI významně snižuje riziko smývání vzorku z analyzovaného povrchu. U nanoDESI je také desorbováno méně vzorku, což ale klade větší nároky na citlivost měření a může být limitující pro malé obsahy analytů. Samotný jeho technický vývoj musel překonat řadu obtíží, jako byla v počátcích značná náročnost na dovednosti pracovníka související s nastavením zdroje. V průběhu let byla konstrukce zdroje vylepšována, až byla vyrobena verze umožňující jeho spojení s hmotnostním spektrometrem s vysokou rozlišovací schopností a provádění experimentů hmotnostně spektrometrického zobrazování<sup>9</sup>. Nedílnou součástí vývoje byla charakterizace nanoDESI. Ukázalo se, že má značnou toleranci k zasolení vzorků podobně jako DESI<sup>10</sup>. Povrchové rozlišení se pohybuje v desítkách mikrometrů, je lepší nebo srovnatelné s hodnotami uváděnými pro DESI<sup>9</sup>. V poslední době se vývoj zdroje soustředí na zlepšení citlivosti měření. Úpravou komerčního vstupu do hmotnostního spektrometru (připojení pomocného vakuového čerpadla) bylo dosaženo řádového zlepšení odezvy.

První aplikace nanoDESI se týkala analýzy farmaceutického přípravku. Kombinací nanoDESI s kinetickou metodou bylo možné prokázat přítomnost D-efedrinu v Mukoseptonexu E<sup>8</sup>. Následně byl podobný přístup úspěšně použit při analýze optických izomerů léčiv v kapce krve<sup>11</sup>. Pro odhalování pančování červeného vína (vylepšování barvy) lze pomocí nanoDESI sledovat přítomnost anthokyaninů, které nejsou obsažené v révě vinné.

Pozorované látky potvrzovaly přidavek extraktu z bezinek<sup>12</sup>. K dalším aplikacím patří analýza drog nebo tablet. Na vhodný povrch je vždy nanášeno pouze několik mikrolitrů vzorku případně jeho suspenze.

Během vývoje nanoDESI byla zlepšena opakovatelnost měření, zjednodušeno jeho ovládání a ukázána jeho použitelnost pro rychlou analýzu řady vzorků. Slibné je rovněž dosahované povrchové rozlišení a nabízí se tak jeho využití v hmotnostně spektrometrickém zobrazování. Pro tento účel je zásadní technický vývoj realizovaný v poslední době, jehož cílem je dále zlepšit citlivost měření a zajistit kompatibilitu iontového zdroje s různými typy hmotnostních spektrometrů.

*Poděkování patří všem kolegům, kteří se v průběhu času podíleli na vývoji, testování a aplikacích desorpčního nanoelektrospreje. V posledním období byl výzkum podpořen Grantovou agenturou ČR (16-20229S) a MŠMT ČR (LO1305).*

#### LITERATURA

1. Takáts Z., Wiseman J. M., Gologan B., Cooks R. G.: *Science* 306, 471 (2004).
2. Cody R. B., Laramée J. A., Durst H. D.: *Anal. Chem.* 77, 2297 (2005).
3. Venter A. R., Douglass K. A., Shelley J. T., Hasman G., Jr., Honarvar E.: *Anal. Chem.* 86, 233 (2014).
4. Hoffmann W. D., Jackson G. P.: *Annual Rev. Anal. Chem.* 8, 419 (2015).
5. Pavlovich M. J., Musselman B., Hall A. B.: *Mass Spectrom. Rev.* 37, 171 (2018).
6. Wu C., Dill A. L., Eberlin L. S., Cooks R. G., Ifa D. R.: *Mass Spectrom. Rev.* 32, 218 (2013).
7. Yang Y., Huang Y., Wu J., Liu N., Deng J., Luan T.: *Trac-Trends Anal. Chem.* 90, 14 (2017).
8. Ranc V., Havlíček V., Bednář P., Lemr K.: *Chem. Listy* 101, 524 (2007).
9. Hartmanová L., Lorencová I., Volný M., Fryčák P., Havlíček V., Chmelíčková H., Ingr T., Lemr K.: *Analyst* 141, 2150 (2016).
10. Hartmanová L., Fryčák P., Soral M., Tureček F., Havlíček V., Lemr K.: *J. Mass Spectrom.* 49, 750 (2014).
11. Ranc V., Havlíček V., Bednář P., Lemr K.: *Eur. J. Mass Spectrom.* 14, 411 (2008).
12. Hartmanová L., Ranc V., Papoušková B., Bednář P., Havlíček V., Lemr K.: *J. Chromatogr. A* 1217, 4223 (2010).

#### PL-04

#### UHLÍKOVÉ NANOSTRUKTURY PRO POKROČILÉ BIOMEDICÍNSKÉ, ENVIRONMENTÁLNÍ A MAGNETICKÉ APLIKACE

#### RADEK ZBOŘIL, MICHAL OTYEPKA

*Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů (RCPTM), Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 27, Olomouc, 783 71, Česká republika.  
radek.zboril@upol.cz*

Uhlíkové nanostruktury zahrnují široké spektrum materiálů včetně nízkodimenzionálních struktur, jako jsou fuleren a uhlíkové kvantové tečky (0D), uhlíkové nanotrubičky (1D) či grafen a jeho deriváty (2D), které vykazují řadu výjimečných elektrických, optických, magnetických, povrchových a mechanických vlastností<sup>1</sup>. Tyto mohou být vhodně řízeny kovalentní i nekovalentní chemickou funkcionalizací směrem k aplikacím v medicíně, životním prostředí, senzorce či průmyslových technologiích<sup>2</sup>.

Uhlíkové kvantové tečky (CDs) jsou nanoskopické objekty hmoty, obvykle s grafitickým jádrem nesoucím různé funkční skupiny na povrchu dle použité syntézy. Oproti „klasickým“ kvantovým tečkám na bázi chalkogenidů kovů (CdSe, CdTe) se jedná o netoxické a biokompatibilní materiály s unikátním mechanismem vylučování z organismu. Jejich optické vlastnosti lze navíc ladit prostřednictvím dopace ve struktuře grafitického jádra nebo funkcionalizací vhodnými povrchovými funkčními skupinami<sup>3</sup>. CDs tak nabízí široké uplatnění například při značení buněk, měření teploty v živých buňkách (nanotermometrie) nebo ve fototerminální terapii<sup>4</sup>.

Podobně jako v případě CDs, také vlastnosti a aplikace „nobelovského“ 2D materiálu – grafenu – jsou výrazně závislé na jeho chemické funkcionalizaci. Například magnetické vlastnosti mohou být řízeny prostřednictvím vhodných dopantů (N, S), přičemž koncentrace a typ dopantu zásadně ovlivňují výsledné magnetické chování<sup>5</sup>. Dusíkem dopovaný grafen dovoluje také kontrolovat elektronické vlastnosti a indukovat spinové přechody v jednoduchých planárních molekulách pomocí nekovalentní interakce<sup>6</sup>. Tím se otevírá značný prostor v oblasti molekulární elektroniky, neboť doposud se k indukci spinových přechodů používají převážně vnější stimuly, jako je teplota, světlo, elektrické nebo magnetické pole.

Samotný grafen je chemicky značně inertní materiál odolný vůči kovalentní funkcionalizaci. Velký prostor pro kontrolovatelnou chemickou úpravu se otevřel až s objevem fluorografenu (grafen fluoridu, GF)<sup>7</sup>, prvního stechiometrického derivátu grafenu, který je současně nejtenčím známým izolantem. Přestože byl GF po svém objevu považován za chemický analog teflonu s vysokou chemickou stabilitou, kovalentní C-F vazba ve struktuře GF se ukázala být překvapivě reaktivní, umožňující ukotvení různých funkčních skupin skrze nukleofilní substituci<sup>8</sup>. Použití vhodných rozpouštědel navíc dovoluje kineticky řídit i proces defluorace<sup>8</sup>. Tímto způsobem lze syntetizovat širokou škálu chemických derivátů grafenu s definovaným složením a vlastnostmi.

Komplexní chemie fluorografenu dovoluje připravit například thiofluorografen, který funguje jako vysoce citlivý elektrochemický sensor DNA<sup>9</sup>. Jednoduchá reakce GF s kyanidem sodným v prostředí dimethylformamidu vede k tvorbě kyanografenu, který lze po následné kyselé hydrolyze transformovat v unikátní dvoudimenzionální karboxylovou kyselinu, tzv. grafenovou kyselinu<sup>10</sup>. Tento karboxy-derivát grafenu se skutečně chová jako běžná organická kyselina s  $pK_A = 5,2$ , která navíc vykazuje exceletní biokompatibilitu a vysokou koloidní stabilitu při pH nad  $pK_A$ . V kombinaci se zajímavými elektrickými vlastnostmi a mimořádnou afinitou vůči kovovým iontům nabízí uplatnění v senzorce, medicíně, ale i environmentálních technologiích.

Nukleofilní substituce GF umožňuje také vnesení hydroxylových skupin do struktury grafenu. Tímto způsobem lze připravit nekovové magnety udržitelné až do pokojové teploty<sup>11</sup>. Zcela nový přístup k vývoji organických magnetů je založen na cílené implementaci diradikálových motivů do struktury grafenu a zprostředkování jejich magnetické interakce přes vodivostní elektrony a supervýměnnou interakci. Takové grafenové magnety mohou být využity v oblastech spintroniky, cíleného transportu léčiv nebo molekulárních a environmentálních separačních procesech.

Chemie GF je zajímavá také z hlediska přípravy široké škály hybridních materiálů. Jako velmi perspektivní se ukazují mikro/mesoporézní kompozitní systémy s kovovými organickými sítěmi (MOF), které vykazují super-oleofilní a super-hydrofobní vlastnosti s rekordní sorpční účinností odstranění organických fází z vodného prostředí<sup>12</sup>. Kompozitní systémy GF s uhlíkovými alotropy, polymery či komplexy kovů lze zase využít jako vodivé polymery, katalyzátory na úrovni jediného atomu nebo jako nové superkondenzátory.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR LO1305.*

#### LITERATURA

- Georgakilas V., Perman J. A., Tucek J., Zboril R.: *Chem. Rev.* **115**, 4744 (2015).
- Georgakilas V., Tiwari J. N., Kemp K. C., Perman J. A., Bourlinos A. B., Kim K. S., Zboril R.: *Chem. Rev.* **116**, 5464 (2016).
- Holá K., Sudolská M., Kalytchuk S., Nachtigallová D., Rogach A. L., Otyepka M., Zbořil R.: *ACS Nano* **11**, 12402 (2017).
- Kalytchuk S., Poláková K., Wang Y., Froning J. P., Cepe K., Rogach A. L., Zbořil R.: *ACS Nano* **11**, 1432 (2017).
- Błoński P., Tuček J., Sofer Z., Mazánek V., Petr M., Pumera M., Otyepka M., Zbořil R.: *JACS* **139**, 3171 (2017).
- de la Torre B., Švec M., Hapala P., Redondo J., Krejčí O., Lo R., Manna D., Sarmah A., Nachtigallová D., Tuček J., Błoński P., Otyepka M., Zbořil R., Hobza P., Jelínek P.: *Nat. Commun.*, v tisku, DOI: 10.1038/s41467-018-05163-y.
- Zbořil R., Karlický F., Bourlinos A. B., Steriotis T. A., Stubos A. K., Georgakilas V., Šafářová K., Jančík D., Trapalis C., Otyepka M.: *Small* **6**, 2885 (2010).
- Dubecký M., Otyepková E., Lazar P., Karlický F., Petr M., Čépe K., Banáš P., Zbořil R., Otyepka M.: *J. Phys. Chem. Lett.* **6**, 1430 (2015).
- Urbanová V., Holá K., Bourlinos A. B., Čépe K., Ambrosi A., Loo A. H., Pumera M., Karlický F., Otyepka M., Zbořil R.: *Adv. Mater.* **27**, 2407 (2015).
- Bakandritsos A., Pykal M., Błoński P., Jakubec P., Chronopoulos D. D., Poláková K., Georgakilas V., Čépe K., Tomanec O., Ranc V., Bourlinos A. B., Zbořil R., Otyepka M.: *ACS Nano* **11**, 2982 (2017).
- Tuček J., Holá K., Bourlinos A. B., Błoński P., Bakandritsos A., Ugolotti J., Dubecký M., Karlický F., Ranc V., Čépe K., Otyepka M., Zbořil R.: *Nat. Commun.* **8**, 14525 (2017).
- Jayaramulu K., Datta K. K. R., Rösler C., Petr M., Otyepka M., Zboril R., Fischer R. A.: *Angewandte Chem., Int. Ed.* **55**, 1178 (2016).

#### PL-05

#### DÁLKOVÉ ŘÍZENÍ REAKČNĚ DIFÚZNÍCH PROCESŮ POMOCÍ CHEMICKÝCH ROBOTŮ

FRANTIŠEK ŠTĚPÁNEK

Abstrakt nedodán

#### PL-06

#### CHÉMIA SELÉNU A JEJ POTENCIÁL

VIKTOR MILATA

*Oddelenie organickej chémie, Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko  
viktor.milata@stuba.sk*

Selén je prvkom 6. hlavnej skupiny v 4. perióde periodickej sústavy prvkov. Zatiaľ čo kyslík vytvára s vodíkom najesenciálnejšiu molekulu na svete – vodu, ktorá je vďaka vodíkovým väzbám kvapalina, sulfán (sírovodík), selenán (selenovodík) či telurán (telúrovodík) sú plyny a to prudko jedovaté<sup>1</sup>.

Selén objavil v roku 1817 J. J. Berzelius vo švédskych mednatých pyritoch a nazval ho podľa gréckej bohyně Mesiaca Seléne. Po svete je nerovnomerne rozptýlený a priemerne sa nachádza  $9 \cdot 10^{-6}$  % zemskej kôry, čo odpovedá zastúpeniu prvkov ako antimón, argón, kadmium, jód či striebro.

Už v roku 1873 boli zistené jeho vlastnosti ako svetlocitlivého polovodiča, čo napomohlo jeho využitiu v expozimetroch, elektrooptike, solárnych technológiách, pri farbení alebo odfarbení skla, pokovovaní, v mazadlách a kedysi ako anorganický kvázi-1D supravodič.

Výsledky získané v chémii organoselenových zlúčenín boli sumarizované v 70. rokoch 20. storočia s dôrazom na použitie oxidu seleničitého ako oxidovadla, regio- a stereoselektívne syntézy za miernych reakčných podmienok s ľahkou odstrániteľnosťou selénobsahujúcej skupiny. V hmotnostných spektrách sa prítomnosť selénu vo vzorke prejaví typickým izotopickým iónom pre 7 izotopov selénu.

V NMR je však aktivný len jediný izotop a to izotop  $^{77}\text{Se}$ , ktorý je približne  $3\times$  citlivejší ako izotop  $^{13}\text{C}$ .

Na jednej strane je selén esenciálny prvok, na druhej strane je známy ako notoricky toxický prvok, nakoľko spôsobuje nahradenie síry v bielkovinách. Prchavé zlúčeniny, ktoré sú zvyčajne jedovaté na rozdiel od neprchavých alebo málo prchavých majú čiastočne nepríjemný zápach pripomínajúci cesnak<sup>1</sup>.

Ďalšie biologicky účinné zlúčeniny selénu, preparáty, potravinové suplementy a dôsledky ich neprítomnosti v organizme budú podrobnejšie rozobrané v prednáške<sup>1–3</sup>.

*Táto práca bola finančne podporená Agentúrou pre vedu a výskum č. APVV-0038-11 a APVV-17-0513.*

#### LITERATÚRA

1. Nogueira C. W., Zeni G., Rocha J. B. T.: Chem. Rev. 104, 6255 (2004).
2. Mosnáčková J., Kováčiková E., Pastorová J., Košická M., Vojtaššáková A., Holčíková K., Simonová E.: *Selén v potravinách*, VÚP, Bratislava 2003.
3. 15 prác autorov Bella M., Milata V. a kol. v rokoch 2006 – 2018.

**1L-01****CHALKOGENIDOVÁ SKLA – NETRADIČNÍ MATERIÁLY S NETRADIČNÍMI VLASTNOSTMI A APLIKACEMI****MIROSLAV VLČEK<sup>a</sup>, KAREL PÁLKA<sup>b,a</sup>, STANISLAV ŠLANG<sup>a</sup>, LIUDMILA LOGHINA<sup>a</sup>, ANASTASIA IAKOVLEVA<sup>a</sup>, MARINA GRINCO<sup>a</sup>**<sup>a</sup> *Centrum materiálů a nanotechnologií FCHT, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, Pardubice 530 02, <sup>b</sup> Katedra obecné a anorganické chemie FCHT, Univerzita Pardubice, Studentská 95, Pardubice 532 10, Česká republika*  
*Miroslav.Vlcek@upce.cz*

Chalkogenidová skla jsou analogy běžných oxidových skel, ve kterých je kyslík nahrazen jedním nebo i více prvky ze skupiny těžších chalkogenů, tj. prvků 16. skupiny periodické soustavy prvků (S, Se, Te). Elektropozitivnějším partnerem pak je jeden nebo i více prvků, nejčastěji prvků z 13., 14. a 15. skupiny (zejména Ge, Ga, As, Sb nebo In). Vazby v těchto sloučeninách obvykle vykazují slabě iontově-kovalentní až kovalentní charakter. Substituce kyslíku těžším (i) chalkogenem(ny) v jejich struktuře má za následek výraznou změnu řady optických a fyzikálně-chemických vlastností. V porovnání s oxidovými skly mají chalkogenidová skla obecně výrazně vyšší index lomu (obvykle 2,0–3,2), jejich dlouhovlnná absorpční hrana se posouvá výrazně do infračervené oblasti a skla jsou výrazně méně rigidní vzhledem k výrazně nižším teplotám jejich skelných přechodů  $T_g$ . Z hlediska řady aplikací je rovněž významnou vlastností chalkogenidových skel, že jsou mnohá z nich citlivá na expozici různým zářením. Expozicí se mění jejich optické vlastnosti, chemická odolnost, případně může dojít až ke zkrystalizování materiálu, resp. jeho ablaci. S rozvojem telekomunikací, optoelektroniky, fotoniky a obecným trendem miniaturizace nejrůznějších zařízení zájem o tyto anorganické polymerní materiály stále roste<sup>1</sup>.

V práci prezentujeme přehled vhodných technik pro mikro- a nanostrukturování tenkých vrstev chalkogenidových skel připravených z plynné (vakuové napařování) a kapalné fáze (spin coating). Díky výše zmíněné nízké rigiditě jejich struktury a nízkým hodnotám  $T_g$  lze jejich povrch strukturovat jak metodou embossing, tak metodou přímého zápisu fokusovaným laserovým paprskem<sup>2</sup>. Strukturu tenkých vrstev lze rovněž snadno modifikovat expozicí např. UV zářením nebo svazkem elektronů mající za následek změny v jejich chemické odolnosti<sup>3-5</sup>. Následným leptáním v alkalických leptacích lázních tak lze dosáhnout vysoce selektivního pozitivního i negativního strukturování tenkých vrstev v závislosti na složení a historii tenkých vrstev, podmínkách jejich expozice a následného leptání.

V práci jsou rovněž ukázány příklady aplikací tenkých vrstev založené na možnosti jejich mikro- a nanostrukturování např. pro tvorbu difrakčních prvků pro IČ spektrální oblast, výrobu různých senzorů, jejich použití jako rezistory s extrémně vysokým rozlišením pro foto- a zejména elektronovou litografii a prostředky pro tvorbu ochranných prvků.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 16-13876S, grantů MŠMT ČR LM2015082 a ED4.100/11.0251 a EFRR projektu „Modernizace a upgrade infrastruktury CEMNAT“, registrační číslo CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_013/0001829.*

**LITERATURA**

1. Adam J.-L. (ed.), Zhang X. (ed.), *Chalcogenide Glasses: Preparation, Properties and Applications*, Woodhead Publishing, Oxford 2013.
2. Voynarovych I., Schroeter S., Poehlmann R., Vlcek M.: *J. Phys. D: Appl. Phys.* **48**, 265106 (2015).
3. Kovalskiy A., Cech J., Vlcek M., Waits Ch. M., Dubey M., Heffner W. R., Jain H.: *J. Micro/Nanolith. MEMS MOEMS* **8**, 043012 (2009).
4. Voynarovych I., Buzek J., Palka K., Vlcek M.: *Thin Solid Films* **608**, 8 (2016).
5. Slang S., Palka K., Vlcek M.: *J. Non-Cryst. Solids* **471**, 415 (2017).

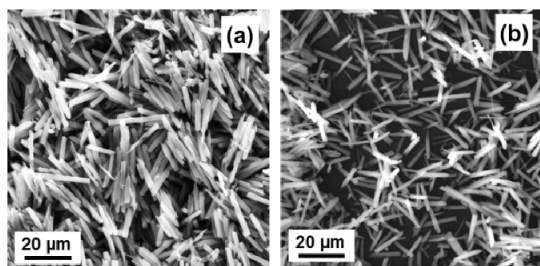
**1L-02****TITANYL SULFÁT JAKO TEMPLÁT PRO PŘÍPRAVU 1D TITANOVÝCH STRUKTUR****EVA PLIŽINGROVÁ, MONIKA MOTLOCHOVÁ, MARIANA KLEMENTOVÁ, JAROSLAV KUPČÍK, LUKÁŠ PALATINUS, LÓRANT SZATMÁRY, JAN ŠUBRT**

*Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i., 250 68 Řež, Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i., 182 21 Praha, Ústav jaderného výzkumu Řež, a.s., 250 68 Řež, Česká republika*  
*plizingrova@iic.cas.cz*

Jednorozměrné (1D) nanostrukturní anorganické materiály jako např. nanodráty, nanotrubičky nebo nanotyčinky mohou být zajímavé pro jejich použití jako stavební kameny pro senzory, v elektronice, fotonice a pro bioelektronické aplikace. Jejich potenciál závisí na kontrole fyzikálních vlastností, které jsou založeny na jejich atomární struktuře a 1D morfologii, čímž si lze přizpůsobit chemické a fyzikální vlastnosti výsledného materiálu.

V této práci byla popsána nová metoda přípravy  $TiO_2$  mikrotyčinek z hydrátu titanyl sulfátu (Obr. 1a) s definovanou tyčinkovou morfologií<sup>1</sup>. Metoda je založena na extrakci sulfátových iontů z krystalů titanyl sulfátu a jejich nahrazení hydroxylovými skupinami z vodného roztoku amoniaku, a to tak, že tyčinková morfologie zůstává zachována i v získaném produktu syntézy – amorfní metatitaničitě kyselině (Obr. 1b). Žiháním produktu nad 400 °C dochází k přeměně metatitaničitě kyseliny na anatas a nad 1100 °C na rutil, morfologie však zůstává stále zachována.

Vzhledem k tomu, že velikost a morfologie hydratovaných částic titanylsulfátu může být v širokých mezích měněna podmínkami jeho krystalizace, popsaná metoda otevírá novou cestu k získání sloučenin oxidu titaničitě požadovaného tvaru a velikosti. Rovněž bylo prokázáno, že nežiháný produkt má vynikající sorpční vlastnosti pro radioaktivní izotopy<sup>1</sup>.



Obr. 1. SEM obrázek (a) výchozího titanyl sulfátu a (b) připravené metatitanické kyseliny

Tato práce vznikla za podpory grantu TAČR (TH02020110).

#### LITERATURA

1. Klementova M., Motlochova M., Bohacek J., Kupcik J., Palatinus L., Plizingrova E., Szatmary L., Subrt J.: *Crystal Growth & Design* 17, 6762 (2017).

#### 1L-03

#### WEAK MAGNETIC EXCHANGE INTERACTION IN TWO NOVEL BINUCLEAR COPPER(II) COMPLEXES

JÁN PAVLIK, MIROSLAVA PUCHOŇOVÁ, JÁN MONCOE, DUŠAN VALIGURA

*Faculty of chemical and food technology, Department of inorganic chemistry STU in Bratislava, Radlinského 9, SK-81237 Bratislava, Slovakia  
jan.pavlik@stuba.sk*

The hydrogen-bonds are being progressively recognized for their ability to transmit the magnetic exchange interaction. In presented work the magnetism of two new dimeric Cu(II) complexes is analyzed, namely  $[\text{Cu}(\mu\text{-menia})(3\text{-Mesal})_2(\text{menia})(\text{H}_2\text{O})]_2$  (**I**), and  $[\text{Cu}(\mu\text{-nia})(5\text{-Mesal})_2(\text{H}_2\text{O})]_2$  (**II**), where menia stands for N-methylnicotineamide and 5-Mesal for 5-methylsalicylate anion. From the structural point of view the dimers are linked by the H-bonds and  $\pi$ -stacking resulting in a 1D chain supramolecular system. However, the DFT study showed that the superexchange pathway operates preponderantly at the intermolecular level, making thus a distinction between the molecular and magnetic structure of the system. By comparison of predicted value of magnetic exchange parameter for various *in-silico* designed model molecules the exchange pathway is discussed.

*This work was supported by the Slovak grants APVV-14-0073, APVV-17-0078, VEGA 1/0125/18, KEGA 017STU-4/2017 and STU Grant scheme for Support of Excellent Teams of Young Researchers BIOKA 1664. The authors are also grateful to the HPC centre at the Slovak University of Technology in Bratislava (SIVVP project, ITMS code 26230120002, funded by the European region development funds, ERDF).*

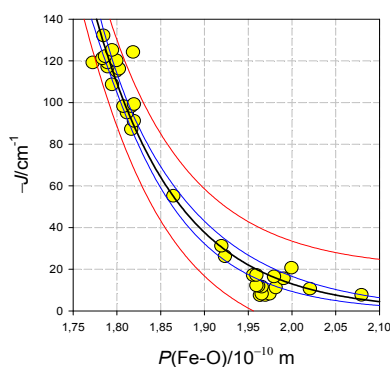
### 1P-01 NOVÉ MAGNETOŠTRUKTURÁLNE KORELÁCIE V DVOJJADROVÝCH KOMPLEXOCH ŽELEZA

**BEATA VRANOVIČOVÁ, ROMAN BOČA**

*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*

Skúmanie vzťahu medzi štruktúrou koordinačných zlúčenín a ich magnetickými vlastnosťami je veľmi dôležité pre ich prediktívne možnosti pri štúdiu magnetických vlastností resp. štúdiu štruktúry koordinačných zlúčenín<sup>1</sup>.

Našu pozornosť sme zamerali na štúdium vzťahu medzi štruktúrnymi údajmi v dvojjadrových komplexoch železa, ktoré obsahujú O-mostikujúce ligandy a magnetickým parametrom charakterizovaným izotropnou konštantou výmennej interakcie<sup>2</sup>. Po skompletizovaní dátového súboru so štruktúrnymi a magnetickými údajmi pre skúmané komplexy železa sme štatistickými metódami v programoch SigmaPlot a Statgraphics získali viacpočetné korelačné vzťahy.



Obr. 1. Magnetoštruktúrna korelácia v komplexoch typu  $[\text{FeII}(\text{FeIII})]$ . Regresná krivka – čierna čiara, interval spoľahlivosti (95 %) – modré čiary, predikčný interval (95 %) – červené čiary

*Táto práca vznikla za podpory grantu KEGA 006UCM-4/2018.*

#### LITERATÚRA

1. Gorun S. M., Lippard S. J.: *Inorg. Chem.* 30, 1625 (1991).
2. Shahbazi-Raz F., et al: *Inorganica Chimica Acta* 435, 262 (2015).

### 1P-02 STRUCTURAL AND SPECTRAL CHARACTERISATION OF METHYL AND METHOXYSALICYLATOCOPPER COMPLEXES WITH BENZIMIDAZOLE

**SIMONA MATEJOVÁ, MIROSLAVA PUCHOŇOVÁ,  
MILAN MAZÚR, JÁN MONCOE**

*Faculty of chemical and food technology, Department of inorganic chemistry STU in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia  
matejovasimona@gmail.com*

The benzimidazole and its derivatives plays very important roles in medicine considering its wide range of biological and pharmacological activities<sup>1</sup>. Combination of benzimidazole with bio-relevant metal centres can form the new area of biological chemistry, metal complexes can be more active than the free bioactive ligands<sup>2,3</sup>.

Therefore, the study are focused on the preparation of new salicylatocopper(II) complexes with benzimidazole, which led to formation of five new complexes with formula  $[\text{Cu}(3\text{-Mesal})_2(\text{bzim})_2]$  **I**,  $[\text{Cu}(4\text{-Mesal})_2(\text{bzim})_2]$  **II**,  $[\text{Cu}(5\text{-Mesal})_2(\text{bzim})_2]$  **III**,  $[\text{Cu}(4\text{-MeOsAl})_2(\text{bzim})_2]$  **IV** and  $[\text{Cu}(5\text{-MeOsAl})_2(\text{bzim})_2]$  **V** (where bzim = benzimidazole, 3-Mesal=3-methylsalicylate, 4-Mesal=4-methylsalicylate, 5-Mesal=5-methylsalicylate, 4-MeOsAl=4-methoxysalicylate, and 5-MeOsAl=5-methoxysalicylate) and their structural and spectral characterisation (IR, UV-VIS, EPR).

Crystal structures of complexes were determined by X-ray powder diffraction (**I**, **II**, **IV** and **V**) or single crystal diffraction (**III**) and it resulted in monomeric complexes with the same distorted tetragonal-bipyramidal coordination environment around copper(II) atom. The complex molecules **I-III** crystallize in triclinic crystallographic system with centrosymmetric space group P-1 and monomeric units are linked through hydrogen bonds into 1D supramolecular chains. In contrast, complexes **IV** and **V** crystallize in monoclinic system with centrosymmetric space group P21/c and forms 2D supramolecular networks.

*This work was supported by the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic VEGA/0125/18 and Grant Scheme for Support of Young Researcher PAPAMEK.*

#### REFERENCES

1. Anand K., Wakode S.: *IJCS* 5, 350 (2017).
2. Apohan E., Yilmaz U., Yilmaz O., Serindag A., Küçükbay H., Yesilada O., Baran Y.: *Journal of Organometallic Chemistry* 828, 52 (2017).
3. Hu J., Guo Y., Zhao J. A., Zhang J.: *Bioorg. Med. Chem.* 25, 5733 (2017).



## 1P-03

NOVÉ TYPY POLYMÉRNÝCH  
KARBOXYLÁTOMEĎNATÝCH KOMPLEXOV SO  
4-PYRIDYLMETANOLOMJAROSLAVA MAROSZOVÁ, JANA VAISOVÁ,  
MIROSLAVA PUCHOŇOVÁ, JÁN MONCOE, MARIAN  
KOMAN

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, Oddelenie anorganickej chémie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko  
jaroslava.maroszova@stuba.sk

Pyridylmetanoly sú v súčasnej dobe zahrnuté do intenzívneho výskumu syntézy, charakterizácie a cytotoxických štúdií nových zlúčenín trans-platiny. Nahradením aminoligandu v „klasických“ komplexoch trans-platiny novými ligandmi sa očakáva zvýšenie cytotoxikkej aktivity komplexu a zníženie nežiadúcich účinkov<sup>1,2</sup>. Karboxylátomeďnaté komplexy s *N*-donorovými ligandmi sú na našom oddelení dlhodobo študované z rôznych uhlov pohľadu. Zaujímá nás cieľná príprava, charakterizovanie pripravených komplexov priamymi a nepriamymi analytickými metódami (elementárna analýza, IR a EPR spektroskopía, RTG-štruktúrna analýza) a v neposlednom rade štúdium potenciálnej biologickej aktivity vybraných komplexov 4-pyridylmetanol ako jeden z polohových izomérov ronikolu (3-pyridylmetanol), ktorý sa využíva ako nesteroidné protizápalové liečivo (NSAIDs), je doposiaľ pomerne málo preštudovaný. Z koordinačného hľadiska 4-pyridylmetanol uprednostňuje, na rozdiel od 3-pyridylmetanolu, monodentátnu koordináciu atómom dusíka a tento spôsob koordinácie je vo väčšine prípadov vyskytujúcich sa v CCSD databáze. Iba výnimočne sa pozorovala väzba 4-pyridylmetanolu ako mostíkujúceho ligandu<sup>3</sup>. Taktiež z koordinačného hľadiska je 4-pyridylmetanol zaujímavý aj kvôli spôsobu viazania sa intramolekulovými O-H...O väzbami do supramolekulových sietí<sup>4,5</sup>.

V tejto práci sú prezentované nové polymérne koordinačné zlúčeniny, ktoré boli pripravené a štruktúrne charakterizované. pričom *N*-donorový ligand vystupuje ako mostíkujúci:

$[Cu(4-MeSal)_2(\mu-4-PM)_2]_n$  (**1**),  $[Cu(5-MeSal)_2(\mu-4-PM)_2]_n$  (**2**)  
 $[Cu(3-NO_2Bz)_2(\mu-4-PM)_2]_n$  (**3**),  $[Cu(4-NO_2Bz)_2(\mu-4PM)(H_2O)]$  (**4**),  $[Cu(4-MeOBz)_2(\mu-4-PM)(4-PM)]_n$  (**5**),  
 (MeOBz<sup>-</sup> – anión kyseliny metoxybenzoovej, MeSal<sup>-</sup> – anión kyseliny metylsalicylovej, NO<sub>2</sub>Bz<sup>-</sup> – anion kyseliny nitrobenzoovej) Komplexy **1**, **2** a **3** sú rovnakého typu s chromofórom trans – CuO<sub>2</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. Atómy Cu(II) ležia v strede symetrie a sú hexakoordinované v tvare teragonálnej bipyramídy. Jednotlivé meďnaté centrá sú pospájané mostíkujúcim 4-pyridylmetanolom a tvoria nekonečné 1-D „double bridged“ reťazce, ktoré sa ukladajú do 2-D vrstiev. Na druhej strane v komplexe **4** sa meďnaté ióny mostíkovo spájajú do 1-D polymérneho tzv. „cik-cak“ reťazca. Jednotlivé reťazce sú navzájom pospájané vodíkovými väzbami medzi atómami molekúl vody a nekoordinovanými atómami kyslíkov karboxylových skupín 4-NO<sub>2</sub>Bz aniónov do „zipsu“

podobného dvojreťazca. Dvojreťazce vytvárajú supramolekulovú 2-D sieť. V prípade komplexu **5** je 4-PM viazaný na centrálny atóm dvoma spôsobmi, ako terminálny, aj ako mostíkujúci lidand. Monoméne jednotky sa spájajú do polymérnych reťazcov navzájom spojených vodíkovými väzbami a tvoriacich tak supramolekulovú 2-D sieť.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0639/18, APVV-14-0078 a APVV-16-0039.

## LITERATÚRA

- Ramos-Lima F. J., Quiroga A. G., Perez J. M., Navarro-Ranninger C.: Polyhedron 22, 3379 (2003).
- Martínez A., Lorenzo J., Pietro M. J., Font-Bardia M., Solans X., Avilés F. X., Moreno V.: Bioorg. Med. Chem. 15, 969 (2007).
- Ucar I., Bulut I., Karadag A.: Struct.Chem. 20, 825 (2009).
- Moncol J., Múdra M., Lonneck P., Koman M., Melník M.: J. Chem. Cryst. 34, 423 (2004).
- Maroszová J., Moncol J., Padelková Z., Sillanpää R., Lis T., Koman M.: Cent. Eur. J. Chem. 9, 453 (2011).

## 1P-04

STRIEBORNÉ KOORDINAČNÉ ZLÚČENINY AKO  
PERSPEKTÍVNE ANTIMIKROBIÁLNE ČINIDLÁMICHAELA RENDOŠOVÁ<sup>a</sup>, ZUZANA VARGOVÁ<sup>a</sup>,  
DANICA SABOLOVÁ<sup>a</sup>, DANIELA HUDECOVÁ<sup>b</sup>,  
HELENA PAULÍKOVÁ<sup>b</sup>, RÓBERT GYEPES<sup>c</sup>, BORIS  
LAKATOŠ<sup>b</sup>, JURAJ KUCHÁR<sup>a</sup>, DAGMAR  
MUDROŇOVÁ<sup>d</sup>, MÁRIA VILKOVÁ<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta Univerzity P. J. Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice,

<sup>b</sup> Ústav biochémie a mikrobiológie, Fakulta chemickej a priemyselnej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava,

<sup>c</sup> Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2,

<sup>d</sup> Ústav imunológie, Univerzita veterinárskeho lekárstva a farmácie v Košiciach, Komenského 73, 041 81 Košice  
michaela.rendosova@student.ujps.sk

Liečba bakteriálnych a fungálnych ochorení je stále dôležitá a náročný problém. Aj keď je v dnešnej dobe k dispozícii široký výber antibiotík, rezistencia vytvorená v posledných desaťročiach ukázala podstatnú zdravotnú potrebu vývoja nových tried antimikrobiálnych látok<sup>1</sup>.

Počas mnohých rokov sa zisťovalo, že strieborné zlúčeniny vykazujú široké spektrum antimikrobiálnych a protirakovinových účinkov a práve preto sú strieborné zlúčeniny vhodnými kandidátmi pre vývoj nových antimikrobiálnych liečiv. V dnešnej dobe je komerčne používaný napríklad sulfadiazín strieborný v prevencii vzniku infekcii pri liečbe popálenín<sup>2</sup>.

Zaujímavosťou je, že už niekoľko desiatok rokov poznáme antimikrobiálny účinok strieborných iónov, no detailný mechanizmus ich pôsobenia stále nie je dostatočne opísaný<sup>3</sup>. Predpokladá sa, že antimikrobiálna aktivita strieborných komplexov závisí aj na povahe donorových

atómov a možnej jednoduchej výmene ligandov<sup>3</sup>.

V súčasnosti sa intenzívne študujú strieborné zlúčeniny obsahujúce organické ligandy prevažne s N-, S-, O-donorovými atómami ako sú napríklad N-heterocykly, fosfíny, karboxyláty a ďalšie<sup>2,4</sup>. V príspevku budú prezentované výsledky štúdia komplexov striebra s vybranými N- a O-donorovými ligandami od ich prípravy, stability a charakterizácie až po ich antimikrobiálny a protirakovinový účinok.

*Táto práca vznikla s podporou projektov VEGA 1/0016/18, KEGA 008UPJŠ-4/2018, VVGS-PF-2018-799 a APVV-15-0520.*

#### LITERATÚRA

1. Rizzotto M., v knihe: *A search for antibacterial agents*, kap. 5, s. 73. InTech, Rijeka 2012.
2. Medici S., Peana M., Crisponi G., Nurchi V. M., Lachowicz J. I., Remelli M., Zoroddu M. A.: *Coord. Chem. Rev.* 327, 356 (2016).
3. Joardar S., Roy S., Samanta S., Dutta A. K.: *J. Chem. Sci.* 127, 1819 (2015).
4. Rendošová M., Vargová Z., Kuchár J., et al.: *J. Inorg. Biochem.* 168, 1 (2017).

#### 1P-05

### PRÍPRAVA A CHARAKTERIZÁCIA NOVÝCH HETEROBIMETALICKÝCH ZLÚČENÍN NA BÁZE Mn(II) A Cu(II)

**ERIKA SAMOLOVÁ, JURAJ KUCHÁR**

*Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovensko  
erika.samolova@student.upjs.sk*

Zlúčeniny obsahujúce vo svojej štruktúre centrálné atómy s rôznym spinom majú miesto v aktuálnom výskume vďaka svojim biologickým vlastnostiam a taktiež zaujímavým magnetickým vlastnostiam. V oblasti magnetických materiálov sa v posledných rokoch venuje záujem štúdiu javov dôležitých pre riešenie fundamentálnych problémov v magnetizme a fyzike tuhých látok a tiež pre technologické aplikácie<sup>1</sup>. Jedným z takýchto javov je magnetokalorický efekt, ktorý sa využíva pri tepelnom štúdiu magnetických vlastností látok, prakticky sa uvažuje jeho využitie v chladiacich systémoch. Magnetokalorický efekt bol pozorovaný vo viacerých látkach vykazujúcich ferrimagnetické vlastnosti<sup>2,3</sup>.

Predpokladá sa, že zlúčeniny, ktorých štruktúra je tvorená reťazcami obsahujúcimi striedavo umiestnené ióny Cu(II) a Mn(II), by mali ferrimagnetické vlastnosti vykazovať. Tento predpoklad sa potvrdil v prípade viacerých zlúčenín, napr.  $MnCu(pbaOH)(H_2O)_3$  ( $pbaOH = 2$ -hydroxy-1,3-propylénbis(oxamát))<sup>4</sup> alebo  $[Cu(tim)MnCl_4]_n$  ( $tim =$  tetrametylcyclotetraazatetradekaén)<sup>5</sup>.

Pri syntéze takéhoto typu zlúčenín hrá dôležitú rolu výber blokujúceho liganda, ktorý má značný vplyv na tvorbu a usporiadanie reťazcov v kryštálovej štruktúre. V našom

výskume sa zameriavame na prípravu a použitie ligandov na báze *cyclam*-u (*cyclam* – 1,4,8,11-tetraazacyklotetradekán) obsahujúcich substituenty na dvoch atómoch dusíka umiestnených vzájomne v *trans* polohe, ktoré by umožnili kontrolu tvorby systému vodíkových väzieb a v dôsledku rôzneho objemu substituentov vynútili odlišnú vzdialenosť reťazcov vo výsledných heterobimetalických zlúčeninách. Formou posteru bude prezentovaná príprava a charakterizácia dvoch z pripravených ligandov: *dpc* ( $dpc = 1,8$ -dipropylcyclam) a *dbc* ( $dbc = 1,8$ -dibutylcyclam), ako aj ich následné použitie na prípravu mednatých komplexov, ktoré ďalej vystupujú ako prekurzory pri príprave bimetalických zlúčenín všeobecného zloženia  $[Cu(L)MnCl_4]_n$ .

*Táto práca vznikla vďaka podpore grantu Slovenskej grantovej agentúry APVV č. APVV-14-0073 a APVV-14-0078 interných grantov UPJŠ č. vvgs-pf-2017-267 a vvgs-2017-652 a projektu 18-10504S Grantovej agentúry Českej republiky.*

#### LITERATÚRA

1. Tishin A., Spichkin Y. I.: *The Magnetocaloric Effect and its Applications*, CRC Press, Boca Raton 2016.
2. Boyarchenkov A. S. et al: *Phys. Rev.* 76, 224410 (2007).
3. Konieczny P. et al: *Inorg. Chem.* 56, 2777 (2017).
4. Pei Y. et al: *Inorg. Chem.* 26, 138 (1987).
5. Willet R. D., Wang Z.: *J. Appl. Phys.* 73, 5384 (1993).

#### 1P-06

### VARIOUS SUPRAMOLECULAR STRUCTURES IN METHYLSALICYLATE COPPER(II) COMPLEXES WITH BENZIMIDAZOLE DERIVATIVES

**MIROSLAVA PUCHOŇOVÁ, JÁN MONCOL, VLADIMÍR KUČTANIN**

*Faculty chemical and food technology, Department of inorganic chemistry STU in Bratislava, Račinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia  
miroslava.puchonova@stuba.sk*

Relationship among structure, synthesis and composition is necessary to know for the subsequent study of biological properties. Reaction conditions of preparation can influence the creation of structure motif, their interactions as well as formation modifications<sup>1</sup>. It is well known that benzoatocopper(II) complexes are studied for many years from different points of view, mostly in presence of N-donor ligands<sup>2,3</sup>. Therefore we focused on the study of preparation and spectral properties of copper(II) complexes with derivatives of methylsalicylic acid in presence of 2-hydroxymethylbenzimidazole (2-OHMezbim) or 2-(1-hydroxyethyl)benzimidazole (2-OHEtzbim), which have resulted in several methylsalicylatecopper(II) complexes. Usage of nitrogen donor ligand 2-OHEtzbim led to formation of complexes with formula  $[Cu(x-Mesal)_2(2-OHEtzbim)_2] \cdot 2H_2O$  showing only 3D supramolecular structure (where  $x=3, 4$  or  $5$  and  $Mesal^- =$  methylsalicylate anion). On the other hand, the change of 2-OHEtzbim by 2-OHMezbim brought about the creation of modifications with/without solvent in the structure. In presence of 3- and 4-methylsalicylate anion

compounds of composition  $[\text{Cu}(x\text{-Mesal})_2(\text{OHMezbim})_2]$ ,  $[\text{Cu}(x\text{-Mesal})_2(\text{OHMezbim})_2]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$  or  $[\text{Cu}(4\text{-Mesal})_2(\text{OHMezbim})_2]\cdot 2\text{ACN}$  have been formed. The coordination environment  $\{\text{CuO}_2\text{N}_2\text{O}'_2\}$  is similar for all of them, but different hydrogen bonds for complexes with 2-hydroxymethylbenzimidazole led to formation of 1D, 2D or 3D supramolecular structures. The solid state complexes have been characterized by spectral methods (infrared, electronic and EPR spectra) and by X-ray analyses.

This work was supported by the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic VEGA1/0639/18, APVV 14-0078 and Grant Scheme for Support of Excellent teams of Young Researchers BIOKA.

## REFERENCES

1. Bond A. D., Boese R. M., Desiraju G. R.: Amer. Pharm. Review 1 (2007).
2. Abujihleh A. L.: Inorg. Chem. Commun. 14, 759 (2011).
3. Puchoňová M., Švorec J., Švorc L., Pavlík J., Mazúr M., Dlháň E., Růžicková Z., Moncol J., Valigura D.: Inorg. Chim. Acta 455, 298 (2017).

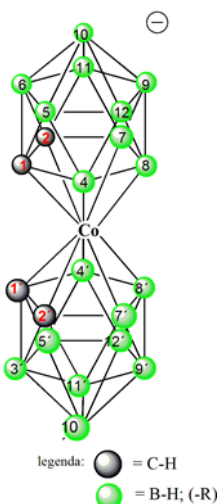
## 1P-07

NOVÉ HALOGENDERIVÁTY  
KOBALT BIS-DIKARBOLIDOVÉHO ANIONTU

**PAVEL KAULE<sup>a</sup>, VÁCLAV ŠÍCHA<sup>a,b</sup>, JAN ČERMÁK<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem, České mládeže 8, 400 01 Ústí nad Labem, <sup>b</sup> Ústav anorganické chemie Akademie věd ČR v.v.i., Hlavní 1001, 250 68 Řež, Česká republika  
PavelKaule@seznam.cz

Kobalt bis-dikarbolidový anion **1** je díky své stálosti, preparativní dostupnosti, amfifilnímu charakteru a dalším unikátním vlastnostem nejpoužívanější karboranový komplex<sup>1</sup>. Tato klastrová molekula byla v nedávné minulosti mnoha způsoby funkcionalizována jak na atomech boru, tak i na klastrových atomech uhlíku. Funkční skupina vždy nahrazuje terminální atom vodíku. Atomy vodíku na borech jsou hydridické, na skeletálních uhlících kyselé. K odštěpení hydridických atomů boru se používají Lewisovy kyseliny (např.  $\text{BF}_3$ ), k deprotonaci uhlíků silné Lewisovy báze, zejména *n*-butyllithium<sup>2</sup>. V současné době se nám podařilo připravit nové halogenderiváty kobalt bis-dikarbolidového aniontu, zejména substituované na atomech uhlíku



Obr. 1. Molekula kobalt bis-dikarbolidového aniontu známá pod komerčním názvem COSAN (Cobalt Sandwich ANion)

jedním až čtyřmi halogeny. Po deprotonaci kyselých proton *n*-butyllithiem při teplotě reakční směsi nižší než  $-50\text{ }^\circ\text{C}$  dochází během pár desítek minut k substituci za atomy halogenů. Pro tyto účely byly otestovány různé zdroje halogenů, od molekulárních halogenů až po halogenderiváty. Největším úskalím přípravy tohoto typu halogenderivátů je obtížná izolace až šestnácti možných pozičních izomerů.

Tato práce vznikla za podpory projektu „UniQSurf - Centrum biopovrchů a hybridních funkčních materiálů“ reg. č.: CZ.02.1.01/0.0/0.0/17\_048/0007411 financovaného z EFRR/ESF a projektu UJEP-SGS-172-07-05.

## LITERATURA

1. Hawthorne M. F., Andrews T. D.: Chem. Commun. 19, 44 (1965).
2. Grimes R. N.: Carboranes, 3. vyd., Elsevier, Amsterdam 2016.

## 1P-08

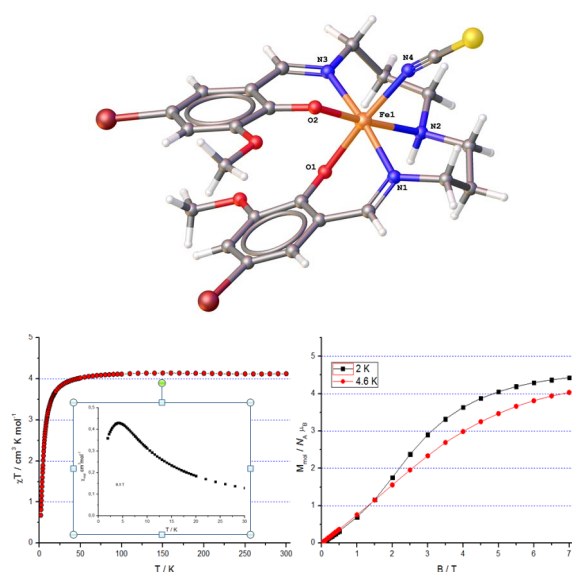
Fe(III) KOMPLEXY S PENTADENTÁTNÝMI  
SCHIFFOVÝMI BÁZAMI ODVODENÝMI  
OD 5-BROMO-3-METOXYSALICYLALDEHYDU

**JOZEF ŠVOREC, ZUZANA ŠVAJDOVÁ, IVAN ŠALITROŠ, JÁN MONCOL**

Oddelenie anorganickej chémie, FCHPT, Slovenská Technická Univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko  
jozef.svorec@stuba.sk

Příprava Schiffových ligandů a jejich kovových komplexů představuje fascinující oblast výzkumu zejména vďaka jejich potenciálnímu využití při katalýze, v materiálovém výskume alebo při přípravě modelových zlúčenin v biochémi<sup>1</sup>. Železité komplexy schiffových báz sú študované najmä kvôli ich nožnej katalytickej aktivite alebo vďaka svojim zaujímavým magnetickým vlastnostiam, pretože často vykazujú spinový prechod, ktorý môže byť využitý napríklad v molekulových magnetických zariadeniach, senzorech alebo prepínačoch<sup>2</sup>. Hexakoordinované Fe(III) komplexy s pentadentátnymi Schiffovými ligandami s chromofórom  $\text{N}_3\text{O}_2$  s koordinačne labilným chlorido ligandom na šiestom mieste predstavuje prekurzor, ktorý dovoľuje relatívnu jednoduchú modifikáciu primárnej koordinačnej sféry komplexov ligandovou substitúciou  $\text{Cl}^-$  aniónu<sup>3</sup>. Uvedený spôsob prípravy umožňuje ladit' niektoré potenciálne zaujímavé elektrónové alebo magnetické vlastnosti komplexov, akým je napríklad pozorovanie spinového prechodu<sup>4</sup>.

V tejto práci budeme prezentovať štruktúrne a magnetické vlastnosti Fe(III) komplexov všeobecného zloženia  $[\text{Fe}(\text{L}^{\text{S}})\text{X}]$ , kde  $\text{H}_2\text{L}^{\text{S}}$  predstavuje pentadentátnu Schiffovú bázu a X je buď  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{CN}^-$  alebo  $\text{NCS}^-$  anión (obr. 1). Pentadentátny Schiffový ligand  $\text{H}_2\text{L}^{\text{S}}$  sa pripravil kondenzáciou 5-bromo-3-metoxysalicylaldehydu s rôznymi alifatickými triaminami. Magnetické vlastnosti komplexov budú diskutované s výsledkami získanými pomocou DFT výpočtov.



Obr. 1. Molekulová štruktúra a magnetické vlastnosti komplexu [Fe(5Br-3MeOsaltp)NCS]

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA (1/0639/18) a KEGA (017STU-4/2017). We are grateful to the HPC center at the Slovak University of Technology in Bratislava, which is a part of the Slovak Infrastructure of High Performance Computing (SIVVP project, ITMS code 26230120002, funded by the European region development funds, ERDF), for the computational time and resources made available.

#### LITERATÚRA

1. Cozzi P. G.: Chem. Soc. Rev. 33, 410 (2004).
2. Harding D. J., Harding P., Phonsri W.: Coord. Chem. Rev. 313, 38 (2016).
3. Pogány L., Moncol J., Pavlik J., Šalitraš I.: New J. Chem. 41, 5904 (2017).
4. Krüger Ch., Augustin P., Nemeč I., Trávníček Z., Oshio H., Boča R., Renz F.: Eur. J. Inorg. Chem. 5-6, 902 (2013).

#### 1P-09

### HALOGENOVANÉ PESTICIDY A MOŽNOSTI JEJICH ODŠTRAŇOVÁNÍ Z VOD A PŮDY

KRYŠTOF SKRBEK<sup>a</sup>, ONDŘEJ JANKOVSKÝ<sup>a</sup>,  
MARCELA DENDISOVÁ<sup>b</sup>, MARIE ŠVECOVÁ<sup>b,c</sup>,  
VILÉM BARTŮŇEK<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Ústav anorganické chemie, Fakulta chemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 - Dejvice, <sup>b</sup> Ústav fyzikální chemie, Fakulta chemicko-inženýrská, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 - Dejvice, <sup>c</sup> Ústav analytické chemie Fakulta chemicko-inženýrská, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 - Dejvice, Česká republika  
krystof.skrbek@vscht.cz

V současné době představují halogenované pesticidy a jejich rezidua – zejména chlorované fenoly – významný problém z hlediska kontaminace vody i půdy<sup>1</sup>. Likvidace těchto reziduí bývá velmi náročná a nevhodná. Předkládaný příspěvek se zabývá různými metodami dekontaminace, jejich výhodami a omezeními s důrazem na dekontaminace chemickými prostředky, a to zejména oxidačními, fotokatalytickými nebo katalytickými metodami. Jednou z klíčových metod je možnost dekontaminace pomocí katalytického rozkladu působením různých typů katalyzátorů. Jako příklad lze uvést reakci s peroxidem vodíku katalyzovanou aktivním uhlím<sup>2</sup>, při které dochází k odštěpení chlorů i otevření benzenového jádra. Další alternativou je fotokatalýza na povrchu polovodičů, při které se ovšem katalyzátor rychle kontaminuje<sup>3</sup>. V naší práci byly použity nanočástice oxidu ceriitého pro katalytický rozklad 2,4-dichlorofenolu (2,4-DCP). Tento chlorovaný fenol je ve vodě relativně dobře rozpustný a jeho rozklad byl tedy sledován pomocí UV-Vis spektroskopie ve vodném prostředí. Výsledky potvrdily katalytickou aktivitu nanočástic oxidu ceriitého při rozkladu 2,4-DCP a jejich potenciál v této oblasti.

Tato práce vznikla za podpory grantu TAČR, program Zéta, číslo grantu TJ01000072.

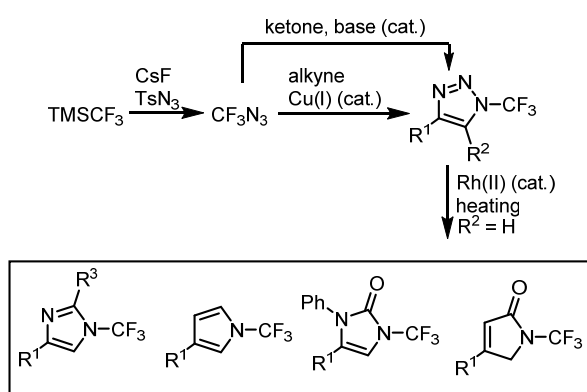
#### LITERATURA

1. Vlková L., Církva V.: Chemické listy 99, 125 (2005).
2. Huang H. H., Lu M. C., Chen J. N., Lee C. T.: Chemosphere 51, 935 (2003).
3. Androulaki E., Hiskia A., Dimotikali D., Minero C., Calza P., Pelizzetti E., Papaconstantinou E.: Environ. Sci. Technol. 34, 2024 (2000).

**2L-01****AZIDO(PER)FLUOROALKANES – USEFUL FLUORINATED BUILDING BLOCKS****ATHANASION MARKOS, VLADIMIR MOTORNOV, ZSOFIA BLASTIK, SVATAVA VOLTROVÁ, PETR BEIER\***

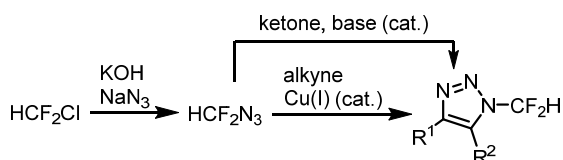
*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Czech Academy of Sciences, Flemingovo nám. 2, 166 10 Prague, Czech Republic*  
 beier@uochbc.cas.cz

Fluoroalkyl azides are understudied building blocks with great synthetic potential. Although  $\text{CF}_3\text{N}_3$  has been known since the 1960's its synthesis was cumbersome and impractical. Due to its low availability and safety concerns, it has not been investigated in synthetic applications. Recently, we have reported a general synthesis of azidotrifluoromethane and other azido(per)fluoroalkanes based on the reaction of perfluoroalkyl carbanion equivalents with electrophilic azides<sup>1,2</sup>. Azidoperfluoroalkanes are stable compounds which undergo copper(I)-catalyzed azide-alkyne cycloadditions (CuAAC) with terminal alkynes<sup>1,2</sup> or organocatalyzed [3 + 2] cycloadditions with  $\beta$ -ketoester or 1,3-diones<sup>3</sup> to provide unprecedented *N*-perfluoroalkyl-1,2,3-triazoles. The triazoles undergo rhodium-catalyzed transannulation to afford previously unreported *N*-(per)fluoroalkyl imidazoles, pyrroles, imidazolones and pyrrolones (Scheme 1)<sup>4</sup>.



Scheme 1.

Related azidodifluoromethane was prepared from chlorodifluoromethane and was shown to also undergo CuAAC and [3 + 2] cycloadditions to novel *N*-difluoromethyl-1,2,3-triazoles (Scheme 2).



Scheme 2.

*This work was supported by the Czech Academy of Sciences (RVO: 61388963).*

## REFERENCES

1. Blastik Z. E., Voltrová S., Matoušek V., Jurásek B., Manley D. W., Klepetářová B., Beier P.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 56, 346 (2017).
2. Voltrová S., Muselli M., Filgas J., Matoušek, V., Klepetářová B., Beier P.: *Org. Biomol. Chem.* 15, 4962 (2017).
3. Blastik Z. E., Klepetářová B., Beier P.: submitted.
4. Motornov V., Markos A., Beier P.: *Chem. Commun.* 54, 3258 (2018).

**2L-02****MODELOVÉ BICHROMOFORY PRO ZKOUMÁNÍ PŘENOSU EXCITAČNÍ ENERGIE****NUMAN ALMONASY<sup>a</sup>, MARTIN MICHL<sup>b</sup>, MIROSLAV DVORÁK<sup>b</sup>, MILOŠ NEPRAŠA<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 573, 532 10 Pardubice, 530 09 Pardubice,* <sup>b</sup> *České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Břehová 7, 115 19 Praha 1, Česká republika*  
 numan.almonasy@upce.cz

Přenos excitační energie (EET) je důležitý nezářivý fotofyzikální proces, při kterém elektronicky excitovaný donor (D) předává excitační energii akceptoru (A) a sám se vrací do základního stavu. Kromě toho, že tento proces hraje klíčovou roli ve fotosyntéze, nalezl již také uplatnění např. při sekvenaci DNA<sup>1</sup> ve fluorescenční mikroskopii<sup>2</sup> či v organických optoelektronických zařízeních<sup>3</sup>.

Intermolekulární EET, kde D a A jsou samostatné molekuly, probíhá tzv. „through-space“ mechanismy, kterými jsou Försterův dipól-dipólový mechanismus (pro vzdálenosti do 10 nm) a Dexterův výměnný mechanismus, který vyžaduje přímý překryv vlnových funkcí orbitalů D a A. V některých bichromoforových molekulách typu D-můstek-A, zejména pak pokud je můstek konjugovaný, dochází k velmi účinnému EET na řádově kratší časové škále, než by odpovídalo výše zmíněným „through-space“ mechanismům. Tento jev je připisován příspěvku tzv. „through-bond“ mechanismu, který je méně prozkoumán a pro nějž je charakteristické, že na rozdíl od „through-space“ mechanismů není podmíněn existencí překryvu mezi emisním pásem D a absorpčním pásem A<sup>4</sup>.

V této oblasti jsou naše výzkumné aktivity soustředěny na cílenou syntézu a studium fotofyzikálních vlastností bichromoforových sloučenin a jejich srovnání s monochromoforovými látkami typu D-můstek a A-můstek, kde můstkem je s-triazinový kruh. D a A pak kondenzované polycyklické aromatické sloučeniny (pyren, perylen, benzantron, anthracen, atd) navázané na můstek přes aminoskupinu.

Zkoumané sloučeniny byly připraveny běžnou nukleofilní substitucí atomů chloru kyanurchloridu za přítomnosti slabé báze. V prvním kroku byl selektivně substituován jeden atom chloru příslušným aminem a následně byly postupně substituovány další dva atomy chloru.

U všech studovaných bichromoforů byl nezávisle na spektrálním překryvu pozorován velmi efektivní EET odpovídající „through-bond“ mechanismu.

## LITERATURA

1. Jiao G. S., et al.: Chem. Eur. J. 12, 7816 (2006).
2. Periasamy A.: J. Biomed. Opt. 6, 287 (2001).
3. Laquai F., et al.: Macromol. Rapid Commun. 30, 1203 (2009).
4. Lin W., et al.: Angew. Chem., Int. Ed. 49, 375 (2010).

## 2L-03

### POUŽITÍ IMOBILIZOVANÝCH $\alpha$ -ACYL AMINOKETONŮ PRO SYNTÉZU CHIRÁLNÍCH HETEROCYKLŮ

#### PETRA KRÁLOVÁ

Katedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta,  
Univerzita Palackého, Olomouc, 771 46, Česká republika  
petra.kralova@upol.cz

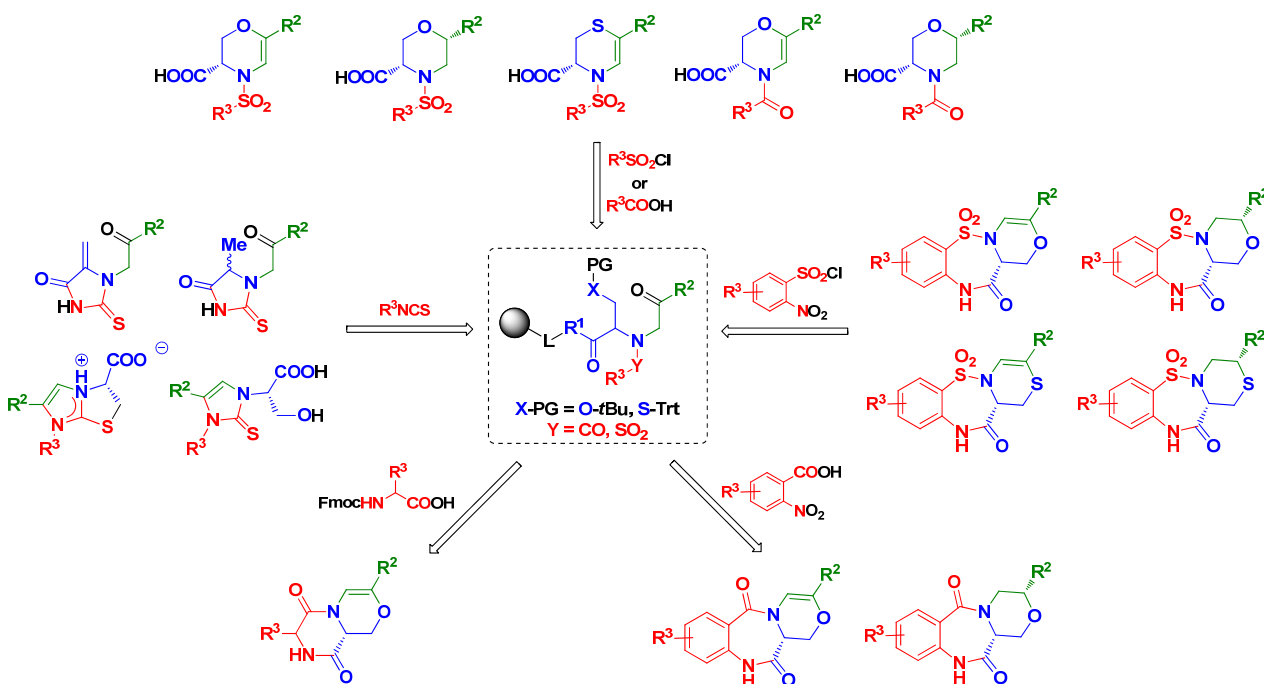
Syntéza na pevné fázi (SPS) představuje efektivní a rychlou metodu pro přípravu nových heterocyklických sloučenin s potenciální biologickou aktivitou s využitím paralelní nebo kombinatoriální syntézy. V poslední dekádě byla pozornost SPS soustředěna také na imobilizované  $\alpha$ -acyl aminoketony, jakožto klíčové intermedie pro přípravu planárních heterocyklů<sup>1</sup>. Vzhledem k současnému důrazu medicínské chemie na 3D architekturu nově připravovaných látek jsme se v našem výzkumu zaměřili na syntézu chirálních sloučenin na bázi morfolinového kruhu<sup>2-5</sup>. Klíčové

intermediáty byly rovněž využity k přípravě nových derivátů nesoucích imidazolový skelet<sup>6,7</sup>. Východními látkami byly snadno dostupné sloučeniny (přírodní Fmoc-amino kyseliny, 4-nitrobenzensulfonyl chloridy, 2-nitrobenzoové kyseliny,  $\alpha$ -bromoketony a deriváty isothiokyanátů), což umožňuje využití metodiky k rychlé přípravě chemických knihoven cílových látek. K tvorbě nových chirálních center byla požitá stereoselektivní redukce dvojně vazby triethylsilanem.

Tato práce vznikla za podpory projektu LO1304 a grantu Univerzity Palackého IGA\_PrF\_2017\_009, IGA\_LF\_2017\_028, IGA\_PrF\_2018\_29 a IGA\_LF\_2018\_032.

## LITERATURA

1. Pudelová N., Krchňák V. J.: Comb. Chem. 11, 851 (2009).
2. Králová P., Fülöpová V., Maloň M., Volná T., Popa I., Sural M.: ACS Comb. Sci. 19, 173 (2017).
3. Králová P., Maloň M., Volná T., Ručilová V., Sural M.: ACS Comb. Sci. 19, 670 (2017).
4. Králová P., Maloň M., Sural M.: ACS Comb. Sci. 19, 770 (2017).
5. Ručilová V., Králová P., Sural M.: Eur. J. Org. Chem. 2017, 7034 (2017).
6. Králová P., Maloň M., Koshino H., Sural M.: Molecules 23, 976 (2018).
7. Králová P., Sural M.: ACS Comb. Sci. 2018, under review.



## 2L-04 IMIDAZOL A IMIDAZOLIUM JAKO STRUKTURNÍ MOTIVY V PUSH-PULL SYSTÉMU

JAROMÍR VARGA, PATRIK PAŘÍK, FILIP BUREŠ

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika  
Patrik.Parik@upce.cz

V roli centrální strukturální jednotky derivátů s push-pull systémem se často objevují dusíkaté heteroaromáty jako imidazol nebo pyrazin. Oba již byly předmětem studia na našem pracovišti. K pracem týkajícím se imidazolu patří například syntéza a studium 2-substituovaných 1-methyl-1*H*-imidazol-4,5-dikarbonitrilů<sup>1</sup> nebo 2,4,5-triarylimidazolů<sup>2</sup>.

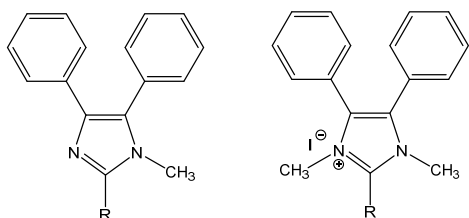


Schéma 1. Obecná struktura připravených 2-substituovaných imidazolů a imidazolií

Jako strukturální motiv nových sloučenin s push-pull systémem byl vybrán imidazol a jeho kvarternizovaný analog imidazolium. Převážně s využitím vybraných palladiem katalyzovaných cross-couplingových reakcí byly syntetizovány molekuly strukturálního tvaru „Y“, které obsahují společnou centrální akceptorní jednotku 4,5-difenyl-1-methyl-1*H*-imidazol, můstek v poloze 2 tvořený  $\pi$ -systémem a donorní fragment (Schéma 1). Nalezenými postupy bylo syntetizováno celkem osm uvedených imidazolů s rozmanitými substituenty (R). Jejich následnou kvarternizací pak bylo připraveno šest odpovídajících imidazolium-jodidů. Připravené sloučeniny byly charakterizovány a jejich čistota byla stanovena, a to prostřednictvím bodu tání, tenkovrstvé chromatografie, <sup>1</sup>H a <sup>13</sup>C NMR spektroskopie, hmotnostní spektrometrie EI-MS, HR-MALDI-MS, FT-IR spektroskopie, diferenciální skenovací kalorimetrie a elementární analýzy. Míra přenosu vnitřního náboje syntetizovaných imidazolů a imidazolií a jejich optické vlastnosti byly studovány a vzájemně porovnány s využitím UV/Vis absorpční spektroskopie.

### LITERATURA

- Kulhánek J., Bureš F., Pytela O., Mikysek T., Ludvík J., Růžička A.: *D. and Pigm.* 85, 57 (2010).
- Čermáková H.: *Diplomová práce*, Univerzita Pardubice, Pardubice (2014).

## 2L-05 CYTOTOXIC TRITERPENOIDS – SYNTHESIS AND MECHANISM OF ACTION

MILAN URBAN, MIROSLAV SOURAL, SONA  
KRAJCOVICOVA, JIRI HODON, JARMILA  
STANKOVA, PETR DZUBAK, JAN SAREK

IMTM – Faculty of Medicine and Dentistry and Department of Organic Chemistry – Faculty of Science, Palacký University in Olomouc, Hnevotinska 5, 17900, Olomouc, Czech Republic  
milan.urban@upol.cz

Triterpenoids are natural compounds that may be found in numerous living organisms, especially in plants. They often have interesting biological activities<sup>1</sup>. Betulinic acid, for example, has strong anti-cancer activity and its hemiesters inhibit maturation of HIV particles<sup>1</sup>.

In this work, a number of new derivatives of many terpenoid scaffolds (such as lupane, oleanane, ursane, taraxastane) was synthesized and tested on eight cancer and two non-cancer fibroblast lines<sup>2–4</sup>. Compounds with cytotoxicity lower than 5  $\mu$ M on cancer cell lines and non-toxic on fibroblasts were then selected for investigation of the mechanism of action. Most successful were heterocycles and highly oxidized structures. Solid-phase synthesis of conjugates of active compounds with a fluorescent tag<sup>5</sup> was developed and using fluorescent microscopy, we were able to visualize their cellular uptake and distribution. Using analogous conjugates of terpenes with biotin (Fig. 1)<sup>6</sup> in pull-down assays, we isolated proteins that bind selectively to active terpenes and which are potential therapeutic targets. Synthetic aspects of the preparation of triterpenic conjugates as well as basic assumptions about mechanism of action and potential target proteins will be presented and discussed.

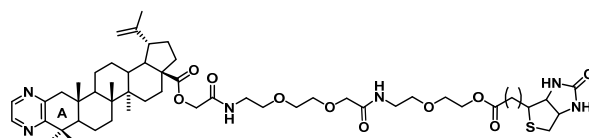


Fig. 1. Conjugate of cytotoxic pyrazine ( $IC_{50} = 0.53 \mu M$ , CCRF-CEM) with biotin<sup>5</sup>

This work was supported by internal grants of Palacký University IGA\_PrF\_2018\_029 and IGA\_LF\_2018\_032.

### REFERENCES

- Dzubak P., Hajduch M., Urban M., Sarek J., et al.: *Nat. Prod. Rep.* 23, 394 (2006).
- Borkova L., Urban M., Sarek J., et al.: *ChemMedChem.* 12, 390 (2017).
- Borkova L., Dzubak P., Sarek J., Urban M., et al.: *Eur. J. Med. Chem.* 121, 120 (2016).
- Vlk M., Urban M., Sarek J., et al.: *J. Rad. Nucl. Chem.* 308, 733 (2016).
- Krajcovicova S., Stankova J., Dzubak P., Hajduch M., Soral M., Urban M.: *Chem. Eur. J.* 24, 4957 (2018).
- Soral M., Hodon J., Dzubak P., Sarek J., Urban M., et al.: *Bioconjugate Chem.* 26, 2563 (2015).



## 2L-06

## STABILITA A PŘÍPRAVA POTENCIÁLNÝCH INHIBÍTOROV LUDSKÝCH GLYKOZYLTRANSFERÁZ

JANA JAKUBČINOVÁ, MAREK BARÁTH, JÁN HIRSCH, IGOR TVAROŠKA

Slovenská akadémia vied, Chemický ústav, Oddelenie glykochémie, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovenská republika  
janajakubcinova@gmail.com

Glykozyltransferázy (GTs) tvoria skupinu enzýmov, ktoré katalyzujú transfer sacharidovej časti donora na špecifickú akceptornú molekulu. Väčšina GTs však vyžaduje aj prítomnosť kovového kofaktora ( $Mn^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$ )<sup>1</sup>. Zmeny v glykozylní proteínov môžu viesť k vážnym poruchám a môžu mať negatívny vplyv na živočíchov a ľudský organizmus súvisiaci s rozvojom mnohých ochorení o. i. nádorové ochorenia, diabetes alebo Alzheimerova choroba<sup>2,3</sup>.

Na prípravu inhibítorov GTs sa používa množstvo stratégií. Jednou z nich je príprava inhibítorov tranzitného stavu, kde sa mimikujú obidva substráty ako aj vplyv kofaktora. Navrhnuté boli preto štrukturálne motívy mimetik tranzitného stavu – Schéma 1.

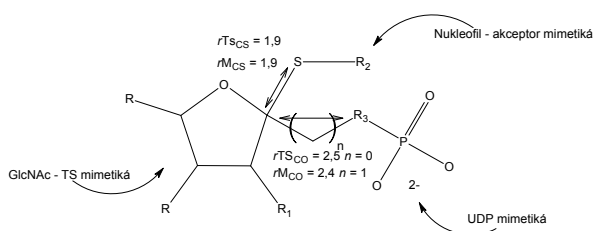


Schéma 1. Štrukturálne motívy mimetik tranzitného stavu

Furanózový skelet predstavuje donorovú časť mimetika. Odvodený je od príslušnej furanózy nesúcej D-frukto, D-tagato, D-psiko konfiguráciu. Akceptorná časť je mimikovaná rôzne substituovanou tioglykozylovou skupinou. Mimikovanie uridín difosfátovej skupiny reprezentuje príslušný ester kyseliny fosforečnej na uhlíku furanózového skeletu v polohe 1. Ten po hydrolyze poskytuje potrebný záporný náboj.

Príprava prekursorov potenciálnych inhibítorov GTs vychádza z benzyl-2-tio- $\alpha$ -D-fruktofuranózy **I**<sup>4</sup>. Zistená bola však nízka stabilita finálnych zlúčenín, preto sa v práci venujeme príprave sulfónových derivátov, ktorých stabilita by mala byť zabezpečená nasýtením síry jej oxidáciou.

Ďalšou možnosťou stabilizácie je manipulácia dĺžky postranného reťazca v polohe C1 ako aj zmena funkčnej skupiny (sulfát, fosfát, fosfonát) nesúcej záporný náboj, ktorý takto mimikuje náboj odstupujúcej UMP skupiny v prirodzenom substráte. Lepšiu distribúciu náboja je možné dosiahnuť aj zavedením elektronegatívneho atómu fluóru, či geminálnych difluoridov.

Práca vznikla za finančnej podpory projektu VEGA 2/0024/16.

## LITERATÚRA

1. Tvaroška I., André I., Carver J. P.: *Glycobiology* 13, 559 (2003).
2. Dwek R. A., Butters T. D., Platt F. M., Zitzmann N.: *Nat. Rev. Drug Discov.* 1, 65 (2002).
3. Marquardt T., Freeze H.: *Biol. Chem.* 382, 161 (2001).
4. Hirsch J., Kooš M., Tvaroška I.: *Chem. Pap.* 63, 329 (2009).

## 2L-07

## NEW COMPOUNDS WITH 1,2,3-TRIAZOLE MOIETY

DAVID MILIČEVIČ<sup>a</sup>, ROMAN KIMMEL<sup>a</sup>, JANEZ KOŠMRLJ<sup>b</sup>, STANISLAV KAFKA<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Department of Chemistry, Faculty of Technology, Tomas Bata University in Zlin, 760 01 Zlin, Czech Republic,

<sup>b</sup> Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, 1000 Ljubljana, Slovenia

david.milicevic@gmail.com

1,2,3-Triazoles are widely applicable heterocyclic molecules that have been intensively explored in numerous areas including pharmacy and medicine. The interest in 1,2,3-triazole synthesis and studies tremendously increased in 2002, when Sharpless and Meldal independently reported copper(I) catalyzed alkyne-azide cycloaddition as an effective reaction pathway for the preparation of these compounds<sup>1-3</sup>. In addition to copper, ruthenium species have also been recognized as effective and selective catalysts. While the former result in solely 1,4-disubstituted products, the latter give mostly 1,5-disubstituted counterparts<sup>3</sup>.

Due to the well-known desirable and promising characteristics of these compounds, we focused on synthesis of various novel materials with 1,2,3-triazole scaffolds that could be potentially utilized as antimicrobial or photoprotective agents.

3-Azidoquinoline-2,4(1H,3H)-diones were combined with terminal alkynes to provide the corresponding 1,2,3-triazoles. The transformations were carried out at room temperature and in the presence of  $Cu^0/Cu^{II}$  catalytic system<sup>4</sup>. The products were successfully isolated and purified by crystallization or silica gel column chromatography.

During the experimental work, a series of new 1,4-disubstituted 1,2,3-triazole compounds has been successfully synthesized in moderate to excellent yields through the couple of consecutive reaction steps. The structures of obtained materials were unambiguously confirmed by IR and NMR spectroscopy and will be further investigated for their biological activities and physical properties.

This work was supported by the Internal Funding Agency of the Tomas Bata University in Zlin (grant No. IGA/FT/2018/007, funded from the resources of specific university research) and the Slovenian Research Agency (research core funding No. P1-0230).



## REFERENCES

1. Rostovtsev V. V., Green L. G., Fokin V. V., Sharpless K. B.: *Angew. Chem. Int. Ed.* **41**, 2596 (2002).
2. Tornøe C. W., Christensen C., Meldal M.: *J. Org. Chem.* **67**, 3057 (2002).
3. Košmrlj J.: *Click Triazoles, Topics in Heterocyclic Chemistry*. Springer, Berlin/Heidelberg 2012.
4. Kafka S., Hauke S., Salčinović A., Soidinsalo O., Urankar D., Košmrlj J.: *Molecules* **16**, 4070 (2011).

## 2L-08

NOVÉ RECYKLOVATELNÉ KATALYZÁTORY  
ASYMETRICKÉ HENRYHO REAKCE

PAVEL DRABINA

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika  
pavel.drabina@upce.cz

Výzkum v oblasti recyklace katalyzátorů a její zavádění do praxe je významný nejen z hlediska ekonomických aspektů daného chemického procesu, ale i rozvoje ekologicky udržitelných technologií. Další důvod, proč je recyklace katalyzátorů žádoucí, spočívá ve zjednodušení chemického postupu, vedoucí následně k úspoře surovin, energií a lidských zdrojů. Mezi významné strategie, jak lze získat recyklovatelný katalyzátor, patří imobilizace účinného homogenního katalyzátoru na pevný nosič. Pevné nosiče lze klasifikovat jako organické (rozpuštěné a nerozpuštěné polymery) nebo anorganické (SiO<sub>2</sub>, zeolity, jíly, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> apod.). Důležitými charakteristikami takto imobilizovaných katalyzátorů je především jejich katalytická aktivita, snadnost separace, účinnost po recyklaci, cena nebo možnosti technologického uspořádání (např. možnost použití v průtočných reaktorech)<sup>1</sup>. V tomto příspěvku bude pozornost zaměřena na nové recyklovatelné katalyzátory asymetrické Henryho reakce, založené na měďnatých komplexech chirálních 2-(pyridin-2-yl)imidazolidin-4-onů<sup>2-6</sup>.

Připravené recyklovatelné katalyzátory byly charakterizovány a následně testovány pro Henryho reakci alifatických i aromatických aldehydů s nitromethanem resp. nitroethanem. Odpovídající 2-nitroalkanolů byly obvykle získány ve vysokých výtěžcích a s vysokou enantioselektivitou (~ 90 % ee). Pozornost byla věnována vlivu recyklace katalyzátorů na jejich katalytickou aktivitu a enantioselektivitu. Bylo zjištěno, že i vícenásobná recyklace nevede k výraznému poklesu jejich enantioselektivity, a proto tyto katalyzátory představují systémy s vysokým aplikačním potenciálem.

Tato práce vznikla za podpory Grantové Agentury ČR, projekt č. 17-08499S.

## LITERATURA

1. Drabina P., Harmand L., Sedlák M.: *Curr. Org. Synth.* **11**, 879 (2014).
2. Bhosale D. S., Drabina P., Palarčík J., Hanusek J., Sedlák M.: *Tetrahedron: Asymmetry* **25**, 334 (2014).

3. Harmand L., Drabina P., Pejchal V., Husáková L., Sedlák M.: *Tetrahedron Lett.* **56**, 6240 (2015).
4. Bhosale D. S., Drabina P., Kincl M., Vlček M., Sedlák M.: *Tetrahedron: Asymmetry* **26**, 1300 (2015).
5. Nováková G., Drabina P., Frumarová B., Sedlák M.: *Adv. Synth. Catal.* **358**, 2541 (2016).
6. Nováková G., Drabina P., Svoboda J., Sedlák M.: *Adv. Tetrahedron: Asymmetry* **28**, 791 (2017).

## 2L-09

SOLID PHASE SYNTHETIC APPROACH TOWARDS  
NEW PYRIMIDINES AS PROMISING  
ANTITUBERCULAR AND ANTIMICROBIAL AGENTSROMANA MACHNÍKOVÁ<sup>a</sup>, LUCIE JANOVSKÁ<sup>b</sup>,  
LUCIE BRULÍKOVÁ<sup>a\*</sup>

<sup>a</sup> Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc,

<sup>b</sup> Department of Microbiology, Faculty of Medicine and Dentistry, Palacký University, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc, Česká republika  
lucie.brulikova@upol.cz

Pyrimidine pharmacophore plays an important role in several biological active substances and was found to possess a range of diverse biological activities such as anticancer, anti-inflammatory, anti-hepatitis, anti-diabetic and many others. Moreover, variously modified pyrimidines were studied as antimycobacterial and/or antibacterial agents<sup>1-3</sup>.

In a view of biological significance of pyrimidine pharmacophore, we designed and synthesized two scaffolds **I** and **II** (Fig. 1). All prepared compounds were evaluated for their antimycobacterial activity against *M. tuberculosis* H37Rv. Furthermore, all compounds were also studied for their antibacterial activity against several Gram-positive and Gram-negative strains such as *Staphylococcus aureus*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Escherichia coli* or *Enterococcus faecalis*.

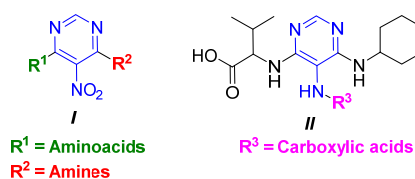


Fig. 1. Overview of synthesized pyrimidines

Our results revealed that some of the tested compounds displayed potent antitubercular activity with MIC value 32 µg/mL. Moreover, some derivatives showed interesting activity against *P. aeruginosa* with MIC value 2 µg/mL.

This work was supported by the National Program of Sustainability (project LO1304).

## REFERENCES

1. Wilson C. R., Gessner R. K., Moosa A., Seldon R.,

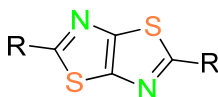
- Warner D. F., et al.: *J. Med. Chem.* 60, 10118 (2017).  
 2. Reddy D. S., Hosamani K. M., Devarajegowda H. C.: *Eur. J. Med. Chem.* 101, 705 (2015).  
 3. Seenaiah D., Reddy P. R., Reddy G. M., Padmaja A., Padmavathi V., Siva krishna N.: *Eur. J. Med. Chem.* 77, 1 (2014).

**2L-10****THIAZOLO[5,4-D]THIAZOLE DERIVATIVES AS BUILDING BLOCKS FOR  $\pi$ -CONJUGATED SEMICONDUCTORS**

**RÓBERT BALOGH<sup>a</sup>, MARTIN DANKO<sup>a</sup>, ANITA ECKSTEIN-ANDICSOVÁ<sup>a</sup>, ERIKA KOZMA<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Polymer Institute SAS, Dúbravská cesta 9, 84541 Bratislava 45, Slovak Republic, <sup>b</sup> Istituto per lo Studio delle Macromolecole, CNR, Via Alfonso Corti 12, 20133 Milano, Italy  
 robert.balogh@savba.sk

The development of  $\pi$ -conjugated semiconductors for optoelectronic applications by alternating donor and acceptor units is the most common approach for the synthesis of low band gap materials. Thiazolo[5,4-d]thiazoles (TzTz), characterized by a rigid and coplanar structure, high stability and good electron acceptor properties are valuable starting materials for the design of electron accepting semiconductors. The use of TzTz derivatives for various optoelectronic applications like OLEDs, OFETs, emitters and fluorescent sensors, has been already demonstrated<sup>1-3</sup>.



Scheme 1. Structure of thiazolo[5,4-d]thiazole (R= aryl or heteroaryl)

Following this concept, in this work we describe the synthesis and characterization of thiazolo-thiazole based  $\pi$ -conjugated molecules and polymers. Various substituted aromatic and heteroaromatic aldehydes and dithiooxamide were used as starting materials in various reaction conditions. Subsequently various  $\pi$ -conjugated systems were prepared by Suzuki coupling reaction. According to their optical and electrochemical properties, their applications in optoelectronics will be demonstrated.

This work was supported by the Slovak Grant Agencies VEGA through projects No. 2/0158/17 a 2/0161/17.

**REFERENCES**

- Smirnova N. G., Zavarzin I. V., Krayushkin M. M.: *Chem. Heterocycl. Compd.* 42, 144 (2006).
- Reginato G., Mordini A., Zani L., Calamante M., Dessi A.: *J. Org. Chem.* 2016, 233 (2016).
- Benin V., Yeates A. T., Dudis D.: *J. Heterocycl. Chem.* 45, 811 (2008).

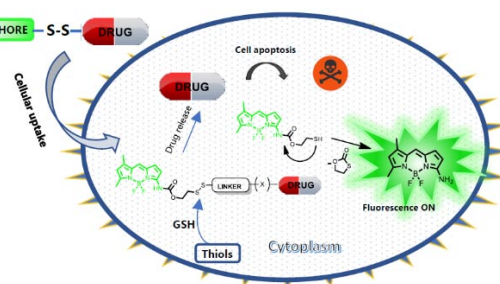
**2L-11****DEVELOPMENT OF NOVEL OFF-ON BODIPY FLUORESCENT SYSTEM FOR VISUALIZATION OF DRUG RELEASE**

**MARTIN PORUBSKÝ<sup>a</sup>, JAN HLAVÁČ<sup>b\*</sup>**

<sup>a</sup> Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, Palacky University, 771 46 Olomouc, <sup>b</sup> Institute of Molecular and Translation Medicine, Faculty of Medicine and Dentistry, Palacky University, Hněvotínska 5, 779 00 Olomouc, Czech Republic  
 martin.porubsky@upol.cz

Drug delivery is one of the most rapidly evolving topic in the area of medicinal chemistry mainly due to selective targeting of desired cells. Cancer cells are often connected with overexpression of glutathione (GSH) and enzymes, mainly glutathione-S-transferase (GSTs) to protect themselves from toxic xenobiotics including therapeutic agents<sup>1</sup>.

We have developed new system for monitoring of drug release due to increased concentration of glutathione. The drug can be bound via thiol, amino or hydroxy group to BODIPY as a fluorescent dye via self-immolative disulphide linker. The releasable disulphide linker previously used in other systems<sup>2</sup> proved to be stable in the presence of low concentrations of GSH normally present in cells (20  $\mu$ M) but was readily disengaged in the higher concentrations of GSH (around 5mM), occurring in cancer cells. The suitable fluorescent properties of prepared conjugates enabled us to develop the OFF-ON fluorescent system with approximately 5-fold increase of fluorescence after cleavage of disulphide linker after treatment with GSH. This feature together with ratiometric excitation character of our system allows the real time monitoring and visualisation of drug release by ratiometric measurement.



Scheme 1.

This work was supported by Technology Agency of the Czech Republic (TE02000058), Ministry of Education, Youth and Sport of the Czech Republic (project IGA\_PrF\_2016\_020, National Program of Sustainability (project LO1304).

**REFERENCES**

- Lee M. H., Sessler J. L., Kim J. S.: *Acc. Chem. Res.* 48, 2935 (2015).
- Zhang Y., Yin Q., Yen J., Li J., Ying H., Wang H., Hua

Y., Chaney E. J., Boppart S. A., Cheng J.: Chem. Commun. 51, 6948 (2015).

## 2L-12

### MULTINUCLEAR NMR STUDIES OF TAUTOMERISM AND E/Z ISOMERISM IN AZO DYES: PAST AND PRESENT

ANTONÍN LYČKA

Research Institute for Organic Syntheses (VUOS a. s.), č.p. 296, CZ-533 54 Rybitví, Czech Republic  
antonin.lycka@vuos.com

Azo dyes are very frequently used type of colorants. They are usually prepared by diazonium salts coupling reactions with so called passive components containing hydroxy, amino, or activated methylene groups, azo-hydrazo tautomerism being a typical feature of such compounds. Multinuclear NMR spectroscopy is a very useful technique used for characterization of them. The  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  and, especially,  $^{15}\text{N}$  NMR data are very precious. Some time ago,  $^{15}\text{N}$  labelled compounds had to be used to study specific features<sup>1,2</sup>.

Modern NMR spectroscopy allows at present to obtain most of these results using compounds with natural abundance level of  $^{15}\text{N}$ . Regardless of this fact, many dyes and colorists are very conservative relying on routine 1D  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR data or even completely ignoring NMR spectroscopy and relying on UV-VIS, IR, etc. Such a conservative approach frequently leads to incorrect conclusions.

The aim of this contribution is to present an application of  $^{15}\text{N}$  NMR data measured at the natural abundance level of  $^{15}\text{N}$  as the “first glance” method providing the strongest evidence for the existence of hydrazo forms of azo dyes and differentiation of E and Z isomers on  $\text{C}=\text{N}_\beta$  double bond derived from compounds containing activated methylene groups in passive components<sup>3,4</sup>.

#### REFERENCES

1. Lyčka A.: Annu. Rep. NMR Spectr. 26, 247 (1993).
2. Lyčka A.: Annu. Rep. NMR Spectr. 42, 1 (2000).
3. Lyčka A.: Dyes Pigm. 142, 51 (2017).
4. Lyčka A.: Dyes Pigm. 150, 181 (2018).

## 2L-13

### NOVEL FLUORESCENT SYSTEM FOR MULTIPLE PROTEASE DETECTION

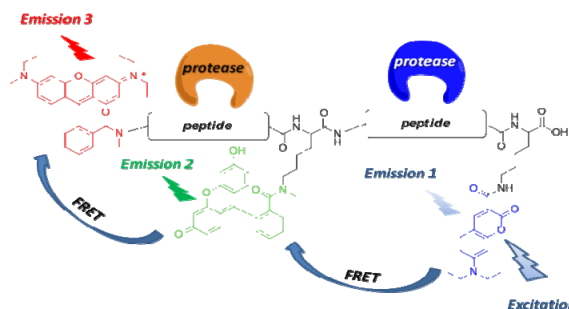
YANA OKOROCHENKOVA, MARTIN PORUBSKÝ, SANDRA BENICKÁ, JAN HLAVÁČ

Institute of Molecular and Translational Medicine, Palacký University Olomouc, Hněvotínská 5, 779 00 Olomouc, Czech Republic  
jan.hlavac@upol.cz

Proteases belong to the most important biomolecules in a living organism. Their functions vary from controlling cell

proliferation and DNA replication to inducing cell apoptosis. The proteases act very often in complex process involving the coordinated action of multiple proteases or cascade-like organization<sup>1,2</sup>. To study multi-component interactions, it is necessary to employ a reliable method, where multiple enzymes can be selectively recognized.

Recently we reported new system for two proteases detection based on three-fluorophores connected by two cleavable linkers<sup>3</sup>.



The system is able to monitor presence of one, other or both proteases in their mixture via ratio of fluorescence emission intensities of the dyes. Moreover the system enables variation of detection limits and time of the assay and the synthetic protocol is adaptable to various proteases.

This work was supported by National Program of Sustainability LO1304

#### REFERENCES

1. McIlwain D. R., Berger T., Mak T. W.: Cold Spring Harb. Perspect. Biol. 5, a008656 (2013).
2. Davie E. W., Fujikawa K., Kisiel W.: Biochemistry 30, 10363 (1991).
3. Okorochenkova Y., Porubsky M., Benicka S., Hlavac J.: Chem. Comm. DOI: 10.1039/C8CC01731J (2018).

## 2L-14

### NEUTRAL SPHINGOMYELINASE 2 INHIBITORS AS POTENTIAL THERAPEUTICS FOR THE TREATMENT OF BRAIN INJURY AND NEURODEGENERATIVE DISEASES

RADIM NENCKA<sup>a</sup>, MICHAL ŠÁLA<sup>a</sup>, AJIT THOMAS<sup>b</sup>, RANA RAIS<sup>b</sup>, BARBARA SLUSHER<sup>b</sup>, CAMILO ROJAS<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the CAS, Flemingovo náměstí 542/2, 166 10 Praha 6, Czech Republic,  
<sup>b</sup> Johns Hopkins Drug Discovery, Baltimore, Maryland 21205, United States

nencka@uochb.cas.cz

Ceramide production catalyzed by neutral sphingomyelinase 2 (nSMase2) is a requisite step in the formation and budding of exosomes<sup>1</sup>. Exosomes are small vehicles, 30–100 nm in diameter, which play critical roles in

the cell-cell communication regulating many physiological and pathological processes<sup>2-4</sup>. Preclinical evidence suggests that modulation of exosome biosynthesis through nSMase2 inhibition is a new avenue for the treatment of neurological diseases associated with dysfunctional exosomal communication. In addition, recent studies indicate that exosomes released from glial cells are involved in both A $\beta$  plaque aggregation<sup>5</sup> and tau propagation, two major hallmarks of Alzheimer's disease (AD). Pharmacological inhibition or genetic deletion of nSMase2 has been shown to significantly decrease A $\beta$  plaque aggregation and tau propagation resulting in dramatic improvement in behavioral and cognitive tests in AD rodent models<sup>5</sup>. In collaboration with Johns Hopkins Drug Discovery, we have performed a screening of the IOCB library of compounds and identified a promising hit compound. Chemical optimization the hit (over 140 analogs) led to MS882, a potent nSMase2 inhibitor (IC<sub>50</sub> = 0.3  $\mu$ M) with excellent drug-like properties. MS882 is metabolically stable in mouse and human liver microsomes, and shows excellent brain penetration. MS882 is also orally available (F%~50% of systemic dose). MS882 dose-dependently inhibits exosome release from activated astrocytes. Both the *in vitro* and *in vivo* results indicate target engagement of MS882 to inhibit exosome release via nSMase2 inhibition.

*The project was supported by the Academy of Sciences Czech Republic (RVO: 61388963). The work was supported from European Regional Development Fund; OP RDE; Project: Chemical biology for drugging undruggable targets (ChemBioDrug) (No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000729).*

#### REFERENCES

1. Trajkovic K., Hsu C., Chiantia S., Rajendran L., Wenzel D., Wieland F., Schwille P., Brugger B., Simons M.: *Science* 319, 1244 (2008).
2. Ibrahim A., Marban E.: *Annu Rev. Physiol.* 78, 67 (2016).
3. Raposo G., Stoorvogel W.: *J. Cell Biol.* 200, 373 (2013).
4. Weidle U. H., Birzele F., Kollmorgen G., Ruger, R.: *Cancer Genomics Proteomics* 14, 1 (2017).
5. Dinkins M. B., Dasgupta S., Wang G., Zhu G., Bieberich E.: *Neurobiol. Aging* 35, 1792 (2014).

## 2P-01

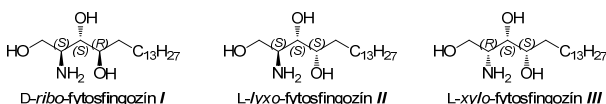
## TOTÁLNA SYNTÉZA

## L-lyxo- A L-xylo-FYTOSFINGOZÍNŮV

JANA ŠPAKOVÁ RASCHMANOVÁ<sup>a</sup>, MIROSLAVA MARTINKOVÁ<sup>a</sup>, JOZEF GONDA<sup>a</sup>, MARTINA BAGO PILATOVÁ<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice, <sup>b</sup> Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Lekárska fakulta, Ústav farmakológie, Trieda SNP 1, 040 66 Košice, Slovensko  
jana.raschmanova@upjs.sk

Fytosfingozíny sú alifatické 2-amino-1,3,4-trioly s dlhým uhlíkovodíkovým reťazcom (obr. 1) a sú štruktúrnymi zložkami sfingolipidov najmä u kvasiniek a húb, ale vyskytujú sa aj v cicavčích tkanivách a morských organizmoch<sup>1</sup>. Dominantné zastúpenie v prírode má D-*ribo*-fytosfingozín **I**, ktorý bol prvýkrát izolovaný v roku 1911 Zelnerom z huby *Amanita muscaria* a vyznačuje sa zaujímavou biologickou aktivitou<sup>1</sup>.



Obr. 1. Štruktúra D-*ribo*-fytosfingozínu **I** a jeho dvoch stereoizomérov (látky **II** a **III**)

Intenzívna syntetická práca na poli prípravy **I** a jeho stereochemických analógov<sup>2,3</sup> je však ochudobnená o informácie týkajúce sa ich biologickej aktivity. To bol jeden z dôvodov, ktorý nás viedol ku konštrukcii **II** a **III** so zámerom ohodnotiť ich cytotoxický profil.

Ako východisková látka bol v našej syntetickej stratégii (Schéma 1) použitý komerčne dostupný dimetylexer kyseliny L-vínnej **XVI**, ktorý už vo svojej molekule obsahuje dve stereogénne centrá. Sekvenciou chemických transformácií bol z **XVI** pripravený alylrichlóracetimidát **XIV**, resp. alyltiokyanát **XV**. Oba zmienené deriváty reprezentujú vhodné substráty pre kľúčové [3,3]-sigmatropné prešmyky, prostredníctvom ktorých bolo do štruktúry zabudované požadované stereocentrum s dusíkovou funkcionalitou. Produkty prešmykov, trichlóracetamidy **X**, **XI** a izotioxyantáty **XII**, **XIII** boli vzájomnou premenou ich funkčných skupín modifikované na pokročilé syntóny **VIII**, **IX**. Na inkorporovanie postranného lipofilného reťazca bola využitá Wittigova olefinácia za tvorby zodpovedajúcich alkénov **VI**, **VII**. Hydrogenácia **VI**, **VII** ( $H_2$ , 10%Pd/C/20% Pd(OH)<sub>2</sub>/C, EtOH), nasledovaná deprotekciovou chrániacich skupín (TFA/H<sub>2</sub>O) poskytla cieľové molekuly vo forme ich solí **II.TFA**, **III.TFA**. Tie boli následne acetylované na známe deriváty **IV**<sup>4-6</sup> a **V**<sup>7,8</sup>. Finálne fytosfingozíny **II.TFA** a **III.TFA** boli podrobené testovaniu ich antiproliferačnej/cytotoxickej aktivity na 7 typoch rakovinových bunkových línií. Treba povedať, že protirakovinový potenciál takýchto látok nebol zatiaľ v literatúre študovaný.

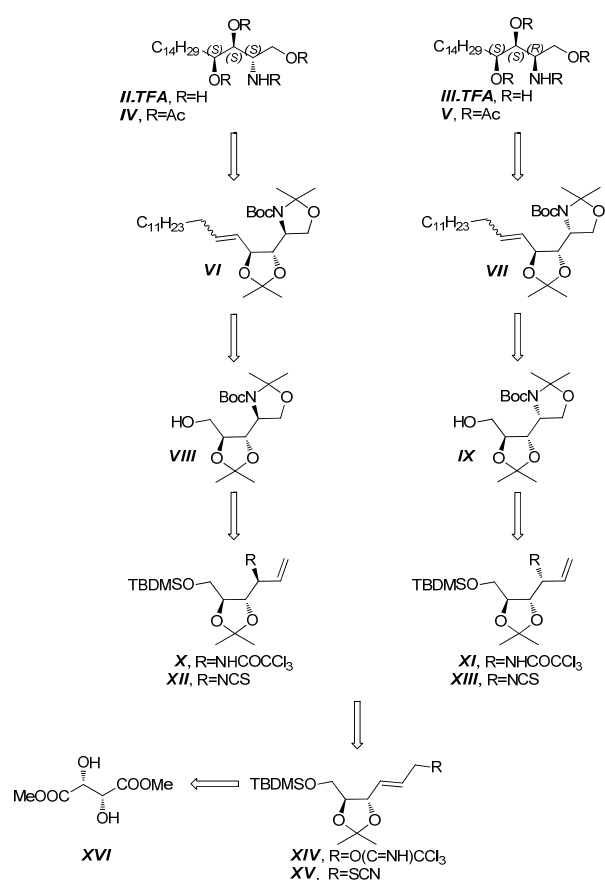


Schéma 1. Retrosyntéza prípravy L-*lyxo*-**II** a L-*xylo*-**III** fytosfingozínov

Tento príspevok vznikol s finančnou podporou projektov VEGA (1/0047/18, 1/0546/16) a APVV 14-0883.

## LITERATÚRA

- Howell A. R., Ndakala A. J.: *Curr. Org. Chem.* **6**, 365 (2002).
- Morales-Serna J. A., Llavera J., Díaz Y., Matheu M. I., Castellón S.: *Curr. Org. Chem.* **14**, 2483 (2010).
- Gao Y., He X., Ding F., Zhang Y.: *Synthesis* **48**, 4017 (2016).
- Lee M. Y., Baek D. J., Lee S., Kim D., Kim S.: *J. Org. Chem.* **76**, 408 (2011).
- Shirota O., Nakanishi K., Berova N.: *Tetrahedron* **55**, 13643 (1999).
- Sugiyama S., Honda M., Komori T.: *Liebigs Ann. Chem.* **11**, 1069 (1990).
- Kumar P., Dubeya A., Puranik V. G.: *Org. Biomol. Chem.* **8**, 5074 (2010).
- Fernandes A., Kumar P.: *Synthesis* **1**, 129 (2003).

## 2P-02

STEREOKONVERGENTNÁ SYNTÉZA  
HYDROXYLOVANÝCH OKTAHYDROINDOLOV

MICHAEL ŠIROKÝ, JOZEF GONDA

Katedra Organickej chémie, Ústav chemických vied,  
Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11,  
040 01 Košice, Slovensko  
siroky.michael@gmail.com

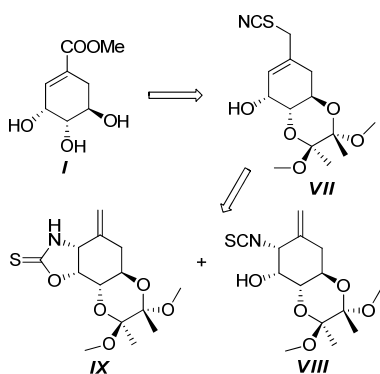
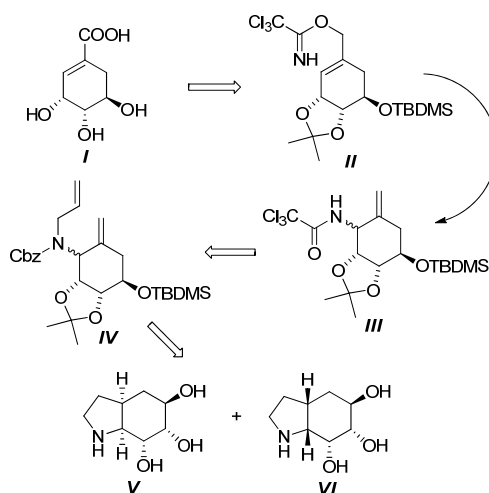
Viaceré známe dusíkaté polyhydroxylované alkaloidy, ako napríklad kastanospermin<sup>1</sup>, sú zaujímavé svojou biologickou aktivitou ako inhibítory glykozidáz, avšak ich terapeutické použitie je obmedzené, vzhľadom na ich toxicitu voči ľudským bunkám. Preto je potrebný vývoj nových polyhydroxylovaných alkaloidov, pre lepšie poznanie štruktúrnych nárokov pre inhibíciu glykozidáz.

Tieto látky spolu so skupinou karbacukrov obsahujúcich rôzne chránené amino skupinu<sup>2</sup>, sú tiež vhodnými kandidátmi pre vývoj účinných inhibítorov β-galaktosidáz a β-gluosidáz. Podobne aj fluórované piperidínové iminosacharidy vykazujú na vybraných glykozidázach zaujímavú inhibičnú aktivitu<sup>3</sup>.

Ako pokračovanie našej snahy o prípravu nových polyhydroxylovaných iminosacharidov sme uskutočnili stereokonvergentnú syntézu zlúčenín **V** a **VI** s použitím prešmyku alyltrichloracetimidátu **II** a alyltiokyanátu **VII**.

Popisovaná totálna syntéza vychádza z kyseliny šikimovej a jej cieľom sú dva diastereoizoméry oktahydroindoltriolu, pričom jeden z finálnych produktov a niektoré medzi produkty boli testované na ich antiproliferačnú aktivitu voči ôsmim malígnym bunkovým líniam s dobrými až vynikajúcimi výsledkami. Taktiež bol testovaný inhibičný účinok finálnej zlúčeniny **V** na troch glykozidázach so sľubnými výsledkami.

Zatiaľ čo pri prešmyku zlúčeniny **II** sme získali dva diastereoizoméry, z ktorých sa sledom ďalších reakčných krokov pripravili látky **V** a **VI**, pri prešmyku zlúčeniny **VII** sme pozorovali vznik jedného diastereoizoméru, v závislosti od použitých reakčných podmienok, buď v cyklickej, alebo acyklickej forme. Ďalšou modifikáciou zlúčeniny **IX** je možné sa selektívne dopracovať k finálnej látke **VI**, ktorá má rovnakú relatívnu konfiguráciu na stereogénnom centre nesúcom dusík.

Schéma 1. Diastereoselektívny prešmyk alyltiokyanátu **VII**Schéma 2. Retrosynetická analýza syntézy zlúčenín **V** a **VI** s použitím Overmanovho prešmyku

Prezentovaná práca bola podporená Grantovou Agentúrou (č. 1/0168/15) Ministerstva Školstva Slovenskej Republiky. Tiež bola podporená Agentúrou na podporu vedy a výskumu (SRDA Grant č. APVV-14-0883) a projektom MediPark Košice: 26220220185, podporený Operačným programom Výskum a Vývoj (OPVaV-2012/2.2/08-RO, zmluva č. OPVaV/12/2013).

## LITERATÚRA

- Kang M. S., Liu P. S., Bernotas R. C., Harry B. S., Sunkara P. S.: *Glycobiology* 5, 147 (1995).
- Scallan M., Wolfsgruber A., Gonzales Santana A., Tysoc Ch., Fischer R., Stütz E. A., Thonhofer M., Withers G. S.: *Carbohydr. Res.* 440-441, 1 (2017).
- Bhuma N., Burade S. S., Louat T., Herman J., Kwande S., Doshi P. J., Dhawale D. D.: *Tetrahedron* 8, 74 (2018).

## 2P-03

SYNTÉZA ANALÓGOV BIOLOGICKY AKTÍVNYCH  
ZLÚČENÍN SO ZABUDOVANÝMI MOLEKULOVÝMI  
PREPÍNAČMISIMONA HIRKOVÁ, JOZEF GONDA, TATIANA  
MITRÍKOVÁ, VERONIKA BODNÁROVÁ,  
MIROSLAVA MARTINKOVÁ, DÁVID ROMAN

Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta,  
Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie,  
Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovensko  
simonahirikova@gmail.com

Vďaka svojim unikátnym vlastnostiam nachádzajú azobenzény mnohé aplikácie a to napríklad v rámci svetlocitlivých funkčných zariadení, inteligentných polymérov a enzýmov, molekulových strojov, či tekutých kryštálov a patria medzi najlepšie molekulové prepínače dnešnej doby<sup>1</sup>. Sú to bistabilné fotochrómne molekuly, ktoré existujú v dvoch izomérnych formách, *trans* a *cis* a vplyvom UV, respektíve viditeľného žiarenia určitej vlnovej dĺžky je možné prepínať



medzi týmito dvoma konformáciami<sup>2</sup>. Zabudovaním azobenzénovej jednotky do štruktúry bioaktívnej zlúčeniny je možné doceliť možnosť modulácie tejto aktivity.

Cieľom našej práce bola syntéza analógov sfinganínu (**I**) a imunosupresívneho liečiva FTY720 (**II**), ktorých štruktúra by zahŕňala azobenzénovú jednotku.

Syntetická cesta vedúca k vyššie spomínaným analógom **I** pozostávala z modifikácie kyseliny D-izoaskorbovej na vhodný aldehyd a jeho napojenia na azobenzénový prepínač prostredníctvom Wittigovej reakcie.

Pri syntéze analógov **II** bola cieľová molekula rozdelená na tri komponenty. Polárna „hlava“ bola pripravená známym postupom<sup>3</sup> z tris(hydroxymetyl)aminometánu, ktorý bol Wittigovou olefináciou spojený s druhým komponentom, predstavujúcim prvú časť azobenzénovej jednotky. Napokon bola prostredníctvom Millsovej reakcie s rôzne substituovanými anilínmi vybudovaná azo-väzba.

Všetky cieľové molekuly mohli byť následne podrobené skúmaniu ich fotochrómných vlastností a biologickej aktivity v oboch izomérnych formách (*trans* aj *cis*)

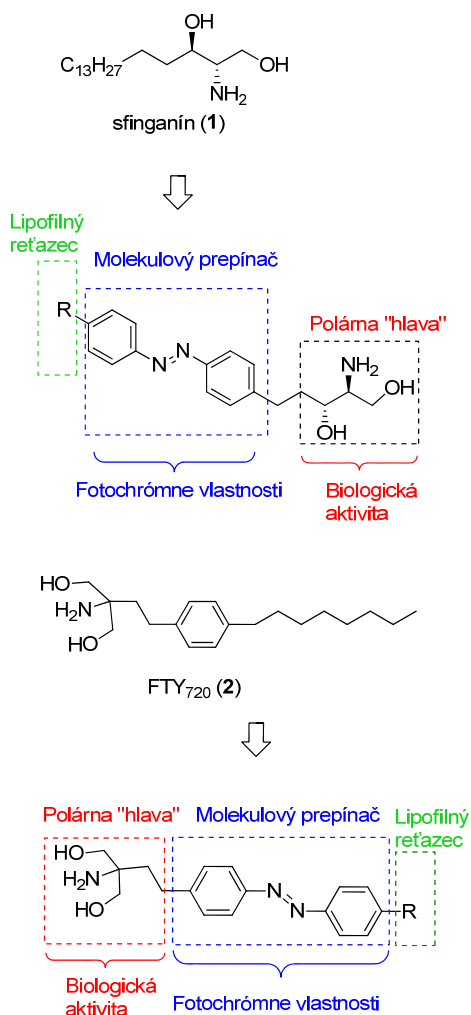


Schéma 1. Návrh štruktúrnych analógov sfinganínu a fingolimodu so zabudovaným azobenzénovým prepínačom

Prezentovaná práca bola podporená Grantovou Agentúrou (č. 1/0168/15) Ministerstva Školstva Slovenskej Republiky. Tiež bola podporená Agentúrou na podporu vedy a výskumu (SRDA Grant č. APVV-14-0883) a projektom MediPark Košice: 26220220185, podporený Operačným programom Výskum a Vývoj (OPVaV-2012/2.2/08-RO, zmluva č. OPVaV/12/2013).

#### LITERATÚRA

- Hamon F., Djedajni-Pilard F., Barbot F., Len C.: *Tetrahedron* 65, 10105 (2009).
- Merino E., Ribagorda M.: *Beilstein J. Org. Chem.* 8, 1071 (2012).
- Shaikh R. S., Schilson S. S., Wagner S., Herrmann S., Keul P., Levkau B., Schäfers M., Haufe G.: *J. Med. Chem.* 58, 3471 (2015).

#### 2P-04

#### SYNTÉZA HYBRIDU (–)-SWAINSONÍNU A MANOSTATÍNU A: NOVÝ PRÍSTUP K SYNTÉZE 1-AMINOKARBA-D-LYXOFURANÓZ

MÁRIA SPIŠÁKOVÁ<sup>a</sup>, MAROŠ BELLA<sup>a</sup>, JÁN MONCOL<sup>b</sup>, MIROSLAV KOOŠ<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Centrum glykomiky, Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, <sup>b</sup> Oddelenie anorganickej chémie, FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko maria.spisakova@savba.sk

Tento príspevok sa zaoberá prípravou 1-aminokarba-D-lyxofuranózu **2** a **3** a syntézou hybridu (–)-swainsonínu<sup>1</sup> a manostatínu A<sup>2</sup> **4** z komerčne dostupnej D-lyxózy. Kľúčová karba-β-D-lyxofuranóza **1** slúži ako dôležitý prekursor pre syntézu karba-D-lyxofuranózu<sup>3</sup> a hybridu **4** (Schéma 1). Biologické vlastnosti týchto zlúčenín sú úzko spojené s liečbou veľkého počtu ochorení ako rakovina, bakteriálne a vírusové infekcie.

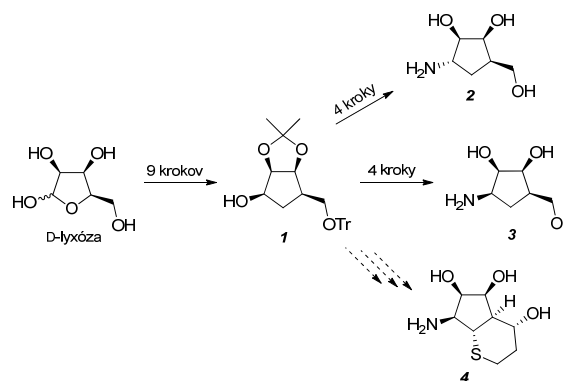


Schéma 1. Štruktúra 1-aminokarba-D-lyxofuranózu **2** a **3** a hybridu (–)-swainsonínu a manostatínu A **4**

Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore Agentúry pre podporu vedy a vývoja APVV (grant č. APVV-0484-12) a Vedeckej grantovej agentúry VEGA (grant č. 2/0064/15)

a grant č. 2/0024/16). Tento príspevok je výsledkom realizácie projektov: Centrum Excelentnosti pre Glykomiku, ITMS 26240120031, a „Univerzitného vedeckého parku STU Bratislava“, ITMS 26240220084, podporených z Operačného programu pre Výskum a vývoj financovaného z ERDF.

## LITERATÚRA

1. Pyne S. G.: *Curr. Org. Synth.* 2, 39 (2005).
2. Vasella A., Hu G.: *Helv. Chim. Acta* 87, 2405 (2004).
3. Arjona O., Gómez A. M., López J. C., Plumet J.: *Chem. Rev.* 107, 1919 (2007).

## 2P-05

### STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA C-8a SUBSTITUOVANÝCH POLYHYDROXYLOVANÝCH INDOLIZIDÍNŮVÝCH ALKALOIDOV

**JÁN ELEČKO, MIROSLAVA MARTINKOVÁ, JOZEF GONDA**

Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Ústav chemických vied,  
Katedra organickej chemie, Moyzesova 11, 040 01 Košice,  
Slovenská republika  
jan.elecko@upjs.sk

Polyhydroxylované indolizidíny ako inhibítory glykozidáz predstavujú zaujímavý cieľ organickej syntézy. Predstavitelia tejto skupiny látok, ktoré boli pôvodne izolované z prírodných zdrojov, imitujú štruktúru sacharidov<sup>1</sup>. Inhibičná aktivita do veľkej miery závisí od počtu a polohy hydroxylových skupín a konfigurácie stereogénnych centier, no jej predikcia nie je taká jednoznačná<sup>2</sup>. Syntéza nových derivátov je preto pre pochopenie účinku žiadúca až nevyhnutná.

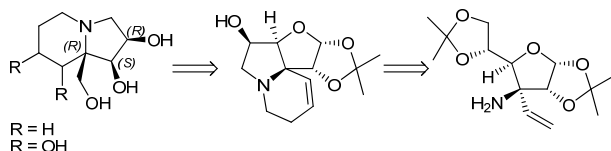


Schéma 1. Retrosyntéza cieľových látok

V návaznosti na naše predošlé práce<sup>3</sup> prezentujeme syntetický prístup vedúci ku neprirodným polyhydroxylovaným indolizidínovým alkaloidom obsahujúcim hydroxymetylový substituent v polohe C-8a vychádzajúc z chirálneho aminoderivátu pripraveného z D-glukózy.

*Predkladaná práca vznikla za podpory Vedeckej grantovej agentúry Ministerstva školstva SR (No. 1/0168/15), Agentúry pre vedu a výskum SR (SRDA Grant No. APVV-14-0883), projektu MediPark Košice: 26220220185 podporovaného v rámci Operačného programu výskum a vývoj (OPVaV-2012/2.2/08-RO, contract No. OPVaV/12/2013).*

## LITERATÚRA

1. Asano N., Nash R. J., Molyneux R. J., Fleet G. W. J.: *Tetrahedron: Asymmetry* 11, 1645 (2000).
2. Stütz A. E.: *Iminosugars as Glycosidase Inhibitors:*

*Nojirimycin and Beyond*, Wiley-VCH Verlag GmbH, 1999.

3. a) Gonda J., Martinková M., Raschmanová J., Balentová E.: *Tetrahedron: Asymmetry* 17, 1875 (2006); b) Gonda J., Elečko J., Martinková M., Fábian M.: *Tetrahedron Letters* 57, 2829 (2016).

## 2P-06

### VYUŽITIE NOVÝCH TIOMOČOVÍN OBSAHUJÚCICH SACHARIDOVÝ FRAGMENT AKO POTENCIÁLNYCH ORGANOKATALYZÁTOROV PRI SYNTÉZE BIOLOGICKY ÚČINNÝCH LÁTOK

**ROBERT RONČÁK, MONIKA TVRDOŇOVÁ, JOZEF GONDA**

Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Ústav chemických vied,  
Katedra organickej chemie, Moyzesova 11, 040 01 Košice,  
Slovenská republika  
roncakrobo@gmail.com

Sacharidy a ich deriváty sú veľmi vhodné pre použitie v organokatalyzovaných reakciách<sup>1</sup>. Široká paleta dostupných izomérov umožňuje syntézu organokatalyzátorov s rôznou konfiguráciou na rôznych stereogénnych centrách. Medzi deriváty, ktoré dosahujú dobré výsledky v organokatalýze rôznych typov reakcií patria aj tiomočoviny. Obmenou sacharidovej časti štruktúry tiomočovín dokážeme kontrolovať vznik jednotlivých izomérov v katalyzovaných reakciách.

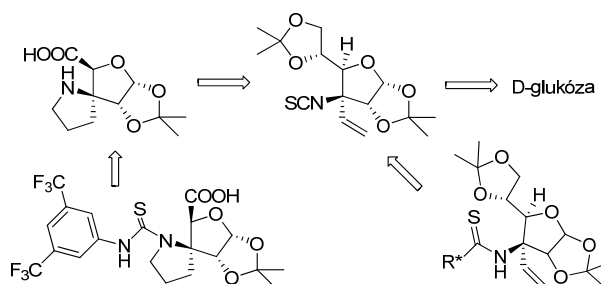


Schéma 1. Retrosyntéza tiomočovín so sacharidov časťou

Naša stratégia pri syntéze nových tiomočovín obsahujúcich sacharidový skelet vychádza z D-glukózy. Sériou transformácií s využitím [3,3]-sigmatropného prešmyku sme štruktúru modifikovali na izotiokyanát<sup>2</sup>, ktorý slúžil ako pokročilý prekurzor v ďalšej syntéze<sup>3</sup>. Pripravené boli nové tiomočoviny s bis(3,5-(trifluorometyl)fenylovým fragmentom alebo fragmentom obsahujúcim rôzne chirálne aminy. Organokatalytická aktivita všetkých pripravených derivátov bola testovaná v rôznych typoch reakcií ako napr. Henryho reakciách, Michaelových adíciách.

*Predkladaná práca vznikla za podpory Vedeckej grantovej agentúry Ministerstva školstva SR (No. 1/0168/15), Agentúry pre vedu a výskum SR (SRDA Grant No. APVV-14-0883), projektu MediPark Košice: 26220220185 podporovaného v rámci Operačného programu výskum a vývoj (OPVaV-2012/2.2/08-RO, contract No. OPVaV/12/2013).*



## LITERATÚRA

1. a) Liu K., Cui H.-F., Nie J., Dong K.-Y., Li X.-J., Ma J.-A.: *Organic Letters* 9, 923 (2007), b) Agarwal J., Peddinti R. K.: *Tetrahedron Lett.* 52, 117 (2011).
2. Gonda J., Martinková M., Raschmanová J., Balentová E.: *Tetrahedron: Asymmetry* 17, 1875 (2006).
3. Gonda J., Elečko J., Martinková M., Fábian M.: *Tetrahedron Lett.* 57, 2895 (2016).

## 2P-07

STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA POKROČILÉHO PREKURZORA LAKTACYSTIN- $\beta$ -LAKTONU

**MARTIN FÁBIAN**, MIROSLAVA MARTINKOVÁ, JOZEF GONDA

Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovenská republika  
martin.fabian@student.upjs.sk

(+)-Laktacystín bol objavený v roku 1991, keď bol izolovaný z baktérie z rodu *Streptomyces*<sup>1</sup>. Prvá totálna syntéza (+)-laktacystínu bola uskutočnená v roku 1992 Coreyom a Reichardom<sup>2</sup>. (+)-Laktacystín, respektíve jeho *in vitro* aktívna forma laktacystín- $\beta$ -laktón sú selektívne inhibítory 20S proteazómu, vďaka čomu sú biologicky aktívne proti astme, ischemii alebo artritíde<sup>3</sup>.

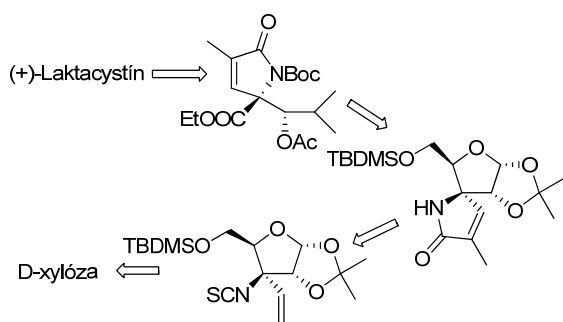


Schéma 1. Retrosyntetická stratégia

Naša syntetická stratégia vychádza z D-xylózy. Sériou krokov s využitím [3,3]-sigmatropného prešmyku sme štruktúru modifikovali na izotiokyanát<sup>4</sup>. Ďalšími krokmi sme vytvorili laktám, kde kľúčovým krokom bola metatéza pomocou Grubbsovho katalyzátora 2. generácie. Otvorením furanózového skeletu a modifikácií funkčných skupín pripravíme pokročilý intermediát laktacystín- $\beta$ -laktónu.

Predkladaná práca vznikla za podpory Vedeckej grantovej agentúry Ministerstva školstva SR (No. 1/0168/15), Agentúry pre vedu a výskum SR (SRDA Grant No. APVV-14-0883), projektu MediPark Košice: 26220220185 podporovaného v rámci Operačného programu výskum a vývoj (OPVaV-2012/2.2/08-RO, contract No. OPVaV/12/2013).

## LITERATÚRA

1. Omura S., Fujimoto T., Otaguro K., Matsuzaki K., Moriguchi R., Tanaka H., Sasaki Y.: *J. Antibiot.* 44, 113 (1991).
2. Corey E. J., Reichard G. A.: *J. Am. Chem. Soc.* 114, 10677 (1992).
3. Masse E. C., Morgan J. A., Adams J., Panek S. J.: *Eur. J. Org. Chem.* 14, 2513 (2000).
4. Martinková M., Gonda J., Raschmanová J.: *Molecule* 11, 564 (2006).

## 2P-08

## OD STARÉ MOLEKULY ISONIAZIDU K ANTITUBERKULOTIKÚM S NOVÝM MECHANIZMEM ÚČINKU

**MARTIN KRÁTKÝ<sup>a</sup>**, **KATARÍNA MIKUŠOVÁ<sup>b</sup>**, **JÍŘINA STOLAŘÍKOVÁ<sup>c</sup>**, **JARMILA VINŠOVÁ<sup>a,\*</sup>**

<sup>a</sup> Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Univerzita Karlova, Česká republika, <sup>b</sup> Přírodovědecká fakulta Univerzity Komenského, Bratislava, Slovensko, <sup>c</sup> Centrum klinických laboratoří, Ostrava, Česká republika  
vinsova@faf.cuni.cz

Narůstající multiléková rezistence původce tuberkulózy *Mycobacterium tuberculosis* (*Mtb.*) iniciuje vývoj léčiv působících jiným mechanismem účinku. Isoniazid (INH) však stále zůstává klíčovým lékem první volby, i když zvyšující se procento rezistentních kmenů vyžaduje nová léčiva zasahující do metabolismu tohoto mikroorganismu jiným způsobem, aby se předešlo vzniku rezistence a zkrátala se léčba<sup>1</sup>.

Antituberkulotická aktivita oxadiazolů nás inspirovala věnovat se této skupině sloučenin blíže. Z isoniazidu **1** byly připraveny dvěma syntetickými přístupy odpovídající 1,3,4-oxadiazoly **3** (Schéma 1)<sup>1</sup>.

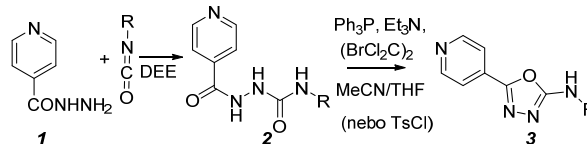


Schéma 1. Syntéza isoniazidových analogů **2** a **3**

Nové oxadiazoly **3** jsou netoxické pro eukaryotické buňky (HepG2, MonoMac-6). Jejich antimykobakteriální aktivita byla studována proti různým kmenům a byl studován mechanismus účinku (Tabulka 1). Oboje hydrazidy **2** a oxadiazoly **3** jsou účinnější vůči rezistentním a netuberkulózním mykobakteriím (*M. avium*, *M. kansasii*). U oxadiazolů **3** byla zjištěna významná účinnost vůči INH-a multilékově rezistentním kmenům *Mtb.* Na rozdíl od INH a derivátů **2**, oxadiazoly **3** neinhibují InhA, mykolové kyseliny ani biosyntézu buněčné stěny. Lze tedy konstatovat, že inhibují *Mtb.* selektivně prostřednictvím dosud neznámého mechanismu, který nesouvisí s INH<sup>1</sup>.

Tabulka I

Souhrn biologické účinnosti (MIC v [ $\mu$ M])

Typ sloučenin	INH 1	2	3
<i>Mtb.</i> H37Rv	1	$\geq 1$	$\geq 4$
Rezistentní <i>Mtb.</i> kmeny	$>250$	$\geq 16$	$\geq 4$
Netuberkulózní mykobakterie	$>250$	$\geq 4$	$\geq 8$

Tato jednoduchá chemická modifikace starého léčiva INH vedla k derivátům s inovativním mechanismem<sup>1</sup>. Studie vztahu mezi strukturou a aktivitou nejaktivnějšího oxadiazolu 3 (R = n-dodecyl) nadále pokračuje.

Práce vznikla za finanční podpory GAČR, projekt 17-27514Y.

## LITERATURA

- Vosátka R., Krátký M., Švarcová M., Janoušek J., Stolaříková J., Huszár S., Mikušová K., Korduláková J., Trejtnar F., Vinšová J.: Eur. J. Med. Chem. 151, 824 (2018).

## 2P-09

SYNTHESIS OF NOVEL DISUBSTITUTED PURINES AND PYRROLO[2,3-*d*]PYRIMIDINES BEARING ADAMANTANE MOIETY

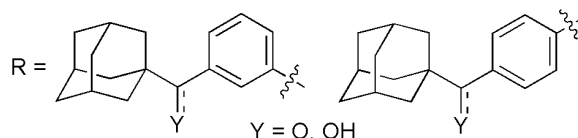
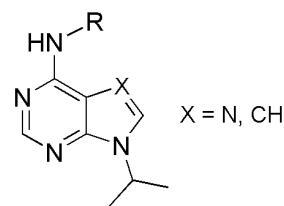
FILIP ZATLOUKAL\*, DAVID GERGELA, ROBERT VÍCHA, MICHAL ROUČHAL\*

Department of Chemistry, Faculty of Technology,  
Tomas Bata University in Zlín, Vavrečkova 275, 760 01 Zlín,  
Czech Republic  
f\_zatloukal@utb.cz; rouchal@utb.cz

Recently, purines and their bioisosteres, after a proper derivation by a whole range of substituents, have been widely investigated as potential drugs in the human medicine<sup>1,2</sup>. Introduction of the adamantane moiety into the molecules of these compounds enables formation of supramolecular complexes with a number of host molecules, e.g. cyclodextrins and cucurbit[*n*]urils<sup>3,4</sup>. The ability of the encapsulation affects solubility and permeation through the biological membranes<sup>5</sup>.

A novel family of 2,9-disubstituted purines and 4,7-disubstituted pyrrolo[2,3-*d*]pyrimidines was synthesized using three step process including alkylation, nucleophilic aromatic substitution and reduction. During an optimization of a synthetic approach, aniline was used as a model amine to test behaviour of the intermediates over the individual steps. Subsequently, four novel derivatives of 2,9-disubstituted purines along with 4,7-disubstituted pyrrolo[2,3-*d*]pyrimidines substituted with aromatic amines bearing adamantane moiety were prepared and fully characterized using spectral methods.

Moreover, a preliminary study on complexation behaviour with cyclodextrins and cucurbit[*n*]urils was performed in terms of mass spectrometry and nuclear magnetic resonance.

Scheme 1. Structure of novel disubstituted purines and pyrrolo[2,3-*d*]pyrimidines

This work was financially supported by the Internal Founding Agency of Tomas Bata University in Zlín, Project No. IGA/FT/2018/001.

## REFERENCES

- Wang X., Han C., Wu K., Luo L., Wang Y., Du X., He Q., Ye F.: Eur. J. Med. Chem. 149, 10 (2018).
- Zhao O. T., Zhao I. D., Liu X. Y., Wang B., Li Z. H., He Z. X., Zhang X. H., Liang J. J., Ma L. Y., Liu H. M.: Eur. J. Med. Chem. 151, 237 (2018).
- Nazarov V. B., Avakyan V. G., Rudyak V. Y., Alfimov M. V., Vershinnikova T. G.: J. Lumin. 131, 1932 (2018).
- Venkataramanan N. S., Suvitha A., Kawazoe Y.: J. Mol. Liq. 260, 18 (2018).
- Lee D. W., Jo J., Jo D., Kim J., Min J. J., Yang D. H., Hyun H.: J. Ind. Eng. Chem. 57, 37 (2018).

## 2P-10

## SYNTEZA KOJUGÁTOV AKRIDÍNU S AMINOKYSELINAMI A ICH VYUŽITIE V ASYMETRICKEJ SYNTEZE

PAULÍNA SLEPČÍKOVÁ, MICHAL BEČKA, JÁN IMRICH

Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Ústav chemických vied,  
Katedra organickej chemie, Moyzesova 11, 040 01 Košice,  
Slovenská republika  
paulina.plachetkova@gmail.com

Tiohydantoiny<sup>1</sup> sú známe zlúčeniny, ktoré okrem pozoruhodnej biologickej aktivity<sup>2</sup> našli v posledných rokoch svoje využitie aj ako chirálne auxiliárie v asymetrickej syntéze. Pripravili sme konjugáty nových 3-amino-2-tiohydantoinov s akridínovým<sup>3</sup> skeletom na báze aminokyselín, ktoré môžu byť aj zaujímavými prekurzormi látok pre asymetrickú aldolovú reakciu<sup>4</sup>.

Naša syntetická stratégia vychádzala z hydrochloridu metylesteru L-valínu (Schéma 1). Sekvencia niekoľkých krokov zahrňujúca redukciu vzniknutého 3-amino-2-tiohydantoinu, spojenie s akridínom cez azometínový linker a následná propionylácia viedla k príprave substrátu pre aldolovú reakciu. Konfiguráciu na novovybudovaných

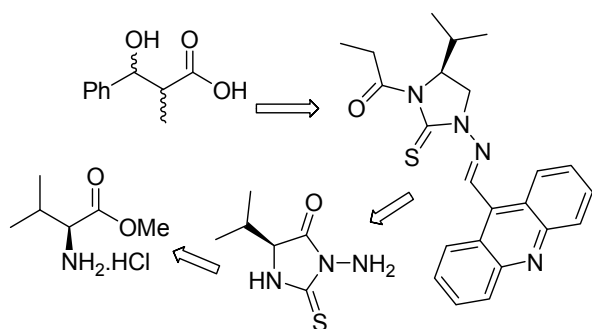
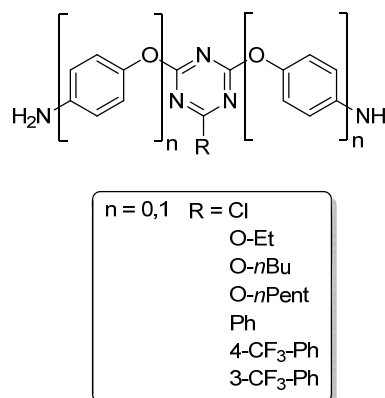


Schéma 1. Retrosynetická strategie



Obr. 1. Všeobecná struktura připravovaných diamínů

stereogenných centrech stanovíme použitím vhodných chirálních posunových činidel.

*Predkladaná práce vznikla za podpory Vnitřního vědeckého grantového systému VU a VP35 –VVGs-2017-681.*

#### LITERATÚRA

1. Wang Z. D., Sheikh S. O., Zhang Y.: *Molecules* 11, 739 (2006).
2. Vengurlekar S., Sharma R., Trivedi P.: *Let. Drug Des. Discov.* 9, 549 (2012).
3. Vilková M., Prokaiová M., Imrich J.: *Tetrahedron* 70, 944 (2014).
4. Gopal L. K., Ravi K., Varum K., Vipin A. N.: *Synthesis* 19, 323 (2011).

#### 2P-11

#### STUDIE VLIVU STRUKTURY DIAMINŮ S 1,3,5-TRIAZINOVÝM SKELETEM NA JEJICH FYZIKÁLNĚ CHEMICKÉ VLASTNOSTI A NA VLASTNOSTI OD NICH ODVOZENÝCH POLYIMIDŮ

**PAVEL ŠIMON<sup>a</sup>, JIŘÍ KULHÁNEK<sup>a</sup>, JIŘÍ ZELENKA<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, Pardubice, 53210, <sup>b</sup> TOSEDA s.r.o., U Panasonicu 376, Staré Ččivice, 53006, Česká republika  
pavel.simon1@student.upce.cz

V současné době je značná poptávka po vysoce teplotně odolných materiálech s dobrými optickými vlastnostmi a odolností vůči atomárnímu kyslíku, kosmickému a UV záření a různým chemikáliím. Vhodnými kandidáty pro tyto aplikace jsou polyimidy (PI). Za posledních 10 let byla věnována velká pozornost studiu vlivu struktury monomeru na finální vlastnosti od něho odvozených polyimidů.

Tato práce se zabývá syntézou nových monomerů s triazinem jako základním skeletem a studiem vlivu struktury monomerů na vlastnosti připraveného PI.

Připravené monomery byly analyzovány pomocí GC/MS analýzy, respektive HR-MS MALDI, <sup>1</sup>H a <sup>13</sup>C NMR. U připravených monomerů byla zkoumána jejich rozpustnost, barva a stálost na vzduchu. U připravených PI byly studovány tepelná stabilita (TGA), teplota skelného přechodu (DSC) a optické vlastnosti (transmitance a zabarvení).

Vzhledem ke špatné rozpustnosti monomerů byly pro přípravu PI použity pouze vybrané diaminy. Výsledky získané touto studií budou mít významné uplatnění v dalším výzkumu, především s ohledem na závislost struktury vs. rozpustnost diaminu a případně vlastnosti PI.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MPO ČR FV 104 80.*

#### 2P-12

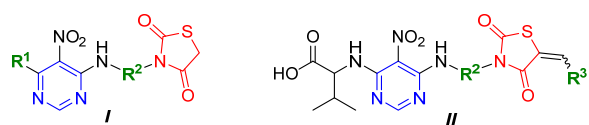
#### SOLID PHASE SYNTHESIS OF NEW THIAZOLIDINEDIONES AND THEIR ANTIMICROBIAL ACTIVITY

**VERONIKA ŠLACHTOVÁ<sup>a</sup>, LUCIE JANOVSKÁ<sup>b</sup>, LUCIE BRULÍKOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, 17. listopadu 12, 77146, Olomouc, <sup>b</sup> Department of Microbiology, Faculty of Medicine and Dentistry, Palacký University, Hněvotínská 3, 77515, Olomouc, Czech Republic  
Lucie.brulikova@upol.cz

The thiazolidine-2,4-diones are well known pharmacophores with a broad spectrum of biological activities such as antidiabetic, antimicrobial or anti-inflammatory<sup>1-3</sup>. Moreover, various thiazolidinedione derivatives were studied for their antitubercular activity showing promising results.

A novel series of thiazolidinedione (Fig. 1) analogs were designed and synthesized by employing a solid phase combinatorial approach. The synthesized compounds were tested for their antitubercular activity against *Mycobacterium tuberculosis* and antimicrobial activity against several Gram-positive and Gram-negative strains such as *Staphylococcus aureus*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Escherichia coli* and *Enterococcus faecalis*.



R<sup>1</sup>: amino acid; R<sup>2</sup>: alkyl linker; R<sup>3</sup>: alkyl/aryl

Fig. 1. Structures selected for the study

The most promising compound exhibited antimicrobial activity against *S. aureus* CCM 3953 (MBS = 128 µg/mL) and antitubercular activity against *M. tuberculosis* H37Rv (MIC = 256 µg/mL).

This work was supported by the Ministry of Education, Youth and Sport of the Czech Republic (projects IGA PrF\_2018\_029, IGA LF\_2018\_032) and the National Program of Sustainability (project LO1304).

## REFERENCES

1. Nanjan M. J., Mohammed M., Prashantha Kumar B. R., Chandrasekar M. J. N.: *Bioorg. Chem.* 77, 548 (2018).
2. Bondock S., Khalifa W., Fadda A. A.: *Eur. J. Med. Chem.* 42, 948 (2007).
3. Deep A., Jain S., Sharma P. C., Phogat P., Malhotra M.: *Med. Chem. Res.* 21, 1652 (2012).

## 2P-13

### 3,5-DIARYL-1H-PYRAZOLE DERIVATIVES AS MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS PROTEIN KINASE G (MTBPKNG) INHIBITORS: SYNTHESIS, IN-SILICO AND IN-VITRO SCREENING

ASHOK KUMAR<sup>a</sup>, GOPICHAND GUTTI<sup>a</sup>, KARAN ARYA<sup>a</sup>, DHARMARAJAN SRIRAM<sup>b</sup>, SUSHIL KUMAR SINGH<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Pharmaceutical Chemistry Research Laboratory, Department of Pharmaceutical Engineering & Technology, Indian Institute of Technology (Banaras Hindu University), Varanasi 221005, <sup>b</sup> Medicinal Chemistry & Antimycobacterial Research Laboratory, Pharmacy Group, Birla Institute of Technology & Science-Pilani, Hyderabad Campus, Jawahar Nagar, Hyderabad 500 078, Andhra Pradesh, India  
akmaurya.rs.phe@iitbhu.ac.in

With an aim to develop potent antitubercular agents, a series of novel 3,5-diaryl-1H-pyrazole analogues were synthesized and evaluated for *in-vitro* activity against *Mycobacterium tuberculosis* H37Rv. The titled compounds exhibited Minimum inhibitory concentration (MIC) in between 3.90 and < 70 µM. Among the tested compounds, PTH-14 (3-F) and PTH-17 (a-naphthalene) exhibited moderate activity (MIC 8.74 and 16.04 µM respectively), while PTH-13 (3,4-OCH<sub>3</sub>) and PTH-04 (4-OCH<sub>3</sub>) exhibited excellent activity (MIC 3.90 and 4.22 µM respectively). Molecular docking studies of PTH-13 (3,4-OCH<sub>3</sub>) and PTH-

04 (4-OCH<sub>3</sub>) on *Mycobacterium tuberculosis* protein kinase G (MtbPknG, PDB ID: 2PZI) indicated key interactions with Val-235 and G score of -7.85 and -7.69 kcal/mol respectively. In addition, these analogues showed >95% cell viability against VERO cell lines at 80 µM.



Reagents and Conditions:

a) Benzoyl chloride 1.05eq, TEA 1.05eq, EtOAc, Rt, 6hr. Yield 94.6%

b) Ar-CHO 1.0eq, 1M NaOH 1ml, EtOH, 25°C, 4-6hr. Yield 85-95%

c) (i) Hydrazine hydrate 5.0eq, EtOH, reflux, 2-4hr.

(ii) Catalytic I<sub>2</sub>, DMSO, 110°C, 1.5hr. Yield 60-90%

## REFERENCES

1. Singh N.: *J. Chem. Inf. Model.* 55, 1120 (2015).
2. Szekely R., et al.: *Imm. Lett.* 116, 225 (2008).
3. Scherr N.: *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 104, 12151 (2007).

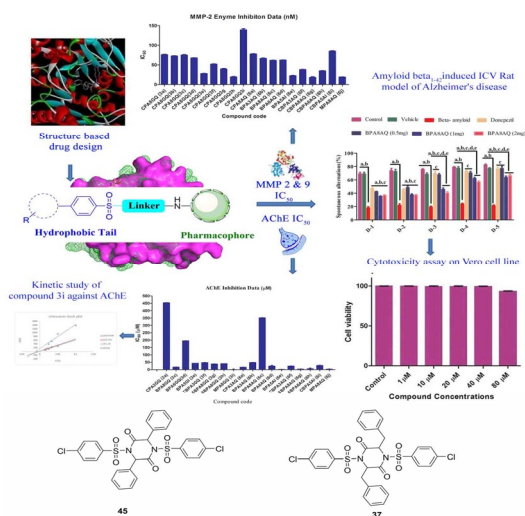
## 2P-14

### PIPERAZINEDIONES AS ACETYLCHOLINESTERASE AND MATRIX METALLOPROTEINASE-2 INHIBITORS FOR TREATMENT OF ALZHEIMER'S DISEASE

SUSHIL KUMAR SINGH, DEVENDRA KUMAR, ANKIT GANESHPURKAR

Department of Pharmaceutical Engineering & Technology, Indian Institute of Technology (Banaras Hindu University), Varanasi 221005, India  
sksingh.phe@iitbhu.ac.in

Novel 3,6-diphenyl-1,4-bis(phenylsulfonyl)piperazine-2,5-dione derivatives were designed for the treatment of Alzheimer's disease (AD) and were synthesized by reacting various substituted sulphonamides with ethylene glycol<sup>1</sup>. The synthesized compounds showed blood brain barrier penetrating ability, Acetylcholinesterase (AChE) and Matrix metalloproteinase-2 (MMP-2) inhibition potential. Compounds **37** and **45** showed very significant inhibition potential against AChE, IC<sub>50</sub>=32.45±0.044, 28.65±0.029 and MMP-2, IC<sub>50</sub> = 36.83±0.015, 19.57±0.005 (nM), respectively. Enzyme kinetics study with lead molecule **45** showed non-competitive inhibition for AChE with K<sub>i</sub> = 7 nM and competitive inhibition of MMP-2 with K<sub>i</sub> = 20 nM. Compounds **37** and **45** inhibited AChE-induced Aβ aggregation at 20 µM. The compounds also showed *in-vitro* antioxidant potential in DPPH assay. Further, compound **45** exhibited promising neuroprotection ability in MC65 cell. It significantly enhanced working memory in scopolamine-induced amnesia animal model. The learning response was also found to be improved at 5 mg/kg dose of the compound. The mitochondrial membrane potential was restored in animals when treated with compounds **37** and **45**<sup>2</sup>.



## REFERENCES

- Kumar D., Ganeshpurkar A., Kumar D., Modi G. P., Gupta S. K., Singh S. K.: *Eur. J. Med. Chem.* **148**, 436 (2018).
- Kumar D., Gupta S. K., Ganeshpurkar A., Gutti G., Krishnamurthy S., Modi G., Singh S. K.: *Eur. J. Med. Chem.* **150**, 87 (2018).

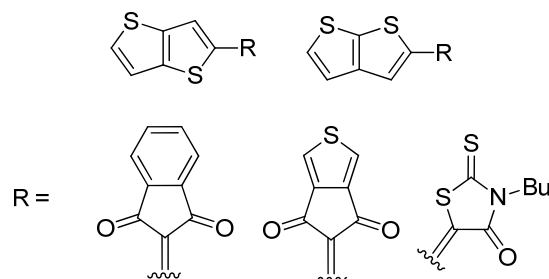
## 2P-15

**THIENO[3,2-*b*]THIOFEN A THIENO[2,3-*b*]THIOFEN  
JAKO ELEKTRON-DONORNÍ JEDNOTKY PUSH-  
PULL CHROMOFORŮ**

**JAN PODLESNÝ, FILIP BUREŠ**

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-  
technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10  
Pardubice, Česká republika  
jan.podlesny@student.upce.cz

Thieno[3,2-*b*]thiofen a thieno[2,3-*b*]thiofen představují strukturální části molekul, které nachází uplatnění v rámci různých optoelektronických aplikací jako je nelineární optika<sup>1</sup>, organické světlo emitující diody<sup>2</sup>, organické solární články<sup>3</sup> nebo organické polemy řízené tranzistory<sup>4</sup>. Oba thienothiofenové skelety reprezentují elektronově bohaté planární konjugované systémy, které mohou figurovat v nízkomolekulárních nebo polymerních látkách jako elektron-donorní strukturální jednotky. Syntéza základního thieno[3,2-*b*]thiofenu zahrnuje čtyři kroky. Šestikroková reakční cesta vede k thieno[2,3-*b*]thiofenovému jádru. Oba klíčové prekurzory pro finální Knoevenagelovu kondenzaci byly připraveny formylací základních skeletů v poloze 2 pomocí Vilsmeierovy-Haackovy reakce. Cílové chromofory obsahují ve své molekulární struktuře elektron-akceptorní jednotky jako je např. indan-1,3-dion, cyklopenta[*c*]thiofen-4,6-dion nebo *N*-butylrhodanin (obr. 1). Vztahy mezi strukturou a vlastnostmi připravených látek byly studovány pomocí UV-VIS absorpční spektroskopie, elektrochemie, diferenční skenovací kalorimetrie a DFT kalkulací.



Obr. 1. Příklady molekulární struktury cílových chromoforů.

## LITERATURA

- Rao V. P., Wong K. Y., Jen A. K.-Y., Drost K. J.: *Chem. Mater.* **6**, 2210 (1994).
- Tang W., Lin T., Ke L., Chen Z.-K.: *J. Polym. Sci. Part A Polym. Chem.* **46**, 7725 (2008).
- Liu X., Kong F., Guo F., Cheng T., Chen W., Yu T., Chen J., Tan Z., Dai S.: *Dyes Pigm.* **139**, 129 (2017).
- Meager I., Ashraf R. S., Rossbauer S., Bronstein H., Donaghey J. E., Marshall J., Schroeder B. C., Heeney M., Anthopoulos T. D., McCulloch I.: *Macromolecules* **46**, 5961 (2013).

## 2P-16

**SYNTHESIS, PHOTOCHEMISTRY  
AND PHOTSENSITIZING PROPERTIES  
OF METALLOPHTHALOCYANINES BEARING  
SPIROPYRROLIZIDINE OXINDOLES**

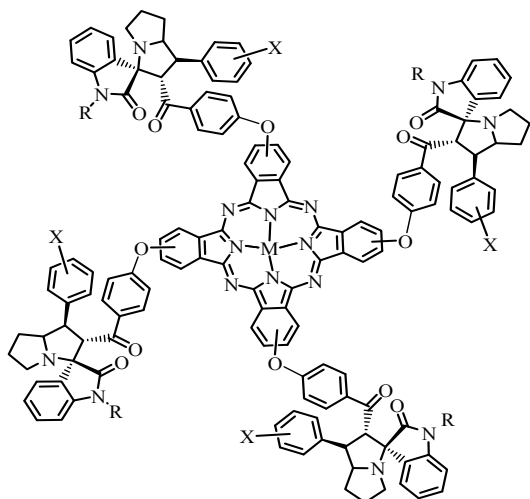
**ALI REZA KARIMI, AZAM KHODADADI,  
REYHANEH DAVOODABADI**

Department of Chemistry, Faculty of Science, Arak  
University, Arak 38156-8-8349, Iran  
a-karimi@araku.ac.ir

Interestingly, Pc derivatives are promising photosensitizing agents for photodynamic therapy (PDT) due to their intense absorption capabilities in the visible region.<sup>7</sup> However, the efficiency of Pcs is limited due to their aggregation in solvents that reduces their photoactivities such as singlet oxygen generation. An important aim of research into the chemistry of phthalocyanines is to enhance their solubility in various solvents. The solubility of Pcs can be improved by the incorporation of bulky groups at peripheral positions.

Spirocyclic oxindoles are important targets in organic synthesis due to their significant biological activities. The spiro-oxindole system is the core structure of several natural alkaloids and pharmacological agents, which have shown diverse biological activities including antimycobacterial, antitumor, antibacterial, antimicrobial and antiviral properties. A combination of these two potentially promising units (i.e. phthalocyanines and *spiropyrrrolizidine oxindole* groups) may improve their organosolubility and biological properties. Herein, we report the synthesis and characterization of several metallophthalocyanines bearing four *spiropyrrrolizidine oxindole* groups which enable the molecules to dissolve in

number of organic solvents such as DMF, DMSO and THF. It should be noted that not much research has been carried on the synthesis of phthalocyanines bearing spiro substituted, which may show remarkable properties.



Scheme 1. Metallophthalocyanines bearing spiro pyrrolizidine oxindoles

Phthalonitrile derivatives of spiro pyrrolizidine oxindoles were synthesized in three steps. The metallophthalocyanines were prepared from reaction of phthalonitrile derivatives with anhydrous metal salts [ $\text{Zn}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ , and  $\text{NiCl}_2$ ] in the presence of a few drops of DBU in high-boiling solvent (DMAE) under microwave irradiation. These complexes showed good thermal stability.

The aggregation behavior of the metallophthalocyanines was investigated at different concentrations and in two solvents (DMSO and THF). The Phthalocyanines did not show aggregation in THF and DMSO. The intensity of the absorption bands at the Q band (600–700 nm) increased on increasing the concentration and there were no new bands because of aggregation.

The singlet oxygen generation ability of the ZnPc was quantified as singlet oxygen quantum yields ( $\Phi_\Delta$ ) and was determined in DMF using 1,3-diphenylisobenzofuran (DPBF) as a chemical quencher. A continuous decrease in DPBF absorbance at 417 nm for phthalocyanine was monitored using a UV-Vis spectrophotometer within 30 min.

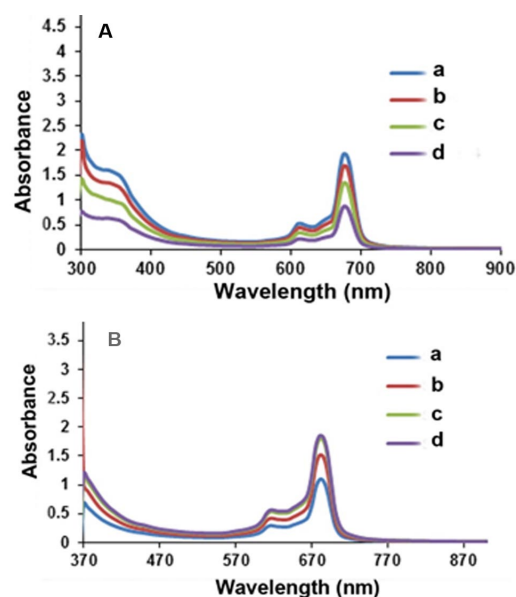


Fig. 1. Absorption spectra of phthalocyanine (A): in THF and (B): in DMF.  $c = 2 \times 10^{-5}$  M (a),  $3 \times 10^{-5}$  M (b),  $4 \times 10^{-5}$  M (c),  $5 \times 10^{-5}$  M (d)

#### REFERENCES

1. Makhseed S., Machacek M., Alfadly W., Tuhl A., Vinodh M., Simunek T., Novakova V., Kubat P., Rudolf E., Zimcik P.: *Chem. Commun.* 49, 11149 (2013).
2. Li Y., Wang J., Zhang X., Guo W., Li F., Yu M., Kong X., Wu W., Hong Z.: *Org. Biomol. Chem.* 13, 7681 (2013).
3. Chen G., He H.-P., Ding J., Hao X.-J.: *Heterocycl. Commun.* 15, 355 (2009).

#### 2P-17

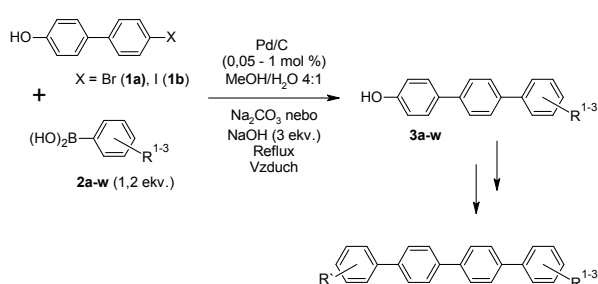
#### SYNTEZA *p*-TERFENYL-4-OLŮ A Z NICH ODVOZENÝCH *p*-QUATERFENYLŮ

**JOSEF JANSÁ, TOMÁŠ ŘEZNÍČEK, ANTONÍN LYČKA**

*Výzkumný ústav organických syntéz a.s., Rybitví 296, 533 54  
Rybitví, Česká republika  
josef.jansa@vuos.com*

Terfenylový skelet je zajímavým motivem přírodních látek<sup>1</sup>, látek s protirakovinovým účinkem<sup>2</sup> a materiálů pro elektroniku<sup>3</sup>. S využitím heterogenně (Pd/C) katalyzované Suzuki-Miyaura reakce bylo připraveno 23 derivátů *p*-terfenyl-4-olů (Schéma 1)<sup>4</sup>. Byly využity nízké dávky katalyzátoru a reakce probíhaly bez použití inertní atmosféry. Popsaný syntetický protokol je vhodný i pro reakce elektronově chudých či stericky stíněných boronových kyselin, včetně reakcí ve větším měřítku. Připravené *p*-terfenyly dále slouží pro syntézy nesymetricky substituovaných *p*-quaterfenylů, u kterých jsou studovány především spektrální, optické a elektronické vlastnosti.



Schéma 1. Syntéza *p*-terfenyl-4-olů a *p*-quaterfenylů

Tato práce vznikla za podpory grantů Ministerstva průmyslu a obchodu ČR (FR-T11/202 a FR-T14/177).

## LITERATURA

1. Liu J.-K.: Chem. Rev. 106, 2209 (2006).
2. Kamal A., Reddy M. K., Shaik T. B., Rajender, Srikanth Y. V. V., Reddy V. S., Kumar G. B., Kalivendi S. V.: Eur. J. Med. Chem. 50, 9 (2012).
3. Lee T.-H., Chen J.-T., Hsu C.-S.: Liquid Crystals 42, 104 (2015).
4. Jansa J., Řezníček T., Jambor R., Bureš F., Lyčka A.: Adv. Synth. Catal. 359, 339 (2017).

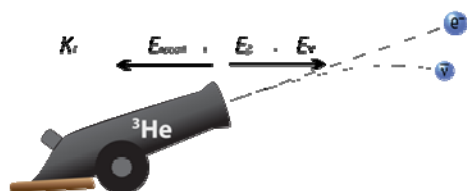
## 2P-18

### THE FATE OF HIGH ENERGETIC SPECIES GENERATED BY RADIOACTIVE DECAY OF TRITIUM IN TRITIUM-LABELLED COMPOUNDS

TOMÁŠ ELBERT

IOCB CAS, Flemingovo Sq. 2, 166 10 Prague 6 - Dejvice, Czech Republic  
elbert@uochb.cas.cz

The energy released during the decay of tritium atom is distributed among the energy of departing  $\beta$ -particle, newly created  $^3\text{He}$  atom and antineutrino. The total kinetic energy released in the  $\beta$ -decay process is  $K_T$ . From chemical point of view neutrino is inert and off interest. What is important is the modified molecule left behind. The bond between carbon and helium is very weak and more over the helium atom has high kinetic energy, too. It is the consequence of the action – reaction principle. Stöcklin has compared the emission of a radioactive particle to the shot from the canon<sup>1</sup> – the leaving particles are like the shells and the stable atom left behind is the canon.



The kinetic energy of  $^3\text{He}$  atom is in the range of units of eV. However, dissociation energy of the C– $^1\text{H}$  bond is also in the range of 4–5 eV. The hypothetical C– $^3\text{He}$  bond has much lower dissociation energy than C– $^1\text{H}$  bond and obviously it is broken immediately after the  $^3\text{H} \rightarrow ^3\text{He}$  decay.

The multiple paths of molecule stabilisation after the decay event will be discussed in the case study of stability of 9-[5'<sub>endo</sub>,6'<sub>endo</sub>- $^3\text{H}_2$ ]norbornyl-6-chloro-purine. One of them is the capture of hydrogen from the milieu and formation of C– $^1\text{H}$  bond in the same position where the C–T bond was originally. The most important conclusion from this study is that the specific activity of the multiple tritiated compounds after prolonged storage period is lower than that of freshly prepared tritiated molecules.

This work was supported by the Czech Academy of Sciences, programme RVO: 61388963, and the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic, grant No. LG15033.

## REFERENCE

1. Stöcklin G., in the book: *Chemistry of Hot Atoms*, Vol. 6 in the Series "Chemischen Taschenbücher" (Först W., Grünewald H., ed.). Verlag Chemie GmbH, Weinheim/Bergstrasse, 1969.

### 3L-01 VYUŽITÍ ELEKTROCHEMICKÝCH METOD V BIOCHEMII A MEDICÍNSKÝCH OBORECH: KRITICKÝ POHLED

JAN VACEK

Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta,  
Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3, 775 15  
Olomouc, Česká republika  
jan.vacek@upol.cz, <http://vacek.upol.cz>

Elektrochemické metody plní významnou úlohu v základním fyzikálněchemickém výzkumu a jsou široce využívány pro analytické účely. Dnes především ve vývoji nových čidel (senzorů) a v miniaturizované laboratorní technice pracující jak ve stacionárním tak i průtočném režimu. Od druhé poloviny 20. století byly elektrochemické přístupy aplikovány ve své plné šíři pro účely biochemického, biofyzikálního a biomedicínského výzkumu, což vedlo ke vzniku samostatné disciplíny bioelektrochemie<sup>1,2</sup>. Referát si klade za cíl seznámit posluchače s aktuálními trendy v elektrochemii biologicky aktivních látek, přičemž pozornost bude věnována jak nízkomolekulárním substancím, tak i makromolekulárním systémům. Popsána bude elektroanalýza biopolymerů (především DNA a proteinů) a část textu bude také zaměřena na elektrochemii vysoce komplexních buněčných systémů. Kromě elektrochemie *in vitro* jsou popsány také *in vivo* aplikace a nové možnosti, které přináší elektrochemické zobrazovací metody a specifické modifikace vybraných analytů elektrochemicky aktivními značkami. Ambicí autora příspěvku není poskytnout vyčerpávající přehled současného poznání, naopak referát cílí na vybrané oblasti zájmu a podrobuje výše zmíněné segmenty bioelektrochemického výzkumu diskusi a kritickému zhodnocení.

Tato práce vznikla za podpory operačního programu Podnikání a inovace pro konkurenceschopnost 2014–2020, CZ.01.1.02/0.0/0.0/16\_084/0010374.

#### LITERATURA

1. Vacek J., Novák D., Zatloukalová M.: Chem. Listy 111, 430 (2017).
2. Egea J., Fabregat I., et al.: Redox Biol. 13, 94 (2017).

### 3L-02 CHRONOPOTENCIOMETRICKÁ ANALÝZA KARBONYLACE Ca<sup>2+</sup>-ATPASY

DAVID NOVÁK<sup>a</sup>, JANA VISKUPIČOVÁ<sup>b</sup>, MARTINA  
ZATLOUKALOVÁ<sup>a</sup>, MAGDALÉNA MÁJEKOVÁ<sup>b</sup>,  
JAN VACEK<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta,  
Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3, 775 15  
Olomouc, Česká republika, <sup>b</sup> Centrum experimentální  
medicíny, Ústav experimentální farmakologie a toxikologie,

Slovenská akadémia věd, Dubravská cesta 9, 841 04  
Bratislava, Slovenská republika  
david.novak@upol.cz

Ca<sup>2+</sup>-ATPasa (SERCA) je transmembránový protein zodpovědný za aktivní transport Ca<sup>2+</sup> iontů z cytosolu do sarkoplazmatického retikula. K obnovení cytozolové koncentrace Ca<sup>2+</sup> iontů dochází při svalové relaxaci a je zapotřebí energie z hydrolyzy ATP. V příspěvku je popsán vliv karbonylových produktů metabolismu: methylglyoxalu, glyoxalu a 3-deoxyglukosonu na isoformu proteinu SERCA1 izolovanou z králíčího kosterního svalstva. Pro analýzu interakce jednotlivých látek se SERCA1 byla použita chronopotenciometrická rozpouštěcí analýza konstantním proudem. Po 24 h inkubaci SERCA1 (9,1 μmol/l) s methylglyoxalem (3 mmol/l) při pH 7,4 dochází k úplné modifikaci proteinu. Pomocí optimalizované metody je možné zkoumat nejenom čistý solubilizovaný protein, ale také protein, který je stále součástí endoplazmatického retikula. Modifikace proteinu karbonylovými sloučeninami významně potlačuje aktivitu SERCA1 a to v tomto pořadí: methylglyoxal >> glyoxal > 3-deoxyglukoson<sup>1</sup>.

Tato práce vznikla za podpory grantu IGA LF 2017\_11, COST projektu MuTaLig (CA15135), VEGA 2/0111/16 a APVV-15-0455.

#### LITERATURA

1. Novak D., Viskupicova J., Zatloukalova M., Heger V., Michalikova S., Majekova M., Vacek J.: J. Electroanal. Chem. 812, 258 (2018).

### 3L-03 METALOTHIONEINY – ELEKTROCHEMICKÁ ANALÝZA

SYLVIE SKALIČKOVÁ<sup>a</sup>, MICHAEL GARGULÁK<sup>a</sup>,  
BRANISLAV RUTTKAY-NEDECKÝ<sup>a</sup>, MICHAELA  
DOČEKALOVÁ<sup>b</sup>, MARTINA STAŇKOVÁ<sup>b</sup>, DAGMAR  
UHLÍŘOVÁ<sup>b</sup>, PAVLA PANTUČKOVÁ<sup>b</sup>, MARTA  
KEPINSKÁ<sup>c</sup>, RENÉ KIZEK<sup>a,b,c,\*</sup>

<sup>a</sup> Ústav humánní farmakologie a toxikologie, Farmaceutická fakulta, VFU Brno, Palackého tř. 1, 612 42 Brno, <sup>b</sup> Oddělení výzkumu a vývoje, Prevention medicals, s. r. o., Tovární 342, Butovice, 742 13 Studénka, Česká republika, <sup>c</sup> Department of Biomedical and Environmental Analyses, Faculty of Pharmacy, Wrocław Medical University, 50-556 Borowska 211, Wrocław, Poland  
kizek@sci.muni.cz

Normální funkce buňky závisí na stálosti a minimálních změnách vnitřního prostředí. Není proto překvapující, že u živočichů se vyvinulo značné množství regulačních mechanismů směřujících k zachování tohoto stavu. V roce 1957 byl popsán v dřeni koňských ledvin protein s vysokou afinitou ke kadmii. Metalothionein (MT), je z obecně biologického hlediska polypeptid o molekulové hmotnosti v rozmezí 6–10 kDa. MT většinou obsahující 60 až 68 aminokyselinových zbytků. Později se zjistilo, že MT jsou



charakteristické jejich unikátním obsahem iontů kovů, tak obsahem síry. Vyšší hladina MT byla pozorována u proliferujících buněk. Tento fakt svědčí o důležitosti MT v tomto procesu buněčné regulace (vztah k nádorovým onemocněním).

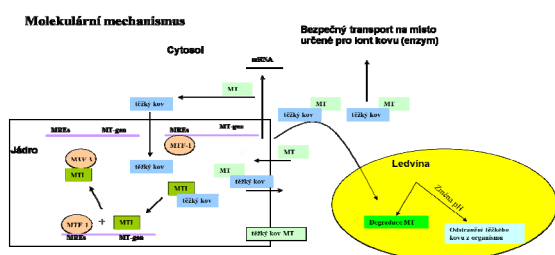


Schéma. Zjednodušené schéma molekulární regulace metalothioneinu

Analytické metody detekce MT využívají přítomnosti –SH skupin. Mezi velmi senzitivní metody patří elektrochemie využívající katalytické signály (Brdčíkova reakce, pík H). Pro zvýšení citlivosti metody je často využita technika adsorptivního přenosu (subnanomolární koncentrace). Navržený postup byl aplikován pro analýzu biologických vzorků.

Tato práce vznikla za podpory grantu Liga proti rakovině Praha 260/LPR/2018 a NANOCSDOXO 306/2018/FaF.

#### LITERATURA

1. Kizek R., Trnkova L., Palecek E.: *Anal. Chem.* 73, 4801 (2001).

#### 3L-04

##### POSSIBILITIES OF ELECTROCHEMISTRY IN ANALYSIS OF AZOLES

JAN FISCHER<sup>a</sup>, HANA DEJMKOVÁ<sup>a</sup>, RENATA ŠELEŠOVSKÁ<sup>b</sup>, JAVIER GONZÁLEZ MARTÍN<sup>c</sup>, PAULA MARTÍN MIJÁN<sup>c</sup>, KAROLINA SCHWARZOVÁ<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Charles University, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, Albertov 6, 128 43 Prague 2, CZ, <sup>b</sup> University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Studentská 95, 532 10 Pardubice, CZ, <sup>c</sup> University of Valladolid, Department of Analytical Chemistry, Faculty of Science, Ps. Belén, 47011 Valladolid, Spain  
kpeckova@natur.cuni.cz

Azoles are a group of chemicals which are often used as pesticides and some of them as pharmaceuticals, acting as antifungal agents. The diazole ring is the key building-block of these compounds which modulates their biological activity<sup>1</sup>. Triazoles represent another group of azole derivatives showing the selective inhibition of cytochrome P450 enzyme by different mechanisms and display a wider antifungal spectrum and safer profile than imidazole derivatives<sup>2</sup>. Because of the severe impact on the organism of

the chronic exposure to azoles, the application of individual azoles is regulated, when used as pesticides. Analytical methods used for this type of compounds have been based on HPLC coupled to UV/VIS or diode array detection, fluorometric detection or mass spectrometry (HPLC-MS). Concerning the electrochemistry of azole pesticides, literature data are scarce, being available for diazole-based pharmaceuticals containing oxidizable piperazine moiety (e.g., ketoconazole, itraconazole)<sup>3</sup> or reducible azomethine moiety (e.g., propiconazole).

In this contribution, the existing electrochemical approaches performed by means of traditional electrode materials (glassy carbon, platinum, mercury-based electrodes) will be introduced and compared with possibilities of modern electrode materials, e.g. boron doped diamond. Due to the extended potential window in anodic region, it enables electrooxidation of some triazoles (e.g., difenoconazole) and diazoles (e.g., terconazole) using anodic activation to ensure good repeatability of measurements. Electrochemical methods with micromolar detection limits were developed for both compounds using batch voltammetric methods and flow-injection analysis with amperometric detection.

The project was supported by the Czech Science Foundation (project 18-01710S) and carried out within the framework of Specific University Research (SVV 260440).

#### REFERENCES

1. Locatelli M., Kabir A., Innosa D., Lopatriello T., Furton K. G.: *J. Chromatogr. B* 1040, 192 (2017).
2. Ekiert R. J., Krzek J., Talik P.: *Talanta* 82, 1090 (2010).
3. Dantas A. N. D., De Souza D., de Lima J. E. S., de Lima-Neto P., Correia A. N.: *Electrochim. Acta* 55, 9083 (2010).

#### 3L-05

##### VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ PESTICIDŮ S VYUŽITÍM ELEKTROD NA BÁZI STRÍBRNÉHO AMALGÁMU A BOREM DOPOVANÉHO DIAMANTU

RENÁTA ŠELEŠOVSKÁ, LENKA JANÍKOVÁ, JAROMÍRA CHÝLKOVÁ

Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 75, 532 10 Pardubice, Česká republika  
Renata.selesovska@upce.cz

Pesticidy jsou látky chemického nebo biologického charakteru využívané zejména při ochraně zemědělských plodin proti rostlinným a živočišným škůdcům. Jejich aplikace vede k růstu zemědělské produkce i její kvality. Množství používaných pesticidních látek celosvětově neustále roste, což souvisí se zvyšujícím se rizikem znečištění půdy, vod a ovzduší, intoxikace zemědělských produktů nebo ohrožení vegetace a živočichů vyskytujících se volně v přírodě. Pesticidy jsou obvykle těžko rozložitelné, u člověka se mohou kumulovat v organismu a způsobovat chronická onemocnění<sup>1-3</sup>. Proto je třeba mít k dispozici rychlé, citlivé a selektivní nástroje pro jejich stanovení.

Vhľadom k tomu, že rada pesticídnych látok je elektrochemicky aktívna, je možné pre jejich monitorovanie použiť voltametriu. Cieľom tejto práce je shrnúť možnosti voltametrických metód s využitím striebornej pevnej amalgámovej (AgSAE)<sup>4</sup> a borem dopovanej diamantovej elektrody (BDDE)<sup>5</sup> pri stanovení pesticídnych látok na základe sledovania jejich redukčných alebo oxidačných reakcií. Byli vyvinuté konkrétne metódy a optimalizované parametre stanovenia herbicídov linuronu, metamitronu, metribuzínu, picloramu, terbutrynu, triasulfuronu a triclopyru a insekticídov imidaclopridu, methiocarbu a pymetrozínu. Ukázalo sa, že kyselé prostredie je optimálne pre stanovenie väčšiny študovaných látok. Diferenčné pulzná voltametrie (DPV) a square wave voltametrie (SWV) po optimalizácii parametrov umožnili dosiahnuť veľmi nízke hodnoty limitu detekcie (LOD) a širokých využiteľných koncentračných rozsahov (LDR) pre stanovenie uvedených pesticídov. Navrhnuté metódy boli rovněž úspešne využité pri analýze vzoriek pesticídnych prípravkov a prírodných vod.

*Tato práce byla financována Univerzitou Pardubice (projekty č. SGSFChT\_2018\_003 a SD373001/82/30350(2016)) a Grantovou agenturou České republiky (projekt č. 17-03868S).*

#### LITERATURA

1. Greer F., Ignoffo C. M., Anderson R. F.: Chem. Technol. 1971, 342 (1971).
2. Cremlyn R.: *Pesticidy*, SNTL, Praha 1985.
3. Nikonorow M.: *Pesticidy a toxicita prostredia*, Príroda, Bratislava 1983.
4. Yosypchuk B., Berek J.: Crit. Rev. Anal. Chem. 39, 189 (2009).
5. Swain G. M., Ramesham R.: Anal. Chem. 65, 345 (1993).

#### 3L-06

##### NEENZYMATICKE ELEKTROCHEMICKÉ SENZORY PRE STANOVENIE GLUKÓZY

**JANA HOVANCOVÁ, IVANA ŠIŠOLÁKOVÁ, RENÁTA ORIŇAKOVÁ, ANDREJ ORIŇAK**

*Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra fyzikálnej chémie, Moyzesova 11, Košice 040 01, Slovenská republika  
jana.hovancova@student.upjs.sk*

Glukózové senzory predstavujú veľmi aktívnu časť výskumu zaoberajúceho sa elektrochemickými senzormi a v súčasnosti tvoria približne 85 % priemyslu týkajúceho sa biosenzorov. Glukózové senzory môžu byť vo všeobecnosti rozdelené na enzymatické a neenzymatické. Mnoho publikácií diskutuje nevýhody spojené s aplikáciou enzymatických senzorov, ktoré sa týkajú vlastností enzymatickej zložky, ktorej vlastnosti sú ovplyvnené teplotou, vlhkosťou a pH (cit.'). V súčasnosti sa preto veľká pozornosť venuje práve neenzymatickým senzorom, ktoré by mohli prekonať nedostatky predošlej generácie senzorov. Medzi najviac používané materiály pri vývoji neenzymatických glukózových senzorov patria kovové nanomateriály, ktoré ponúkajú

výhodné elektrokatalytické vlastnosti. Medzi kovovými materiálmi sa zlato ponúka ako vhodný kandidát na základe jeho unikátnych elektrokatalytických vlastností, efektívnemu prenosu elektrónov a dobrej biokompatibilitate<sup>2,3</sup>.

Tento príspevok sa zaoberá elektrochemickými neenzymatickými glukózovými senzormi, ktorých povrch bol modifikovaný nanomateriálmi pre zlepšenie prúdovej odozvy systému. Boli použité metódy cyklickej voltampérometrie a chronoampérometrie na sledovanie prúdovej odozvy systému. Pričom bude diskutovaný vplyv modifikácie zlatých mikroelektrod na lineárny rozsah koncentrácií, limit detekcie a citlivosť elektrody. Okrem iného bola študovaná aj kinetika oxidácie glukózy na zlatých mikroelektrodách, kvôli lepšiemu pochopeniu systému. Taktiež bola určená aktívna plocha elektrody pomocou Cottrelovej rovnice a morfológia povrchu bola študovaná pomocou skenovacej elektrónovej mikroskopie. Bol dosiahnutý lineárny rozsah koncentrácií 1–40 mM, čo prekračuje požiadavky kladené na komercializované glukózové senzory.

*Táto práca vznikla za podpory grantu vvgp-pf-2018-794, VEGA 1/0074/17, APVV-16-0029.*

#### LITERATÚRA

1. Toghiani K. E., Compton R. G.: Int. J. Electrochem. Sci. 5, 1246 (2010).
2. Guo X., Deng H., Zhou H., Fan T., Gao Z.: Sensors Actuators, B Chem. 206, 721 (2015).
3. Pasta M., La Mantia F., Cui Y.: Electrochim. Acta 55, 5561 (2010).

#### 3L-07

##### SEARCHING FOR A PROVERBIAL NEEDLE IN A HAYSTACK – IDENTIFYING NEW METABOLITE(S) OF ENDOGENIC THIOLS AND ALDEHYDES IN HUMAN BIOLOGICAL FLUIDS

**JUSTYNA PIECHOCKA<sup>a,b</sup>, MONIKA WYSZCZELSKA-ROKIEL<sup>a</sup>, RAFAŁ GŁOWACKI<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *University of Łódź, Faculty of Chemistry, Department of Environmental Chemistry, Pomorska 163 Str., 90-236 Łódź,*  
<sup>b</sup> *Polish Chemical Society, Freta 14 Str., 00-227 Warszawa  
justyna.piechocka@chemia.uni.lodz.pl*

Accumulating evidences indicate that plasma homocysteine (Hcy) and metabolically related compounds are associated with civilization diseases and can act as strong predictors of mortality in cardiovascular and cancer patients. It has been also demonstrated that daily supplementary treatments with B vitamins have a beneficial impact on reducing the risk of coronary heart disease, nonfatal myocardial infarction and hypertension<sup>1</sup>. Unfortunately, the reason(s) for the beneficial impact of their supplementation are still unclear.

The B vitamins, to which vitamin B6 also belongs, are a group of water soluble, chemically quite distinct compounds involved in a variety of important functions. According to literature data, pyridoxal 5'-phosphate (PLP) that is the most biologically active form of vitamin B6 is an enzymatic co-

factor required for more than 140 biochemical reactions. Particularly, it acts as an essential coenzyme for cystathionine  $\beta$ -synthase and cystathionine  $\gamma$ -lyase that participate in the transsulfuration of Hcy to cysteine (Cys)<sup>2</sup>. PLP is also known to undergo facile condensation reaction with Cys and Hcy affording 2-pyridoxyl-1,3-thiazolidine-4-carboxylic acid (Cys-PLP)<sup>3</sup> and 2-pyridoxyl-1,4-thiazine-4-carboxylic acid (Hcy-PLP)<sup>4</sup>, respectively.

In recent years, we have demonstrated that Cys and Hcy react with PLP in plasma fortified with phosphate buffer<sup>5</sup>. Due to the fact that Hcy, Cys and PLP are ubiquitous in biological fluids, we have concluded that it appears to be likely that there are also products of their reactions. Our further studies have revealed that Cys react with PLP *in vivo* forming Cys-PLP adduct which is presumably present in human plasma and remains to be a novel metabolite<sup>6</sup>. These surprising results encourage further research into Cys-PLP. The latest results will be presented.

Supported by grants from Polish National Science Center: 2012/07/B/ST5/00765, 2017/27/B/ST4/01476.

#### REFERENCES

1. Kirsch S., et al.: *Clin. Chem. Lab. Med.* 53, 445 (2015).
2. Hellmann H., Mooney S.: *Molecules* 15, 442 (2010).
3. Buell M., Hansen R.: *J. Am. Chem. Soc.* 82, 6042 (1960).
4. a) Griffiths R., et al.: *Eur. J. Biochem.* 137, 467 (1983).  
b) Jakubowski H.: *Chem. Eur. J.* 12, 8039 (2006).  
c) Jakubowski H.: *Cell. Mol. Life Sci.* 61, 470 (2004).
5. Głowacki R., et al.: *Anal. Bioanal. Chem.* 408, 1935 (2016).
6. Wyszczelska-Rokiel M.: *Chromatographic studies of thiazolidine and thiazine derivatives of endogenic aldehydes*, PhD thesis, Łódź 2015.

#### 3L-08

##### STANOVENIE BIOGÉNNYCH AMÍNŮV VO VYBRANÝCH VZORKÁCH POTRAVIN

**JOZEF SOKOL, MÁRIA MALIAROVÁ, DOMINIKA GEBHARDTOVÁ**

*Fakulta prírodných vied, Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave, Nám. J. Herdu 2, SK 917 01 Trnava, Slovensko  
jozef.sokol@ucm.sk*

Biogénne amíny (BA) sú organické dusíkaté látky s jednou, alebo viacerými aminovými skupinami. Vyznačujú sa rôznymi biologickými vlastnosťami, od plnenia fyziologických procesov, ako je bunkový rast, proliferácia, diferenciácia, až po nežiaduce účinky, ako hypertenzia, migrény, alergie, dýchacie ťažkosti. Tvoria sa dekarboxyláciou aminokyselín za súčasného uvoľňovania oxidu uhličitého, ale tiež aj transamináciou a amináciou aldehydov a ketónov.

Cieľom predkladanej práce bolo zaviesť HPLC metódu stanovenia jednotlivých BA a stanoviť ich obsah vo vybraných vzorkách fermentovanej zeleniny a detskej výživy.

Stanovovaných bolo 8 biogénnych amínov (tryptamín

TR, fenyletylamín FEA, putrescín PUT, kadaverín CAD, histamín HIS, tyramín TYR, spermidín SPM a spermin SPM). Na separáciu bola použitá chromatografická kolóna Hypersil BDS C18 (4x100 mm, 3  $\mu$ m) s predkolónou SecurityGuard TM Mobilná fáza: zložka A – 0,02 M roztok kyseliny octovej a acetonitril (90:10); B – metanol, acetonitril a 0,02 M kyselina octová (45:45:10). Bola použitá gradientová elúcia: 6 min – 70 % B, 7 min – 75 % B, 15–18 min – 100 % B. Analyzované boli vzorky detskej výživy a vzorky fermentovanej zeleniny. Vzorky boli extrahované 10% kyselinou trichlóroctovou a následne prefiltrované cez filtračný papier a membránový filter. Na derivatizáciu octovej bol použitý danzylchlorid, ktorý bol pridaný k 1 ml extraktu vzorky a roztok uhličitanu sodného. Po premiešaní vzorky boli inkubované pri teplote 60 °C po dobu 15 min. Následne odparené a rozpustené v acetonitrile a analyzované pomocou HPLC. Detekcia bola vykonávaná UV-VIS detektorom pri 254 nm.

Vzorky detskej výživy pochádzali z obchodných reťazcov a vzorky fermentovanej zeleniny (kvasené uhorky a kvasená kapusta z trhovísk. Vo vzorkách kvasených uhoriek bol zistený najvyšší obsah PUT (49,33 mg/kg) a TYR (14,94 mg/kg). Najvyšší obsah HIS (24,34 mg/kg) a TR (14,42 mg/kg) bol zaznamenaný v jednej vzorke sladkej kapusty. Vo vzorkách detských výživ bolo identifikovaných 6 (FEA, PUT, CAD, HIS, TY, SPM). Hodnoty obsahu BA vo vzorkách detských výživ variovali v rozmedzí 0–3,37 mg/kg pre PUT, 5,07–13,99 mg/kg pre CAD, 0–5,51 mg/kg pre HIS, 0–3,04 mg/kg pre TY a 0–7,7 mg/kg pre SPM. Na vyhodnotenie zdravotného rizika sa používa vzorec na výpočet indexu biogénnych amínov (BAI). Ako z nameraných výsledkov vyplýva, zistené koncentrácie BA vo vzorkách fermentovanej zeleniny a detskej výživy nepredstavujú zdravotné riziko. Ale vzhľadom na výsledné hodnoty BAI u vzoriek detských výživ je treba dodržiavať podmienky procesu výroby a skladovania pokrmov určených pre deti s cieľom dodržať potrebnú kvalitu výrobku.

*Podporené grantom Kega 006UCM-4/2018.*

#### 3L-09

##### VYUŽITÍ ICP-MS JAKO DETEKTORU PRO ANALÝZY KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZOU

**DANIEL BARON, TOMÁŠ PLUHÁČEK, ANDREA ŠEBESTOVÁ, RADKA PECHANCOVÁ, JAN PETR**

*Katedra analytické chemie, Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 77146 Olomouc, Česká republika  
BaronDaniel@email.cz*

Kapilární elektroforéza (CE) je známá separační analytická technika, mezi jejíž největší výhody patří vysoká účinnost, rychlost analýzy, relativně nízké provozní náklady a malá spotřeba chemikálií. Nicméně výhody CE mohou být zastíněny nízkou citlivostí běžně používaných detektorů (DAD), zejména pro detekci specií kovů. Toto omezení lze vyřešit spojením CE s hmotnostní spektrometrií s indukčně

vázaným plazmatem (ICP-MS). ICP-MS je ultracitlivá technika pro stavení velmi nízkých koncentrací analytů obsahujících kovy. Běžně dosažitelné limity detekce jsou na úrovni sub-ng/l. Zároveň ICP-MS dovoluje multiprvkovou detekci různých izotopů a má velmi široký dynamický rozsah.

V naší práci jsme se zaměřili nejprve na vývoj a optimalizaci spojení CE s ICP-MS. Jako „proof of concept“ byla testována metoda pro stanovení kationtů  $\text{Cd}^{2+}$  a  $\text{Pb}^{2+}$  a poté ověření linearit odezvy ICP-MS detektoru po předešlé separaci pomocí CE v koncentračním rozmezí 10 ppb – 10 ppm u každého kationtu. Separované zóny z kapiláry byly smíchány s pomocnou kapalinou (10× naředěný základní elektrolyt) a zavedeny přes koncentrický zmlžovač a cyklonickou mlžnou komoru do ICP-MS. Odezvy byly lineární ( $R^2 = 0,9982$  pro  $\text{Cd}^{2+}$  a  $R^2 = 0,9999$  pro  $\text{Pb}^{2+}$ ) v rozmezí 50 ppb – 10 ppm.

Dalším cílem bylo použití metody CE-ICP-MS pro studium interakcí mezi karboxylovanými  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  nanočásticemi s antibiotiky. Jako zástupce bylo vybráno polypeptidové antibiotikum Polymyxin B (PMB), jež je používáno pro léčbu infekcí močového traktu, meningí a krevního oběhu způsobených gram-negativními bakteriemi *Pseudomonas aeruginosa*. Antibiotikum bylo přidáváno do základního elektrolytu pro CE analýzu v rozmezí 0–250 nM a byly sledovány změny efektivní mobility nanočástic se změnou koncentrace PMB (od  $-128,6$  do  $-62,5 \times 10^{-9} \text{ m}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ ).

Nakonec jsme se zaměřili na separaci dvou optických izomerů oxaliplatiny, což je preparát používaný pro léčbu metastatického kolorektálního karcinomu. Separace byla provedena v 70 cm dlouhé kapiláře o vnitřním průměru 25  $\mu\text{m}$  za použití sulfatovaného  $\beta$ -cyklodextrinu jako chirálního selektoru. U této metody byla opět ověřena linearita odezvy ICP-MS detektoru, a to v rozmezí 100 ppb – 500 ppm.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR LO1305 a grantu GA ČR 16-23938Y.*

### 3L-10 CHARAKTERIZACE NANOMATERIÁLŮ POMOCÍ KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZY

**JAN PETR, DANIEL BARON, ANDREA ŠEBESTOVÁ,  
PETRA ŠVECOVÁ, TOMÁŠ PLUHÁČEK**

*Katedra analytické chemie, Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká republika  
secjpetr@upol.cz*

Kapilární elektroforéza (CE) je známá separační technika, kterou je možné mimo jiné použít pro pokročilou charakterizaci nanoobjektů, potažmo nanomateriálů, a to zejména v prostředí, které odpovídá záměru jejich použití (např. vnitřní prostředí buněk). Zároveň je možné nanomateriály charakterizovat co do jejich interakcí s vybranými ligandy, případně sledovat jejich tendenci k agregaci<sup>1</sup>.

V naší práci jsme se zabývali třemi okruhy souvisejícími s interakcí nanomateriálů s ligandy. Nejprve jsme studovali

interakci karboxylovaných magnetických core-shell nanočástic s vybranými ligandy na bázi antibiotik (např. polymyxinu B) a proteinů. Výsledky jsme srovnávali při použití standardní DAD detekce a spojení CE s ICP-MS detekcí, která umožnila daleko přesnější stanovení interakčních konstant.

V druhé části jsme se zabývali vývojem metodiky a studiím tzv. interčásticových interakcí, kdy jsme studovali interakci již zmíněných karboxylovaných core-shell nanočástic s nanočásticemi zlata různé velikosti v různých prostředích pomocí Taylorovi disperzní analýzy v kapilární elektroforéze. Získaná data jsme korelovali s daty z měření zeta potenciálu a velikosti částic.

Poslední studovanou oblastí pak byla charakterizace interakcí nového 2D materiálu, grafenové kyseliny, s malými anorganickými kationty ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{La}^{3+}$  atd.) v různém pH odpovídajícím zároveň různé interakci jednotlivých listů (3D uspořádání) této kyseliny.

V naší práci jsme ukázali, že kapilární elektroforéza je vhodnou technikou pro studium interakcí nanomateriálů jak s vybranými malými i velkými molekulami (ligandy), tak pro studium interakcí i mezi částicemi.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR LO1305 a grantu GA ČR 16-23938Y. Autoři rovněž děkují za poskytnutí nanomateriálů: Jean-Michel Siaugue (Sorbonne Université, Paříž), Aristides Bakandritsos a Radek Zbořil (RCPTM Olomouc) a za spolupráci na DLS měření: Karlis Pajuste a Aiva Plotniece (Latvian Institute of Organic Synthesis, Riga).*

### LITERATURA

1. Adam V., Vaculovičová M.: *Electrophoresis* 38, 2389 (2017).

### 3L-11 ANALÝZA NANOVLÁKENNÝCH MATERIÁLŮ RAMANOVOU A ENERGIJÍ DISPERZNÍ SPEKTROSKOPIÍ

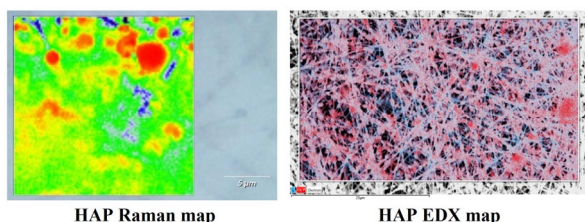
**ADÉLA KOTZIANOVÁ, ONDŘEJ ŽIDEK, JAN  
KLEMEŠ, MAREK POKORNÝ, VLADIMÍR VELEBNÝ**

*Contipro a.s., Dolní Dobrouč 401, 561 02, Česká republika  
kotzianova@contipro.com*

Vláknenné materiály připravené metodou elektrostatického zvláknování, většinou ve formě tenkých vrstev, jsou tvořeny sítí polymerních vláken s průměrem lišícím se dle použitého polymeru od 20 nm do několika  $\mu\text{m}$ . Současný výzkum a vývoj bioplikací využívá také možnosti přidat do vláknenné struktury aditiva (např. aktivních složky, léčiva atd.)<sup>1</sup>. Veškeré aplikace využívající inkorporaci aditiv do vláknenné vrstvy vyžadují homogenní rozložení aditiva napříč vrstvou. Pro sledování jejich distribuce je nutné použít analytickou metodu, která dokáže určit chemické složení s vysokým prostorovým rozlišením. Z tohoto hlediska se jako výhodné zdá použití Ramanovy spektroskopie<sup>2</sup> a energiově disperzní spektroskopie<sup>3</sup>. Obě tyto metody umožňují mapování vzorků s prostorovým rozlišením řádu jednotek mikrometrů a přesto,

že rozlišení nedosahuje nanometrových rozměrů, dokáží podrobně zobrazit rozložení aditiv v nanovláknenných materiálech.

V této práci jsme se zaměřili na obě výše uvedené metody. Ty jsme využili pro mapování modelových polyvinylalkoholových nanovláknenných materiálů (průměr 300–700 nm), do nichž byl jako aditivum inkorporován hydroxyapatit (HAP). Tento příspěvek má za cíl zejména ukázat možnosti obou metod pro kvalitativní i kvantitativní analýzu aditiv v nanovláknenných materiálech. Vzhledem k tomu, že se aplikace nanovláknenných materiálů pomalu přesouvají z výzkumu do praxe, prezentované výsledky zohlední možné využití v kontrole výroby nanovláknenných produktů.



HAP Raman map

HAP EDX map

objemu, který byl určen expanzí helia pomocí (i) heliového pyknometru (Pycnomatic ATC, Thermo Scientific) a (ii) volumetrického plynového fyzisorpčního analyzátoru (PCTPro E&E, Setaram).

Bylo zjištěno, že skeletální hustoty kovů a hlinitokřemičitanů, které byly stanoveny heliovým pyknometrem a sorpčním analyzátozem, se neliší o více než ~5 %. Volumetrický fyzisorpční analyzátor lze tedy považovat za vhodný nástroj pro stanovení skeletální hustoty takovýchto typů materiálů, bez nutnosti pořízení specializovaného plynového pyknometru. V případě uhlíkatých materiálů bylo pomocí fyzisorpčního analyzátoru dosaženo až o ~40 % vyšších skeletálních hustot ve srovnání s hustotami, které byly získány prostřednictvím heliové pyknometrie. V konferenčním příspěvku bude ukázáno, že tato nesrovnalost souvisí s vysoce porézní strukturou uhlíkatých látek a rovněž se specifickým nastavením použitých zařízení.

#### LITERATURA

1. Pham Q. P., et al.: *Tissue engineering* 12, 1197 (2006).
2. Kotzianová A., Řebíček J., Židek O., Pokorný M., Hrbáč J., Velebný V.: *Anal. Methods* 7, 23 (2015).
3. Scimeca M., Bischetti S., Lamsira H. K., Bonfiglio R., Bonanno E.: *Eur. J. Histochem.* 62, 1 (2018).

#### 3L-12

#### MĚŘENÍ SKELETÁLNÍ HUSTOTY PEVNÝCH LÁTEK POMOCÍ FYZISORPČNÍHO ZAŘÍZENÍ

**TOMÁŠ ZELENKA<sup>a</sup>, VOJTĚCH STEFAN<sup>a</sup>, VÁCLAV SLOVÁK<sup>a</sup>, MILOSLAV LHOTKA<sup>b</sup>, SOŇA ŠTUDENTOVÁ<sup>c</sup>, GABRIELA HOTOVÁ<sup>a</sup>, LENKA BLÁHOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Katedra chemie, institut environmentálních technologií, přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava,* <sup>b</sup> *Ústav anorganické technologie, Fakulta chemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6,* <sup>c</sup> *Katedra chemie, FMMI, VŠB-Technická univerzita Ostrava, 17. listopadu 15/2172, 708 33 Ostrava, Česká republika*  
tomas.zelenka@osu.cz

Skeletální hustota pevných látek je důležitým parametrem ovlivňujícím jejich aplikace. Cílem příspěvku je prezentovat metodu pro získání skeletové hustoty pevných látek za použití přístroje původně navrženého pro měření volumetrické sorpce plynů, která je široce používána pro hodnocení texturních vlastností pevných látek.

K tomuto účelu bylo použito celkem 35 vzorků (většinou uhlíkaté látky, hlinitokřemičitany a kovy), s různými texturními a chemickými vlastnostmi. Skeletální hustota byla vypočtena jako poměr hmotnosti vzorku k jeho skeletálnímu

## 3S-01

CHEMICKÁ CHARAKTERIZACE GENOFUNDU  
CIBULE ŠALOTKYVĚRA DOSEDĚLOVÁ<sup>a</sup>, TIBOR BÉRES<sup>a</sup>, HELENA  
STAVĚLÍKOVÁ<sup>b</sup>, PETR TARKOWSKI<sup>a,b\*</sup>

<sup>a</sup> *Centrální laboratoře a podpora výzkumu, Centrum regionu Haná pro biotechnologický a zemědělský výzkum, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc,* <sup>b</sup> *Oddělení genetických zdrojů zelenin, léčivých rostlin a speciálních plodin, Centrum regionu Haná pro biotechnologický a zemědělský výzkum, Výzkumný ústav rostlinné výroby, v.v.i., Šlechtitelů 29, 783 71 Olomouc*  
petr.tarkowski@upol.cz

Potraviny rostlinného původu obsahují nejen důležité živiny, ale také látky, které příznivě působí na lidský organismus nebo mají význam prevence vzniku onemocnění. Cibule šalotka (*Allium cepa* var. *aggregatum* L.) hraje významnou roli v kulinářství díky své unikátní chuti a navíc vykazuje řadu zdraví prospěšných biologických aktivit, např. antioxidační, protizánětlivé, prebiotické, antimikrobiální nebo antimykotické. Cílem práce bylo porovnání obsahu derivátů kvercetinu jako zástupců sekundárních metabolitů, nestrukturních sacharidů jako hlavních složek sušiny, které bezprostředně ovlivňují chuť a současně skladovatelnost šalotky. Třetím cílem bylo porovnání metod stanovení aktivity fruktan- $\beta$ -(2,1)-fruktosidasy (EC 3.2.1.153), která může být markerem skladovatelnosti.

Screening primárních a sekundárních metabolitů byl proveden v 87 genotypech cibule šalotky a 3 typech cibule kuchyňské (*Allium cepa* L.) ze dvou vegetačních období, 2016 a 2017. Glukosidy kvercetinu a malé sacharidy byly analyzovány vysokoučinnou kapalinovou chromatografií, naopak fruktany byly kvantifikovány pomocí spektrofotometrické metody. Dále byly srovnány tři spektrofotometrické metody a metoda vysokoučinné kapalinové chromatografie pro určení enzymové aktivity fruktan- $\beta$ -(2,1)-fruktosidasy. Ve studovaných typech byl rozsah hladin kvercetin-3,4'-*O*-diglukosidu 218–948 mg/100 g DW, kvercetin-4'-*O*-glukosidu 45–253 mg/100 g DW, sacharosy 8–18 mg/100 mg DW, glukosy 0–10 mg/100 mg DW, fruktosy 4–16 mg/100 mg DW a fruktanů 21–55 mg/100 mg DW. Obsah analytů s výjimkou sacharosy byl mezi dvěma roky signifikantně odlišný. Na základě měření obsahu malých sacharidů a fruktanů byly vybrány sladké kultivary vhodné k okamžité konzumaci a kultivary vhodnější pro dlouhodobému skladování. Ve srovnání s cibulí bylo množství kvercetin-3,4'-*O*-diglukosidu v šalotce vyšší, sacharosy a glukosy nižší. HPLC metoda stanovení enzymové aktivity fruktan- $\beta$ -(2,1)-fruktosidasy a metoda spektrofotometrická (založená na spřažených enzymových reakcích) byly nejvhodnější pro měření enzymové aktivity, která by mohla být využita ke stanovení konce dormance a potažmo monitorování skladovatelnosti.

*Tato práce vznikla za podpory grantu IGA (IGA\_PrF\_2018\_033).*

## 3S-02

SINGLE-MOLECULE UPCONVERSION-LINKED  
DIGITAL IMMUNOSENSING OF CANCER  
BIOMARKERSZDENĚK FARKA<sup>a,b</sup>, MATTHIAS J. MICKERT<sup>b</sup>,  
ANTONÍN HLAVÁČEK<sup>c</sup>, HANS H. GORRIS<sup>b</sup>, PETR  
SKLÁDAL<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *CEITEC MU, Masaryk University, Kamenice 5, 625 00 Brno, Czech Republic,* <sup>b</sup> *Institute of Analytical Chemistry, Chemo- and Biosensors, University of Regensburg, 93040 Regensburg, Germany,* <sup>c</sup> *Institute of Analytical Chemistry of the Czech Academy of Sciences, v. v. i., 602 00 Brno, Czech Republic*  
farka@mail.muni.cz

The ability to detect cancer biomarkers at the single-molecule level promises the ultimate sensitivity in clinical diagnosis. Fluorescence-based single-molecule analysis, however, is limited by matrix interferences, and therefore is typically not suitable for real world analytical applications. This optical background can be elegantly avoided by using photon-upconversion nanoparticles (UCNPs) that emit shorter-wavelength light under near-infrared excitation (anti-Stokes emission)<sup>1</sup>. Conjugates of UCNPs with antibody can be used as a background-free luminescent tracer in upconversion-linked immunoassays<sup>2</sup>.

We have developed an optical approach for visualizing individual UCNPs and applied it for the sensitive detection of the cancer biomarker prostate specific antigen (PSA). An inverted wide-field microscope was equipped with a fiber-coupled 980 nm continuous-wave laser diode, 100 $\times$  heat-resistant objective and a sensitive sCMOS camera. Silica-coated UCNPs with carboxyl groups on the surface were synthesized and conjugated with anti-PSA antibody. The structure and monodispersity of the nanoconjugates was studied in detail by transmission electron microscopy and agarose gel electrophoresis.

Individual sandwich immunocomplexes consisting of (1) immobilized anti-PSA antibody, (2) PSA, and (3) anti-PSA antibody-UCNP conjugate were counted under an upconversion wide-field microscope equipped with a 980 nm laser excitation source. The noise-surpassing digital readout provided single particle resolution with almost no instrumental background. This allowed to reach a limit of detection (LOD) of 1.2 pg mL<sup>-1</sup> (42 fM) of PSA in 25 % blood serum which is about ten times more sensitive than a classical (analog) readout of luminescence intensity<sup>3</sup>. The digital signal readout is a completely new approach with the potential to pave the way for a new generation of immunoassays.

## REFERENCES

1. Farka Z., Juřík T., Kovář D., Trnková L., Skládal P.: *Chem. Rev.* 117, 9973 (2017).
2. Hlaváček A., Peterek M., Farka Z., Mickert M. J., Prechtl L., Knopp D., Gorris H. H.: *Microchim. Acta.* 184, 4159 (2017).
3. Farka Z., Mickert M. J., Hlaváček A., Skládal P., Gorris H. H.: *Anal. Chem.* 89, 11825 (2017).



## 3S-03

**FUNCTIONAL SERS: HIGH SELECTIVITY, LOW DETECTION LIMIT, PERFECT REPRODUCIBILITY AND COMPATIBILITY WITH PORTABLE RAMAN SPECTROMETER****OLGA GUSELNIKOVA<sup>a,b</sup>, YEVGENIYA KALACHYOVA<sup>a,b</sup>, PAVEL POSTNIKOV<sup>b</sup>, OLEKSIY LYUTAKOV<sup>a,b</sup>, VACLAV SVORCIK<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Department of Solid State Engineering, University of Chemistry and Technology, Technická 3, 166 28 Prague, Czech Republic, <sup>b</sup> Tomsk Polytechnic University, Lenina Av. 30, 634034 Tomsk, Russian Federation  
guselnio@vscht.cz

Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) have been established as one of the most perspective techniques due to the high sensitivity and selectivity, short time of analysis, reliability of results and possibility of application in the wide range of detection areas. Advances in optical devices and detectors moved Raman spectroscopy from the controlled surroundings of the analytical laboratory to the industrial level. However, there is a challenge in the development of considerably reproducible and selective SERS sensor compatible with portable Raman spectrometers<sup>1</sup>.

We propose a SERS-based universal sensor system, consisting of the ordered Au grating, which provide high enhancement factor (up to  $10^{10}$ ) and high reproducibility, and grafted organic functional groups (OFGs)<sup>3,4</sup>. OFGs serve as a recognition layer, enhancing the affinity to analyte, and provide excellent selectivity. By proposed concept SERS sensor system can be functionalized by various ligands – for the rapid determination of heavy metals<sup>5</sup>, organic contaminants<sup>6</sup>, disease markers<sup>7</sup>, DNA complementarity, pesticides and other relevant compounds, specific markers of cancer cells, free radicals, as well as validation of enantiomeric-active drugs.

Suggested functionalized gold gratings demonstrate principal advantages for efficient SERS detection: expressivity (30 sec for analysis), sensitivity ( $10^{-16}$  M), pre-treatment free procedure and reproducibility (up to 95 %).

## REFERENCES

1. Yuan Y., Panwar N., Hui Kit Yap S., Wu Q., Zeng S., Xu J., Tjin S. C., Song J., Qu J., Yong K.-T.: *Coord. Chem. Rev.* 337, 1 (2017).
2. Tan L., Chen Z., Zhao Y., Wei X., Li Y., Zhang C., Wei X., Hu X.: *Biosens. Bioelectron.* 85, 414 (2016).
3. Tan L., Chen Zh., Zha Y., Wei X., Li Y., Zhang Ch., Wei X., Hua X.: *Biosens. Bioelectron.*, 85, 414 (2016).
4. Guselnikova O. A., Postnikov P., Elashnikov R., Trusova M., Kalachyova Y., Libansky M., Berek J., Kolska Z., Švorčík V., Lyutakov O.: *Coll. Surf. A* 516, 274 (2017).
5. Guselnikova O., Postnikov P., Erzina M., Kalachyova Y., Švorčík V., Lyutakov O.: *Sens. Act. B* 253, 830 (2017).
6. Guselnikova O., Postnikov P., Kalachyova Y., Kolska Z., Libansky M., Zima J., Svorcik V., Lyutakov O.: *Chem-NanoMat* 3, 135 (2017).
7. Guselnikova O., Kalachyova Y., Hrobonova K., Trusova M., Berek J., Postnikov P., Svorcik V., Lyutakov O.: *Sens. Act. B* 265, 182 (2018).

## 3S-04

**NOVÉ TYPY NANOVLÁKENNÝCH SORBENTŮ PRO EXTRAKCI NA BÁZI UNIVERZÁLNÍHO COATINGU POLYDOPAMINEM****MARTINA HÁKOVÁ<sup>a</sup>, LUCIE CHOCHOLOUŠOVÁ HAVLÍKOVÁ<sup>a</sup>, JAKUB ERBEN<sup>b</sup>, JIŘÍ CHVOJKA<sup>b</sup>, DALIBOR ŠATÍNSKÝ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Katedra analytické chemie, Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Akademiya Heyrovského 1203/8, 500 05 Hradec Králové, <sup>b</sup> Fakulta textilní Technické univerzity v Liberci, Studentská 1402/2, 461 17 Liberec 1  
mhakova@faf.cuni.cz

Kompozitní polykaprolakon (PCL) potažený polydopaminovou vrstvou byl připraven a otestován jako nový druh nanovláknenného materiálu pro použití v extrakčních systémech on-line spojených s HPLC (on-line SPE HPLC). Kompozitní PCL, skládající se z nanovláken navázaných na mikrovlákna, byl vytvořen za pomoci hybridní technologie, kombinující elektrostatické zvláknění s technikou zvanou melt-blown. Díky této technice je možné získat mechanicky stabilnější a poréznější nanovláknenné materiály, umožňující jejich použití ve vysokotlakých chromatografických systémech v módu přepínání kolon<sup>1,2</sup>. Pro povrchovou modifikaci PCL byl použit polydopamin, který již ukázal veliký potenciál v univerzálním potahování materiálů. Díky tomuto přístupu byl vytvořen nový dosud nepopsaný materiál, jehož extrakční vlastnosti byly popsány za pomoci čtyř skupin modelových analytů. Pro co nejjednodušší popis extrakčních vlastností, jak coatovaného tak i základního PCL, byly vybrány látky s rozdílnými fyzikálně chemickými vlastnostmi. Mezi modelovými analyty byly lipofilní i hydrofilní látky obsahující fenolické skupiny, jako jsou bisphenoly a fenolické kyseliny. Dále nesteroidní antiflogistika a betablokátory, zastupující farmaceutické substance s kyselými a zásaditými vlastnostmi. Coatovaný i základní PCL prokázaly velký potenciál pro extrakci bisphenolů a nesteroidních antiflogistik ze vzorků vod. Současně byl potvrzen předpoklad, že polydopaminová vrstva výrazně zvýší extrakční účinnost materiálu pro hydrofilnější analyty. Vyvinuté on-line SPE HPLC metody byly aplikovány na reálné vzorky říčních vod, moči a plasmu.

*Tato práce vznikla za podpory GAČR 17-08738S a SVV 260 412.*

## LITERATURA

1. Háková M., Chocholoušová Havlíková L., Chvojka J., Švec F., Solich P., Šatínský D.: *Anal. Chim. Acta* 1018, 26 (2018).
2. Háková M., Chocholoušová Havlíková L., Chvojka J., Erben J., Švec F., Solich P., Šatínský D.: *Anal. Chim. Acta*, v tisku.

## 3S-05

**ANALÝZA OBRANNÝCH SEKRETŮ PLOŠTIC DRUHU *LYGAEUS EQUESTRIS* POMOCÍ JEDNO- A DVOUDIMENZIONÁLNÍ PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE****MARTINA HAVLÍKOVÁ, ZUZANA BOSÁKOVÁ, RADOMÍR ČABALA***Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Albertov 6, 128 00 Praha 2  
havlikm@natur.cuni.cz*

Všechny hmyz je potenciální kořistí pro nějakého predátora a v průběhu evoluce si vyvinul mnoho strategií obrany před nimi. Jeden ze způsobů obrany je vylučování těkavých sekretů, pro jejichž identifikaci je vhodná metoda plynové chromatografie (GC), nejlépe v kombinaci s hmotnostní detekcí (GC-MS). V reálných vzorcích však bývá problém se stanovením všech makro i mikrokomponent pomocí jednorozměrné plynové chromatografie (1D GC-MS), protože se jedná o velice komplexní směsi. Některé látky je často nemožné během jedné analýzy oddělit, kvůli jejich podobným vlastnostem. Z tohoto důvodu je výhodné využít účinné komprehenzivní dvoudimenzionální GC opět ve spojení s hmotnostní detekcí (GCxGC-MS).

Práce se zabývá analýzou obranných sekretů u ploštic druhu *Lygaeus equestris* metodami 1D GC-MS (Shimadzu GCMS-QP2010 Plus) a GCxGC-MS (Shimadzu GCMS-QP2010 Ultra) ve spojení s kryogenním modulátorem; v případě 1D GC-MS i na více kolonách. *Lygaeus equestris* je schopný mít jako živnou rostlinu slunečnici, ale i Hlaváček jarní, který je pro jiné živočichy jedovatý. Je zde proto předpoklad, že toxiny z něj je schopen uchovávat a používat při obranně a přitom potlačit ostatní obranné mechanismy.

Odběr sekretů probíhal námi publikovanou metodou<sup>1</sup> z celkem čtyř různých skupin – samců a samic žijících jednak na jedovatém Hlaváčku jarním (*Adonis vernalis*) a nejedovaté slunečnici (*Helianthus*). Zakoncentrování sekretů bylo prováděno pomocí sorpce na vlákně SPME s fází carboxen/polydimethylsiloxan/divinybenzen.

Po vyhodnocení byly nalezeny rozdíly ve složení sekretů a intenzitě odezvy některých látek jak mezi pohlavími tohoto druhu, tak i mezi různě živnými jedinci. Při měření pomocí 1D GC-MS docházelo ke koelucím některých látek. Ty se podařilo identifikovat až pomocí GCxGC-MS. Příkladem jsou píky dekanalu a oktyl-acetátu, které v 1D GC-MS prezentuje jediný pík. Dále byly identifikovány různé kutikulární uhlovodíky (např. oktan-1,3-dien, 5-decyn), alkoholy ((E)-2-hexen-1-ol, 2-okten-1-ol), z hlediska obrany důležité aldehydy (2-hexenal, benzaldehyd, nonanal, dekanal), estery (2-hexen-1-ol acetát, 2-decenylní acetát) aj.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GA UK 760216 a SVV 260440.*

## LITERATURA

1. Krajicek J., Havlikova M., Bursova M., Ston M., Cabala R., Exnerova A., et al.: PLoS One 11(12), e0168827 (2016).

## 3S-06

**LIQUID CHROMATOGRAPHY AS A TOOL FOR IDENTIFICATION OF BACTERIOCIN NISIN INCORPORATED INTO POLYMERS****PAVLÍNA HOLČAPKOVÁ, ANNA HURAJOVÁ, VLADIMÍR SEDLAŘÍK***Centre of Polymer Systems, University Institute, Tomas Bata University in Zlin, Tr. T. Bati 5678, 760 01 Zlin  
holcapkova@utb.cz*

The study of incorporating antimicrobial agents into polymers has become an important aspect of active and intelligent packaging applications. In alignment with new trends, emphasis is increasingly being put on the utilization of naturally derived biocides<sup>1</sup>. Bacteriocins are antimicrobial peptides created by bacteria, which boast excellent antibacterial properties even at low concentrations<sup>2</sup>. The most well-known and characterised bacteriocin is nisin<sup>3</sup>. This peptide is composed of 34 amino-acid residues and exists in several variants differing in amino-acid sequence in their structure<sup>3,4</sup>.

The present work deals with the determination of nisin A incorporated into biodegradable polymer systems based on polylactide acid (PLA) and polylactide/polyethylene glycol (PLA/PEG). The samples were prepared by solvent cast technique and characterized according to their thermal, structural and antibacterial properties. The determination of nisin as well as evaluation of release kinetic was performed by high performance liquid chromatography (HPLC) coupled to UV/VIS detector and quadrupole time-of-flight mass spectrometer (QTOFMS).

Different methods for nisin determination according to the detector used were successfully verified. The results show that the PEG significantly enhances the release profile of nisin from PLA matrix.

*This work was co-financed by the Ministry of Agriculture of the Czech Republic (project no. QJ1310254), Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (project no. LO1504) and Internal Grant Agency of the Tomas Bata University in Zlin (project no. IGA/CPS/2018/003).*

## REFERENCES

1. Irkin R., Esmer O. K.: J. Food Sci. Technol. 52, 6095 (2015).
2. Perez R. H., Zendo T., Sonomoto K.: Microb. Cell Fact. 13(Suppl 1), S3 (2014).
3. Gharsallaoui A., Oulahal N., Joly C., Degraeve P.: Crit. Rev. Food Sci. Nutr. 56, 1262 (2016).
4. O'Connor P. M., O'Shea E. F., Guinane C. M., O'Sullivan O., Cotter P. D., Ross R. P., Hill C.: Appl. Environ. Microb. 81, 3953 (2015).



**3S-07****ENANTIOMER DISTRIBUTION OF MAJOR CHIRAL VOLATILE ORGANIC COMPOUNDS IN SLOVAK TOKAJ WINES****LIUDMYLA KHVALBOTA, IVAN ŠPÁNIK**

*Institute of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia  
liudmyla.khvalbota@stuba.sk*

The problem of authentication of food products is becoming more widespread. There is the specific regulation established for registration and protection for wines (Regulation No. 479/2008) within the framework of the EU system of protection of traditional alcoholic beverages. Aroma profile is one of the most important factors in determining the character and quality of the wine. The aroma characteristics are the result of complex interactions between several factors: the geographic location of the vineyards, which is related to soil and climatic characteristics, variety and ripeness of grape, the yeast and technical conditions of wine production, such as the temperature used for grape maceration, frequency and intensity of maceration. Also, most of biochemical interactions are stereospecific, which means that chiral compounds in wines can be characterized by specific enantiomer distributions and any changes in these ratios indicate the changes in technological process of production or falsification.

Use of one-dimensional gas chromatography with chiral stationary phases has a problem in correct determination of enantiomer ratios due to complexity of sample. For better efficiency in separation and to resolve a problem of coelution heartcut two-dimensional gas chromatography (heartcut 2D-GC) can be applied for target analysis and enantiomer separation of chiral volatile organic compounds (VOC).

The enantiomer composition of selected chiral VOCs were studied in Tokajské samorodné (dry and sweet), specialty wines 3–6 puttony. VOCs were extracted by SPME fibre coated with PDMS/CAR/DVB. The adsorption of VOCs from wine samples on SPME fibre took 30 min at 60 °C. A 30 m DB-FFAP column with i.d. 0.25 mm and film thickness 0.25 µm was selected for use in GC–MS experiments. The identification of VOCs was confirmed by the injection of standards and comparison of the obtained retention data and mass spectra. In total, more than 110 compounds were detected in studied wines belonging to various chemical classes such as terpenes, alcohols, acids, aldehydes, esters, benzene and furane derivatives, from which linalool, limonene,  $\alpha$ -terpineol and hotrienol were selected for enantiomeric separation using heartcut 2D-GC.

*The authors would like to thank for financial contribution from the STU Grant scheme for Support of Young Researchers and from Slovak Research and Development Agency under contract number APVV-15-0355.*

**3S-08****STUDIUM INTERAKCE AMINOKYSELIN A PEPTIDŮ S POVRCHEM PLASMONICKÝCH KOVŮ METODAMI VIBRAČNÍ MIKROSPEKTROSKOPIE A NANOSKOPICKÝMI TECHNIKAMI****MARTIN KRÁL, MARCELA DENDISOVÁ, PAVEL MATĚJKA**

*Ústav fyzikální chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 128 66 Praha  
kral2martin@gmail.com*

Pro pochopení biologických systémů je nezbytné jejich detailní studium na úrovni jednotlivých molekul. Této citlivosti dosahují například techniky povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (Surface-Enhanced Raman Scattering, SERS), hrotem zesíleného Ramanova rozptylu (Tip-Enhanced Raman Scattering, TERS) a skenovací infračervené mikroskopie blízkého pole (Scanning Near-field Infrared Microscopy, SNIM). Techniky TERS a SNIM navíc umožňují prostorové rozlišení v řádu několika nanometrů. K dosažení potřebné citlivosti využívají tyto techniky efektu zesílení signálu studovaných molekul v blízkosti povrchu plasmonického kovu (např. Au, Ag, Cu).

Byly zkoumány tři analyty: tryptofan, pantothenan vápenatý a fenylalanin. Tyto látky byly adsorbovány na zlatý nanostrukturovaný povrch připravený galvanickým pokovením platinového plíšku. Bylo zjištěno, že aromatické aminokyseliny poskytují obvykle lepší signál než aminokyseliny bez aromatického kruhu. Ze SERS spekter aromatických aminokyselin je možné odhadnout jejich přibližnou prostorovou orientaci na povrchu substrátu. Byla pozorována závislost poměru signál/šum ve spektrech na drsnosti povrchu substrátu a vlnové délce excitačního záření. Technika SNIM umožnila pozorovat „contact area effect“ u vzorku tryptofanu. Mapování technikou TERS poskytlo u vzorku fenylalaninu spektra, která jsou závislá na poloze měřeného bodu. Pro odhalení trendů v těchto spektrech byla použita analýza hlavních komponent (Principal Component Analysis, PCA). Výsledky PCA umožňují zjistit, jak se v průběhu mapování mění faktor zesílení signálu a orientace molekul analytu mezi různými body měření.

*Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.21-SVV/2008).*

**LITERATURA**

1. Aroca R.: *Surface-enhanced vibrational spectroscopy*. J. Wiley, Hoboken 2006.
2. Kumar N., Mignuzzi S., Su W., Roy D.: EPJ Tech. Instrum. 2, 9 (2015).
3. Brundermann E., Havenith M.: Annu. Rep. Prog. Chem., Sect. C: Phys. Chem. 104, 235 (2008).

## 3S-09

## DETEKCIA TUMOR ASOCIOVANEJ PROTILÁTKY GOD3-2C4 GLYKÁNOVÝM BIOSENZOROM NA BÁZE TN ANTIGÉNU

FILIP KVĚTOŇ<sup>a</sup>, BO JANSSON<sup>b</sup>, JÁN TKÁČ<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Chemický ústav, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovensko, <sup>b</sup> Department of Oncology, Lund University, SE-221 85 Lund, Sweden  
chemfilo@savba.sk

Sacharidy predstavujú jednu zo štyroch základných skupín biomolekúl. Ich najčastejšie sa vyskytujúcou formou v organizmoch sú glykokonjugáty tvorené počas glykozylácie enzymatickým pridávaním sacharidových zvyškov na proteínové alebo lipidové skelety za vzniku veľkého množstva vysokovariabilných molekulových štruktúr<sup>1</sup>. Tn antigén (GalNAcα1-O-Ser/Thr) bol pozorovaný vo viac ako 80 % rôznych foriem rakovín (prsia, prostata, hrubé črevo, pľúca, pankreas). V mnohých prípadoch je jeho expresia sprevádzaná metastatickým rozvojom a zlou prognózou. Tn antigén je považovaný za efektívny biomarker, tak ako za potencionálny diagnostický nástroj, s ohľadom na jeho včasnú expresiu v transformovaných bunkách<sup>2</sup>. Vďaka cukrovému zvyšku sme schopní vyvíjať nové stratégie pre terapeutické a diagnostické využitie ešte pred rozvojom devastálnych ochorení alebo môže slúžiť na detekciu autoprotílátok<sup>3</sup>.

V našej práci sme porovnávali tri rôzne metódy pre povrchové zobrazenie tohto malého glykán (S~1 nm<sup>2</sup>) využitého na detekciu tumor asociovanej anti-Tn protilátky (GOD3-2C4). Prvé dva postupy boli založené na imobilizácii antigénu na zmesnej samousporiadanej monovrstve (SAM) za vzniku 2D biosenzora. Tretí využíval kompaktnú vrstvu ľudského sérového albumínu (HSA) na povrchu pracovnej elektródy na sformovanie 3D biosenzora.

Biosenzor založený na 3D konformácii poskytol oveľa lepšie analytické vlastnosti v porovnaní s 2D štruktúrovanými biosenzormi z hľadiska citlivosti (1,4× vyššia), limitu detekcie (1,4 aM vs. 270 aM), ako aj rozsahu použiteľnosti (1,4 aM-1,4 pM s R<sup>2</sup>=0,998 vs. 270 aM-1,4 pM s R<sup>2</sup>=0,987). Taktiež sme ukázali, že 3D povrch je dostupnejší pre naviazanie sa protilátky a taktiež poskytuje lepšiu kinetiku počas tvorby väzby Ag-Ab (t<sub>50%</sub>=137 s vs. 354 s). Pre lepšie porozumenie novovytvoreného biosenzora boli využité techniky ako mikroskopia atomárnych síl (AFM), povrchová plazmónová rezonancia (SPR) a kremikové kryštálové mikrováhy (QCM).

Výsledky tohoto výskumu boli dosiahnuté vďaka finančnej podpore z Európskej rady pre výskum - Siedmy rámcový projekt (FP/2007-2013)/ERC grant č. 311532 a vďaka grantom - APVV-140753 a VEGA 2/0162/14.

## LITERATÚRA

1. Paleček E., Tkáč J., Bartošík M., Bertók T., Ostatná V., Paleček J.: Chem. Rev. 11, 2045 (2015).
2. Rouvinski A. et al.: Nature 520, 109 (2015).
3. Květoň F., Blšáková A., Hushégyi A., Damborský P., Blixt O., Jansson B., Tkáč J.: Langmuir 33, 11 (2017).

## 3S-10

## SELECTIVE INHIBITORS OF PHOSPHATIDYLINOSITOL 4-KINASE IIIβ AS BROAD-SPECTRUM ANTIVIRAL AGENTS

IVANA MEJDROVÁ, DOMINIKA CHALUPSKÁ, EVŽEN BOUŘA, RADIM NENCKA

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR v.v.i., Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha  
mejdrova@uochb.cas.cz

Phosphatidylinositol 4-kinase IIIβ (PI4KIIIβ) is one of four mammalian enzymes catalysing phosphorylation of phosphatidylinositol (PI) to phosphatidylinositol 4-phosphate (PI4P)<sup>1</sup>. PI4KIIIβ has been identified as an essential host factor required for the replication of positive-sense single-stranded RNA viruses ((+)ssRNA), namely from *Picornaviridae* family, which are associated with a plethora of diseases ranging from common cough to life-threatening encephalitis and myocarditis<sup>1</sup>.

During the viral infection, the PI4KIIIβ is hijacked to create PI4P-enriched membranes and to remodel the membranes to viral replication machinery<sup>1</sup>. Targeting the isoform IIIβ with selective inhibitors thus stops the viral replication and eliminates the risk of viral resistance. Moreover, potent and selective inhibitors would represent so desperately needed broad-spectrum antiviral agents.

We report on the synthesis of novel IIIβ inhibitors based on a screening hit T-00127-HEV1 (**I**) and our selective inhibitor MI14 (**II**)<sup>2</sup>, which bind in the ATP-binding site. Indeed, „hybrids“ of both structures resulted in very potent compounds including the most active compound ever reported (**III**) with subnanomolar IC<sub>50</sub><sup>3</sup> (Fig. 1). All compounds were purified by flash chromatography and characterized by HRMS and NMR. Inhibitors were evaluated against a panel of (+) ssRNA viruses exerting low nanomolar EC<sub>50</sub><sup>3</sup>. Our compounds also possess striking selectivity towards IIIβ at 6 nM IC<sub>50</sub>. The most potent compounds are tested in mouse models.

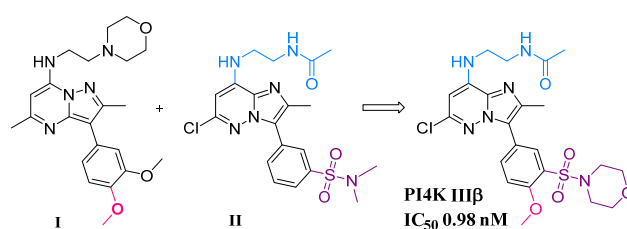


Figure 1. Design of novel PI4KIIIβ inhibitors

The research was supported by Czech Science Foundation (GA15-09310S), Gilead Sciences, Inc. and the Academy of Sciences of the Czech Republic (RVO61388963).

## REFERENCES

1. Boura E., Nencka R.: Exp. Cell. Res. 337, 136 (2015).
2. Mejdrová I. et al.: J. Med. Chem. 58, 3767 (2015).
3. Mejdrová I. et al.: J. Med. Chem. 60, 100 (2017).

**3P-01****POROVNÁNÍ POKOVENÍ PVRCHU ELEKTRODY QCM SENZORU PRO TVORBU IMUNOSENZORU A OPTIMALIZACE MĚŘÍČÍHO SYSTÉMU****ADAM KOSTELNÍK, PAVLA MARTINKOVÁ,  
MIROSLAV POHANKA***Univerzita obrany, Fakulta vojenského zdravotnictví,  
Třebešská 1575, 500 01 Hradec Králové, Česká republika  
miroslav.pohanka@gmail.com*

Historie křemenných mikrováček (QCM – z anglického quartz crystal microbalance) se začala psát již v 19. století, kdy bratři Curieovi popsali piezoelektrický jev. Jedná se o vlastnost anizotropních krystalů generovat elektrický náboj, pokud jsou mechanicky deformovány. Tato deformace může nastat i po aplikaci napětí, kdy dochází k výskytu mechanických oscilací<sup>1</sup>.

QCM mikrovážky řadíme mezi hmotnostní senzory, u kterých po fyzikální nebo chemické vazbě na povrchu elektrody dochází ke změně frekvence oscilací. Změna této oscilační frekvence je podle Sauerbreyho rovnice rovna hmotnosti látky navázané na povrchu elektrody. QCM nachází využití v celé řadě aplikací jako je např. detekce biologických agens nebo biomolekul<sup>2</sup>.

Tato práce se zabývá porovnáním pokovení povrchu elektrody QCM senzoru a porovnává jejich výhody a nevýhody vzhledem k dalšímu použití při tvorbě imunosenzoru. Rovněž se zabývá optimalizací měřicího systému.

Z porovnávaných pokovení povrchu elektrody QCM senzoru (hliník, stříbro, zlato) bylo pro další použití vybráno zlato z důvodů lepší odolnosti vůči nespecifickým interakcím a reprodukovatelnosti výsledků, jelikož stříbro je náchylné k oxidaci, a proto musí být povrch elektrody nejprve důkladně očištěn.

Měřicí systém byl optimalizován za použití různého uspořádání a adjustaci měřicí aparatury.

*Tato práce vznikla za podpory Technologické agentury České republiky (TJ01000478) a Dlouhodobého výzkumného záměru (Fakulta vojenského zdravotnictví v Hradci Králové, Univerzita obrany)*

**LITERATURA**

1. Pohanka M.: *Int. J. Electrochem. Sci.* 12, 1 (2017).
2. Vashist S. K., Vashist P.: *J. Sensor.* 2011, 571405 (2011).

**3P-02****PŘÍPRAVA, CHARAKTERIZACE A VLASTNOSTI SYNTETICKÝCH ZEOLITŮ****LENKA ŠENKÁROVÁ***Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická,  
Ústav inženýrství ochrany životního prostředí, Vavrečkova  
275, 762 72 Zlín, Česká republika  
senkarova@utb.cz*

Zeolity jsou minerály na bázi hliníkokřemičitanů. Tyto materiály mají ve své struktuře zabudovány ionty hliníku a křemíku, které tvoří tetraedry. Spojením těchto základních stavebních jednotek vznikají složitější útvary, které po opětovném spojování vytvářejí trojrozměrnou mikroporézní strukturu<sup>1</sup>. Obecně lze zeolity rozdělit na přírodní a syntetické. Vlivem trojrozměrné struktury zeolitů dané systémem kanálků a kavit se jejich specifický povrch mnohonásobně zvětšuje. Póry přesných rozměrů poskytují krystalickým hliníkokřemičitanům velkou adsorpční kapacitu a iontovýměnné vlastnosti. U jílových minerálů jako je klinoptilolit dochází k sorpčním procesům zejména na povrchu a proto vykazují nižší kationtovou výměnnou kapacitu<sup>2</sup>. Ioniovýměnné vlastnosti zeolitů se odvíjejí z typických struktur jednotlivých zeolitů. Významnou roli má vnitřní rozložení kanálků a dutin ve struktuře<sup>1</sup>. Tato jejich schopnost vázat některé těžké kovy je využitelná v životním prostředí<sup>3</sup>.

Tato práce se zabývá přípravou a charakterizací syntetických zeolitů připravených z komerčních a odpadních materiálů obsahujících kaolín. Použité materiály byly kalcinovány. Molární poměry v reakčních směsích byly upraveny přidávkem sodného, nebo draselného vodního skla. Dále bylo provedeno hydrotermální ošetření reakčních směsí. U získaných materiálů byla stanovena pevnost v tlaku a provedena identifikace mineralogických fází pomocí rentgenové práškové difrakční analýzy. Bylo prokázáno, že odpadní materiály představují vhodné surovinové zdroje pro zeolitovou syntézu, srovnatelné s komerčním kaolínem. Dále byla zkoumána kationtová výměnná kapacita (CEC) syntetických zeolitů připravených z odpadních kaolínů. Z výsledků práce lze usuzovat, že odpadní kaoliny se mohou používat jako vhodná alternativa čistého kaolínu při syntéze katexů. V poslední části této práce byla provedena studie iontovýměnných vlastností syntetických zeolitů, konkrétně jejich selektivitou pro ionty mědi a olova. Cílem práce je zjištění účinnosti interakce iontů se zeolity, které se liší rozdílnou dobou hydrotermálního ošetření. Předmětem zkoumání je také posouzení, zda na tuto účinnost má vliv míchání roztoku. Koncentrace iontů v roztoku byla zjišťována pomocí atomové absorpční spektrometrie.

**LITERATURA**

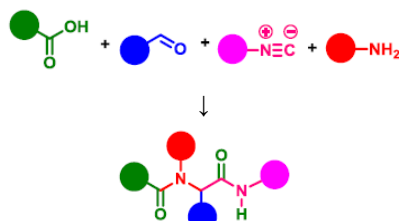
1. Čejka J., Žilková N.: *Chem. Listy* 94, 278 (2000).
2. Pitter P.: *Hydrochemie*, 2. přeprac. a rozš. vyd., SNTL, Praha 1990.
3. JACOBS P. A.: *Introduction to zeolite science and practice*, 2nd compl., Elsevier Science 2001.

**3P-03****UGI FOUR COMPONENT REACTION AS AN EFFICIENT PLATFORM FOR MULTIMODAL HPLC STATIONARY PHASE SYNTHESIS****KAMIL ZÁRUBA, AMENEH TATAR, DAVID SÝKORA, VLADIMÍR KRÁL***University of Chemistry and Technology in Prague, Technická 5, Prague 6, 16628, Czech Republic  
kamil.zaruba@vscht.cz*

In the continuous quest to develop new stationary phases with improved separation selectivity for groups of difficult to separate compounds, multimodal/mixed-mode liquid chromatography (MMLC) can bring efficient solution. Utilization of various modes of separations in one run is possible by using separate chromatographic columns, mixture of differently modified silicas in one column or a silica with a modification providing different separation modes.

Considering scientific papers in recent years, it is evident that the applications of MMLC are progressively increasing. High separation selectivity and high peak capacity make MMLC very appealing. In addition, the ability of MMLC stationary phases to work as “universal” stationary phases separating many compounds of very distant properties in a single run renders them economically favored and environmental friendly. The other significant benefit of MMLC systems is that selectivity can be optimized by adjusting mobile-phase ionic strength, pH, or organic solvent type or amount. As a result, the selectivity can be finely tuned to reach the separation of compounds differing widely in their physicochemical properties.

Ugi four component reaction is a versatile tool for the preparation of functionalized scaffolds. Variability of substituents allows to control physicochemical properties of a final product. As some of these variable functionalities can be immobilized on a modified surface, a corresponding chemical reaction can take place on silica/polymer particles, monoliths or silanized surfaces as well as at the inner wall of fused silica capillaries.



Silica modified with 3-aminopropyl group was used as a starting material for the synthesis of novel stationary phases for HPLC utilizing four components Ugi reaction. Their spectroscopic characterization and several examples of chromatographic separation of model compounds will be presented.

*Financial support from Grant Agency of CR 18-02597S is acknowledged.*

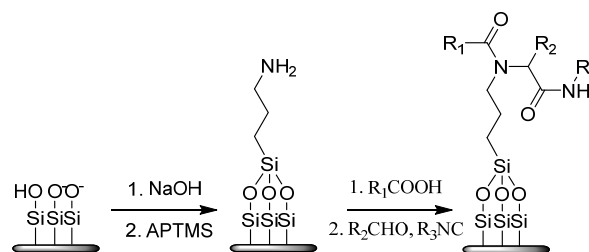
**3P-04****PREPARATION OF MULTIMODAL STATIONARY PHASE FOR CAPILLARY ELECTROPHORESIS BY UGI REACTION****PAVEL ŘEZANKA, VÁCLAV RACH, VLADIMÍR KRÁL***University of Chemistry and Technology in Prague, Technická 5, 166 28 Prague 6, Czech Republic  
Pavel.Rezanka@vscht.cz*

The Ugi four-component reaction demonstrates an attractive tool for stationary phase synthesis or modification, since products of this synthesis exhibit structural motifs that allow the formation of multimodal stationary phase containing functionalized amides, and can be synthesized from easily available compounds<sup>1</sup>.

In this work, several different capillaries using the Ugi four-component reaction were prepared (Scheme 1) for capillary electrophoresis. In the first step, 3-aminopropyl-triethoxy silane (APTMS) was covalently bonded to the inner wall of the capillary by different procedures<sup>2</sup> such as i) a simple covalent bonding, ii) sol-gel procedure, and iii) etching procedure using  $\text{NH}_4\text{HF}_2$ . In the second step, the Ugi four-component reaction was carried out using for example benzoic acid, benzaldehyde, and 1-isocyanopropane.

Prepared capillaries were characterized by means of separation properties using mixtures of appropriate analytes, for example aromatics compounds.

The results showed the influence of preparation procedures on the separation properties of prepared capillaries.



Scheme 1. Preparation of modified fused silica capillary

*This work was supported by the Czech Science Foundation, grant no. 18-02597S.*

## REFERENCES

1. Ugi I., Heck S.: *Comb. Chem. High Throughput Screen* 4, 1 (2001).
2. Řezanka P., Navrátilová K., Žvátora P., Sýkora D., Matějka P., Mikšík I., Kašička V., Král V.: *J. Nanopart. Res.* 13, 5947 (2011).

**3P-05****STOCHASTICALLY-LINKED PHOTOMODIFIED PROBES ENABLE SUCCESSFUL IDENTIFICATION OF PROTEIN TARGETS OF BIOACTIVE SMALL MOLECULES****KRISTÝNA BLAŽKOVÁ, PETR ŠIMON, TOMÁŠ KNEDLÍK, PETRA DVOŘÁKOVÁ, ANNA BŘEZINOVÁ, LIBOR KOSTKA, VLADIMÍR ŠUBR, JAN KONVALINKA, PAVEL ŠÁCHA***Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Czech Academy of Sciences, Flemingovo n. 2, 166 10 Prague 6, Faculty of Science, Charles University, Viničná 7, 128 43 Prague 2,**Institute of Macromolecular Chemistry of the Czech Academy of Sciences, Heyrovského n. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic  
blazkova@uochb.cas.cz*

The identification of protein targets of bioactive small molecules is a challenging process that requires the demanding preparation of an affinity probe. To circumvent the lengthy structure-activity-studies, we present a new method – stochastic modification of given small molecule using a photoactivatable 3-trifluoromethyl-3-phenyldiazirine linker.

Using a panel of model enzymes we show that their published inhibitors are successfully modified using this approach. The resulting stochastic mix of isomers is conjugated to *N*-(2-hydroxypropyl)methacrylamide (HPMA) conjugates – iBodies – decorated with a fluorophore and biotin. Using these iBodies, target proteins are pulled down from complex cell lysates and identified using mass spectrometry as well as visualized on the surface of cells.

Moreover, we semi-purify the stochastic mix of probes using HPLC and identify the linker-attachment position using multi-dimensional mass spectrometry. Selected fraction enriched in functionally-attached linker is used for the preparation of iBodies that have improved compared to the original iBodies both in affinity to the target protein and in capability to visualize it in cell experiments.

Our approach offers a fast target protein isolation and identification. For applications where such information is required, the identification of the functional linker attachment position is achieved through HPLC separation of fractions and subsequent mass spectrometry. The stochastic photomodification can, therefore, be used in a wide array of applications achieving successful target identification.

**3P-06****FLOW TECHNIQUES – TOOL FOR RESEARCH IN PHARMACEUTICAL AREA****PETR SOLICH, HANA SKLENÁŘOVÁ, PETR CHOCHOLOUŠ***Laboratory of Flow Analysis, Faculty of Pharmacy, Charles University, Ak. Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Czech Republic  
solich@faf.cuni.cz*

Different flow techniques (FIA, SIA, SIC, MSA, LOV, etc.) are already well established analytical methods, which are characterised by several factors essential for research or routine analysis, e.g. simplicity of fundamental principles, inexpensive instrumentation, low sample consumption and short analysis time. All flow methods offer several advantages, mainly the instrumental set-up is very flexible and the hydrodynamic variables are easily controlled, thus flow methods are becoming a convenient research tool for pharmaceutical area<sup>1</sup>.

Automated flow analytical methods has been recently used as a simple sample preparation step (automation of various extraction techniques) or for long-term monitoring. Flow techniques can automate the analysis and control long-term measurements such as dissolution, liberation or permeation tests of pharmaceuticals. A fully automated system based on the SIA technique connected to the Franz cell (enables to mimic real conditions in the human skin and penetration of the drug through the dermal barrier) can easily monitor on-line the release rate of pharmaceuticals<sup>2</sup>.

Sequential injection chromatography (SIC) was firstly introduced in 2003 as a simple alternative of high performance liquid chromatography (HPLC) for fast analysis of relatively simple samples. Implementation of short monolithic chromatographic column into SIA has expanded also to analysis of pharmaceuticals<sup>3</sup>.

*The authors gratefully acknowledge the financial support of Grant Agency of the Czech Republic (GAČR), project No. 15-10781S and by the project STARSS (Reg. No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000465) co-funded by ERDF.*

## REFERENCES

1. Šrámková J., Amorim C. G., Sklenářová H., Montenegro M. C. M. B., Horskotte B., Araujo A. N., Solich P.: *Talanta* 118, 104 (2014).
2. Zelená L., Marques S. S., Segundo M., Miro M., Pávek P., Sklenářová H., Solich P.: *Anal. Bioanal. Chem.* 408, 971 (2016).
3. Batista A. D., Chocholouš P., Šatinský D., Solich P., Rocha F. R. P.: *Talanta* 133, 142 (2015).

3P-07

**PŘÍPRAVA MOLEKULÁRNĚ VTIŠTĚNÉHO POLYMERU PRO MYKOTOXIN CITRININ: SELEKTIVNÍ SORBENT PRO ON-LINE SPE-HPLC****IVONA LHOTSKÁ, ANETA KHOLOVÁ, ANDREA MACHYŇÁKOVÁ, KATARÍNA HROBOŇOVÁ, DALIBOR ŠATÍNSKÝ***Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Česká republika lhotski@faf.cuni.cz*

Kontaminace potravin mykotoxiny není problém pouze nevhodného skladování a správné zemědělské praxe. I záměrné osídlení ušlechtilou plísní pro fermentaci může být zdrojem toxikózy. Obecně totiž plísně produkují velké množství metabolitů včetně toxických. Tato práce byla zaměřena na červenou fermentovanou rýži (RYR) a z ní vyráběné potravní doplňky pro snížení cholesterolu vycházející z tradiční čínské medicíny. Rýže je fermentována červenou kvasinkou *Monascus purpureus*, která je producentem také mykotoxinu citrininu (CIT). Ten je nejčastěji spojován s nefrotoxicitou, několik studií prokázalo také zvýšenou indukci apoptózy působením oxidačního stresu a volných radiálů například ve střevě či reprodukčním systému. Z tohoto důvodu je v evropské legislativě zakotvena kontrola citrininu pro potravní doplňky na bázi RYR<sup>1</sup>.

Navržená chromatografická metoda pro stanovení CIT zahrnuje on-line extrakci na selektivním molekulárně vtištěném polymeru (MIP). Pro stanovení stopových koncentrací mykotoxinů jsou často využívány selektivní metody extrakce, narozdíl od imunoafinitních sorbentů jsou MIP odolnější, levnější a mají větší extrakční kapacitu. Nově připravené MIP o různém složení byly testovány z hlediska extrakční kapacity a selektivity (nárůst výtěžnosti o 67 % proti nevtištěnému polymeru, který poskytuje pouze nespecifické interakce). Pro další optimalizaci metody byl použit nejvhodnější MIP o složení 1:4:16 templát 1-hydroxy-2-naftoová kyselina/struktury monomer methakrylamid/sířovací činidlo ethylenglykol-dimethakrylát (v porogenním rozpouštědle acetonitrilu).

On-line extrakce bylo docíleno použitím HPLC systému s přepínáním kolon. Vzorek byl nadávkován na MIP extrakční kolonku a promýván 25% MeOH pro odstranění interferencí. Po přepnutí toku byl obsah MIP eluován 30% ACN a v gradientové eluci separován na chromatografické koloně (celkem 9,5 min). Limit detekce této SPE-HPLC-FD metody je 7,5 µg/l, výtěžnost 76 % s přesností RSD<2,5 %. Testované potravní doplňky vyhovovaly kritériím pro obsah CIT (n=6, limit 2000 µg/kg, nejvyšší kontaminace 1105,8 µg/kg).

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAUK 726 316, GAUK 181 216 a projektu STARSS (Reg. No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000465) co-funded by ERDF.*

## LITERATURA

1. Commission Regulation (EU) No 212/2014. Off. J. Eur. Union, L67, 3 (2014).

3P-08

**STANOVENÍ STUPNĚ REDUKCE NiO V Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> KATALYZÁTORECH A JEHO VLIV NA AKTIVITU****ROMAN VALEŠ, HANA REZKOVÁ, ZUZANA TOPINKOVÁ, BOHUMÍR DVOŘÁK***ÚOT, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika roman.vales@vscht.cz*

Stupeň redukce NiO, v komerčních Ni-katalyzátorech byl určován metodami pulzní O<sub>2</sub>-titrace a H<sub>2</sub>-TPR. Obě metody poskytovaly dobře reprodukovatelné výsledky, s relativní chybou < 2,5 %. Výsledky získané metodou H<sub>2</sub>-TPR jsou systematicky vyšší, o 11 až 19 rel. %. Analýzou H<sub>2</sub>-TPR spekter vzorků katalyzátoru KL-6524 bylo zjištěno, že v oblasti teplot 600–850 °C dochází ke zvyšování záporné odchylky od nulové linie. Možnou příčinou je detekce dvou paralelních reakcí, doprovázených koncentračními změnami plynných produktů s opačnými tepelnými vodivostmi. Správnost hypotézy byla potvrzena paralelním záznamem H<sub>2</sub>-TPR spekter TC- a MS detektory. V intervalu teplot 600–850 °C byl prokázán vznik plynné složky s molekulovou hmotností *m/z* 44. Detekovanou složkou je CO, jehož výrazně nižší tepelná vodivost vysvětluje příčinu záporné odchylky v H<sub>2</sub>-TPR spektru Ni-katalyzátoru. Vznikající CO je produktem niklem katalyzované reakce grafitického uhlíku s vodní párou uvolňovanou při redukci NiO. Touto reakcí, známou jako parní reforming, vzniká plynná směs H<sub>2</sub> + CO. Paralelní výskyt popsané plynné směsi a koncentračních změn vodíku, vyvolaných redukcí NiO, vylučují užití H<sub>2</sub>-TPR metody k analýze stupně redukce v Ni-katalyzátorech obsahujících grafit. Prakticky využitelný je ale první pík v H<sub>2</sub>-TPR spektru Jeho plocha je úměrná množství chemisorpcí vázaného kyslíku a charakterizuje stupeň pasivace na vzduchu nestabilní kovové Ni-fáze. Tato aplikace není dosud v literatuře popsána.

Korelace aktivity vzorků komerčního Ni/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> katalyzátoru, pro technologii dicyklohexylaminu a stupně redukce jejich Ni<sup>2+</sup> složky neposkytly jednoznačné výsledky. Důvodem bylo relativně úzké rozmezí 55 a 69–74 % stupně redukce NiO a zejména realizace hydrogenace anilinu v oblasti brzdicího vlivu vnitřního transportu reaktantu. Platnost korelace stupně redukce Ni<sup>2+</sup> složky a aktivity Ni-katalyzátoru, pro hydrogenaci anilinu, byla později jednoznačně prokázána testováním jejich aktivity v kinetické oblasti.

## LITERATURA

1. Rezková H.: *Studium vlastností Ni-katalyzátorů pro průmyslovou výrobu dicyklohexylaminu*, Diplomová práce, VŠCHT Praha 2014.

**3P-09****ELEKTROCHEMICKÉ CHOVÁNÍ 4-NITROFENOLU NA ELEKTRODÁCH Z PYROLYTICKÉHO GRAFITU****PETER ŠEBEST<sup>a</sup>, PAVLÍNA VIDLÁKOVÁ<sup>a</sup>, FILIP LIGMAJER<sup>a,b,c</sup>, ALEŠ DAŇHEL<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Biofyzikální ústav, Akademie věd České republiky, v.v.i., Královopolská 135, 612 65 Brno, <sup>b</sup> Central European Institute of Technology, Vysoké učení technické v Brně, Technická 10, 616 00 Brno, <sup>c</sup> Ústav fyzikálního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně, Technická 2, 616 69 Brno, Česká republika besta@ibp.cz

Aromatické a fenolové nitro sloučeniny jsou důležité meziproducty produkce fungicidů, pesticidů, barviv a léčiv. Expozice 4-nitrofenolu (4-NP) může vést ke zvýšení hladiny methemoglobinu, aspartátaminotransferasy a také k poškození rohovky a ke kožním onemocněním<sup>1</sup>.

K detekci nízkých koncentrací 4-NP se používají různé techniky např. kapalinová a plynová chromatografie, kapilární elektroforéza, spektrofotometrie, fluorimetrie<sup>2-4</sup>. 4-NP může být detekován také elektrochemicky, ireversibilní redukcí nitro skupiny nebo ireversibilní oxidací hydroxylové skupiny. K detekci 4-nitrofenolu se používá celá řada elektrochemických metod<sup>5-7</sup>, nicméně stále je visící rtuťová kapková elektroda (HDME) v kombinaci s adsorpční rozpouštěcí voltametrií (AdSV) nejcitlivější voltametrický senzor<sup>8</sup>.

Na elektrodě z pyrolytického grafitu (PGE) jsme studovali elektrochemické chování 4-NP. Pomocí cyklické voltametrie jsme kvantifikovali a detekovali 4-nitrofenol na elektrodě z pyrolytického grafitu a stanovili jsme limity detekce a kvantifikace. Dosažené výsledky budou sloužit jako model pro pozdější studie PGE s deponovanými částicemi stříbrného amalgámu.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR projekt 17-23634Y.*

**LITERATURA**

1. Pfeifer R., Martinhon P. T., Sousa C., Moreira J. C., do Nascimento M. A. C., Berek J.: *Int. J. Electrochem. Sci.* 10, 7261 (2015).
2. Wissiack R., Rosenberg E.: *J. Chromatogr. A* 963, 149 (2002).
3. Niazi A., Yazdanipour A.: *J. Hazard. Mater.* 146, 421 (2007).
4. Zhang W., Wilson C. R., Danielson N. D.: *Talanta* 74, 1400 (2008).
5. Svancara I., Vytras K., Berek J., Zima J.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 31, 311 (2001).
6. Li J. H., Kuang D. Z., Feng Y. L., Zhang F. X., Xu Z. F., Liu M. Q.: *J. Hazard. Mater.* 201, 250 (2012).
7. Fischer J., Vanourkova L., Danhel A., Vyskocil V., Cizek K., Berek J., Peckova K., Yosypchuk B., Navratil T.: *Int. J. Electrochem. Sc.* 2, 226 (2007).
8. Berek J., Ebertova H., Mejstrik V., Zima J.: *Collect. Czech Chem. C.* 59, 1761 (1994).

**3P-10****VÝVOJ A OPTIMALIZACE DVOUKANÁLOVÉHO TLAKOVÉHO PULZNÍHO MODULÁTORU PRO KOMPREENZIVNÍ PLYNOVOU CHROMATOGRAPHII (GCxGC)****KAREL MUSIL<sup>a</sup>, RADOMÍR ČABALA<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, katedra analytické chemie, Hlavova 8, 128 43 Praha, <sup>b</sup> Všeobecná fakultní nemocnice, Ústav soudního lékařství a toxikologie VFN, Oddělení toxikologie, Ke Karlovu 2, 128 08 Praha 2, Česká republika karel.musil@natur.cuni.cz, Radomir.Cabala@vfn.cz

Komprehenzivní plynová chromatografie (GCxGC) je dvoudimenzionální separační metoda, umožňující simultánní analýzu vzorku na dvou kolonách s odlišnými stacionárními fázemi. Je určena k analýzám velmi komplexních vzorků, kde účinnost konvenční GC nedostačuje<sup>1,2</sup>.

Tato práce se zabývá vývojem, konstrukcí a optimalizací tlakového pulzního modulátoru, který je klíčovou částí GCxGC instrumentace. Konečným cílem práce je modulátor pro celkem 4 separační kolony (dvoukanálový). U stávajícího modelu bylo nastavení tlaků v modulátoru řešeno manuálními regulátory. Toto řešení neumožňuje analýzy s teplotním programem ve větším teplotním rozsahu, protože se s rostoucí teplotou modulátor dostává z optimálních podmínek a nastavený tlak nelze průběžně manuálně upravovat s dostatečnou přesností a reprodukovatelností<sup>3</sup>.

Nově konstruovaný model je vybaven programovatelnou elektronikou, ke které byl vytvořen řídicí software ovládající čtyři elektronické regulátory tlaku a spínání solenoidových ventilů (původní model byl jedнокanálový pro dva manuální regulátory). Software je schopen řídit a regulovat tlak dle nastaveného programu v průběhu analýz s teplotním programem, a to s vysokou přesností a reprodukovatelností. Funkčnost modulátoru byla testována na GC Shimadzu GC-2010 s FID detekcí. Optimalizace modulátoru probíhala ve dvou krocích, nejprve byly naměřeny mrtvé časy systému, vypočteny lineární průtokové ryhlosti a odpovídající modulační periody v závislosti na nastavených tlacích, dále pak byly na směsi n-alkanů, alkoholů a aromatických látek testovány vypočtené teoretické modulační periody a optimalizovány pracovní parametry.

*Tato práce vznikla za podpory grantu č. 606216 Grantové agentury Univerzity Karlovy.*

**LITERATURA**

1. Winnike J. H., Wei X., Knagge K. J., Colman S. D., et al.: *J. Proteome. Res.* 14, 1810 (2015).
2. Krupčík J., Gorovenko R., Špánik I., Sandra P., Armstrong D. W.: *J. Chromatogr. A.* 1280, 104 (2013).
3. Ston, M., Cabala, R., Bierhanzl, V. M., Krajčec, J., Bosáková Z.: *J. Chromatogr. Sci.* 54, 1481 (2016).

## 3P-11

## VLASTNOSTI STŘÍBRNÝCH AMALGAMOVÝCH ELEKTROD VÝZNAMNÉ Z HLEDISKA ANALYTICKÝCH APLIKACÍ

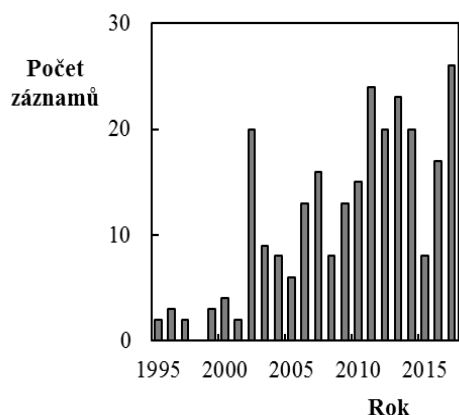
JAN FISCHER, JIŘÍ BAREK

Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 43 Praha 2, Česká republika

Jan.Fischer@natur.cuni.cz

Na začátku toho století našly stříbrné pevné amalgamové elektrody (AgSAE) uplatnění v analytické chemii. Bylo to především díky jednoduchému postupu přípravy tohoto typu elektrod<sup>1,2</sup>. Jejich hlavní výhodou je podobnost potenciálového okna se rtuťovými elektrodami a možnost snadné elektrochemické aktivace/regenerace povrchu elektrody<sup>3</sup>. Následně byly připraveny stovky metod (obr. 1) pro jejich využití v elektroanalytických metodách<sup>4,5</sup>.

Tento příspěvek přehledně shrnuje základní vlastnosti těchto elektrod a představuje praktické postupy důležité pro jejich využití v elektrochemii a pro aplikace zaměřené na sledování biologicky aktivních organických látek, které je třeba sledovat v environmentálních, biologických či potravinových matricích.



Obr. 1. Počet publikací zaměřených na voltametrii na amalgamových elektrodách podle databáze SciFinder

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (projekt 17-03868S).

## LITERATURA

- Novotny L., Yosypchuk B.: Chem Listy 94, 1118 (2000).
- Mikkelsen O., Schroder K.: Anal. Lett. 33, 3253 (2000).
- Fischer J., Vanourkova L., Danhel A., Vyskocil V., Cizek K., Berek J., Peckova K., Yosypchuk B., Navratil T.: Int. J. Electrochem. Sci. 2, 226 (2007).
- Danhel A., Berek J.: Curr. Org. Chem. 15, 2957 (2011).
- Danhel A., Josypchuk B., Berek J., Fojta M.: Chem. Listy 110, 215 (2016).

## 3P-12

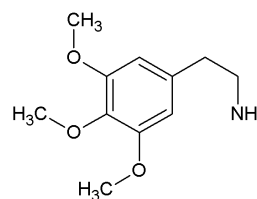
## VÝVOJ ANALYTICKÉ METODY PRO STANOVENÍ A IDENTIFIKACI MESKALINU V ROSTLINNÉM A BIOLOGICKÉM MATERIÁLU

MARTIN ŠVIDRNOCH<sup>a,b</sup>, LUCIE SKÁCELOVÁ<sup>a</sup>, VÍTĚZSLAV MAIER<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, <sup>b</sup> Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, Česká republika  
martin.svidrnoch@osu.cz

Mescalín (obr. 1) je přirozeně se vyskytující halucinogenní alkaloid vyskytující se v kaktusech rodu *Lophophora*. Doposud bylo stanovení meskalínu prováděno výhradně za pomoci kapalinové nebo plynové chromatografie (GC), přičemž pro GC analýzu byla nezbytná derivatizace. Pro stanovení a identifikaci meskalínu v rostlinném a biologickém materiálu byla vyvinuta nová metoda využívající kapilární elektroforézu s tandemovou hmotnostní spektrometrií (CE-ESI-MS/MS). Vzorky rostlin byly nejdříve sušeny do konstantní hmotnosti při teplotě 105 °C a poté důkladně homogenizovány. Pro rostlinné vzorky byla použita jednoduchá L-L extrakce etanolem o bazickém pH, které bylo upraveno přidávkou hydroxidu amonného (3%, v/v). U vzorků moči nebyla nutná extrakce, vzorky byly pouze 10× naředěny z důvodu potlačení vlivů solí a metabolitů přítomných v biologické matrici. Separace byla prováděna v nepokryté křemenné kapiláře (70 cm × 50 μm I.D.) při separačním napětí +25 kV. Separací elektrolyt sestával z 25 mM octanu amonného pH 3,5.

Pro identifikaci a detekci byl použit tandemový hmotnostní spektrometr s ESI ionizací v pozitivním módu. Podmínky detekce byly pečlivě studovány s cílem maximálně zvýšit odezvu detektoru, z tohoto důvodu byly optimalizovány parametry MS jako např. kolizní energie, desolvatační potenciál, složení pomocné kapaliny a její průtok a stejně tak i tlak, průtok a teplota nebulizačního plynu (N<sub>2</sub>). Pro účely kvantifikace a validace vyvinuté metody byl použit deuterizovaný standard meskalínu. Získané limity kvantifikace byly 1,30 μg/l pro rostlinné vzorky a 2,13 μg/l pro vzorky biologické (moč). Tato vyvinutá a optimalizovaná metoda je rychlou, jednoduchou a účinnou alternativou pro stávající chromatografické metody.



Obr. 1. Strukturální vzorec meskalínu



**3P-13****URYCHLOVAČOVÁ HMOTNOSTNÍ  
SPEKTROMETRIE V ČR – NOVÉ MOŽNOSTI PRO  
STANOVENÍ VYBRANÝCH AKTINOIDŮ V RÁMCI  
PROJEKTU RAMSES****KATEŘINA FENCLOVÁ<sup>\*</sup>, MARTIN DAŇO,  
MARYANA BILOUS, TOMÁŠ PRÁŠEK, MOJMÍR  
NĚMEC, JAN JOHN***Katedra jaderné chemie, Fakulta jaderná a fyzikálně  
inženýrská, ČVUT, Břehová 78/7, 115 19 Praha 1, Česká  
republika  
katerina.fenclova@fffi.cvut.cz*

Projekt RAMSES (Ultra-trace isotope research in social and environmental studies using accelerator mass spectrometry) přináší rozšíření Centra urychlovačových a jaderných analytických metod (CANAM) a v rámci Ústavu jaderné fyziky (UJF) v Řeži bude vybudována první laboratoř urychlovačové hmotnostní spektrometrie (AMS – Accelerator mass spectrometry) v České Republice. Metoda AMS patří v současné době k nejcitlivějším analytickým metodám. Tato metoda umožňuje měření vzájemných poměrů izotopů v ultrastopových koncentracích, a to až do řádu  $10^{-16}$  při použití jen 1 mg analyzovaného vzorku a době analýzy kratší než 1 hodina.

Kromě radiouhlíkového datování a stanovení  $^{14}\text{C}$  budou analýzy zaměřeny na stanovení vybraných vhodných kosmogenních radionuklidů aktinoidů, štěpných a aktivačních produktů. Výhodou AMS proti jiným ultracitlivým metodám (TIMS, ICP-MS...) je kromě hmotnostního rozlišení také mnohařádkově potlačení interferujících iontů. Proto lze měřit i izotopické poměry nuklidů, které jsou ve vzorku pod hranicí „koncentrace všudepřítomnosti“<sup>2,3</sup>. Tyto analýzy se využívají hlavně k monitorování životního prostředí, migrace a původu radionuklidů, ke zjištění kontaminace vody a půdy v důsledku radioaktivního spadu, k datování stáří hornin, v jaderné energetice a k monitorování jaderných materiálů<sup>1,2</sup>.

Stanovení aktinoidů v projektu RAMSES je zaměřeno na aktinoidy s dlouhým poločasem přeměny převážně ve vzorcích životního prostředí. Jedná se zejména o aktinidy  $^{230}\text{Th}$ ,  $^{231}\text{Pa}$ ,  $^{236}\text{U}$ , izotopy Np, Pu, Am a Cm. Z řad štěpných produktů budou AMS analýzy nejčastěji využívány ke stanovení radionuklidů  $^{79}\text{Se}$ ,  $^{93}\text{Zr}$ ,  $^{99}\text{Tc}$ ,  $^{107}\text{Pd}$ ,  $^{126}\text{Sn}$ ,  $^{129}\text{I}$ . Rutinně budou stanovovány převážně  $^{236}\text{U}$  a  $^{129}\text{I}$ , ale výzkum bude zaměřen jak na rozšíření portfolia měřených radionuklidů, tak na aplikaci analýz při zkoumání přírodních i antropogenních jevů či individuálních vzorků.

*Tato práce vznikla za podpory projektu Nr.  
CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000728: RAMSES.***LITERATURA**

1. Kutschera W.: EJP Web of Conferences 63, 03001 (2013).
2. Quinto F., Golser R., Lagos M., Plaschke M., Schäfer T., Steier P., Geckeis H.: Anal. Chem. 87, 5766 (2015).
3. Elmore D., Phillips F. M.: Science 236, 543 (1987).

**3P-14****PREPARATION OF FLUORIDE TARGET MATRICES  
FOR  $^{236}\text{U}$  AMS MEASUREMENT****TOMÁŠ PRÁŠEK<sup>a</sup>, MOJMÍR NĚMEC<sup>a</sup>,  
PETER STEIER<sup>b</sup>, XIAOHE ZHANG<sup>b</sup>***<sup>a</sup> Department of Nuclear Chemistry, Czech Technical  
University in Prague, 115 19 Praha 1, Czech Republic,**<sup>b</sup> VERA Laboratory, Institute of Isotopic Research and  
Nuclear Physics, University of Vienna, Währinger Straße 17,  
A1090 Vienna, Austria  
tomasprasek@seznam.cz*

Urychlovačová hmotnostní spektrometrie (AMS) je vysoce citlivou hmotnostně-spektrometrickou analytickou metodou, jež nalézá uplatnění především při stanovení stopových a ultrastopových množství jak stabilních, tak i radioaktivních nuklidů. Jedním z nich je i isotop uranu  $^{236}\text{U}$ , jehož analýza v přírodních matricích zaznamenala v posledních letech značný rozvoj, související především s mimořádně vhodnými vlastnostmi  $^{236}\text{U}$  pro účely stopování lidské jaderné činnosti. Jeho aplikace lze dále rozšířit rovněž na studium některých přírodních jevů jako hlubokomořského proudění, přírodních štěpných reaktorů apod.

Ve srovnání s oxidickými terčovými matricemi, jež jsou ke stanovení  $^{236}\text{U}$  prostřednictvím AMS běžně využívány, poskytují v současnosti vyvíjené fluoridové matrice obecně vyšší iontové výtěžky za současné významné redukce interferencí isobarických iontů. V důsledku tak lze dosáhnout detekčních limitů nižších až o několik řádů. Nevýhodou je pak náročnost přípravy těchto sloučenin v požadované čistotě, jež se výrazně projevuje kupříkladu v případě teoreticky velmi slibného  $\text{UF}_4$ . Vyvíjeny jsou tudíž nové postupy přípravy terčových vzorků, jež by mohly vést k fluoridové matici vhodné pro stanovení  $^{236}\text{U}$  pomocí AMS. Důraz je kladen především na čistotu výsledného produktu, jednoduchost kroků vlastního postupu a v neposlední řadě návaznost na předchozí zpracování přírodních vzorků.

*Tato práce vznikla za podpory grantu ČVUT: SGS18/192/  
OHK4/3T/14 a projektu RAMSES: CZ.02.1.01/0.0/  
0.0/16\_019/0000728.***3P-15****FIRST ACCELERATOR MASS SPECTROMETRY  
LABORATORY IN THE CZECH REPUBLIC****MARTIN DAŇO<sup>a</sup>, JAN KUČERA<sup>b</sup>, JAN JOHN<sup>a</sup>,  
MOJMÍR NĚMEC<sup>a</sup>, IVO SVĚTLÍK<sup>b</sup>, DAGMAR  
DRESLEROVÁ<sup>c</sup>***<sup>a</sup> Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU  
in Prague, Břehová 7, 115 19, <sup>b</sup> Nuclear Physics Institute  
CAS, 250 68 Husinec-Řež 130, <sup>c</sup> Institute of Archaeology in  
Prague CAS, Letenská 7, 118 01 Prague 1, Czech Republic  
martin.dano@fffi.cvut.cz*

Establishment of the first Accelerator Mass Spectrometry (AMS) laboratory in the Czech Republic (within

the project RAMSES – Ultra-trace isotope research in social and environmental studies using accelerator mass spectrometry) has recently been started in cooperation of the Nuclear Physics Institute of the Czech Academy of Sciences (NPI), the Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering of the Czech Technical University in Prague and the Institute of Archaeology in Prague of the Czech Academy of Sciences. The laboratory will be incorporated into NPI infrastructure Centre of Accelerators and Nuclear Analytical Methods (CANAM), with an accelerator with maximum terminal voltage 1 MV. The laboratory will be built on the premises of NPI in Řež.

The AMS system should be capable of measuring low levels of  $^{14}\text{C}$ , cosmogenic radionuclides  $^{10}\text{Be}$  and  $^{26}\text{Al}$ , actinides, especially isotopes of U and Pu, and selected fission products, e.g.  $^{129}\text{I}$ . The application fields of  $^{14}\text{C}$  measurement will involve: radiocarbon dating in archaeology, paleoecology and other disciplines; bomb peak dating for environmental protection and forensic medicine; environmental and geological studies, detection of environmental changes;  $^{14}\text{C}$  in the atmosphere and in the vicinity of nuclear power plants; atmospheric  $^{14}\text{CO}_2$  and  $^{14}\text{C}$  environmental levels (reference background values); green vs. fossil carbon  $^{14}\text{C}$  in motor fuels, pharmaceuticals, foods and chemical industry; microdosing of pharmaceuticals labeled with  $^{14}\text{C}$ . The applications of  $^{10}\text{Be}$  and  $^{26}\text{Al}$  measurement will involve geochemistry and paleoclimatic change studies (sediments, rocks, glaciers, ...); age determination of meteorites and other extra-terrestrial materials; and determination of cosmogenic nuclides. The measurements of actinides and fission products will be applied for geochronology, environmental control and monitoring; natural fission and neutron reactions; nuclear forensics and Safeguards, undeclared nuclear activities, nuclear weapon explosions<sup>1</sup>.

*This contribution was supported by the EU, ESIF, OP RDE, MEYS project Nr. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000728 (RAMSES).*

#### REFERENCE

1. Kutschera W.: EJP Web of Conferences 63, 03001 (2013).

#### 3P-16

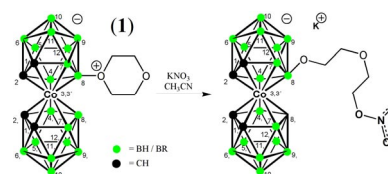
#### POUŽITÍ BORANOXONIA K HPLC DERIVATIZACI A STANOVENÍ NUKLEOFILŮ VE VODÁCH

JAROSLAV KLAPETEK<sup>a</sup>, VÁCLAV ŠÍCHA<sup>a,b</sup>, JAN ČERMÁK<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem, České mládeže 8, 400 01 Ústí nad Labem, <sup>b</sup> Ústav anorganické chemie Akademie věd ČR v.v.i., Hlavní 1001, 250 68 Řež, Česká republika  
j.klapetek@seznam.cz

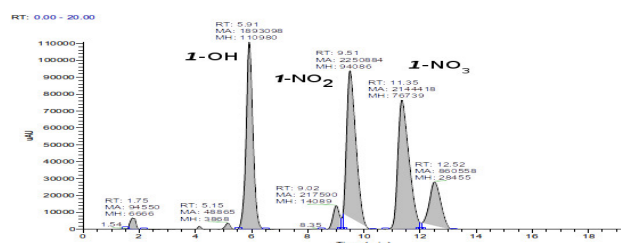
K detekci jen obtížně detekovatelných molekul a citlivějšímu stanovení některých analytů jsou v chromatografických metodách používána derivatizační

činnidla. Je jich na výběr velmi mnoho, většinou jsou drahá, alergizující nebo vykazují zvýšenou toxicitu, reagují na vzduchu s vlhkostí nebo reagují selektivně jen s určitým druhem analytu za úzce vymezených reakčních podmínek<sup>1</sup>. Z těchto důvodů dosud byly například koncentrace velmi toxických aniontů ( $\text{NO}_3^-$ ,  $\text{NO}_2^-$ ) raději sledovány méně přesnými spektrofotometrickými metodami<sup>2</sup>. Použitím reaktivního, ale na vzduchu stálého boranoxonia, 8-dioxonium-kobalt bis-dikarbolidového obojetného iontu<sup>3</sup> **I**, se podařilo v jediném kroku kvantitativně zreagovat, jednoznačně dokázat přítomnost a stanovit koncentrace dusičnanů a dusitanů, ale zároveň i halogenidů ( $\text{X}^-$ ), pseudohalogenidů ( $\text{CN}^-$ ,  $\text{SCN}^-$ ),  $\text{OH}^-$  iontů, a také amoniaku.



Obr. 1. Schéma příkladu reakce **I** s dusičnanem draselným

Ke stanovení koncentrací sledovaných analytů byly připraveny a jako analytické standardy charakterizovány (NMR, MS, CHN) příslušné deriváty. K detekci a stanovení koncentrací sledovaných analytů byly použity UV-Vis, PDA a ESI MS detektory. Tento postup umožňuje pro stanovení výše uvedených analytů nahradit iontový chromatograf za běžný systém HPLC s UV-Vis detekcí. Navíc lze díky efektivní, snadné, rychlé a bezpečné předkolonové derivatizaci činidlem **I** s molekulovou hmotností 410,85  $\text{g mol}^{-1}$  zvýšit řádově citlivost stanovení a posunout se do oblasti ultrastopové analýzy studovaných analytů.



Obr. 2. HPLC-UV/Vis chromatogram derivátů **I** s  $\text{OH}^-$ ,  $\text{NO}_2^-$  a  $\text{NO}_3^-$

*Tato práce vznikla za podpory projektu "Centrum pokročilých chemických technologií realizovaných v Ústecko-chomutovské aglomeraci" č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/17\_049/0008397 a projektu UJEP-SGS-172-07-05.*

#### LITERATURA

1. Lawrence J. F., Frei R. W.: *Chemical derivatization in liquid chromatography*, Elsevier Scientific Publishing Company, New York 1976.
2. Pitter P.: *Hydrochemie*, VŠCHT Praha, Praha 2015.
3. Kvasničková E., Masák J., Čejka J., Mařátková O., Šícha V.: *J. Organomet. Chem.* 827, 23 (2017).

## 3P-17

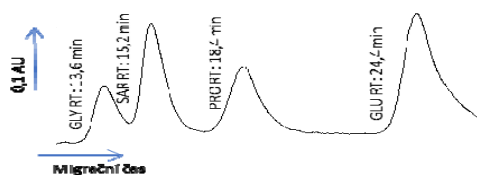
## STANOVENÍ SARKOSINU V UMĚLÉ A REÁLNÉ MOČI ZA VYUŽITÍ IONTOVÝMĚNNÉ KAPALINOVÉ CHROMATOGRRAFIE

PAVLA PANTUČKOVÁ<sup>a</sup>, DAGMAR UHLÍŘOVÁ<sup>a</sup>,  
MICHAELA DOČEKALOVÁ<sup>a</sup>, MARTINA  
STAŇKOVÁ<sup>a</sup>, ZUZANA TÓTHOVÁ<sup>a</sup>, RENÉ KIZEK<sup>a,b,\*</sup>

<sup>a</sup> Oddělení výzkumu a vývoje, Prevention medicals, s. r. o.,  
Tovární 342, Butovice, 742 13 Studénka, Česká republika,  
<sup>b</sup> Department of Biomedical and Environmental Analyses,  
Faculty of Pharmacy, Wrocław Medical University, 50-556  
Borowska 211, Wrocław, Poland  
kizek@sci.muni.cz

Hladina neproteinogenní aminokyseliny sarkosinu (*N*-methylglycin), přítomné v lidské moči a plazmě, je v poslední době sledována jako potenční marker zhoubných nádorů, a to především nádorů prostaty<sup>1</sup>. Zvýšená hodnota hladiny sarkosinu v lidské moči může signalizovat také další patogenní příčiny, jako je virová infekce nebo kardiovaskulární onemocnění<sup>2,3</sup>.

Cílem naší práce bylo zavedení robustní a plně automatizované metody iontovýměnné kapalinové chromatografie (přístroj model AAA500, INGOS, CR) pro stanovení hladiny sarkosinu v biologických vzorcích. Pro detekci sarkosinu (a dalších aminokyselin) byla použita post kolonová derivatizace ninhydrinem (8,9 mM) s následnou Vis-detekcí při 570 nm. Základní parametry chromatografie byly následující: teplota kolony 60 °C, doba analýzy 45 min, průtok 0,3 ml/min, nástřik 100 ml). Typický signál sarkosinu (10 mM) byl zaznamenán v RT 15,2 ± 0,3 min (n = 10). Chromatografická metoda byla optimalizována pro stanovení sarkosinu ve vodném roztoku. Sarkosin byl od ostatních aminokyselin velmi dobře separovatelný Gly (RT 13,6 min), Pro (RT: 18,4 min) a Glu (RT 24,4 min). Byla získána závislost signálu na koncentraci ( $y = 4,63x - 5,15$ ,  $r = 0,997$ ), RSD 8,98 %, LOD = 2,2 mM, LOQ = 6,6 mM. Rychlá, jednoduchá a robustní metoda byla aplikována pro stanovení sarkosinu v moči zdravých jedinců a pacientů se zhoubnými nádory prostaty.



Obr. 1. Typický chromatografický záznam směsi aminokyselin (Gly, Sar, Pro, Glu: 10 mM)

Tato práce vznikla za GLpodpory SARKO TEST 165/2016.

## LITERATURA

1. Cernei N., et al.: Int. J. Electrochem. Sci. 7, 4286 (2012).
2. Jiang Y., et al.: Anal. Chem. 82, 9022 (2010).
3. Shamsipur M., et al.: J. Pharm. Biomed. Anal. 81-82, 65 (2013).

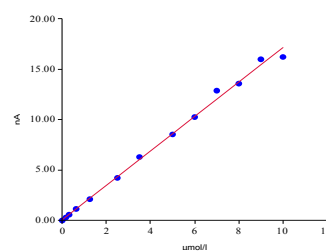
## 3P-18

## ELEKTROCHEMICKÁ ANALÝZA VLIVU ZINKU NA SARKOSIN OXIDASU

ZUZANA TÓTHOVÁ<sup>a</sup>, MICHAELA DOČEKALOVÁ<sup>a</sup>,  
MARTINA STAŇKOVÁ<sup>a</sup>, DAGMAR UHLÍŘOVÁ<sup>a</sup>,  
PAVLA PANTUČKOVÁ<sup>a</sup>, RENÉ KIZEK<sup>a,b,\*</sup>

<sup>a</sup> Oddělení výzkumu a vývoje, Prevention medicals, s. r. o.,  
Tovární 342, Butovice, 742 13 Studénka, Česká republika,  
<sup>b</sup> Department of Biomedical and Environmental Analyses,  
Faculty of Pharmacy, Wrocław Medical University, 50-556  
Borowska 211, Wrocław, Poland  
kizek@sci.muni.cz

Karcinom prostaty patří mezi nejčastěji diagnostikované malignity a zároveň je druhou nejčastější příčinou úmrtí mužů v oblasti nádorových onemocnění<sup>1</sup>. V řadě našich předchozích studií byl potvrzen vztah mezi hladinou sarkosinu v moči a nádorem prostaty. K detekci sarkosinu je možné využít enzym sarkosin oxidasu (SOX). Její aktivita může být ovlivněna řadou fyzikálně-chemických činitelů. Velmi významným faktorem je přítomnost iontů kovů. Cílem naší práce bylo určit vztah zinku a sarkosin oxidasy.



Obr. 1. Závislost změny DPV signálu iontů zinku na koncentraci ve vzorku moči

Hladiny zinečnatých iontů byly sledovány pomocí elektrochemické analýzy (DPV tA 10 s při -1,2 V; sken 50 mV, acetátový pufr pH 5,0). Získané závislosti proudové odezvy na koncentraci aplikovaných zinečnatých iontů (0 – 10 μM) byly ve vodě:  $y = 0,2358 + 1,3850x$ ,  $r = 0,996$ , RSD = 4,7 %, v umělé moči I (0,1 g kreatininu, bez bílkoviny):  $y = 0,1240 + 1,1824x$ ,  $r = 0,999$ , RSD = 5,0 %, v umělé moči II (0,1 g kreatininu, 2,5 mg bílkoviny):  $y = 0,1372 + 1,8905x$ ,  $r = 0,997$ , RSD = 6,8% a umělé moči III (0,1 g kreatininu, 5 mg bílkoviny):  $y = -0,1850 + 2,2487x$ ,  $r = 0,992$ , RSD = 13,04 %, v reálné moči:  $y = 0,0671 + 1,7090x$ ,  $r = 0,998$ , RSD = 6,2 %. Následně se podařilo elektrochemicky prokázat výrazný vliv iontů zinku (1,5 mM) na aktivitu SOX (40 μg/ml), který působí jako její inhibitor (pokles aktivity až o 50–70 %).

Tato práce vznikla za podpory grantu SARKOTEST 165/2016.

## LITERATURA

1. Ulmert H., Cronin A. M., Bjork T., et al.: BMC Medicine 6, 1 (2008).

**3P-19****ELEKTROCHEMICKÁ DETEKCE CHOLESTEROLU A JEHO PREKURSORU V PRŮTOKOVÉ INJEKČNÍ ANALÝZE****LENKA BENEŠOVÁ, JAN KLOUDA, ADÉLA ZÁRYBNICKÁ, POLINA YERSHOVA, KAROLINA SCHWARZOVÁ**

Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř Elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 43 Praha 2, Česká republika  
 kpeckova@natur.cuni.cz

Cholesterol (Ch) je stavebním materiálem všech buněčných membrán a prekurzorem steroidních hormonů a žlučových kyselin. V živočišném organismu vzniká mevalonátovou dráhou<sup>1</sup>, kde posledním krokem biosyntézy v cytoplasmě buněk je přeměna prekurzoru 7-dehydrocholesterolu (7DCh) na cholesterol. Jakákoliv změna v metabolismu sterolů se projevuje snížením či zvýšením jejich koncentrace v krvi. Např. porucha metabolismu cholesterolu vede k nárůstu koncentrace jeho prekurzoru 7-DCh v krvi. To má za následek vznik Smith-Lemli-Opitzova syndromu, způsobujícího deformace končetin a rozštěp patra během těhotenství<sup>2</sup>. Hromadění Ch v krvi vede ke vzniku kardiovaskulárních onemocnění, aterosklerózy aj. Mezi běžně používané metody pro stanovení Ch v matricích patří HPLC s tandemovou MS detekcí<sup>3</sup> či enzymatické metody, elektrochemické metody jsou používány okrajově (viz review<sup>4</sup>).

V této práci bylo využito průtokové injekční analýzy s ampérometrickou detekcí (FIA-ED) na borem dopované diamantové elektrodě pro detekci Ch a 7-DCh. Bylo pracováno v prostředí 0,1 mol l<sup>-1</sup> kyseliny chloristé v acetonitrilu s 5% obsahem vody v roztoku, kdy dochází k dehydrataci sterolů za vzniku dvojných vazeb (Liebermann-Burchardova reakce<sup>4</sup>) a tím k jejich aktivaci umožňující elektrochemickou oxidaci, jak bylo prokázáno u primárních žlučových kyselin<sup>5</sup>. Byly provedeny optimalizace složení nosného elektrolytu a detekčního potenciálu  $E_{det}$  pro roztoky obsahující samotný Ch, 7-DCh a jejich ekvimolární směs. Limity detekce samotných sterolů či jejich směsi byly v řádu koncentrací 1·10<sup>-7</sup> mol l<sup>-1</sup>. Dále byla vyvinuta metoda pro stanovení koncentrace Ch a 7-DCh v modelových směsích použitím kombinace rozdílných detekčních potenciálů.

*Tento výzkum byl proveden v rámci specifického vysokoškolského výzkumu (SVV 260440). Autoři děkují za finanční podporu Grantové agentuře České republiky (project 18-01710S) a Grantové agentuře Univerzity Karlovy (projekt GAUK 1440217).*

**LITERATURA**

1. Van Veldhoven P. P.: J. Lipid Res. 51, 2863 (2010).
2. Tonks D. B.: Clin. Biochem. 39, 446 (2006).
3. Dinh T. T. N., Thompson L. D., Galyean M. L., Brooks J. C., Patterson K. Y., Boylan L. M.: Compr. Rev. Food. Sci. Food Saf. 10, 269 (2011).
4. Klouda J., Berek J., Nesmerak K., Schwarzova-Peckova

K.: Crit. Rev. Anal. Chem. 47, 384 (2017).

5. Xiong Q. B., Wilson W. K., Pang J. H.: Lipids 42, 87 (2007).
6. Klouda J., Berek J., Kocovsky P., Herl T., Matysik F. M., Nesmerak K., Schwarzova-Peckova K.: Electrochem. Commun. 86, 99 (2018).

#### 4L-01 UNDERSTANDING ELIMINATION VOLTAMMETRY

LIBUŠE TRNKOVÁ

Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5, 625 00 Brno, Czech Republic  
libuse@chemi.muni.cz

The practical applicability of voltammetric measurements in electrode kinetics and electroanalysis is widely recognized; however, the investigated object requires additional augmenting methods to reveal processes hidden below the voltammetric curves. One of such advanced approaches consists in Elimination voltammetry with linear scan (EVLS), a technique capable of eliminating selected current components while preserving others. For this purpose, the differences in the dependence of individual voltammetric current components (diffusion, charging, kinetics) on the scan rate are utilized.

The lecture is conceived as an attempt to deepen the understanding of EVLS, starting from the original idea<sup>1</sup> that led to elimination functions and ending with the use and general significance of EVLS in individual electrode systems<sup>2,3</sup>. The actual calculation of elimination functions resulting in a linear combination of total voltammetric currents measured at different scan rates is presented<sup>4,5</sup>. The advantages and disadvantages characterizing EVLS are outlined in relation to irreversible processes where an electroactive species rises to the electrode surface via diffusion (Fig. 1A) or where the species is totally adsorbed on the surface (Fig. 1B)<sup>3</sup>.

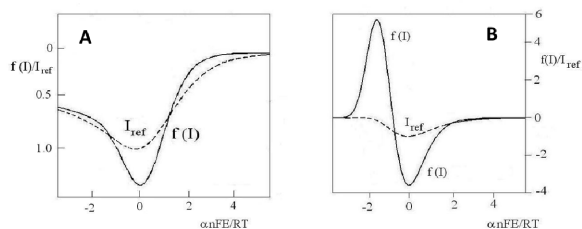


Fig. 1. The theoretical LSV,  $I_{ref}$ , and EVLS  $f(I)$ , curves (the elimination of the charging and kinetic currents and the conservation of the diffusion current) for two cases: A – non-adsorbed species; B – totally adsorbed species

The EVLS signal in the peak – counterpeak form (Fig. 1B) was experimentally confirmed.

Importantly, elimination voltammetry with linear scan appears to be a promising tool for not only electroanalysis but also physical electrochemistry.

#### REFERENCES

1. Dracka O.: J. Electroanal. Chem. 402, 19 (1996).
2. Trnkova L.: Chem. Listy 95, 518 (2001).
3. Trnkova L.: J. Electroanal. Chem. 582, 258 (2005).
4. Serrano N., Klossova K., Trnkova L.: Electroanalysis 22, 2071 (2010).
5. Hrbac J., Halouzka V., Trnkova L.: Sensors 14, 13943 (2014).

#### 4L-02 THE DETERMINATION OF FORMATION CONSTANTS INCLUSION COMPLEXES OF DERIVATIVES OF CINNAMON ACID WITH $\alpha$ -CYCLODEXTRIN BY CONDUCTOMETRIC METHODS IN A WIDE RANGE OF TEMPERATURES

ZDZISŁAW KINART

Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Lodz, 90 – 236 Lodz, Pomorska 163/165, Poland  
zdzislaw.kinart@chemia.uni.lodz.pl

Cyclodextrins are an interesting group of substances that form stable “host-guest” inclusion complexes with molecules and ions, especially those that have hydrophobic fragments in their structure. This property of cyclodextrins, as well as their non-toxicity and high thermal stability, make them the subject of intensive research due to the applicability of inclusion complexes in chemistry, pharmacy, medicine, cosmetology and agriculture. The presented in this communication study of these complexes focus mainly on the description of the thermodynamics of their formation using mainly conductometric methods for the research. A review of the literature data indicates that the measurement techniques in the field of conductometry used in these studies (by many authors) are insufficiently accurate and the interpretation of the obtained results is based on unconvincing methods of analysis of experimental data. The aim of our research was to show a full thermodynamic description of the formation of inclusion complexes of selected anions of cinnamon, coffee, feluric and *p*-coumaric acids (containing hydrophobic fragments) with  $\alpha$ -cyclodextrin. On the basis of conductometric measurements, the values of the limiting molar conductance of the investigated inclusion complexes and the values of formation constants ( $K_f$ ) of these complexes have been determined. The conducted research also required the development of new equations allowing for a detailed analysis of the obtained conductometric results.

#### 4L-03 IMPEDIMETRICKÝ BIOSENZOR PRE DETEKCIU VÍRUSU CHRÍPKY

EVA MELNÍKOVÁ<sup>a</sup>, KORNÉLIA TOMČÍKOVÁ<sup>a</sup>,  
FILIP KVĚTOŇ<sup>b</sup>, JÁN TKÁČ<sup>b</sup>, MIROSLAV GÁL<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Oddelenie anorganickej technológie, FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, <sup>b</sup> Oddelenie glykobiokémie, Chemický ústav SAV, Centrum glykomiky, Dúbravská cesta 9, Bratislava, Slovensko  
miroslav.gal@stuba.sk

Hlavnými pôvodcami infekčných respiračných ochorení sú predovšetkým vírusy. V klinickej liečbe je potrebné správne a rýchle určenie diagnózy, kde jednou z možností je využitie impedimetrického biosenzora<sup>1</sup>. Cieľom práce bolo navrhnutie ultraselektívneho biosenzora na báze protilátky MAb 107/L<sub>2</sub> na detekciu chrípkového vírusu H3N2

a pomocou elektrochemických metód charakterizovať jeho vlastnosti<sup>2</sup>.

Na modelovanie a charakterizáciu impedimetrického biosenzora sa využila elektrochemická impedančná spektroskopia (EIS) a sieťotlačové uhlíkové elektródy. Najvhodnejšia koncentrácia protilátky na detekciu analytu sa optimalizáciou ukázala 1 nM<sup>1,2</sup>. Stanovili sme čas potrebný na väzbu protilátka-antigén, kedy dochádza k takmer úplnému zaplneniu všetkých väzbových miest – 30 minút. Po tejto dobe je už počet voľných miest na väzbu protilátka-antigén malý, a preto nárast odporu  $R_{ct}$  s časom už nie je výrazný. V ďalšom kroku s zmeraním EIS po každom intervale nanosenia a naviazania analytu získali odpory  $R_{ct}$  odpovedajúce nárastu hrúbky vrstvy na povrchu WE vplyvom zaplňania väzbových miest. S nárastom  $R_{ct}$  sme stanovili limit detekcie vzhľadom na nukleoproteíny vírusu a citlivosť biosenzora. Na základe predpokladov, že jeden virión obsahuje približne 533 nukleoproteínov viažucich sa špecificky s protilátkou sme vypočítali krajinu medzi stanovenia vírusových nukleoproteínov 9 nukleoproteínov v 1  $\mu$ l roztoku. Výsledky v porovnaní s ELISA testom sú lepšie a sú porovnateľné s literatúrou. AFM analýza spolu s profilmi drsnosti potvrdila interakciu antigén-protilátka<sup>1,2</sup>.

*Táto práca vznikla s podporou projektu ERC Starting Grant, FP7-311532 a Vedeckej grantovej agentúry Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu Slovenskej republiky a Slovenskej akadémie vied VEGA 1/0543/15. Autori ďakujú skupine z Oddelenia Ortomyxovírusov, BMC Virologického ústavu SAV, ktorí poskytli vzorky purifikovaného vírusu subtypu H3N2 a protilátky MAb 107/L<sub>2</sub>.*

#### LITERATURA

1. Tomčíková K.: *Detekcia vírusu chrípky pomocou impedimetrického biosenzora, Diplomová práca*, FCHPT STU v Bratislave 2017.
2. Tomčíková K., Květoň F., Híveš J., Tkáč J., Gál M.: *Impedimetric Biosensor for Influenza Detection*. XXXVII. Moderní elektrochemické metody, Jetřichovice, 15. 5. – 19. 5. 2017, Sborník přednášek (BEST Servis Ústí nad Labem, ed.), str. 230.

#### 4L-04

##### KATÓDOVÉ MATERIÁLY NA BÁZE SÍRY S VYUŽITÍM PRE LI-S BATÉRIE

**KATARÍNA GAVALIEROVÁ<sup>a</sup>, ANDREA STRAKOVÁ FEDORKOVÁ<sup>a</sup>, PEDRO GÓMEZ-RÓMERO<sup>b</sup>, DANIEL RUEDA<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Katedra fyzikálnej chémie, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesova 11, 04001 Košice, Slovensko, <sup>b</sup> Katalánsky inštitút pre nanovedu a nanotechnológiu ICN2, UAB Campus, Bellaterra (Barcelona), 08193 Španielsko katarina.gavalierova@student.upjs.sk

Rast populácie a technologický progres vo vývoji v oblasti elektronických zariadení či elektromobilov vedie v súčasnosti k veľkému dopytu po zariadeniach na uskladnenie energie. Litium-sírové batérie (Li-S) patria

k novej generácii takýchto zariadení a predstavujú veľmi atraktívneho adepta hlavne kvôli vysokej teoretickej kapacite síry (1670 mAhg<sup>-1</sup>), jej ľahkej dostupnosti a neškodnosti voči životnému prostrediu. Radíme ich ku konverznému typu batérií, t.j. počas elektrochemickej reakcie dochádza k reakcii síry s lítiom a vzniku nových chemických zlúčenín<sup>1,2</sup>. Pričom v klasických Li-iónových batériách dochádza len k interkalácii resp. inzercii Li<sup>+</sup> iónov do kryštalickej štruktúry katódy a anódy bez chemickej reakcie.

V práci sa venujeme syntéze kompozitného materiálu na báze síry s využitím v Li-S batériách ako katódového materiálu. Síra však nie je vodivý materiál a má tendenciu zväčšovať svoj objem počas cyklovania batérie, čo môže viesť k mechanickému poškodeniu batérie. Z týchto dôvodov je nutné ku síre pridávať vodivé materiály, ako napríklad mnohostenné uhlíkové nanotrubičky (MWCNTs), uhlíkové mikrovlákna alebo iné aditíva na zvýšenie vodivosti<sup>3</sup>. Okrem toho môžu nanotrubičky akumulovať síru vo vnútri svojej štruktúry a tým kontrolovať rast objemu, čo je aj cieľom našej práce.

Cyklická voltampérometria, galvanostatické cyklovanie a elektrónová impedančná spektroskopia boli použité na elektrochemickú charakterizáciu kompozitného materiálu. Štruktúra a zloženie vzoriek boli skúmané elektrónovou mikroskopiou (SEM, TEM).

*Táto práca vznikla za podpory grantu NATO Science for Peace and Security project No. 985148 a projektu VEGA 1/0074/17.*

#### LITERATÚRA

1. Yin Y., Xin S., Guo Y., Wan L.: *Angew. Chem.-Int. Edit.* 52, 13186 (2013).
2. Strakova Fedorkova A., Kazda T., Gavalierova K., Gomez-Romero P., Shembel E.: *Int. J. Electrochem. Sci.* 13, 551 (2018).
3. Amatucci G., Pereira N.: *J. Fluor. Chem.* 128, 243 (2007).

#### 4L-05

##### METHODOLOGY FOR DETERMINING SURFACE PROPERTIES OF Fe-C-Cr ALLOYS

**VLAŠTIMIL NOVÁK, LENKA ŘEHÁČKOVÁ, BEDŘICH SMĚTANA, LUBOMÍRA DROZDOVÁ**

Faculty of metallurgy and materials engineering, VŠB – Technical University of Ostrava, 17. listopadu 15, Ostrava-Poruba, 708 33, Czech Republic vlastimil.novak@vsb.cz

The paper focuses on experimental determination and subsequent evaluation of surface properties of selected Fe-alloys. The surface tension of the alloys and their wetting angles on alumina substrate were determined by sessile drop method in the temperature range from the melting point to the temperature of 1600 °C. Experimental study of the surface properties of liquid multicomponent alloys by one of the contacting methods is challenging. The cause is the high reactivity of metallic melts with the solid substrate at high temperatures, chemical heterogeneity, roughness, a porosity of

substrate surface and, last but not least, a high sensitivity of the surface tension to any trace amount impurities. However, the characterisation of the surface of the solid materials by determining the contact angle of a sessile drop on the solid substrate (high-temperature wettability) helps to understand physicochemical processes at the interfacial area. Three Fe-C-Cr model alloys with a carbon content 0.34 wt. %, chromium content 0.92–4.76 wt. %, and a trace amount of sulfur 0.0062–0.0675 wt. % was heated while in contact with highly pure  $\text{Al}_2\text{O}_3$  at a rate of  $5\text{ }^\circ\text{C min}^{-1}$  in resistance observation furnace Clasic filled with a protective atmosphere of argon (> 99.9999 %). The temperature was measured by the thermocouple Pt – 13 % Rh/Pt. The shape of the sessile drop was monitored by the camera CANON EOS 550D when the sample was melted. It was found that the surface tension of all analysed systems increases with increasing temperature thus  $d\sigma/dT$  was positive. A positive temperature coefficient of surface tension can be explained according to <sup>1</sup> where, based on the Gibbs adsorption theory, the free surface of a metal drop is covered by a monolayer of surface active elements (sulphur, oxygen) with a lower surface tension than the volume phase. With increasing temperature, the surface-active elements are desorbed into the bulk of the liquid metal causing a slight increase of surface tension. Furthermore, it was also shown that the surface tension depends positively on the chromium content. The wetting angles also increased with increasing chrome content and temperature.

*This paper was created on the FMME in the Project No. LO1203 "Regional Materials Science and Technology Centre-Feasibility Program" funded by Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic, GAČR project No. 17-18668S, student project SP2018/93.*

#### REFERENCE

1. Dubberstein T., Heller H., Klostermann J., Schwarze R., Brillo J.: *J. Mater. Sci.* 50, 7227 (2015).

#### 4L-06

### NANOBUBLINY – EXISTUJÍ NEJEN NA HYDROFOBNÍM POVRCHU, ALE I V OBJEMU KAPALINY?

#### JIRÍ KLÍMA

*Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Česká republika  
jiri.klima@jh-inst.cas.cz*

Nanobublinami (NB) rozumíme plynem naplněné bubliny v kapalině o rozměru v řádu maximálně desítek až stovek nanometrů. NB mohou existovat v kontaktu s pevným povrchem nebo v objemu kapaliny. Předmětem zvýšené pozornosti jsou NB zhruba posledních 10–15 let zejména pro svou překvapivou stabilitu. Zpočátku byla jejich existence většinou odmitána. Pak ale byla jednoznačně prokázána existence NB na povrchu pevné fáze metodou mikroskopie AFM. Zatímco o povrchových NB dnes existuje rozsáhlá literatura (viz např.<sup>1–3</sup>), existence NB v objemu kapaliny je

stále nedostatečně prokázána a mnohými autory zpochybňována.

V tomto příspěvku ukážeme metodu přípravy NB a jejich detekci, která podle našeho názoru dokazuje existenci NB v objemu vody („bulk nanobubbles“). Některé další vlastnosti NB budou diskutovány.

*Tato práce vznikla díky grantu GAČR 18-12150S a za institucionální podpory RVO: 61388955.*

#### LITERATURA

1. Seddon J. R. T., Lohse D., Ducker W. A., Craig V. S. J.: *Chem. Phys. Chem.* 13, 2179 (2012).
2. Lohse D., Zhang X.: *Rev. Mod. Phys.* 87, 981 (2015).
3. Alheshibri M., Qian J., Jehannin M., Craig V. S. J.: *Langmuir* 43, 32 (2016).

#### 4L-07

### CHEMICKÁ KOPRECIPITACE BIMETALICKÝCH ČÁSTIC STŘÍBRNÉHO AMALGÁMU A JEHO SPEKTRO-ELEKTROCHEMICKÉ VLASTNOSTI

#### ALEŠ DAŇHEL<sup>a</sup>, FILIP LIGMAJER<sup>a,b,c</sup>

*<sup>a</sup> Biofyzikální ústav, Akademie věd České republiky, v.v.i., Královopolská 135, 612 65 Brno, <sup>b</sup> Central European Institute of Technology, Vysoké učení technické v Brně, Technická 10, 616 00 Brno, <sup>c</sup> Ústav fyzikálního inženýrství, Vysoké učení technické v Brně, Technická 2, 616 69 Brno, Česká republika danhel@ibp.cz*

Stříbrný amalgám se zdá být velmi perspektivním elektroodovým materiálem jak pro samotnou elektroanalýzu velkého spektra látek, tak i pro vývoj různých detekčních systémů<sup>1</sup>. Nejčastěji se připravuje misením kovové rtuti a stříbra v požadovaném poměru anebo elektrochemickým vyloučením rtuťového filmu na zvolených kovových površích<sup>2</sup>. Krystaly stříbrného amalgámu je možné získat přidáním kovové rtuti do roztoku stříbrných iontů<sup>3</sup> a nebo pomocí elektrochemické co-redukce ze směsi rozpustných kationtů obou kovů na vodivých materiálech (např. ITO)<sup>4</sup>.

Pro některé možnosti spektro-elektrochemických aplikací je však potřeba připravit částice stříbrného amalgámu s průměrem velikosti částic do 100 nm a hustotě pokrytí >80%. Možnou cestou se zdá být chemická koprecipitace<sup>5</sup>.

Tato práce je tedy zaměřena na přípravu bimetalických nanočástic stříbrného amalgámu současnou redukcí stříbrných a rtuťnatých iontů z roztoku za použití vhodného redukčního činidla a stabilizátoru s cílem dosáhnout jejich velikosti pod 100 nm, což by umožnilo efektivní vybuzení povrchových plasmonů a poskytlo nové možnosti jejich spektro-elektroanalytického využití.

*Tento výzkum vznikl za finanční podpory Grantové agentury České republiky (projekt 17-23634Y) a jeho část byla rovněž vypracována za podpory Výzkumné infrastruktury CEITEC Nano (ID LM2015041, MŠMT ČR, 2016–2019), CEITEC Vysoké učení technické v Brně.*



## LITERATURA

1. Danhel A., Barek J.: *Curr. Org. Chem.* 15, 2957 (2011).
2. Danhel A., Yosypchuk B., Barek J., Fojta M.: *Chem. Listy* 110, 215 (2016).
3. Danhel A., Mansfeldova V., Janda P., Vyskocil V., Barek J.: *Analyst* 136, 3656 (2011).
4. Danhel A., Ligmajer F., Sikola T., Walcarius A., Fojta M.: *J. Electroanal. Chem.* (2017). Published online: doi:10.1016/j.jelechem.2017.12.008.
5. Katsikas L., Gutiérrez M., Henglein A.: *J. Phys. Chem.* 100, 11203 (1996).

## 4L-08

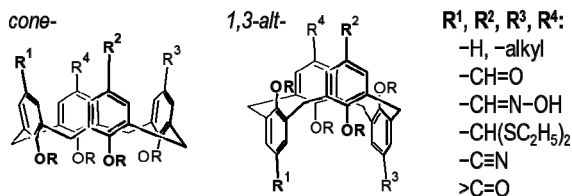
**STEREOELEKTROCHEMIE KALIXARENŮ  
SUBSTITUOVANÝCH KARBONYLOVÝMI  
A PŘÍBUZNÝMI SKUPINAMI**

**ALAN LIŠKA, JIŘÍ LUDVÍK**

Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.,  
Dolejškova 3/2155, 182 23 Praha 8, Česká republika  
alan.liska@jh-inst.cas.cz

Kalixareny jsou populární zejména v supramolekulární chemii<sup>1</sup>, nicméně samotný skelet není elektroaktivní. Pro možnost jejich studia elektrochemickými metodami je nutné je substituovat nejméně jedním redoxaktivním substituentem (tzv. redox sonda). V nedávné době bylo publikováno několik prací<sup>2–7</sup> věnujících se zejména polynitro- a nitroso-kalixarenům, jejich vzájemným elektronovým interakcím a vlivu počtu / polohy redox aktivních skupin, typu můstkových skupin a konformace na jejich polarografickou a voltametrickou odezvu. Kromě toho bylo zjištěno, že se uplatňují také dynamické efekty v roztocích a že meziproducty redukce polynitroderivátů v aprotickém prostředí jsou stabilní polyradikálové polyanionty schopné koordinovat kationty alkalických kovů.

V tomto příspěvku je prezentováno několik dílčích navazujících studií zaměřených na elektrochemickou redukci karbonylových derivátů a příbuzných sloučenin (obr. 1) z hlediska vzájemného ovlivňování redox center a příslušných mechanismů. Naměřené výsledky budou zasazeny do kontextu struktury jednotlivých kalixarenů ("stereochemie").



Obr. 1.

Tato práce vznikla díky grantu GAČR 17-18108S a za institucionální podpory RVO 61388955. Autoři děkují P. Lhotákovi a M. Řezankové (VŠCHT Praha) za poskytnutí látek.

## LITERATURA

1. Flídrová K., Liška A., Ludvík J., Eigner V., Lhoták P.: *Tetrahedron Let.* 56, 1535 (2015).
2. Ludvík J., Liška A., Lhoták P.: *ECS Transactions* 66, 23 (2015).
3. Liška A., Flídrová K., Lhoták P., Ludvík J.: *Monatshefte für Chemie-Chemical Monthly* 146, 857 (2015).
4. Liška A., Lhoták P., Ludvík J.: *Electroanalysis* 28, 2861 (2016).
5. Liška A., Ludvík J.: *Chem. Listy* 104, 23 (2010).
6. Liška A., Vojtíšek P., Fry A. J., Ludvík J.: *J. Org. Chem.* 78, 10651 (2013).
7. Liška A., Rosenkranz M., Klíma J., Dunsch L., Lhoták P., Ludvík J.: *Electrochim. Acta* 140, 572 (2014).

## 4L-09

**SPEKTROELEKTROCHEMIA BIOLOGICKY  
AKTIVNÝCH KOMPLEXOV OSMIA A RUTÉNIA**

**PETER RAPTA**

Ústav fyzikálnej chémie a chemickej fyziky, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika  
peter.rapta@stuba.sk

V priebehu ostatných desaťročí sa zaznamenal stúpajúci záujem na poli výskumu protirakovinových liečiv na báze ruténia a osmia. Syntéza alternatívnych analógov liečiva KP1019 obsahujúceho ruténium(III) pomocou komplexov osmia(III), ktoré vykazovali antiproliferatívnu aktivitu, sa len nedávno podarila využitím elektrochemickej a chemickej redukcie komplexov osmia(IV)<sup>1</sup>. Stabilita uvedených koordinačných zlúčenín v rôznych oxidačných a spinových stavoch pri fyziologických podmienkach je mimoriadne dôležitým parametrom pri vývoji nových liečiv obsahujúcich ióny prechodných kovov v danom komplexe.

Príspevok sa venuje oblasti biologicky aktívnych novo pripravených komplexov osmia a ruténia zo série zlúčenín so všeobecným vzorcom  $[M^{IV}Cl_4(Hazol)_2]$ , kde Hazol je indazol, pyrazol, benzimidazol a imidazol a M je osmium alebo ruténium<sup>1</sup>. Uskutočnili sa elektrochemické a in situ UV-Vis-NIR experimenty pri laboratórnej teplote, EPR spektroelektrochemické štúdie pri nízkych teplotách, ako aj teoretické štúdie oxidovaných a redukovaných foriem potenciálnych protirakovinových liečiv na báze osmia(IV) a ruténia(IV) typu (kation)[Os<sup>IV</sup>Cl<sub>4</sub>(Hazol)<sub>2</sub>], tak v *trans* ako aj v *cis* forme s cieľom vyjasniť redox správanie a nezvyčajné rozloženie spinovej hustoty v komplexoch v ich redukovanom stave obsahujúcom M(III) ako centrálny atóm. Úspešne sa podarilo elektrochemickou alebo chemickou redukciou pripraviť *cis*-konfigurované oxidačné formy osmium(III), ktoré sa vyzoľovali z roztoku ako ich soli s tetrabutylamóniovým kationom alebo s kationom sodíka. Analýza pomocou teórie ligandového poľa indikuje rôznu elektrónovú konfiguráciu pre *cis* izoméry v porovnaní s *trans* analógom kde elektrónová "diera" je primárne na d<sub>xz,yz</sub> orbitáloch v porovnaní s *trans* geometriou s typickou lokalizáciou na d<sub>xy</sub> orbitále. Možnosť prípravy oboch *cis*- a *trans*-isomérov osmia(IV) a osmia(III),



ktoré sú rozpustné vo vode umožnilo študovať *in vitro* ich protirakovinovú aktivitu.

*Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. APVV-15-0053 a grantovou agentúrou VEGA (projekt č. 1/0416/17).*

#### LITERATÚRA

1. Büchel G. E., Kossatz S., Sadique A., Rapta P., Zalibera M., Bučinský L., Komorovský S., Telser J., Eppinger J., Reiner T., Arion V. B.: Dalton Trans. 46, 11925 (2017).

#### 4L-10

### ELEKTROCHEMICKY „PŘEPÍNATELNÁ“ ELEKTROAKTIVNÍ CENTRA V PŘIROZENÝCH A CHEMICKY MODIFIKOVANÝCH NUKLEOVÝCH KYSELINÁCH

**MIROSLAV FOJTA, JAN ŠPAČEK, ALEŠ DAŇHEL,  
MARTINA HEJDUKOVÁ, PAVLÍNA HAVRANOVÁ,  
LUDEK HAVRAN**

*Biofyzikální ústav, v.v.i., Královopolská 135, 612 65 Brno,  
Česká republika  
fojta@ibp.cz*

Nukleové kyseliny jsou samy o sobě elektrochemicky aktivní díky tomu, že obsahují nukleobáze redukovatelné resp. oxidovatelné na vhodných elektrodách. Tradičně jsou pro účely elektrochemické redukce bází využívány rtuťové elektrody a pro jejich elektrochemickou oxidaci elektrody uhlíkové vzhledem k rozsahu příslušných potenciálových oken. Naše nedávné výsledky<sup>1</sup> nicméně ukázaly, že redukci nukleobází v DNA lze za vhodných podmínek pozorovat i na elektrodách z pyrolytického grafitu. Navíc lze díky tomu, že jak redukční, tak oxidační děje mohou probíhat na stejném povrchu, pozorovat i produkty redukce bází prostřednictvím jejich oxidace a naopak, což je výhodné i z analytického hlediska: je dosaženo lepšího rozlišení jednotlivých bází díky tomu, že signály primárních ireverzibilních redox přeměn lze „vypnout“ a objeví se nové specifické signály v jiné oblasti potenciálů.

Podobných principů lze využít rovněž ve spojení s modifikací DNA organickými elektroaktivními skupinami. Typickým příkladem jsou konjugáty nukleobází s antrachinonem nebo aromatickými nitroderiváty<sup>2</sup>. Nitroskupina je ireverzibilně redukována na derivát hydroxylaminu, který podléhá reverzibilní redox přeměně (hydroxylamin-nitroso skupina). Tím se „vypne“ signál odpovídající primárnímu redukčnímu ději, což umožní zviditelnit jiné elektrochemické děje v příslušné oblasti; původní nitroderivát je pak detekován prostředním zmíněného redox páru. „Vypnout“ tento redox pár pak lze redukcí hydroxylaminu na příslušný amin. V přednášce budou prezentovány a diskutovány další příklady „přepínání“ různých redox značek na bázi organických skupin, např. benzofurazanu<sup>3</sup>, methoxyfenolu<sup>4</sup>, fenothiazinu<sup>5</sup> a dalších.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR P206/12/G151.*

#### LITERATURA

1. Spacek J., Danhel A., Hason S., Fojta M.: Electrochem. Commun. 82, 34 (2017).
2. Balintova J., Pohl R., Horakova P., Vidlakova P., Havran L., Fojta M., Hocek M.: Chem.-Eur. J. 17, 14063 (2011).
3. Balintova J., Plucnara M., Vidlakova P., Pohl R., Havran L., Fojta M., Hocek M.: Chem.-Eur. J. 19, 12720 (2013).
4. Simonova A., Balintova J., Pohl R., Havran L., Fojta M., Hocek M.: Chempluschem 79, 1703 (2014).
5. Simonova A., Havran L., Pohl R., Fojta M., Hocek M.: Org. Biomol. Chem. 15, 6984 (2017).

#### 4L-11

### ELEKTROCHEMICKÉ STANOVENÍ AKTIVITY TRANSMEMBRÁNOVÉHO PROTEINU Na<sup>+</sup>/K<sup>+</sup>- ATPASY

**MARTINA ZATLOUKALOVÁ<sup>a</sup>, DAVID NOVÁK<sup>a</sup>, EWA  
NAZARUK<sup>b</sup>, RENATA BILEWICZ<sup>b</sup>, JAN VACEK<sup>a</sup>**

*<sup>a</sup> Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta,  
Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3, 775 15  
Olomouc, Česká republika, <sup>b</sup> Faculty of Chemistry, University  
of Warsaw, Pasteura 1, 02-093 Warsaw, Poland  
martina.zatloukalova@seznam.cz*

Na<sup>+</sup>/K<sup>+</sup>-ATPasa je transmembránový přenašeč iontů, který získává energii hydrolýzou ATP za uvolnění ADP a volného fosfátu<sup>1</sup>. Volný fosfát může reagovat s molybdenanem amonným a v kyselém prostředí tvořit fosfomolybdenanový komplex, který je elektrochemicky aktivní. Elektrochemické stanovení tvorby fosfomolybdenanového komplexu tak lze využít ke stanovení aktivity Na<sup>+</sup>/K<sup>+</sup>-ATPasy. Touto cestou lze studovat jak aktivitu solubilizovaného proteinu tak i proteinu rekonstituovaného nebo přímo imobilizovaného na povrch elektrody. Kromě ATPasové aktivity proteinu byl také sledován proud generovaný Na<sup>+</sup>/K<sup>+</sup>-ATPasou pomocí chronoamperometrické metody. Elektrogenní vlastnosti Na<sup>+</sup>/K<sup>+</sup>-ATPasy byly zkoumány v lipidových kubických fázích (LCP), což jsou lipidové matrice původně navržené pro stabilizaci a krystalizaci membránových proteinů. Pro analýzy byla použita uhlíková elektroda modifikovaná LCP se zabudovanou Na<sup>+</sup>/K<sup>+</sup>-ATPasou. Bylo prokázáno, že aktivita imobilizované Na<sup>+</sup>/K<sup>+</sup>-ATPasy závisí na přítomnosti resp. koncentraci ATP, sodných a draselných iontů<sup>2</sup>.

*Tato práce vznikla za podpory grantu Univerzity Palackého v Olomouci (IGA\_LF\_2018\_012) a za podpory operačního programu Podnikání a inovace pro konkurenceschopnost 2014–2020 (CZ.01.1.02/0.0/0.0/16\_084/0010374).*

#### LITERATURA

1. Apell H. J., Borlinghaus R., Läuger P.: Curr. Top. Membr. 34, 229 (1989).
2. Zatloukalova M., Nazaruk E., Novak D., Vacek J., Bilewicz R.: Biosens. Bioelectron. 100, 437 (2018).

## 4L-12

**STUDIUM FYTOCHELATINŮ  
A METALOTHIONEINŮ NA RTUŤOVÉ  
A AMALGÁMOVÉ ELEKTRODĚ, TVORBA JEJICH  
KOMPLEXŮ S TĚŽKÝMI KOVY****TOMÁŠ NAVRÁTIL, IVANA ŠESTÁKOVÁ, BOHDAN  
JOSYPČUK, JAN LANGMAIER**

*Ústav fyzikální chemie, J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.,  
Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Česká republika  
tomas.navratil@jh-inst.cas.cz*

Výskyt těžkých kovů (TK) v půdách představuje velké riziko pro životní prostředí. Jejich ionty jsou přenášeny přes buněčné membrány do buněk rostlin a živočichů, kde se začínají podílet na metabolických procesech. V případě rostlin jsou kovy v různých formách transportovány do kořenů a z nich za pomoci mnoha mechanismů do ostatních jejich částí. Některé mechanismy přenosu iontů kovů přes fosfolipidové membrány byly již detailně popsány (např. Na<sup>+</sup>/K<sup>+</sup> pumpa). Naproti tomu transportní mechanismy těžkých kovů jsou stále velmi intenzivně zkoumány<sup>1–4</sup>.

Buňky se přítomnosti TK brání různými způsoby, např. syntézou speciálních molekul, metalothioneinů (MT) a fytochelatínů (FT), podílejících se na jejich komplexaci a transportních procesech (např. do rostlinných vakuol či do jiných částí rostlin). MT jsou nízkomolekulární proteiny (6–7 kDa) s vysokým obsahem cysteinylových zbytků s vysokou schopností tvořit komplexy s ionty Cd<sup>2+</sup> a Zn<sup>2+</sup>. Obdobně, v důsledku přítomnosti iontů Cd, Cu, Hg a As se v rostlinách, řasách a houbách se syntetizují FT, které jsou též bohaté na cysteinylové zbytky<sup>5,6</sup>.

Přítomnost siry v molekulách MT a FT se jeví jako zásadní pro jejich elektrochemická chování. Pro jejich studium se osvědčily jak rtuťové elektrody, tak pevné amalgámové elektrody, především stříbrné či měděné, leštěné i rtuťovým meniskem modifikované, jako velmi vhodné<sup>1,6</sup>. Pro současnou studii byla využita chronopotenciometrie (diferenciální potenciometrická rozpouštěcí analýza) a voltametrie.

*T.N. a B.J. děkují za podporu projektu GA ČR 17-03868S, I.Š. a J.L. děkují projektu GA ČR 17-05387S.*

## LITERATURA

1. Sestakova I., Navratil T., Josypcuk B.: *Electroanalysis* 28, 2754 (2016).
2. Jaklova Dyrtrtova J., Sestakova I., Jakl M., Navratil T.: *Electroanalysis* 21, 573 (2009).
3. Navratil T., Sestakova I., Stulik K., Marecek V.: *Electroanalysis* 22, 2043 (2010).
4. Parisova M., Navratil T., Sestakova I., Jaklova Dyrtrtova J., Marecek V.: *Int. J. Electrochem. Sci.* 8, 27 (2013).
5. Sestakova I., Navratil T.: *Bioinorg. Chem. Appl.* 3, 43 (2005).
6. Sestakova I., Skalova S., Navratil T.: *J. Electroanal. Chem.* doi:10.1016/j.jelechem.2017.11.052, In press (2017).

**4M-01****ANODICALLY ACTIVATED BORON-DOPED DIAMOND AND NON-MODIFIED AND POLYMER-MODIFIED GLASSY CARBON ELECTRODES FOR ELECTROANALYSIS OF TUMOUR BIOMARKERS****SIMONA BALUCHOVÁ<sup>a</sup>, JIŘÍ BAREK<sup>a</sup>, LUCIANA I. N. TOMÉ<sup>b</sup>, CHRISTOPHER M. A. BRETT<sup>b</sup>, KAROLINA SCHWARZOVÁ-PECKOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Charles University, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Albertov 6, 128 43 Prague 2, Czech Republic, <sup>b</sup> University of Coimbra, Faculty of Sciences and Technology, Department of Chemistry, Rua Larga, 3004-535 Coimbra, Portugal  
simona.baluchova@natur.cuni.cz

Vanillylmandelic acid (VMA) and homovanillic acid (HVA), the major end catecholamine metabolites, serve as diagnostic markers for diverse metabolic<sup>1</sup> and neurological disorders, including tumours of the adrenal medulla<sup>2,3</sup>.

In this contribution, the voltammetric study of the electrochemical behaviour of VMA and HVA on anodically activated boron doped diamond (BDD) electrode, non-modified glassy carbon electrode (GCE), and GCE modified by polymers Nafion (Nafion/GCE) and poly(neutral red) (PNR/GCE) is introduced. Used electrode material as well as pH values of the aqueous media strongly influence the recorded voltammetric responses of VMA and HVA, an acidic environment being the most convenient one. Therefore, 0.1 mol L<sup>-1</sup> phosphate buffer pH 3.0 was chosen as an optimal supporting electrolyte in which concentration dependences of both biomarkers were measured. However, linearity over two orders of magnitude was achieved only at BDD electrode. Obtained limits of quantifications on all tested carbon-based electrodes are sufficiently low for the determination of studied biomarkers in urine. Moreover, the possibility of simultaneous voltammetric determination of VMA and HVA was verified.

*The research was supported by the Czech Science Foundation (project P206/15/02815S) and from the Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT), Portugal projects PTDC/QEQ-QAN/2201/2014, in the framework of Project 3599-PPCDT, and UID/EMS/00285/2013 (both co-financed by the European Community Fund FEDER). S. B. acknowledges financial support from Specific University Research (SVV 260440) and the Grant Agency of Charles University (project 1390217).*

## REFERENCES

1. Matsuo M., Tasaki R., Kodama H., Hamasaki Y.: J. Inherit. Metab. Dis. 28, 89 (2005).
2. Maris J. M., Hogarty M. D., Bagatell R., Cohn S. L.: Lancet 369, 2106 (2007).
3. Lenders J. W. M., Pacak K., Walther M. M., Linehan W. M., Mannelli M., Friberg P., Keiser H. R., Goldstein D. S., Eisenhofer G.: J. Am. Med. Assoc. 287, 1427 (2002).

**4M-02****ELEKTROCHEMICKÁ ELISA METÓDA NA DETEKCIU NÁDOROVÉHO SUPRESOROVÉHO PROTEÍNU p53****DANIEL DOBROVODSKÝ, PETR ORSÁG, ALEŠ DAŇHEL**

Oddělení biofyzikální chemie a molekulární onkologie, Biofyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Královopolská 135, 612 65 Brno, Česká republika  
ddobrovodsky@mail.muni.com

Nádorový supresor p53 je klíčovým proteínem v prevencii rakoviny. Jeho mutované formy, nachádzajúce sa takmer v 50 % všetkých ľudských nádorových typov môžu byť použité ako diagnostické markery na ich zhubnosť. Preto je vývoju rýchlejšej, jednoduchšej a citlivejšej metódy na jeho detekciu venovaná značná pozornosť.

Na tieto účely bola vyvinutá elektrochemická ELISA metóda, využívajúca mikroskopické magnetické častice ako povrch na imobilizáciu reagentov a voltametrickú detekciu na tlačených uhlíkových elektródach (SPCE). SPCE, prípravné v našom laboratóriu, boli elektrochemicky charakterizované a ich príprava optimalizovaná pomocou cyklickej voltametrie a reverzibilného redoxného systému K<sub>4</sub>[Fe(CN)<sub>6</sub>]/K<sub>3</sub>[Fe(CN)<sub>6</sub>].

Optimalizované boli tiež parametre sendvičovej ELISA metódy (koncentrácie činidiel/protilátok, pufov a inkubačnej doby), ktorá využívala primárnu protilátku DO-1 zachytenú na magnetických guľičkách, študovaný proteín p53, biotinylovanú detekčnú protilátku Bp53-10 a streptavidínom značený enzým alkalická fosfatáza, premieňajúci naftyl fosfát na elektrochemicky aktívny 1-naftol. Takto získaný 1-naftol bol stanovený s limitom detekcie 0,7 ng ml<sup>-1</sup> pomocou voltametrie s lineárnym skenom na dispozabilných SPCE. Tento systém je porovnateľný s bežne používanou ELISA metódou využívajúcou spektrofotometrickú detekciu 4-nitrofenolu s limitom detekcie 0,3 ng ml<sup>-1</sup>. Použitím magnetických guľičiek s naviazanou primárnou protilátkou bola dosiahnutá vyššia účinnosť reakcie a tak zredukovaný čas potrebný na tento postup z 360 min, potrebných pre bežnú ELISA metódu, na 60 min.

Vyvinutá metóda bola úspešne použitá pre detekciu p53 v lyzátoch rôznych bunkových línií v prítomnosti vybraných koncentrácií modelových cytostatik (doxorubicín, fluorouracil, cis-platina) a tetracyklínu. Táto metóda dostatočne koreluje s bežne používanými komerčnými ELISA a western blot metódami, čo potvrdzuje jej spoľahlivosť ako alternatívnej a perspektívnej techniky na detekciu p53.

*Táto práca bola podporená Grantovou agentúrou Českej republiky (Projekt P206/12/G151).*

**4M-03****VOLTAMETRICKÁ DETEKCE PROTEIN-DNA INTERAKCÍ ZALOŽENÁ NA DUÁLNÍM REDOXNÍM ZNAČENÍ DNA****MONIKA HERMANOVÁ, PETR ORSÁG, MIROSLAV FOJTA***Biofyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Královopolská 135, 612 65 Brno, Česká republika  
hermanova@ibp.cz*

Proteiny interagující s DNA jsou klíčové pro mnoho dějů probíhajících v buňce a metody pro studium těchto interakcí jsou proto hojně využívány. Kromě tradičních metod byly v poslední době představeny i metody založené na elektrochemické detekci (shrnuto v<sup>1</sup>). Elektrochemická analýza DNA je možná díky signálům, které poskytují báze DNA<sup>2</sup>, nicméně při použití značení DNA dojde ke zvýšení citlivosti a selektivity detekce<sup>3</sup>. Zde představujeme nový přístup pro detekci interakcí proteinu p53 s DNA založený na enzymatické inkorporaci redoxních značek do DNA.

Tento přístup využívá dvojího značení DNA sond pomocí dvou různých elektroaktivních značek, benzofurazanu a nitrobenzenu, které poskytují katodické signály při odlišných potenciálech a umožňují tak detekci vazby proteinu na značené sondy v kompetičním upořádání. S použitím tohoto přístupu a imunoprecipitace na magnetických mikročásticích bylo možné rozlišit sekvenčně specifickou a nespecifickou vazbu proteinu p53 na DNA, protože protein p53 vykazoval silnou preferenci pro sondy obsahující specifickou vazebnou sekvenci pro protein p53 (p53CON), což je v souladu s již známými vazebnými preferencemi proteinu p53<sup>4,5</sup>. Navíc bylo možné modulovat vazbu p53 na jednotlivé sondy pomocí specifických monoklonálních protilátek. Tento přístup tak představuje univerzální nástroj pro studium protein-DNA interakcí, jelikož po výběru vhodných DNA sond a monoklonálních protilátek může být použit i pro studium DNA-vazebných vlastností jiných proteinů.

*Tato práce vznikla s podporou projektu č. P206/12/G151.*

**LITERATURA**

1. Bowater R. P., Cobb A. M., Pivonkova H., Havran L., Fojta M.: *Monatshefte für Chemie – Chem. Mon.* 146, 723 (2015).
2. Paleček E., Bartošík M.: *Chem. Rev.* 112, 3427, (2012).
3. Hocek M., Fojta M.: *Chem. Soc. Rev.* 40, 5802 (2011).
4. Brázdová M., Paleček J., Cherny D. I., Billová S., Fojta M., Pecinka P., Vojtesek B., Jovin T. M., Paleček E.: *Nucleic Acids Res.* 30, 4966 (2002).
5. Fojta M., Pivonkova H., Brázdová M., Nemcova K., Paleček J., Vojtesek B.: *Eur. J. Biochem.* 271, 3865 (2004).

**4M-04****VOLTAMETRICKÉ CHOVÁNÍ AZOXYSTROBINU A VÝVOJ METODY JEHO STANOVENÍ****MARIE HERYNKOVÁ, RENÁTA ŠELEŠOVSKÁ, PAVLÍNA MARTINKOVÁ***Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice, Česká republika  
herynkovamarie@seznam.cz*

Syntetický širokospektrální fungicid azoxystrobin (AS) patří do skupiny strobilurinů, které byly odvozeny od účinných látek produkovaných dřevokaznými houbami<sup>1</sup>. Svoji fungicidní aktivitou způsobuje inhibici mitochondriálního dýchání hub a plísní, čímž brání jejich růstu<sup>1,2</sup>. Přípravky s AS se dodávají ve formě granulí i suspenzního koncentrátu, a to s jednou účinnou látkou nebo ve směsi s dalšími fungicidy<sup>3</sup>. Aplikují se při ochraně zeleniny, obilí, řepky a různých okrasných rostlin<sup>2</sup>. Vedle pozitivních účinků bylo prokázáno, že AS je toxický pro vodní organismy a škodlivý pro člověka<sup>2,3</sup>. Proto je důležité mít k dispozici rychlé, citlivé a selektivní metody stanovení.

Díky elektrochemické aktivitě AS lze pro jeho stanovení využít voltametrii. Doposud byla použita pouze visící rtuťová kapková elektroda (HMDE) ve spojení se square-wave voltametrií<sup>4</sup>. V rámci této práce bylo studováno voltametrické chování AS s využitím různých elektrod, konkrétně pro sledování redukce AS byla vybrána rtuťovým meniskem modifikovaná stříbrná pevná amalgámová elektroda (m-AgSAE) jako nejčastější alternativa k HMDE a pro studium oxidace sloužila borem dopovaná diamantová elektroda (BDDE). Současně byla použita hmotnostní spektrometrie s cílem objasnit mechanismus sledovaných redoxních reakcí. Poté byly vyvinuty metody stanovení AS s využitím obou elektrod v kombinaci s diferenční pulzní voltametrií (DPV) a vypočteny statistické parametry jako limit detekce (*LOD*), mez stanovitelnosti (*LOQ*), využitelný koncentrační rozsah (*LDR*) či relativní směrodatná odchylka opakovaného stanovení (*RSD*). Po porovnání získaných výsledků byla jako vhodnější vybrána BDDE, která byla úspěšně aplikována pro stanovení AS v reálných vzorcích vod a ve fungicidním přípravku Ortiva.

*Tato práce vznikla za podpory Univerzity Pardubice (projekt č. SGSFChT\_2018\_003) a GAČR (projekt č. 17-03868S).*

**LITERATURA**

1. Knight S. C., Anthony V. M., Brady A. M., Greenland A. J., Heaney S. P., Murray D. C., Powell K. A., Schulz M. A., Spinks C. A., Worthington P. A., Youle D.: *Annu. Rev. Phytopathol.* 35, 349 (1997).
2. Han Y., Liu L., Wang J., Wang J., Zhang Ch., Zhu L.: *Pest. Biochem. Physiol.* 133, 13 (2016).
3. Rodrigues E. T., Moreno A., Mendes T., Palmeira C., Pardal M. A.: *Chemosphere* 132, 127 (2015).
4. Pacheco W. F., Doyle A., Duarte D. R. A., Ferraz C. S., Farias P. A. M., Aucelio R. Q.: *Food Anal. Meth.* 3, 205 (2010).

**4M-05****ELEKTROCHEMICKÁ OXIDACE CHEMICKY AKTIVOVANÝCH ŽLUČOVÝCH KYSELIN****JAN KLOUDA<sup>a,b</sup>, JIŘÍ BAREK<sup>a</sup>, FRANK-MICHAEL MATYSIK<sup>b</sup>, KAROLINA SCHWARZOVÁ-PECKOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Hlavova 8/2030, 128 43 Praha 2, Česká republika,* <sup>b</sup> *Universität Regensburg, Institut für Analytische Chemie, Chemo- und Biosensorik, Universitätsstraße 31, Regensburg, DE 93040*  
jan.klouda@natur.cuni.cz

Žlučové kyseliny jsou amfipatické produkty katabolické eliminace cholesterolu<sup>1</sup>. Žlučové kyseliny, které jsou biosyntetizovány v játrech, se nazývají primární. U člověka jsou nejdůležitějšími žlučovými kyselinami cholová a chenodeoxycholová kyselina. Z hlediska analytické chemie se jedná o obtížně detekovatelné molekuly a pro jejich stanovení je třeba využívat nákladné techniky, jako je hmotnostní spektrometrie, nejčastěji v kombinaci s HPLC<sup>2</sup>.

Elektrochemický přístup byl dlouhou dobu považován za nepříliš vhodný pro stanovení žlučových kyselin<sup>3</sup>. V tomto příspěvku je prezentována metoda, díky které je možné velmi jednoduše zvýšit elektrochemickou aktivitu primárních žlučových kyselin. Tento přístup je inspirován Liebermannovou-Burchardovou reakcí cholesterolu, při které dochází k jeho dehydrataci. Jako dehydratační činidlo byla využita kyselina chloristá v acetonitrilu. Primární žlučové kyseliny za těchto podmínek poskytují voltametrický signál okolo +1,2 V vs. Ag/AgNO<sub>3</sub> (ref.<sup>4</sup>) díky zavedení dvojné vazby/vazeb do jejich struktury.

Tento koncentračně závislý signál je možné využít pro stanovení primárních žlučových kyselin cholové a chenodeoxycholové s využitím běžných elektrodoých materiálů. Lze očekávat aplikaci postupu pro detekci v průtokových metodách jako jsou FIA a HPLC.

*Tento výzkum vznikl v rámci specifického vysokoškolského výzkumu (SVV 260440). Práce vznikla za podpory Grantové agentury Univerzity Karlovy (projekt GAUK 1440217) a Grantové agentury České republiky (projekt GAČR P206/12/G151).*

**LITERATURA**

1. Russell D. W., Setchell K. D.: *Biochemistry* 31, 4737 (1992).
2. Griffiths W. J., Sjövall J.: *J. Lipid Res.* 51, 23 (2010).
3. Klouda J., Berek J., Nesměrák K., Schwarzová-Pecková K.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 47, 384 (2017).
4. Klouda J., Berek J., Kočovský P., Herl T., Matysik F.-M., Nesměrák K., Schwarzová-Pecková K.: *Electrochem. Commun.* 86, 99 (2018).

**4M-06****PŘÍPRAVA VRSTEVNATÝCH CHALKOGENIDŮ GALIA A INDIA A STUDIUM JEJICH SENZOROVÝCH VLASTNOSTÍ****PETR MARVAN**

*Ústav anorganické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha, Česká republika*  
marvanp@vscht.cz

Binární vrstevnaté chalkogenidy galia a india jsou skupinou zajímavých 2D polovodičových nanomateriálů. Na rozdíl od grafenu mají nenulovou velikost energie zakázaného pásu. Tato práce se zaměřuje na přípravu 2D nanomateriálů „top-down“ metodou z objemových materiálů, které byly připraveny syntézou z prvků. Objemové materiály byly následně exfoliovány mletím pomocí střížných sil ve směsi voda: ethanol (1:1 obj.%). U připravených materiálů byla studována struktura, složení, fotoluminiscence a velikost energie zakázaného pásu. Senzory byly připraveny nanosením suspenze na zlatou elektrodu s prstovou strukturou a usušeny. U senzorů byla změřena jejich voltampérová charakteristika pro určení typu kontaktů a následně se pomocí impedanční spektroskopie zjišťovala možnost detekce různých rozpouštědel. Připravené vzorky vrstevnatých chalkogenidů galia a india byly schopny dobrého rozlišení methanolu od testovaných rozpouštědel. Vzorek GaS navíc uměl rozlišit také ethanol.

**4M-07****MODIFIKACE UHLÍKOVÝCH ŠTĚTIČKOVÝCH ELEKTROD FOSFOLIPIDY****VERONIKA MÜLLEROVÁ, RADEK JERGA, JANA SKOPALOVÁ**

*Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc, Česká republika*  
verca.mullerova@seznam.cz

Fosfolipidy jsou základní stavební jednotkou biologických membrán, které zajišťují mimo jiné důležité transportní funkce v živé buňce. Vlastnosti fosfolipidových membrán jsou studovány pomocí tzv. modelových membrán, na kterých lze testovat například interakci s některými biologicky aktivními látkami nebo léčivými<sup>1</sup>.

Cílem práce bylo vyvinout vhodnou metodu modifikace povrchu elektrody vrstvou fosfolipidů. Pro tento účel byly vyrobeny dva typy elektrod ze svazků uhlíkových vláken. Prvním typem jsou uhlíkové štětičkové elektrody skládající se z měděného drátku a jednoho nebo více svazků uhlíkových vláken částečně uzavřených uvnitř skleněné kapiláry<sup>2</sup>. Druhým typem jsou elektrody vyrobené ze špiček pro pipety, kde byl vnitřní prostor špičky vyplněn grafitovými vločkami a širší konec špičky byl utěsněn zátkou s měděným drátem. Pro modifikaci těchto elektrod bylo vyzkoušeno několik odlišných postupů využívajících přírodní směs fosfolipidů

izolovaných ze sójových bobů s komerčním názvem asolectin. Kompaktnost fosfolipidové vrstvy byla sledována pomocí cyklické voltametrie a pomocí elektrochemické impedanční spektroskopie byl sledován rozdíl v odporu čisté a modifikované elektrody. Bylo zjištěno, že odpor modifikované elektrody je přibližně třicetkrát větší než u elektrody čisté.

Modifikované elektrody byly použity pro detekci dopaminu, který je důležitým neurotransmiterem v centrální nervové soustavě<sup>3</sup>, a jeho metabolitu kyseliny 3,4-dihydroxyfenyloctové (DOPAC). U dopaminu došlo k navýšení proudové odezvy v diferenčně pulzní a square-wave voltamogramech při měření s modifikovanou elektrodou. Důvodem je interakce dopaminu s fosfolipidovou vrstvou, což má za následek jeho akumulaci ve vrstvě. Naopak v případě DOPAC k akumulaci nedochází, a proto jsou proudové odezvy naměřené s modifikovanou elektrodou mnohem nižší.

*Tato práce vznikla za podpory grantů GAČR 17-05387S a IGA\_PrF\_2018\_027.*

#### LITERATURA

1. Peetla C., Stine A., Labhasetwar V.: *Mol. Pharmaceutics* 6, 1264 (2009).
2. Skopalová J., Barták P., Bednář P., Tomková H., Ingr T., Lorencová I., Kučerová P., Papoušek R., Borovcová L., Lemr K.: *Anal.Chim. Acta* 999, 60 (2018).
3. Vallone D., Picetti R., Borrelli E.: *Neurosci. Biobehav. Rev.* 24, 125 (2000).

#### 4M-08

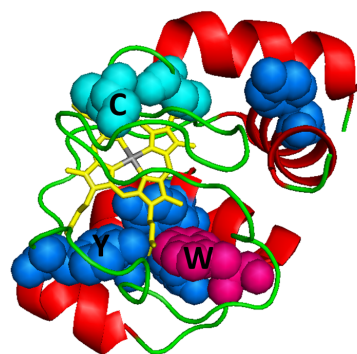
##### ELEKTROCHEMIE CYTOCHROMU C

DAVID NOVÁK

*Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta  
Univerzity Palackého, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc, Česká republika  
david.novak@upol.cz*

Cytochromy *c* jsou proteiny s integrovaným systémem hemu, který podléhá oxidačně-redukčním přeměnám. Tyto konjugované proteiny zastávají roli elektronových přenašečů, jakožto součást respiračního řetězce lokalizovaného v membránovém systému mitochondrií. Slabá elektrostatická interakce s membránami umožňuje cytochromům opustit mitochondriální prostor a zasahovat tak do dalších buněčných procesů, jako je apoptóza apod.

Předložený příspěvek cílí na studium oxidačně-redukčních a spektrálních vlastností cytochromu *c* včetně jeho strukturních analog. Výsledky elektrochemických analýz byly interpretovány společně s výsledky dosaženými pomocí 3D strukturní vizualizace.



Hlavním přínosem příspěvku je komplexní zhodnocení oxidace a redukce cytochromu *c* na úrovni povrchově lokalizovaných aminokyselinových zbytků a hemu v jednom elektrochemickém záznamu. Elektroaktivní tyrosinové (Y), tryptofanové (W) a cysteinové (C) zbytky jsou vyznačeny společně s hemovou skupinou na 3D modelu cytochromu *c* izolovaného z koňského srdce (viz výše).

Elektrochemické záznamy nativního cytochromu *c* a jeho strukturních analog se od sebe liší, čehož může být využito při studiu oxidačně-redukčních přeměn, struktury a funkce dalších hemoproteinů. Závěrem byla provedena série analýz pomocí elektronové paramagnetické rezonance a imunochemických nástrojů. Tyto výsledky jsou komplementární s výsledky elektrochemických analýz, více viz cit.<sup>1</sup>

*Tento výzkum byl podporován projektem IGA\_LF\_2018\_012 Univerzity Palackého v Olomouci.*

#### LITERATURA

1. Novak D., Mojovic M., Pavicevic A., Zatloukalova M., Hernychova L., Bartosik M., Vacek J.: *Bioelectrochemistry* 119, 136 (2018).

#### 4M-09

##### ELECTROCHEMISTRY OF NATURAL AND UNNATURAL DNA

JAN ŠPAČEK

*CEITEC MU, Kamenice 753/5, Brno, 625 00 and Institute of Biophysics of the CAS, v.v.i., Královopolská 135, 612 65 Brno, Czech Republic  
j.h.spacek@ibp.cz*

This work is dedicated to novel approaches towards electroanalysis of natural and modified DNAs and their interactions. It summarizes and discusses six studies published in electroanalytical peer reviewed journals and mentions two yet unpublished projects<sup>1</sup>. The most important contributions are discovery of new redox signals provided by DNA components at pyrolytic graphite electrode (PGE)<sup>2</sup> and electroanalysis of unnatural base pairs (UBPs) used for creation of semi-synthetic organism<sup>3</sup> (not yet published).

For over fifty years it was believed that only positive and mildly negative potentials are useful for DNA electroanalysis using carbon electrodes. It has been shown for

the first time that highly negative potentials could be used to obtain analytically interesting reduction signals of the DNA bases. Broadening of the potential window more than doubled the number of known analytically useful signals provided by DNA on the PGE<sup>2</sup>. Expanded potential window of PGE is applicable, for example, for the detection of DNA methylation and as an analytical tool for analysis of RNA oligomers produced through non-enzymatic RNA polymerization, in experiments simulating origin of life<sup>4</sup>.

It has been shown that semi-synthetic bacterium can store and retrieve information in UBPs: replicate, transcribe and translate it into a protein with coded unnatural amino acids<sup>3</sup>. This technology has great potential for basic research as well as for industrial applications.

Method for sensitive quantitative electroanalysis of UBP content in the bacterial plasmid DNA has been developed and is discussed<sup>1</sup>.

*This work has been supported by a Czech Science Foundation project reg. no. 16-01625S; and by the SYMBIT project reg. no. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000477 financed from the ERDF.*

#### REFERENCES

1. Špaček J.: *Disertation*. Masaryk University, Brno, Czechia, 2018.
2. Špaček J., Daňhel A., Hasoň S., Fojta M.: *Electrochem. Commun.* 82, 34 (2017).
3. Zhang Y., Ptacin J. L., Fischer E. C., Aerni H. R., Caffaro C. E., Jose K. S., Feldman A. W., Turner C. R., Romesberg F. E.: *Nature* 551, 644 (2017).
4. Šponer J. E., Šponer J., Di Mauro E.: *WIREs RNA* 3, 1 (2016).

**4P-01****ELEKTROCHEMICKÁ DETEKCIA INZULÍNU NA UHLÍKOVÝCH ELEKTRODÁCH MODIFIKOVANÝCH NANOČASTICAMI****IVANA ŠIŠOLÁKOVÁ, JANA HOVANCOVÁ, RENÁTA ORIŇAKOVÁ, ANDREJ ORIŇAK***Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Katedra fyzikálnej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovensko  
sisolakova.ivana@gmail.com*

Diabetes mellitus je jedno z najrozšírenejších metabolických ochorení súčasnosti, charakteristické dlhodobým zvýšením hladiny glukózy v krvi (hyperglykémia). Hyperglykémia je spôsobená poruchou vylučovania inzulínu, pôsobením inzulínu alebo kombináciou oboch porúch súčasne, v závislosti od toho o aký typ diabetu sa jedná<sup>1</sup>. Častokrát nie je toto ochorenie diagnostikované dostatočne včas, a tak hyperglykémia spôsobuje patologické a funkčné zmeny v tele pacienta<sup>2</sup>. Z toho dôvodu sa výskum v poslednom období čoraz viac zameriava na vývoj elektrochemického senzora, ktorý by bol prístrojovo a finančne nenáročný a schopný rýchlo a presne detegovať inzulín.

Táto práca je zameraná na elektrochemické stanovenie inzulínu na modifikovaných uhlíkových elektrodách, využitím metód cyklickej voltampérometrie a chronoampérometrie. Cieľom práce je vhodne modifikovať uhlíkovú elektrodu, ktorá by disponovala vhodnými elektrochemickými charakteristikami pre stanovenie inzulínu. Na základe vykonaných meraní bol vypočítaný korelačný koeficient, charakterizujúci lineárnu závislosť maximálnej hodnoty prúdu od koncentrácie inzulínu, limit detekcie a citlivosť pripravenej elektródy. Aktívna plocha nemodifikovanej a modifikovanej uhlíkovej elektródy bola stanovená metódou chronoampérometrie, pomocou Cottrelovej rovnice v roztoku  $K_4[Fe(CN)_6]$ . Modifikáciou uhlíkovej elektródy bolo dosiahnuté zlepšenie elektrochemických vlastností uhlíkovej elektródy, zvýšenie citlivosti, korelačného koeficientu a zníženie citlivosti.

*Táto práca vznikla za podpory grantu VVGS-PF-2018-795, VEGA 1/0074/17, APVV-16-0029.***LITERATÚRA**

1. Mathebula S. D.: Afr. Vision Eye Health 74, 5 (2015).
2. Bi X., Lim J., Henry C. J.: Food Chem. 217, 281 (2017).

**4P-02****KOMBINÁCIA KOLOIDNEJ LITOGRAFIE A ELEKTROCHEMICKEJ DEPOZÍCIE AKO VHODNÁ METÓDA NA PRÍPRAVU PLAZMÓNOVÝCH POVRCHOV****ONDREJ PETRUŠ, ANDREJ ORIŇAK, RENÁTA ORIŇAKOVÁ***Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra fyzikálnej chémie, Moyzesova 11, Košice 040 01, Slovensko  
ondrej.petrus@student.upjs.sk*

V súčasnej dobe sa zvyšujú nároky na rýchlosť, presnosť a detekčný limit analytických metód. Uvedené podmienky spĺňa povrchovo zosilnená Ramanova spektroskopia, ktorá využíva efekt zosilnenia analytického signálu na nanoštrukturovaných povrchoch alebo nanočasticiach. Zosilnenie analytického signálu významne závisí od morfológie a chemického zloženia povrchu. Moduláciou morfológie povrchu je možné meniť polohu absorpčného maxima v rozmedzi UV-Ľ oblasti.

Vhodnou metódou na prípravu nanoštrukturovaných plazmónových povrchoch je koloidná litografia v spojení s elektrochemickou depozíciou. Morfológia povrchu závisí od priemeru použitých nanoguličiek ako aj od času elektrochemickej depozície. Takto pripravené povrchy sa nazývajú nanokavitové filmy, ktoré majú vysokú homogenitu v rozsahu niekoľko desiatok milimetrov až centimetrov.

Najpoužívanejšie kovy na prípravu plazmónových povrchoch sú striebro a zlato. Nevýhodou pri elektrochemickej depozícii striebra je tvorba predovšetkým dendritických štruktúr, čo značne znižuje homogenitu povrchu a tým aj reprodukovateľnosť meraní. Na druhej strane zlato je možné elektrochemicky depozitovať do súvislých filmov, no je neporovnateľne drahšie ako striebro, čo značne navyšuje cenotakýchto povrchoch. Ako vhodné je použiť kombináciu kovov napríklad nikel a striebro. Takáto kombinácia niklových nanokavit s nanočasticami striebra sa ukázala ako vhodná kombinácia vďaka jej nenáročnosti na prípravu, cenu a hlavné výborným výsledkom pri aplikácii ako plazmónových povrchoch v povrchom zosilnenej Ramanovej spektroskopii<sup>1</sup>.

*Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0074/17, APVV-16-0029.***LITERATÚRA**

1. Petruš O., Oriňak A., Orságová Oriňaková R., Kráľová Z., Múdra E., Kupková M., Kovaľ K.: Appl. Surf. Sci. 423, 322 (2017).



## 4P-03

**ELEKTROCHEMICKÉ STUDIUM FLUOROVANÝCH DERIVÁTŮ 1,3-DIFENYLISOBENZOFURANU – CHROMOFORY PRO SINGLETOVÉ ŠTĚPENÍ****LUDMILA ŠIMKOVÁ, JIŘÍ LUDVÍK**

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

V dnešní době je velký zájem věnován molekulám na bázi 1,3-difenyliisobenzofuranu (DPIBF), neboť tyto molekuly by mohly představovat účinné chromofory pro singletové štěpení (SF)<sup>1</sup>. SF je fotofyzikální proces, ve kterém organický chromofor ve svém excitovaném singletovém stavu předá část své excitované energie sousední molekule, která se nachází v nevzbuzeném základním stavu, a obě tyto molekuly skončí ve svém excitovaném tripletovém stavu<sup>2</sup>. SF lze popsat jako výměnu elektronů mezi dvěma molekulami, které nevyžaduje od žádné z nich změnu spinu. Studium redoxních vlastností molekul pro SF je proto velmi důležité pro jejich případné použití v solárních článcích.

Předkládaná práce se zabývá studiem elektrochemických vlastností fluorovaných derivátů DPIBF se zaměřením na vliv počtu fluorovaných atomů a jejich polohy v molekule na redox potenciály, HOMO-LUMO "gap" a na mechanismus.

Ve většině případů jsou potenciály prvního redukčního i oxidačního kroku ovlivněny účinkem substituentů. Pozorovaná redukce i oxidace fluorovaných derivátů (ať už symetrických nebo asymetrických), v jejichž molekule je počet atomů fluoru 1–4, je víceméně podobná s redukcí i oxidací samotného DPIBF. U těchto sloučenin atomy fluoru v *para* a *ortho* pozici vzhledem ke spojení s isobenzofuranovým kruhem nemají vliv na redukční ani oxidační potenciály. Oproti tomu redukční i oxidační potenciály molekul s fluorovými atomy v *meta* poloze jsou výrazně posouvány k pozitivnějším hodnotám.

V případě vyššího počtu atomů fluoru v molekule se redukční mechanismus skokem liší od ostatních fluorovaných derivátů kvůli silnému indukivnímu účinku, a sice pro *meta* polohu. Další účinek nastává v případech přítomnosti dvou substituentů fluoru v *ortho* poloze. Sterické důvody (vytočení benzenového kruhu z roviny heterocyklu) způsobují nižší elektronovou komunikaci (delokalizaci) mezi jednotlivými částmi molekuly, tedy různé elektrochemické a UV-vis a EPR spektroeletrochemické odezvy způsobené částečným blokem delokalizace elektronů. Je zřejmé, že detailní "ladění" redoxních vlastností v této sérii chromoforů pomocí vhodné kombinace počtu a polohy atomů fluoru je možné.

Autoři děkují Dr. Jiřímu Kaletovi za syntézu studovaných molekul. Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 18-12150S a za institucionální podpory RVO 61388955.

## LITERATURA

- Howard J. A., Mendenhall G. D.: Can. J. Chem. 53, 2199 (1975).
- Smith M. B., Michl J.: J. Chem. Rev. 110, 6891 (2010).

## 4P-04

**ELEKTROCHEMICKÉ STUDIUM PREKURSORŮ PRO ORGANICKÉ POLOVODIČE NA BÁZI PYRENU****LUCIE KOLÁČNÁ<sup>a</sup>, PETER POLÁK<sup>b</sup>, TOMÁŠ TOBRMAN<sup>b</sup>, JIŘÍ LUDVÍK<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.,  
Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy, Dolejškova 3,  
182 23 Praha 8, <sup>b</sup> Vysoká škola chemicko-technologická  
v Praze, Ústav organické chemie, Technická 5, 166 28 Praha  
6, Česká republika  
Lucie.kolacna@jh-inst.cas.cz

Polycyklický uhlovodík pyren má díky svému planárnímu delokalizovanému systému schopnost tvořit relativně stabilní radikálové ionty. Díky tomu – podobně jako další sloučeniny obsahující konjugované dvojné vazby nachází široké uplatnění v materiálové chemii a katalýze. Organické tranzistory řízené elektrickým polem (Organic field-effect transistor – OFET) jsou organické látky založené na biodegradovatelných organických (polo)vodičích či jiných supramolekulárních systémech. Obsahují organické jádro prosté těžkých kovů (v tomto případě je středem molekuly čtyřikrát substituovaná dvojná vazba) a fotoaktivní či redoxní centra propojená systémem  $\pi$ -konjugovaných můstků. Elektrochemické studium jejich vlastností je nevyhnutelné při analýze tohoto intramolekulárního elektronového systému.

Elektrochemické vlastnosti derivátů pyrenu a dalších aromátů propojených cyklobutenovým můstkem byly sledovány pomocí redukce v nevodném prostředí (polarografie na rtuťové kapající elektrodě a cyklická voltanetrie na visící rtuťové kape). Bylo zjištěno, že pyren je vhodným chromoforem i redoxním centrem pro organické polovodiče. Redukce probíhá přes stabilní radikálový aniont (kolem  $-2,15$  V) k tvorbě nestálého dianiontu u zápornějších potenciálů blízkých rozkladu základního elektrolytu (kolem  $-2,7$  V). Cyklobutenový můstek vstupuje do konjugace aromatických vazeb a rozšiřuje tak planární delokalizovaný systém. Při redukcí samotného cyklobutenu dochází k otevření kruhu<sup>1,2</sup> a stěpení vazby  $\text{CH}_2\text{-CH}_2$  mechanismem ECE. Naopak přímé propojení dvou pyrenových (aromatických) fragmentů díky jejich vzájemnému stočení ze sterických důvodů brání vzájemné interakci jejich konjugovaných systémů.

Interpretace redukčních potenciálů, jejich posunu a rozdílů, spolu s kvantově chemickými výpočty umožnila určení podílu jednotlivých částí těchto složitých molekul na celkových redox vlastnostech systémů a zjištění umístění jednotlivých elektroaktivních center i rozsah delokalizace elektronů. Zatím jde o studium modelových látek, které přispívá k dalšímu vývoji materiálů pro OFET.

Tato práce vznikla díky grantu GAČR 18-12150S a za institucionální podpory RVO: 61388955.

## LITERATURA

- Bauld N. L., Cessac J., Farr F. R., Holloway R. J.: Am. Chem. Soc. 98, 4561 (1976).
- Boehm A., Meerholz K., Heinze J., Muelllen K.: J. Am. Chem. Soc. 114, 688 (1992).

## 4P-05

ELEKTROCHEMICKÉ MONITOROVÁNÍ REAKCÍ FTALALDEHYDU (OPA) S *N*-, *S*- A *O*-NUKLEOFILY

JIRÍ LUDVÍK, JOEL DONKENG DAZIE, KRISTÝNA KANTNEROVÁ

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

Ftalaldehyd (Orthophthalaldehyde – OPA) se užívá již dlouho jako derivatizační činidlo při analýze aminokyselin a jako desinfekční činidlo v medicíně. Díky dvěma karbonylům v ortho-poloze vykazuje tato molekula specifickou reaktivitu vůči nukleofilům, neboť zde hrají roli jak efekty indukční, tak i rezonanční a sterické<sup>1,2</sup>. V literatuře je popsán velmi zjednodušený mechanismus a hlavní produkty<sup>3,4</sup>, současně však i řada nesrovnalostí. Při systematictější studiu jsme pozorovali dosud nepopsané efekty a získali rozdílné produkty ukazující na to, že detailní mechanismus není známý.

OPA se ve vodném prostředí redukuje ve dvou (třech) redukčních krocích s výraznou vlnou u  $-1,45$  V (SCE), kterou lze využít k monitorování příslušných kondenzačních reakcí. Hlavním rysem těchto reakcí je rychlá intramolekulární cyklizace s řadou následných chemických pochodů, z nichž některé produkují redukovatelné meziproducty.

V příspěvku jsou diskutovány reakce OPA s primárními aminy, s 1,2- a  $\alpha,\omega$ -diaminy odvozenými od aromatických, alifatických a alicyklických látek, dále s alifatickými aminokyselinami, jakož i s thioley a to vše v konkurenci se vsudypřítomnou vodou, která je též nukleofilem a s OPA tvoří neredukovatelné hydráty. Ukázalo se, že o produktech rozhodují zejména rozdíly v kinetice jednotlivých konkurenčních i následných reakcí, které jsou způsobeny strukturou nukleofilních substrátů. Úvahy o mechanismech vycházejí s UV-vis spekter a z identifikace produktů pomocí MS, NMR a x-ray strukturní analýzy<sup>5-8</sup>.

Auři děkují grantu GAČR 18-12150S a institucionální podpoře RVI 61388955.

## LITERATURA

1. Roth M.: Anal. Chem. 43, 880 (1971).
2. Simoes M., Simoes L.C., Cleto S., Machado I., Pereira M.O., Vieira M. J.: J. Basic Microbiol. 47, 230 (2007).
3. Zuman P.: Chem. Rev. 104, 3217 (2004).
4. Zuman P., Salem N., Kulla E.: Electroanalysis 21, 645 (2009).
5. Donkeng Dazie J., Liška A., Ludvík J., Fábry J., Dušek M.: Acta Crystallogr. C 72, 518 (2016).
6. Donkeng Dazie J., Liška A., Ludvík J.: J. Electrochem. Soc. 163, G127 (2016).
7. Donkeng Dazie J., Liška A., Ludvík J., Fábry J., Dušek M., Eigner V. Z.: Krist.-Cryst. Mater. 232, 441 (2017).
8. Donkeng Dazie J., Liška A., Urban J., Ludvík J. J.: Electroanal. Chem. 821, 131 (2018).

## 4P-06

## ELECTROCHEMICAL &amp; SPECTROSCOPIC INVESTIGATION OF FERROCENE BEARING THIALCALIX[4]ARENE AND ITS Cu(II) COMPLEX

KRUNAL MODI<sup>a</sup>, ALAN LISKA<sup>a</sup>, URVI PANCHAL<sup>b</sup>, SHUVANKAR DEY<sup>b</sup>, JIRI LUDVIK<sup>a</sup>, V. K. JAIN<sup>b</sup>

<sup>a</sup> J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the Czech Academy of Sciences, Dolejškova 2155/3, 182 23 Prague 8, Czech Republic, <sup>b</sup> Department of Chemistry, University School of sciences, Gujarat University, Ahmedabad 380009, Gujarat, India  
krunal.modi@jh-inst.cas.cz

Design and synthesis of a new ligand molecule derived from thiacalix[4]arene is presented and formation of its Cu(II) complex is described. Thiacalix[4]arenes have some specific features. Larger ring size (in comparison to calix[4]arene) due to longer C-S than C-C bond, and the sulfur atom as bridging unit may act cooperatively with phenolic oxygen upon binding with the guest – analyte<sup>1</sup>. The presence of two hydrazone groups as pendants at the lower rim of calixarene enable formation of complexes with some transition metal cations. It was found that the new Thiacalix[4]arene ligand (Fig. 1) exhibits selectively Cu(II) recognition.

Because calixarene frameworks are not electrochemically active<sup>2-4</sup>, for electrochemical investigation they have to be derivatized by a redox center. Due to its stability and excellent redox properties, ferrocene was used as a redox probe. From shifts of the ferrocene oxidation potential in combination with the reduction of the complexing metal cation the formation of a complex can be characterized. The aim of the project is to investigate abilities of Thiacalix[4]arenes to serve as specific ligands – possible future sensors.

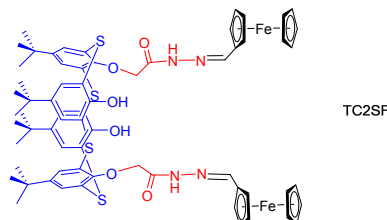


Fig. 1. Structure of thiacalix[4]arene bis(oxy)-di(1-ferrocene-*N'*-ethylidene-propione hydrazide)

The financial support of the grant No 17-18108S (GAČR) and the institutional support RVO: 61388955 is highly appreciated.

## REFERENCES

1. Modi K. M., Panchal U. S., Patel C., Bhatt K. D., Dey S., Mishra D. R., Jain V. K.: New J. Chem. (2018), in press.
2. Liška A., Lhoták P., Ludvík J.: Electroanalysis 28, 2861 (2016).
3. Liška A., Ludvík J.: Curr. Opin. Electrochem. 8, 45 (2018).
4. Liška A., Modi K. M., Ludvík J.: ECS Meeting Abstracts -Seattle, WA, 2018, MA 2018-01, 2036.

## 4P-07

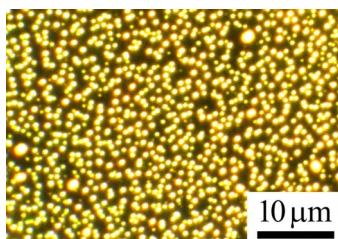
PLAZMONICKÉ VLASTNOSTI NANOČÁSTIC  
STŘÍBRNÉHO AMALGÁMUFILIP LIGMAJER<sup>a,b,c</sup>, ALEŠ DAÑHEL<sup>a</sup><sup>a</sup> BFÚ AV ČR, v.v.i., Královopolská 135, 612 65, Brno,<sup>b</sup> STI VUT v Brně, Purkyňova 123, 612 00, Brno,<sup>c</sup> ÚFI FSI VUT v Brně, Technická 2, 616 69, Brno, Česká republika

filip.ligmajer@ceitec.vutbr.cz

Rtuťové elektrody jsou díky v katodické oblasti mimořádně širokému potenciálovému oknu vhodné pro studium redukčních procesů, a to včetně analýzy nukleových kyselin i proteinů<sup>1</sup>. Kvůli její toxicitě, nízké mechanické stabilitě a obtížné manipulovatelnosti jsou v současné době zkoumány pevné elektrody z alternativních materiálů, které by ji mohly nahradit. Jako nejslibnější se jeví amalgámy, slitiny rtuť s jiným kovem (stříbrem, zlatem nebo měďí), které mají některé elektrochemické vlastnosti podobné rtuťi, ale vyskytují se v pevném skupenství a nejsou toxické.

Stejně jako v jiných vědních oblastech, i v elektrochemii se výrazně uplatňují moderní způsoby nanostrukturování povrchů. Nanostrukturované elektrody, které mohou mít oproti svým planárním protějškům až o několik řádů větší povrch, vnesly do některých experimentů snížení aktivačního přepětí, zvýšení citlivosti, či zlepšení detekčních limitů<sup>2</sup>.

V tomto příspěvku se budeme věnovat optickým vlastnostem nanočástic stříbrného amalgámu (obr. 1), které byly připraveny elektrodepozicí na povrchu průhledných vodivých elektrod tvořených vrstvou cinem dopovaného oxidu inditího (ITO). Budou prezentovány nejen experimentální optické studie plazmonických rezonancí těchto nanočástic, ale také jejich porovnání s numerickými simulacemi. Výsledky mohou sloužit jako podklady pro využití plazmonických rezonancí nanostrukturovaných amalgámů ve spektro-elektrochemických aplikacích.



Obr. 1. Snímek nanočástic stříbrného amalgámu z optického mikroskopu (temnopolní zobrazení)

Tato práce byla finančně podpořena Grantovou agenturou České republiky (grant 17-23634Y) a provedena za podpory výzkumné infrastruktury CEITEC Nano (ID LM2015041, MŠMT, 2016–2019), CEITEC Vysoké učení technické v Brně.

## LITERATURA

1. Paleček E., Bartošík M., Ostatná V., Trefulka, M.: Chem. Rec. 12, 27 (2012).
2. Seeber R., Terzi F., Zanardi C.: *Functional Materials in Amperometric Sensing: Polymeric, Inorganic, and*

*Nanocomposite Materials for Modified Electrodes*, Springer 2014.

## 4P-08

## SIMS DATA ANALYSIS OF LIGNIN COMPOSITES

MONIKA JERIGOVÁ<sup>a,b</sup>, VOJTECH SZÖCS<sup>a</sup>, DUŠAN  
LORENC<sup>a,b</sup>, DUŠAN VELIČ<sup>a,b</sup><sup>a</sup> International laser center, Ilkovicova 3, 84104 Bratislava,<sup>b</sup> Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynska dolina, Ilkovicova 6, 84215 Bratislava, Slovakia  
dusan.lorenc@ilc.sk

Lignin has the potential to be an important source of aromatic chemicals for the chemical industry. Knowing its structure is of primary interest. Our aim was to study the presence of three types of lignin constituents (*p*-coumaryl alcohol, coniferyl alcohol, and syringyl alcohol) in different chemical modifications<sup>1–3</sup>.

The SIMS method is a highly sensitive spectral method for obtaining masses and subsequent identification of individual molecular components of the measured object. For objective evaluation of the measurement, it is necessary to do several dozen scans in a wide range of weights followed by data pre-processing to determine the suitable region of interest.

In order to optimize computer resources and computation time, traditional analytical methods (e.g. peak fitting) can be combined with artificial intelligence and machine learning (ML) algorithms<sup>4,5</sup>. The most suitable methods seem to be those of unsupervised learning branch of ML, namely clustering. These methods allow us to choose the proper data range (and thus substantially reduce the actual amount of data). The later nonlinear fit in prepared data range allows us to make a more precise estimate of the corresponding component mass weight.

The research is supported by the Grant Agency of the Slovak Republic, project APVV-15-0201 and VEGA 1/0400/16.

## REFERENCES

1. Calvo-Flores F. G., et al.: *Lignin and Lignans as Renewable Raw Materials*, John Wiley & Sons 2015.
2. Faruk O., Sain M.: *Lignin in Polymer Composites*, Elsevier 2016.
3. Ponceca S. C., Sundström V.: *Nanoscale* 8, 6249 (2016).
4. Zhou C., et al.: *BMC Bioinformatics* 9, 325 (2008).
5. Gastegge M., et al.: *Chem. Sci.* 8, 6924 (2017).

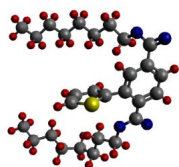
## 4P-09

**ABSORPČNÁ A FLUORESCENČNÁ DYNAMIKA  
SYSTÉMU TIOFÉNOVÝ KOPOLYMÉR/  
FENYLOVANÝ FULLERÉN**

**LENKA SLUŠNÁ<sup>a</sup>, DIMITRIJ BONDAREV<sup>b</sup>, EDUARD  
JANÉ<sup>c</sup>, EUDOVÍT HAIZER<sup>d</sup>, MILAN DRŽÍK<sup>d</sup>,  
VOJTECH SZOCS<sup>d</sup>, MONIKA JERIGOVÁ<sup>a,d</sup>, DUŠAN  
VELIČ<sup>a,d</sup>**

<sup>a</sup> Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Ilkovičova 6, 841 04 Bratislava 4, <sup>b</sup> Ústav polymérov, SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, <sup>c</sup> Chemický ústav, SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, <sup>d</sup> Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava 4, Slovenská republika slusnal@gmail.com

Polytiofény majú široké využitie v oblastiach ako fotovoltika, tranzistory, LED, senzory ako aj nelineárna optika. Tieto polyméry sú vodivé vďaka delokalizácii elektrónov na tiofénových jadrách a ich konjugácii pozdĺž tiofénového reťazca, čo je nevyhnutné pre ich využitie v organických fotovoltických článkoch. Organické solárne články sú založené na donor-akceptorovom systéme, pričom polytiofény vystupujú ako elektrónové donorov a deriváty fullerénov ako elektrónové akceptory. Po ožiarení polyméru, sa elektrón excituje a prechádza z polytiofénového obsadeného orbitálu do fullerénového neobsadeného orbitálu<sup>1,2</sup>. Nový kopolymér P33 (poly(thiophene-2,5-diyl-2,5-di-n-octyloxycarbonyl-1,4-phenylene)), ako je znázornený na obrázku, je študovaný s fenylovaným fullerénom.



Elektrónové prechody sú ultrarýchle a preto je potrebné meranie tejto dynamiky na úrovni pikosekúnd pomocou časovo-rozlišenej absorpčnej a fluorescenčnej spektroskopie<sup>3</sup>. Kvantový výťažok fluorescence P33 je 40.2 % a doba života 810 ps. Doba života ultrarýchlych stavov sa mení v dôsledku zhášania akceptorm od 5,8 ps do 319,7 ps.

Tato práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0400/16.

## LITERATÚRA

1. Sariciftci N. S., Smilowitz L., Heeger A. J., Wudl F.: *Science* 258, 1474 (1992).
2. Günes S., Neugebauer H., Sariciftci N. S.: *Chem. Rev.* 107, 1324 (2007).
3. Lap D. V., Grebner D., Rentsch S.: *Phys. Chem. A* 101, 107 (1997).

## 4P-10

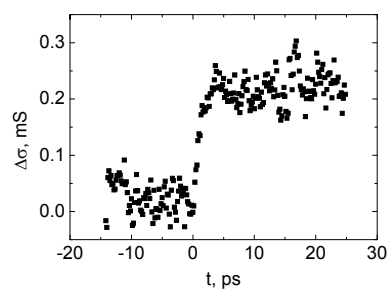
**HYBRIDNÝ POLOVODIČ NA BÁZE PEROVSKITU  
V ČASOVO ROZLIŠENOM TERAHERTZOVOM  
EXPERIMENTE**

**EVA NOSKOVIČOVÁ<sup>a</sup>, DUŠAN LORENC<sup>a,b</sup>, LENKA  
SLUŠNÁ<sup>a</sup>, MONIKA JERIGOVÁ<sup>a,b</sup>, DUŠAN VELIČ<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 84215 Bratislava, <sup>b</sup> Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 84104 Bratislava, Slovensko noskovic.eva@gmail.com

Hybridné anorganicko-organické materiály na báze perovskitovej štruktúry (perovskity)<sup>1</sup> sú pomerne nové materiály využívané vo viacerých odvetviach, hlavne z dôvodu ich polovodičových vlastností. Uplatnenie našli aj ako súčasť fotovoltických článkov, v ktorých vďaka ich ambipolárnemu charakteru nahrádzajú rovnako polovodiče s elektrónovou vodivosťou, ako aj s dierovou vodivosťou. S ich laboratórnou konverznou účinnosťou okolo 22 % môžu byť považované za reálneho konkurenta ku kremíkovým fotovoltickým článkom, ktorých laboratórna účinnosť je približne 26 %.

Tenká vrstva, perovskitu metylamónium jodidu olovnatého s ďalšou vrstvou materiálu schopného prenášať kladný náboj (spiro-OMETAD), bola skúmaná pomocou časovo rozlišeného terahertzového experimentu<sup>2</sup> (optical pump terahertz probe, OPTP), ktorým je možné priamo vyhodnotiť dynamiku vodivosti nosičov náboja v polovodiči. Pomocou OPTP sú najskôr nosiče náboja excitované opticky a následne je zaznamenaná zmena priepustnosti terahertzového žiarenia, počas relaxácie elektrónu do minima vodivostného pásma. Zmena priepustnosti meraná v OPTP experimente je potom priamo úmerná zmene vodivosti vzorky. Meraná zmena vodivosti vzorky v čase je zobrazená na obr. 1.



Obr. 1. Časová odozva vodivosti vzorky

## LITERATÚRA

1. Ponseca S. C., Sundström V.: *Nanoscale* 8, 6249 (2016).
2. Zhou D., Zhou T., Tian Y., Zhu X., Tu, Y.: *J. Nanomater.* 8148072 (2018).

**4P-11****ŠTRUKTÚRA LIGNÍNU POMOCOU HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRIE SEKUNDÁRNYCH IÓNOV****KARINA KULPOVÁ<sup>a</sup>, MONIKA JERIGOVÁ<sup>a,b</sup>, DUŠAN VELIČ<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15, <sup>b</sup> Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava, Slovensko  
k.kulpova@azet.sk

Lignín je hlavnou súčasťou pripravovaných fenolformaldehydových živíc aj drevoplastových kompozitov. Je to vysokomolekulárna polyfenolická amorfná látka, ktorá sa svojou štruktúrou podobá na štruktúru fenolformaldehydovej živice a môže sa použiť ako jej ekologickejšia a ekonomickejšia náhrada<sup>1</sup>.

SIMS (Secondary Ion Mass Spectrometry), hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov, je výkonná analytická technika, ktorá má vysokú citlivosť a dobré spektrálne rozlíšenie, ktoré umožňuje identifikáciu kľúčových fragmentov analyzovaných molekúl. Merali sa hmotnostné spektra lignínu aj fenolformaldehydovej živice v pozitívnej aj negatívnej polarite. Ako primárny ión bol použitý aj klastrový ión  $\text{Bi}_3^+$  a porovnal sa výťažok sekundárnych iónov s primárnym iónom  $\text{Bi}^{+2,3}$ .

V hmotnostných spektrách lignínu sa identifikovali jeho základné zložky, ako aj rôzne štruktúrne jednotky lignínu pri vyšších hmotnostiach  $M > 500$  m.u. V spektrách formaldehydovej živice sa tiež identifikovali jej základné zložky v oboch polaritách. Pri vyšších hmotnostiach nad 300 m.u. sa identifikovali podobné píky ako pri spektrách lignínu, čo potvrdzuje chemickú podobnosť sieťovej štruktúry fenolformaldehydovej živice s lignínom a teda aj možnosť nahrádzania časti živice lignínom.

Táto práca vznikla za podpory grantu APVV-15-0201 a VEGA 1/0400/16.

**LITERATÚRA**

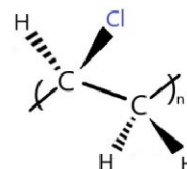
1. Vishtal A., Kraslawski B.: *BioResources* 6, 3 (2011).
2. Frank L., Král J.: *Metody analýzy povrchů – iontové, sondové a speciální metody*, Academia, Praha 2002.
3. Aranyosiová M.: *ChemZi* 2, 52 (2006).

**4P-12****INFRAČERVENÁ SPEKTROSKOPIA KOMPOZITNÝCH MATERIÁLOV NA BÁZE POLYVINYLCHLORIDU A LIGNÍNU****TATIANA VOJTEKOVÁ<sup>a</sup>, DUŠAN LORENC<sup>a,b</sup>, DUŠAN VELIČ<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, <sup>b</sup> Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava, Slovenská republika  
tatiana.vojtekova@gmail.com

Drevoplastové kompozity sú široko využiteľné materiály vzhľadom na svoju ekologickosť a lepšie chemické aj mechanické vlastnosti. Tieto vlastnosti sa získavajú spojením termoplastických polymérov, napríklad polyvinylchloridu, s prírodnou organickou zložkou. Jednou z možných využiteľných foriem organickej hmoty je lignín, komplexný fenolický heteropolymér, ktorý sa nachádza v sekundárnych bunkových stenách drevných tkanív.

Používanou metódou na skúmanie zloženia a vlastností týchto látok je infračervená spektroskopia s Fourierovou transformáciou. Prechádzaním infračerveného žiarenia molekulami študovaných látok a pri súčasnej zmene ich dipólového momentu sú pozorovateľné aktívne vibrácie v spektre. Analyzovaním vibračných módov polyvinylchloridu a lignínu sa určuje ich molekulové zloženie. Sledovanie vybraných vibračných módov polyvinylchloridu je účelné v dôsledku potvrdenia zastúpenia organickej hmoty a polyvinylchloridu, znázornenom na obrázku, ako dvoch hlavných zložiek drevoplastových kompozitných materiálov.



Obr. 1. Polyvinylchlorid

Táto práca vznikla za podpory grantu APVV-15-0201 a VEGA 1/0400/16.

**LITERATÚRA**

1. Ashori A.: *Bioresour. Technol.* 99, 4661 (2007).
2. Wertz J. L., Deleu M., Coppée S., Richel A.: *Hemicelluloses and Lignin in Biorefineries*, Taylor & Francis Group 2018.
3. Smith B. C.: *Fundamentals of Fourier Transformed Infrared Spectroscopy*, Taylor & Francis Group 2011.



## 4P-13

ELEKTROCHEMICKÉ STUDIUM DIHALOGEN  
CYKLOPENTADIENYLOVÝCH LIGANDŮ TITANU  
V NEVODNÉM PROSTŘEDÍJAN SVOBODA\*, LUDMILA ŠIMKOVÁ, JIŘÍ PINKAS,  
JIRÍ LUDVÍK

Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.,  
Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Česká republika,  
\*středoškolský student v rámci projektu AV ČR Otevřená věda  
svoboda-jan@outlook.cz

Jeden z prvních komplexů, u nichž byla zjištěna biologická (protirakovinná) aktivita, je cisplatina  $[cisPt(NH_3)_2Cl_2]^+$ . Je považována za jedno z neúčinnějších a nejběžněji používaných cytostatik v léčbě některých typů rakovin. Nicméně její toxicita a vznik rezistence u rakovinových buněk omezují její využití. Proto v posledních letech vzrůstá zájem o vývoj protirakovinných terapeutik neobsahujících platinu. Jednou skupinou takových komplexů jsou metalocenové dihalogenidy. Jedná se o organometalické sloučeniny, které v sobě spojují část organickou s atomem přechodného kovu (Ti, Zr, Hf). Prvním metalocenovým dihalogenidem, který ukázal protinádorovou aktivitu<sup>2</sup> a podstoupil klinické zkoušky jako lék při chemoterapii, byl titanocen dichlorid  $Cp_2TiCl_2$ , kde  $Cp = \eta^5-C_5H_5$ <sup>3</sup>.

Aby bylo možné pochopit molekulární mechanismus účinku a dokázat předpovídat děje probíhající během chemických procesů v tkáni, začalo se studovat chování metalocenových halogenidů při oxidačně-redukčních dějích. V popředí našeho zájmu jsou látky, ve kterých vystupuje v roli kovu titan a organickou část přebírá cyklopentadienylový kruh. Navazujeme na práci<sup>4</sup>, kde se studovala redukce dichlorid cyklopentadienylového ligandu titanu  $(C_5H_5-nMe_n)_2TiCl_2$ ,  $n = 0-5$ , na rtuti v tetrahydrofuranu. Naše práce je zaměřena především na molekuly  $Cp_2TiX_2$  a  $Cp^*_2TiX_2$ , kde  $Cp^* = \eta^5-C_5Me_5$  a  $X = Cl, F$ . Veškeré elektrochemické experimenty byly provedeny v nevodném prostředí na Hg, Pt a na elektrodě ze skelného uhlíku. Různé materiály pracovní elektrody byly použity pro zjištění, zda materiál elektrody ovlivňuje redox vlastnosti. Sledována byla jak redukce, tak i oxidace.

Tato práce vznikla díky projektu Otevřená věda AV ČR, grantu GAČR 17-05838S a institucionální podpoře RVO 61388955.

## LITERATURA

1. Carter S. K., Goldsmith M.: *The development and clinical testing of new anticancer drugs at the National Cancer Institute-Example: cis-Platinum (II) Diammine dichloride (NSC 119875)*. In *Platinum Coordinated Complexes in Cancer Chemotherapy*, Springer-Verlag, New York 1974.
2. Köpf H., Köpf-Maier P.: *Angewandte Chemie-International edition in English* 18, 477 (1979).
3. Kröger N., Kleeborg U. R., Mross K., Edler L., Saß G., Hossfeld D. K.: *Onkologie* 23, 60 (2000).
4. Langmaier J., Samec Z., Varga V., Horáček M., Mach K.: *J. Organometallic Chemistry* 579, 348 (1999).

## 4P-14

DIFFERENCES OF REDOX BEHAVIOUR  
OF AMINOFERROCENE IN BUFFERED  
AND UNBUFFERED AQUEOUS SOLUTIONSJAKUB VĚŽNÍK<sup>a</sup>, MARTIN KONHEFR<sup>a</sup>, LIBUŠE  
TRNKOVÁ<sup>a</sup>, KAREL LACINA<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Faculty of Science and <sup>b</sup> CEITEC MU, Masaryk university,  
Kamenice 5, 62 500 Brno, Česká republika  
408991@mail.muni.cz

Aminoferrocene is mostly used for synthesis of various electroactive derivatives. We have noticed unexpected behaviour when measuring its redox potential in aqueous solutions of different pH values using cyclic voltammetry (CV).

In buffered solutions, aminoferrocene exhibits single pair of oxidation and reduction peaks, with peak potentials varying linearly across a broad pH range (2–6.5) (Fig. 1A). On the contrary, two pairs of peaks are distinct in unbuffered solutions, if the pH is close to the pKa of aminoferrocene (Fig. 1B).

Similar disparity of behaviour between buffered and unbuffered solutions was observed with flavins<sup>1</sup>, but the proposed mechanism (depletion of protons close to the electrode during CV), does not seem to be applicable in the case of aminoferrocene. We assume that the observed change in the redox behaviour is caused by different tendency of the studied media to disrupt the mesomeric effect of the amino group on the cyclopentadienyl ring. These and other processes will be further addressed in our contribution.

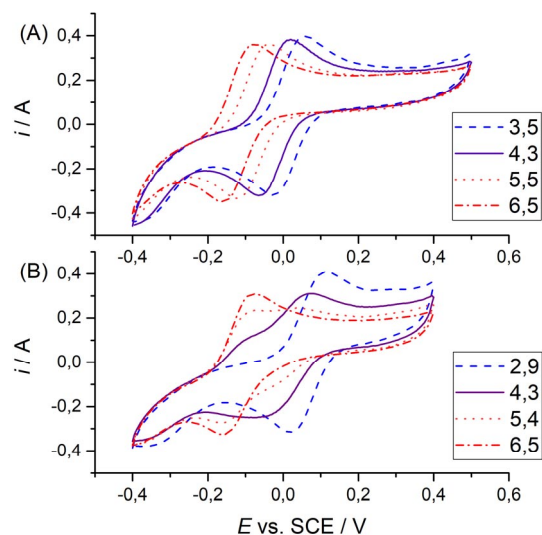


Fig. 1. Cyclic voltammograms of 1mM aminoferrocene in buffered (top) and unbuffered (bottom) solutions at various pH values

## REFERENCE

1. Tan S. L. J., Kan J. M., Webster R. D.: *J. Phys. Chem. B* 117, 13755 (2013).

**4P-15****EXPERIMENTAL CHARGE-DENSITY STUDIES OF BIS (2-METHOXYETHYL)-4,8-DIBROMO-3,7-DICHLOROBENZO [1,2-B: 4,5-B ' ] DITHIOPHEN-2,6-DICARBOXYLATE****JÚLIA KOŽIŠKOVÁ<sup>a</sup>, BRANISLAV PAVILEK<sup>b</sup>, DANIEL VÉGH<sup>b</sup>, JOZEF KOŽIŠEK<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, Bratislava, SK-812 37*, <sup>b</sup> *Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, Bratislava, SK-812 37, Slovakia*  
julia.koziskova@stuba.sk

The newly prepared halogen-substituted benzo[b]-dithiophene can find use as planar and soluble building-blocks for constructing benzodithiophene-based extended p-systems as monomer unit in organic semiconducting polymers. The reason why these compounds are attractive is their characteristic properties such as stable oxidation states, unique electronic, optical, and redox properties, excellent charge transport properties which make them one of the most crucial assets for application in materials science. They have applications in organic light-emitting diodes (OLED), organic field effect transistors (OFET), (dye-sensitized) solar cells, and electrochromic devices (ECDs)<sup>1-3</sup>.

Data collection was performed on a Stoe STADIVARI diffractometer with a Dectris Pilatus 300K detector and with an Incoatec I $\mu$ S Ag microfocuss source (Ag-K $\alpha$ ,  $\lambda = 0.56083$  Å) at 100 K using a nitrogen gas open-flow cooler Cobra from Oxford Cryosystems. Data reduction was processed using X-Area<sup>4</sup>. For numerical absorption corrections a crystal-shape model with 6 faces was employed. An average redundancy of 8.75 gives R<sub>int</sub> of 7.24 %. A Hirshfeld surface analysis was carried out and two-dimensional (2D) fingerprint plot was generated to visualize the intermolecular interactions and to provide quantitative data for their relative contributions. Experimental electronic structure was studied by multipole refinement performed on F<sup>2</sup> using XD suite of programs. The results of topological analysis of the charge density were discussed. In addition, both electrostatic potentials from XD software and from Hirshfeld surface (obtained from IAM) were compared.

## REFERENCES

1. Krebs F. C.: *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **93**, 394 (2009).
2. Skotheim T. A., Reynolds J.: *Handbook of Conducting Polymers*, 3rd ed., CRC Press: Boca Raton 2007.
3. Hassan Z., Reimann S., Wittler K., Ludwig R., Villinger A., Langer P.: *Adv. Synth. Catal.* **354**, 731 (2012).
4. STOE & Cie GmbH (2016). X-Area 1.76, Software Darmstadt, Germany.

**4P-16****PROBING THE FIRST STEPS OF PHOTOINDUCED FREE RADICAL POLYMERIZATION AT WATER-OIL INTERFACES****DENISA DARVASIOVÁ<sup>a</sup>, ZUZANA BARBIERIKOVÁ<sup>a</sup>, MICHAL ZALIBERA<sup>a</sup>, ANNA EIBEL<sup>b</sup>, MAX SCHMALLEGGER<sup>b</sup>, GEORG GESCHEIDT<sup>b</sup>, DMYTRO NESHCHADIN<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> *Department of Physical Chemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 81237 Bratislava, Slovak Republic*, <sup>b</sup> *Institute of Physical and Theoretical Chemistry, Graz University of Technology, NAWI Graz, Stremayrgasse 9, 8010 Graz, Austria*  
denisa.darvasiova@stuba.sk

Microemulsions are macroscopically isotropic liquid colloids that consist of water, oil (nonpolar organic solvent), surfactant and sometimes co-surfactant. Compared to conventional emulsions, microemulsions are optically translucent and thermodynamically stable. These unique properties of microemulsions determine the range of their applications: from template synthesis of nanoparticles (as nanoreactors/templates) and thermal emulsion polymerization to drug delivery vehicles, cosmetics and heterogeneous catalysis. A number of studies addressing photoinduced free radical polymerization in emulsions and microemulsions are known. However, there is no molecular level mechanistic insight on the initiation mechanism of photopolymerizations in microemulsions yet.

In order to gain such mechanistic and kinetic evidence, we have investigated photopolymerization reactions in microemulsions, utilizing the well-studied and well-understood mono- and bisacylphosphane oxide (2,4,6-trimethylbenzoyl-diphenylphosphane oxide, MAPO) and bis(2,4,6-trimethylbenzoyl)-phenylphosphane oxide, BAPO) photoinitiators. Phosphanyl radicals, produced by  $\alpha$ -photocleavage of exclusively octane-soluble acylphosphane oxides, rapidly react with both water- and octane-soluble monomers in water-in-octane microemulsions. These primary reactions can be conveniently monitored using time-resolved EPR spectroscopy (exploiting the chemically induced dynamic electron polarization, CIDEP) as well as laser-flash photolysis. The presented mechanistic insights open the possibility for the tailored construction of photo-generated copolymers comprising polar and non-polar blocks at the same time<sup>1</sup>.

*This contribution was supported by the Science and Technology Assistance Agency under the contract Nos. APVV-15-0053 and by the Slovak Grant Agency VEGA (1/0416/17, 1/0466/18). D.D. would like to thank for financial contribution from the STU Grant scheme for Support of Young Researchers. The authors are grateful for the support of the Aktion Österreich-Slowakei (Project 2016-05-15-003).*

## REFERENCE

1. Darvasiová D., Barbieriková Z., Zalibera M., Eibel A., Schmallegger M., Gescheidt G., Neshchadin D.: *Polym. Chem.* **8**, 6943 (2017).



## 4P-17

**BIFUNCTIONAL COPPER(II) COMPLEXES WITH NON-STEROIDAL ANTI-INFLAMMATORY DRUGS AND INTERCALATING LIGANDS AS PROSPECTIVE ANTICANCER DRUGS****MIRIAMA ŠIMUNKOVÁ<sup>a</sup>, MARIÁN VALKO<sup>a</sup>, JÁN MONCOE<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Department of Physical Chemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 81237 Bratislava, <sup>b</sup> Department of Inorganic Chemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 81237 Bratislava, Slovak Republic  
miriama.simunkova@stuba.sk

Much of the current knowledge about the roles of superoxide anions ( $O_2^{\cdot-}$ ) in diseases has been gathered using native human superoxide dismutase (SOD) enzymes. Although the native enzymes have shown promising anti-inflammatory effect there were drawbacks and issues associated with their use as pharmacological tools. On the basis that removing superoxide anion radicals modulate the process of inflammation, the concept of designing synthetic, low-molecular-mass mimetics of SOD enzymes that could overcome some limitations of native enzyme has been pursued.

Based on these concepts we prepared and characterized bifunctional copper(II) complexes with intercalating and antioxidant functionalities. Three copper(II) complexes were prepared with phenanthroline as intercalating ligand and non-steroidal anti-inflammatory drugs, namely tolfenamic, mefenamic and flufenamic acids:  $[Cu(\text{toif-O},O')_2(\text{phen})]$  (**1**),  $[Cu(\text{mef-O},O')_2(\text{phen})]$  (**2**) and  $[Cu(\text{fluf-O},O')_2(\text{phen})]$  (**3**). Since the biological activity is tightly linked with electronic properties, our attention has been devoted to the X-ray analysis and solid state/solution EPR study. The X-ray crystallography of three prepared complexes showed monomeric structures with distorted octahedral arrangement around copper(II) ion lying on a 2-fold axis and they crystallize in monoclinic space group  $C2/c$ . The EPR spectra were measured both in solid state and frozen DMSO solutions. The results of EPR are in good agreement with the conclusions derived from X-ray study. This points to a very mild effect of solvent on molecular geometry of Cu-(II) complexes. Additionally, based on the results of Nitroblue tetrazolium (NBT) SOD activity test all three copper(II) complexes are excellent SOD-mimetics since they inhibit NBT reduction.

*This contribution was supported by the Science and Technology Assistance Agency under the contract Nos. APVV 15-0079 and by the Slovak Grant Agency VEGA 1/0686/17.*

## REFERENCES

1. Tarushi A., et al.: *J. Inorg. Biochem.* 149, 68 (2015).
2. Poprac P., et al.: *Trends Pharmacol. Sci.* 38, 592 (2017).
3. Valko M., et al.: *Curr. Med. Chem.* 12, 1161 (2005).

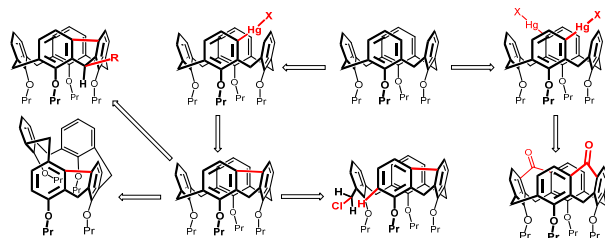
## 5L-01

**meta-MERCURATION AS A DIRECT WAY TO UNUSUAL DERIVATIVES OF CALIX[4]ARENES**

PETR SLAVÍK, PAVEL LHOTÁK

Department of Organic Chemistry, University of Chemistry and Technology Prague, Technická 5, 166 28 Prague 6, Czech Republic  
lhotakp@vscht.cz

Electrophilic aromatic substitution of calixarenes is well-known procedure for derivatization of the *para*-positions of macrocyclic skeleton. Recently, we reported<sup>1</sup> an unprecedented regioselectivity of direct mercuration (reaction with Hg(TFA)<sub>2</sub>) leading to the *meta*-substituted organomercury intermediates. This reaction represents a unique way for derivatization of calix[4]arenes in the *meta* position as documented by *meta*-arylation<sup>2</sup> or by the formation of *meta*-bridged calixarenes<sup>3</sup>.



*meta*-Substituted calixarenes are attractive building blocks for construction of inherently chiral receptors<sup>4</sup>. Moreover, very unusual dynamic behaviour in solution was revealed using RDC measurements<sup>5</sup>. The rigid, highly distorted calix[4]arenes bearing single bond bridge possess significantly different chemical behaviour<sup>6</sup>, demonstrated by their easy cleavage or the rearrangement of basic calixarene skeleton.

This work was supported by Czech Science Foundation (reg. No. 16-13869S).

## REFERENCES

1. (a) Slavík P., Dudič M., Flídrová K., Sýkora J., Cisařová I., Böhm S., Lhoták P.: *Org. Lett.* **14**, 3628 (2012). (b) Flídrová K., Böhm S., Dvořáková H., Eigner V., Lhoták P.: *Org. Lett.* **16**, 138 (2014).
2. Slavík P., Flídrová K., Dvořáková H., Eigner V., Lhoták P.: *Org. Biomol. Chem.* **11**, 5528 (2013).
3. (a) Flídrová K., Slavík P., Eigner V., Dvořáková H., Lhoták P.: *Chem. Commun.* **49**, 6749 (2013). (b) Slavík P., Kohout M., Böhm S., Eigner V., Lhoták P.: *Chem. Commun.* **52**, 2366 (2016). (c) Slavík P., Eigner V., Lhoták P.: *Org. Lett.* **17**, 2788 (2015).
4. Tlustý M., Slavík P., Kohout M., Eigner V., Lhoták P.: *Org. Lett.* **19**, 2933 (2017).
5. Vrzal L., Flídrová K., Tobrman T., Dvořáková H., Lhoták P.: *Chem. Commun.* **50**, 7590 (2014).
6. Slavík P., Dvořáková H., Eigner V., Lhoták P.: *Chem. Commun.* **50**, 10112 (2014).

## 5L-02

**PSEUDOROTAXANES AS CARRIERS FOR RUTHENIUM PRODRUGS**MARTIN SOJKA<sup>a,b</sup>, MONIKA KRATOCHVÍLOVÁ<sup>b,c</sup>, MAREK NEČAS<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Department of Chemistry, Faculty of Science, <sup>b</sup> CEITEC – Central European Institute of Technology, <sup>c</sup> Department of Pathological Physiology, Faculty of Medicine, Masaryk University, Kamenice 753/5, 625 00 Brno, Czech Republic  
martin.sojka@mail.muni.cz

Along with the Pt based metallodrugs, non-platinum complexes are also of interest, with Ru based systems being the most studied because of the promising clinical results of NAMI-A complex.

Recent report highlights the importance of dinuclear Ru complexes for the specific mode of apoptosis induction<sup>1,2,3</sup>. Cucurbituril inclusion complexes of biologically active platinum<sup>4,5</sup> and ruthenium<sup>6,7</sup> complexes are studied in order to evaluate the enhanced pharmacological effect caused by encapsulation of the drug. The abovementioned suggests that the combination of dinuclear Ru prodrugs with supramolecular carriers could be beneficial and is worth to be examined.

We prepared and fully characterized a series of dinuclear Ru complexes bonded to pseudorotaxane carriers. Human breast cell lines HBL-100, MCF-7, and MDA-MB-231 were exposed to the free pseudorotaxane ligands and the assembled Ru(II) complexes at concentrations ranging between 0 and 1500 μM for 24 h. Based on relatively high IC<sub>50</sub> values, the effect of the free ligands on cell viability is unimportant. The assembled Ru rotaxanes, however, exhibit the IC<sub>50</sub> values of 30 % lower or the same as the parent compound, while retaining the same or better activity in migration inhibition assay (e.g. Fig. 1). This suggests that combining Ru with the pseudorotaxane carrier provides a synergistic biological effect.

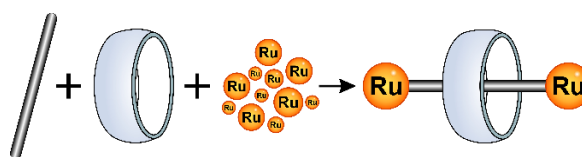


Fig. 1. Schematic representation of synthetic approach for Ru molecular rotaxane

Dinuclear Ru(II) complexes with pseudorotaxane ligands were synthesized and characterized by X-ray, NMR, EA, and IR analyses. We report here biological activities of these supramolecular assemblies with regard to the results of their effect on the cell viability and migration inhibition.

## REFERENCES

1. Davey G. E., et al.: *Nat. Commun.* **8**, 1575 (2017).
2. Jeon Y. J., et al.: *Org. Biomol. Chem.* **3**, 2122 (2005).
3. Wheate N. J. J.: *Inorg. Biochem.* **102**, 2060 (2008).
4. Hettiarachchi G., et al.: *Angew. Chem. Int. Ed.* **52**, 1203 (2013).

- Liet F., et al.: *Org. Biomol. Chem.* 15, 4172 (2017).
- Li A.: *Org. Biomol. Chem.* 15, 4172 (2017).
- Chyba J., et al.: *Inorg. Chem.*, v tisku.

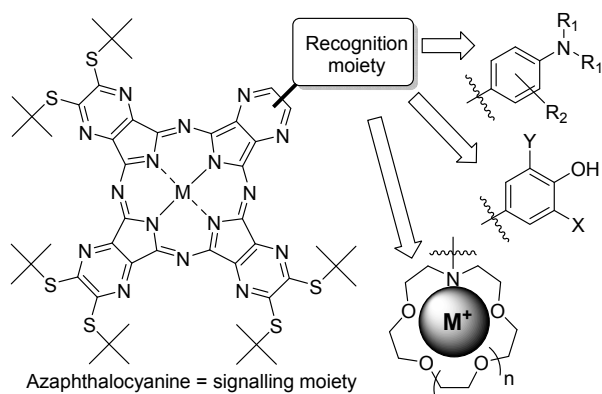
**5L-03****AZAPHTHALOCYANINES AS FLUORESCENT SENSORS FOR pH AND CATIONS**

**PETR ZIMČÍK, VERONIKA NOVÁKOVÁ, LUKÁŠ LOCHMAN, ANTONÍN CIDLINA**

Charles University, Faculty of Pharmacy in Hradec Králové,  
Ak. Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové  
zimcik@faf.cuni.cz

Azaphthalocyanines (AzaPcs) are macrocyclic dyes with strong absorption in the red part of the visible spectrum. Their fluorescence may be switched off by introduction of a donor (e.g. amine or phenolate) to the periphery of the macrocycle. If the donor is a part of recognition moiety, the compound can react on the stimuli from the environment and be switched on upon recognition of an analyte.

In our group, we have focused on the development of the sensors for pH<sup>1</sup> and for metal cations<sup>2,3</sup>, primarily the alkali metals whose blood levels are interesting from the medicinal point of view. The AzaPc core was decorated by suitable bulky substituents that may limit possible aggregation of planar macrocycles (aggregation may switch off the fluorescence non-specifically). Recognition moiety for pH sensors was selected from substituted anilines or phenols where the *pK<sub>a</sub>* of the donor was modulated by suitable substituents on the benzene ring. Introduction of the second switch, that was independent on the donor moiety, enabled also development of pH sensor sensitive to a narrow pH<sup>1</sup>. When the donor is a part of aza-crown, the compound may recognize alkali metal cations<sup>3</sup>. In this case, our effort was aimed on the modification of recognition moiety to receive compounds with high brightness and selectivity to specific cations with no or limited cross-sensitivity.

**REFERENCES**

- Cidlina A., Miletin M., Fathi-Rasekh M., Nemykin V., Zimcik P., Novakova V.: *Chem. – Eur. J.* 23, 1795 (2017).

- Lochman L., Svec J., Roh J., Kiracki K., Lang K., Zimcik P., Novakova V.: *Chem. – Eur. J.* 22, 2417 (2016).
- Novakova V., Lochman L., Zajícová I., Kopecky K., Miletin M., Lang K., Kiracki K., Zimcik P.: *Chem. – Eur. J.* 19, 5025 (2013).

**5L-04****THERMODYNAMIC AND KINETIC STUDY OF Cu(II) COMPLEXES WITH NOTA, DOTA AND TETA MACROCYCLIC LIGANDS**

**PŘEMYSL LUBAL<sup>a</sup>, JAKUB VANĚK<sup>a</sup>, ROMANA ŠEVČÍKOVÁ<sup>a</sup>, PETR HERMANN<sup>b</sup>, VOJTĚCH KUBÍČEK<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>Department of Chemistry&CEITEC, Masaryk University, Kamenice 5, 625 00 Brno, <sup>b</sup>Department of Inorganic chemistry, Charles University, Hlavova 2030, 128 40 Praha  
lupal@chemi.muni.cz

Copper(II) complexes of tetraazamacrocyclic ligands exhibit both high thermodynamic stability as well as considerable kinetic inertness and, therefore, they can be utilized in theranostics (<sup>64</sup>Cu with half-life 12.8 h for positron emission tomography – PET, <sup>67</sup>Cu with half-life 62 h for radio-immunotherapy). Ligands for copper(II) complexation are commonly used as bifunctional chelates (BFC's) having another reactive functional group used for covalent attachment of the ligand to a targeting vector (e.g. oligopeptides, antibodies, etc.) mostly *via* a linker while properties of BFC's and their complexes should be the same or better than those of the parent ligands<sup>1</sup>.

This contribution is devoted to study of formation and dissociation kinetics of Cu(II) complexes with macrocyclic ligands having [9]aneN<sub>3</sub> (*tacn*), [12]aneN<sub>4</sub> (*cyclen*) a [14]aneN<sub>4</sub> (*cyclam*) skeletons and three or four acetate pendant arms (H<sub>3</sub>nota, H<sub>4</sub>dota, H<sub>4</sub>teta, respectively). The impact of cavity size of the parent macrocyclic ligands as well as the presence of acetate pendant arms on kinetic properties of metal complexes will be discussed and correlated with thermodynamic properties<sup>2-4</sup>. These results can be employed to optimize the structural design of new BFC's for possible *in vivo* applications.

Financial support from Masaryk University (MUNI/1286/2017) and Ministry of Education of the Czech Republic (CEITEC 2020 – LQ 1601) is acknowledged.

**REFERENCES**

- David T., Kubiček V., Gutten O., Lupal P., Kotek J., Pietzsch H.J., Rulišek L., Hermann P.: *Inorg. Chem.* 54, 11751 (2015).
- Voráčková I., Vaněk J., Pasulka J., Střelcová Z., Lupal P., Hermann P.: *Polyhedron* 61, 99 (2013).
- Ševčík R., Vaněk J., Michalíková R., Lupal P., Hermann P., Santos I. C., Santos I., Campello M. P. C.: *Dalton Trans.* 45, 12723 (2016).
- Kubiček V., Böhmová Z., Ševčíková R., Vaněk J., Lupal P., Poláková Z., Michalíková R., Kotek J., Hermann P.: *Inorg. Chem.* 57, 3061 (2018).

## 5L-05

SUPRAMOLECULAR COMPLEXES  
OF BAMBUSURILS WITH SULFIDE  
AND HYDROSULFIDE ANIONS

JULIÁN VÁZQUEZ, VLADIMÍR ŠINDELÁŘ\*

Department of Chemistry and RECETOX, Masaryk University, Kamenice 5, 625 00 Brno, Czech Republic  
sindelar@chemi.muni.cz

Hydrogen sulfide ( $\text{H}_2\text{S}$ ) has become an important target for research due to its physiological properties and potential applications in medicine<sup>1–3</sup>. Many synthetic molecules have been reported as exogenous  $\text{H}_2\text{S}$  sources, which rely on chemical reactions for the delivery of the  $\text{H}_2\text{S}$ <sup>4–6</sup>. Bambusurils (**BU**) are a family of host macrocycles that bind inorganic and organic anions with high affinity and selectivity in both organic and aqueous media<sup>7–9</sup>. In this work, supramolecular binding of sulfide ( $\text{S}^{2-}$ ) and hydrosulfide ( $\text{HS}^-$ ) anions by a synthetic receptor in water have been studied for the first time. Bambusuril macrocycles (**BU**) were used to stabilize these anions in its cavity following by their release into water<sup>10</sup>.

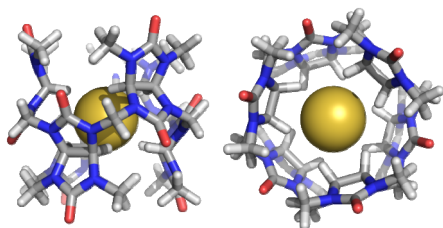


Fig. 1. Energy-optimized geometry of the Bambusuril complex with sulfide anion

This work was supported by the Czech Science Foundation (18-21801S) and by the RECETOX Research Infrastructure (LM2015051 and CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_013/0001761).

## REFERENCES

1. Wang R.: *FASEB J.* 16, 1792 (2002).
2. Yang G., Cao K., Wu L., Wang R.: *J. Biol. Chem.* 279, 49199 (2004).
3. Lee Z. W., Zhou J., Chen C.-S., Zhao Y., Tan C.-H., Li L., Moore P. K., Deng L.-W.: *PLoS one* 6, e21077 (2011).
4. Perrino E., Uliva C., Lanzi C., Soldato P. D., Masini E., Sparatore A.: *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 19, 1639 (2009).
5. Devarie-Baez N. O., Bagdon P. E., Peng B., Zhao Y., Park C.-M., Xian M.: *Org. Lett.* 15, 2786 (2013).
6. Zhao Y., Biggs T. D., Xian M.: *Chem. Commun.* 50, 11788 (2014).
7. Svec J., Necas M., Sindelar V.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 49, 2378 (2010).
8. Yawer M. A., Havel V., Sindelar V.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 54, 276 (2015).
9. Lizal T., Sindelar V.: *Isr. J. Chem.* 58, 326 (2018).
10. Vazquez J., Sindelar V.: *Chem. Commun.* DOI: 10.1039/C8CC00470F (2018).

## 5L-06

RATIONAL DESIGN OF BINDING MOTIFS  
FOR CUCURBIT[*n*]URILS AND CYCLODEXTRINSROBERT VÍCHA<sup>a</sup>, ANDREA ČABLOVÁ<sup>a</sup>, JOSEF  
TOMEČEK<sup>a</sup>, ZDEŇKA PRUCKOVÁ<sup>a</sup>, JAN VÍCHA<sup>b</sup>,  
MICHAL ROUCHAL<sup>a</sup>, LENKA DASTYCHOVÁ<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Department of Chemistry, Faculty of Technology, Vavrečkova 275, <sup>b</sup> Centre of polymer systems, třída Tomáše Bati 5678, Tomas Bata University in Zlín, 760 01 Zlín, Czech Republic  
rvicha@utb.cz

Cyclodextrins (CDs) and cucurbit[*n*]urils (CBns) are two very important families of supramolecular hosts. Nature-occurring cyclodextrins have been continuously studied for more than one hundred years to succeed in many applications. Consequently, broad range of modified cyclodextrins is available. On the other hand, cucurbit[*n*]urils are synthetic macrocycles with recent history no longer than 40 years. Indeed, cucurbit[*n*]urils provide extraordinarily tight host-guest pairs with suitable guests based on cationic derivatives of cage hydrocarbons. Due to geometrical similarity of corresponding homologues along with portals complementarity of CDs and CBns, members of these two families are frequently combined within complex supramolecular systems.

In our group, we recently deal with synthesis of guests consisting of multiple binding sites based on cage hydrocarbons and their binding properties towards CDs and CBns. Accordingly, we are looking for binding motifs with finely tuned affinities. Particularly, we attempted to develop adamantane-based guests with moderate affinity towards CB7 ( $\log K \sim 9–11$ ) and high affinity towards  $\beta$ -CD ( $\log K > 5$ ). We are willing to use such binding motifs for construction of chemical stimuli responsive supramolecular systems.

Considering that adamantane cage firmly sits in the centre of the CB7 cavity and its position is not affected by location of cationic moieties, we decided to tune the affinity towards CB7 by prolongation of the distance between adamantane cage and cationic part of the guest (Fig. 1). Thus, introduction of phenyl linker reduced the contribution of ion-dipole interaction between guest and CB7 portal to provide guests with the  $\log K$  values within the range of 9.8–10.7. The same guests attacked the world record with intriguingly high affinities towards  $\beta$ -CD ( $\log K \leq 6.7$ ). Employing molecular modelling, we revealed that C—H $\cdots$ O interactions between imidazolium core (guest is not shown) and  $\beta$ -CD portal significantly contribute to this outstanding stability. In addition, we unambiguously detected two binding modes of these AdPh-based guests inside the  $\beta$ -CD cavity using <sup>1</sup>H NMR spectroscopy at 258 K in brine.

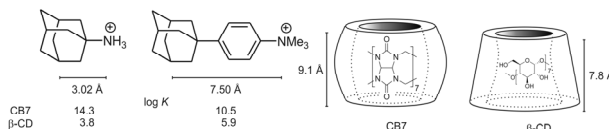


Fig. 1. Effect of phenyl linker on the complex stabilities

This work was supported by project IGA/FT/2018/001.

## 5L-07

**TRANSPORT OF NUCLEOSIDE TRIPHOSPHATES INTO CELLS BY ARTIFICIAL MOLECULAR TRANSPORTERS****ZBIGNIEW ZAWADA, AMENEH TATAR, PAVLE MOCILAC, MILOŠ BUDĚŠÍNSKÝ, TOMÁŠ KRAUS\****Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Czech Academy of Sciences, Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6, Czech Republic  
kraus@uochb.cas.cz*

Chemically modified analogues of nucleoside triphosphates (NTPs) are important unnatural metabolites widely used in chemical biology and medicinal chemistry. Because NTPs do not permeate the plasma membrane, their corresponding nucleosides capable of penetrating cell membranes are usually applied onto cell cultures. In order to be active metabolites recognized by DNA (RNA) polymerases, nucleosides must undergo a triple phosphorylation – an enzymatically catalyzed process in which a number of compounds fail. As yet, no versatile method for direct transport of metabolically active NTPs to living cells is available.

Here we present a highly modular design, preparation and properties of medium-sized organic molecules that are able to efficiently transport NTPs to viable eukaryotic cells<sup>1</sup>. The transporters are composed of receptor sites, capable of formation of stable complexes with NTPs, and cell penetrating units. These well-defined single molecules, termed synthetic nucleoside triphosphate transporters, bind NTPs by non-covalent interactions and rapidly translocate them across cell membrane into intracellular space, nuclei and nucleoli in particular. There, modified NTPs are liberated from the complex – presumably due to competitive displacement by natural NTPs such as ATP (Fig. 1) – and become available as active metabolites. Consequently, unnatural NTPs, modified with fluorescent labels were observed to incorporate into genomic DNA.

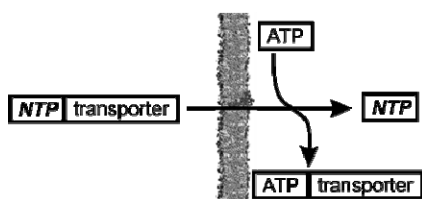


Fig. 1. Proposed mechanism of transport of NTPs across cell membrane

*This work was supported by Grant Agency of the Czech Republic (No. 17-14791S).*

## REFERENCE

- Zawada Z., Tatar A., Mocilac P., Buděšínský M., Kraus T.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 10.1002/anie.201801306.

## 5L-08

**HOST-GUEST COMPLEXES OF POTENTIAL PLATINUM(IV) AND RUTHENIUM(III) METALLODRUGS WITH MACROCYCLIC CARRIERS****JAN CHYBA, MICHAL KNOR, PETRA MUNZAROVÁ, JAN NOVOTNÝ, RADEK MAREK***Central European Institute of Technology Masaryk University, Kamenice 5, 625 00 Brno, Czech Republic  
jan.chyba@ceitec.muni.cz*

In the last decades there has been enormous research interest in the field of Pt and Ru based coordination compounds as metallodrugs for anticancer treatment arising from antineoplastic activity of platinum (cis-, carbo-, and oxaliplatin) and ruthenium (NAMI-A and KP1019) complexes<sup>1</sup>. However, therapeutic use of platinum and ruthenium coordination compounds has certain limitations. Clinical applications of platinum(II) drugs are accompanied by undesirable effects (e.g., nephrotoxicity, nausea, hair loss, anemia) and ruthenium(III) compound (NAMI-A) did not show convincing efficacy in clinical trials<sup>2</sup>. The use of kinetically more inert Pt(IV) complexes, which can release a biologically active Pt(II) form after entering a cancer tissue, and coupling of metallodrugs with biocompatible macrocyclic carriers could help to overcome these drawbacks. Our research is focused on the supramolecular inclusion complexes of potential platinum(IV) and ruthenium(III) metallodrugs encapsulated in a biocompatible macrocyclic cavitation of cyclodextrin or cucurbituril families via the auxiliary organic groups<sup>3</sup>. The auxiliary fragments were installed in axial positions of Pt(II) cytosatics or introduced by suitable modification of heterocyclic ligands coordinated to Ru(III) center at NAMI-A like compounds. In the next step encapsulation of prepared Pt(IV) and Ru(III) coordination compounds with  $\beta$ -cyclodextrin and cucurbit[7]uril macrocyclic carriers was investigated. The molecular and supramolecular forms of platinum(IV) and ruthenium(III) coordination compounds were characterized by multinuclear NMR spectroscopy, X-ray diffraction analysis, and ESI-MS spectrometry. The binding affinity of Pt(IV) and Ru(III) coordination compounds to macrocyclic carriers was evaluated by ITC measurement. The results of supramolecular binding studies will be presented and discussed.

*Financial support by the Czech Science Foundation (16-05961S and 18-05421S) is gratefully acknowledged.*

## REFERENCES

- Bergamo A., Sava G.: *Chem. Soc. Rev.* 44, 8818 (2015).
- Leijen S., Burgers S. A., Baas P., Pluim D., Tibben M., van Werkhoven E., Alessio E., Sava G., Beijnen J. H., Schellens J. H. M.: *Invest. New Drugs* 33, 201 (2015).
- Chyba J., Novák M., Munzarová P., Novotný J., Marek R.: *Inorg. Chem.* (2018).

**5L-09****THE THERMODYNAMIC AND KINETIC STUDY OF Pb(II) COMPLEXES WITH TETRAAZAMACROCYCLIC LIGANDS****VIKTORIE REICHOVÁ<sup>a\*</sup>, PŘEMYSL LUBAL<sup>a</sup>, PETR HERMANN<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Department of Chemistry & CEITEC, Masaryk University, Kamenice 5, CZ-62500 Brno, <sup>b</sup> Department of Inorganic Chemistry, Charles University, Hlavova 2030, 128 40 Praha, Czech Republic  
239146@mail.muni.cz

Lead radioisotopes (<sup>203/212</sup>Pb) have the potential to be utilized in nuclear medicine and therefore, their complexes should exhibit a high thermodynamic stability and a kinetic inertness under physiological conditions<sup>1</sup>. Thus, it is necessary to know the thermodynamic and kinetic properties (dissociation/formation rate constants) of the Pb(II) complexes in order to design macrocyclic bifunctional ligands for possible *in vivo* applications. Here, the thermodynamic and kinetic properties of Pb(II) complexes with cyclen-based macrocyclic ligands having two (*trans*-H<sub>2</sub>do2a), three (H<sub>3</sub>do3a) or four (H<sub>4</sub>dota) acetic pendant arms, and H<sub>4</sub>dota monophosphonic (H<sub>5</sub>do3ap) or -phosphinic (H<sub>5</sub>do3ap<sup>PrA</sup>, H<sub>4</sub>do3ap<sup>ABn</sup>) acid derivatives were studied. The thermodynamic stability of the Pb(II) complexes follows the order H<sub>4</sub>dota ~ H<sub>4</sub>do3ap<sup>ABn</sup> ~ H<sub>5</sub>do3ap<sup>PrA</sup> < H<sub>5</sub>do3ap. Formation kinetics studies showed that lead(II) complexation is not significantly influenced by the type of pendant arms attached to the DO3A skeleton. In addition, the kinetic inertness of the Pb(II) complexes in an acidic medium is reasonably high, as the introduction of phosphorus acid pendant arms does not have a significant impact on the kinetic properties of the Pb(II) complexes. The results will be compared with thermodynamic and kinetic constants obtained for Pb(II) and Cu(II) complexes with other tetraazamacrocyclic ligands<sup>2–4</sup>.

Financial support from Masaryk University (MUNI/1286/2017) and Ministry of Education of the Czech Republic (CEITEC 2020 – LQ 1601) is acknowledged.

## REFERENCES

- Pipin C. G., McMurry T. J., Brechbiel M. W., McDonald M., Lambrecht R., Milenic D., Roselli M., Colcher D., Gansow O. A.: *Inorg. Chim. Acta* 239, 43 (1995).
- Voračová I., Vaněk J., Pasulka J., Střelcová Z., Lubal P., Hermann P.: *Polyhedron* 61, 99 (2013).
- Ševčík R., Vaněk J., Lubal P., Kotková Z., Kotek J., Hermann P.: *Polyhedron* 67, 449 (2014).
- Ševčík R., Vaněk J., Michalicová R., Lubal P., Hermann P., Santos I. C., Santos I., Campello M. P. C.: *Dalton Trans.* 45, 12723 (2016).

**5L-10****SYNTHESES AND APPLICATIONS OF REGIOSELECTIVELY SUBSTITUTED CYCLODEXTRIN DERIVATIVES****JINDŘICH JINDŘICH**

Charles University, Faculty of Science, Department of Organic Chemistry, Hlavova 8, 128 43 Praha 2, Czech Republic  
jindrich@natur.cuni.cz

Results of our activities in the area of synthesis of regioselectively substituted cyclodextrin (CD) derivatives and their applications in separation science and supramolecular chemistry will be presented.

In the first part, methods for preparation of all possible regioselectively monoalkylated derivatives of all common CDs –  $\alpha$ -CD<sup>1</sup>,  $\beta$ -CD<sup>2</sup>, and  $\gamma$ -CD<sup>3</sup> – will be reviewed. These compounds were then converted to the corresponding monocarboxymethyl derivatives and studied as pseudophases in chiral capillary electrophoresis<sup>4–7</sup>.

Aggregation behavior of monocinammyl<sup>8</sup> and mononaphthylallyl<sup>9</sup> cyclodextrin derivatives, also prepared by the above methods, were studied and the substantial differences among the regioisomers documented.

In the last part, synthesis and properties of the monosubstituted CD derivatives bearing a multiply positively charged substituent will be described<sup>10–12</sup>.

## REFERENCES

- Řezanka M., Jindřich J.: *Carbohydr. Res.* 346, 2374 (2011).
- Jindřich J., Tislerova I.: *J. Org. Chem.* 70, 9054 (2005).
- Bláhová M., Bednářová E., Řezanka M., Jindřich J.: *J. Org. Chem.* 78, 697 (2013).
- Řezanka M., Řezanka P., Sýkora D., Jindřich J., Král, V.: *J. Sep. Sci.* 35, 811 (2012).
- Navrátilová K., Řezanka P., Řezanka M., Sýkora D., Jindřich J., Král V.: *J. Sep. Sci.* 36, 1270 (2013).
- Řezanka P., Rokosová L., Řezanková K., Bláhová M., Řezanka M., Sýkora D., Jindřich J., Král V.: *J. Sep. Sci.* 37, 2779 (2014).
- Řezanka P., Řezanková K., Sedláčková H., Mašek J., Rokosová L., Bláhová M., Řezanka M., Jindřich J., Sýkora D., Král, V.: *J. Sep. Science* 39, 980 (2016).
- Benkovic G., Hodek O., Havlikova M., Bosakova Z., Coufal P., Malanga M., Fenyvesi E., Darcsi A., Beni S., Jindrich J.: *Beilstein J. Org. Chem.* 12, 97 (2016).
- Bláhová M., Filippov S. K., Kováček L., Horský J., Hybelbauerová S., Syrová Z., Křížek T., Jindřich, J.: *Beilstein J. Org. Chem.* 13, 2509 (2017).
- Popr M., Hybelbauerová S., Jindřich J.: *Beilstein J. Org. Chem.* 10, 1390 (2014).
- Popr M., Filippov S. K., Matushkin N., Dian J., Jindřich J.: *Beilstein J. Org. Chem.* 11, 192 (2015).
- Kučerová G., Kalíková K., Procházková H., Popr M., Jindřich J., Coufal P., Tesařová E.: *Chromatographia* 79, 529 (2016).



## 5L-11

## TRITOPIC CUBANE-BASED GUEST

**KRISTÝNA JELÍNKOVÁ, ZDEŇKA PRUCKOVÁ,  
MICHAL ROUCHAL, ROBERT VÍCHA**

*Department of Chemistry, Faculty of Technology, Tomas Bata University in Zlín, Vavrečkova 275, 760 01 Zlín, Czech Republic  
rvicha@utb.cz*

Cubane is a synthetic Platonic hydrocarbon. Although this molecule has very high angle strain, it is surprisingly stable due to a lack of reasonable decomposition pathway.

It is well known that cage compounds form highly stable inclusion complexes with host molecules, especially with cucurbit[*n*]urils (CB*n*). Stability of complexes is strongly influenced by size of the ligand, location of cationic moieties and number of hydrogen bonds<sup>1</sup>. Particularly, the cationic guests based on ferrocene<sup>2</sup>, adamantane<sup>3</sup> and diamantane<sup>4</sup> achieve ultra-high binding constants ( $10^{12-17} \text{ M}^{-1}$ ) toward CB7.

In our previous work, synthesis and supramolecular properties of the first cubane-based dicationic guest has been published. The association constants with CB7 and CB8 were determined to be in order of  $10^{11} \text{ M}^{-1}$  and  $10^9 \text{ M}^{-1}$ , respectively<sup>5</sup>.

Having these positive results, we were intrigued by cubane-based guests binding behaviour and decided to prepare multitopic guest **I** with central cubane and two terminal adamantyl binding sites (Fig. 1).

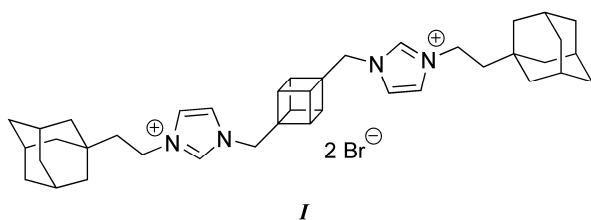


Fig. 1. Chemical structure of tritopic cubane-based guest

We started our investigation of supramolecular behaviour of **I** with CB7,  $\beta$ -cyclodextrin, and  $\gamma$ -cyclodextrin using <sup>1</sup>H NMR spectroscopy, ESI-MS and ITC. The results suggest that **I** forms 2:1 complexes in inclusion manner with adamantanes immersed inside the host cavities. In contrast to behaviour of similar ligands with biphenyl or adamantane-1,3-diyl centres, guest **I** does not form quaternary complex with  $\beta$ -CD confined in central cubane by two CB7 at terminal adamantanes.

*This work was supported by project IGA/FT/2018/001.*

## REFERENCES

1. Assaf K. I., Nau M. W.: Chem. Soc. Rev. 44, 394 (2015).
2. Rekharsky M. V., Mori T., Yang C., Ko H. K., Selvapalam N., Kim H., Sobransingh D., Kaifer A. E., Liu S., Isaacs L., Chen W., Moghaddam S., Gilson M. K., Kim K., Inoue Y.: Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 104, 20737 (2007).
3. Moghaddam S., Yang C., Rekharsky M., Ko Y. H., Kim

K., Inoue Y., Gilson M. K.: J. Am. Chem. Soc. 133, 3570 (2011).

4. Cao L., Šekutor M., Zavalij P. Y., Mlinarić-Majerski K., Glaser R., Isaacs L.: Angew. Chem., Int. Ed. 53, 988 (2014).
5. Jelínková K., Surmová H., Matelová A., Rouchal M., Prucková Z., Dastychová L., Nečas M., Vícha R.: Org. Lett. 19, 2698 (2017).

## 5L-12

## BILE ACIDS – NATURAL BUILDING BLOCKS FOR COORDINATION SELF-ASSEMBLIES

**ONDŘEJ JURČEK<sup>a</sup>, NONAPPA<sup>b</sup>, PIA JURČEK<sup>c</sup>, KARI RISSANEN<sup>d</sup>, RADEK MAREK<sup>a,c</sup>**

*<sup>a</sup> CEITEC – Central European Institute of Technology, Masaryk University, Kamenice 5/A4, 625 00 Brno, Czech Republic, <sup>b</sup> Department of Applied Physics, Aalto University, P.O. Box 15100, FI-00076 Aalto, Finland, <sup>c</sup> Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5/A4, 625 00 Brno, Czech Republic, <sup>d</sup> Department of Chemistry, University of Jyväskylä, P.O.Box 35, FIN-40014 University of Jyväskylä, Finland  
ondrej.jurcek@ceitec.muni.cz*

Bile acids are natural, relatively rigid, amphiphilic molecules in bile responsible for digestion and transport of lipids and lipid soluble nutrients. Inspired by the nature, we have decided to employ the steroid scaffold in design of ligands for supramolecular coordination self-assemblies. Large, asymmetric, and inherently chiral bispyridyl ligand (L) derived from ursodeoxycholic bile acid was used for coordination to square-planar tetravalent Pd(II). Self-assembly of the building units resulted in the formation of large cationic single-enantiomer of Pd<sub>3</sub>L<sub>6</sub> complex containing record 60 chiral centers in its concave structure (Fig. 1 a)<sup>1</sup>. Following on this discovery, we have prepared a number of ligands derived and studied their coordination with various metal salts. One of the complexes has shown ability to further self-assemble into even larger supramolecular structures (Fig. 1 b).

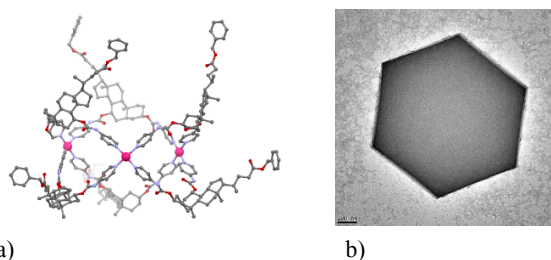


Fig. 1. a) Supramolecular complex Pd<sub>3</sub>L<sub>6</sub>, b) microparticles self-assembled from another Pd<sub>3</sub>L<sub>6</sub> complex

The ultimate goal of this project is to develop biocompatible and porous metal-organic materials for biomedical applications.

*This project has received funding from the European Union's*



*Horizon 2020 research and innovation program under the Marie Skłodowska-Curie and it is co-financed by the South Moravian Region under grant agreement No. 665860. This abstract reflects only the author's view and the EU is not responsible for any use that may be made of the information it contains.*

## REFERENCE

1. Jurček O., Bonakdarzadeh P., Kalenius E., Linnanto J. M., Groessl M., Knochenmuss R., Ihalainen J., Rissanen K.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 54, 15462 (2015).

**5P-01**  
**BIOPOLYMERS MODIFIED WITH**  
**CYCLODEXTRINS FOR SUPRAMOLECULAR**  
**HYDROGELS**

**JELICA KOVAČEVIĆ<sup>a</sup>, VĚRA KAŠPÁRKOVÁ<sup>b</sup>,**  
**ZDENKA PRUCKOVÁ<sup>a</sup>, TOMAŠ POSPÍŠIL<sup>c</sup>, ROBERT**  
**VÍCHA<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Department of Chemistry, <sup>b</sup> Department of Fat, Surfactant and Cosmetics, Faculty of Technology, Tomas Bata University in Zlin, 760 01 Zlin, <sup>c</sup> Department of Experimental Botany, UPOL, Šlechtitelů 783 71 Olomouc, Czech Republic  
 rvicha@ft.utb.cz; jelica.kovacevic1@gmail.com

Recently, hydrogels are extensively studied because of their swollen network structure that is able to encapsulate cells and/or bioactive compounds. Particularly, supramolecular hydrogels are very attractive since they are consisting of host and guest components to enable modulation of gelation by competition with others supramolecular additives. Due to low toxicity and sufficient biocompatibility, polymers like hyaluronic acid (HA) or chitosan are suitable for hydrogel preparation.

As a part of our ongoing research on supramolecular systems based on host or guest molecules with multiple binding sites, we prepared new hyaluronane polymer modified by  $\beta$ -cyclodextrin units (HA-CD, Figure 1). Desired HA-CD was obtained via a click reaction between propargyl-modified HA and monoazido-CD. The degree of modification of 4% was determined from <sup>1</sup>H NMR spectrum. Subsequent NMR and ITC experiments revealed that CD units at HA-CD can form 1:1, 1:2, and 1:3 complexes with single-, two-, and three-site adamantane-based guests, respectively. These results imply that new HA-CD polymer is promising component for construction of chemical stimuli-responsive hydrogels.

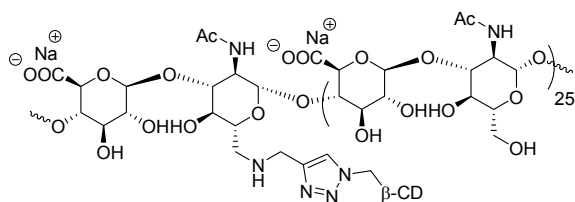


Figure 1. Structure of new  $\beta$ -cyclodextrin-modified hyaluronane

This work was supported by the Internal Funding Agency of the Tomas Bata University in Zlin (IGA/FT/2018/001).

**5P-02**  
**XYLYLENE-GLYCOLURIL MACROCYCLES: NEW**  
**BAMBUSURIL DERIVATIVES**

**TOMÁŠ LÍZAL, VLADIMÍR ŠINDELÁŘ**

Department of Chemistry and RECETOX, Masaryk University, Kamenice 5, 625 00 Brno  
 tomas.lizal@mail.muni.cz

Glycoluril is a urea-based heterocyclic molecule, which is a suitable building block for macrocyclic receptors like cucuribiturils<sup>1</sup> and bambusurils<sup>2</sup>. Bambusurils are potent anion receptors. They were used to detect and quantify anions in a complex mixture by NMR<sup>3</sup>. In order to allow anion sensing by UV-VIS spectroscopy, we designed a new bambusuril derivative incorporating aromatic groups in its structure.

Here we report preparation of xylylene-glycoluril macrocycles. Inspired by work of prof. Shimizu on aromatic-urea macrocycles<sup>4</sup>, we used basic synthetic conditions instead of the acid catalyzed condensation usually used for bambusuril synthesis. It afforded us with macrocycles of various sizes (Figure 1), which were separated by reverse-phase flash chromatography. The conformational behavior of separated isomers of two-membered macrocycles were studied by temperature dependent NMR. The three-membered macrocycle was observed in a gas phase to bind anions.

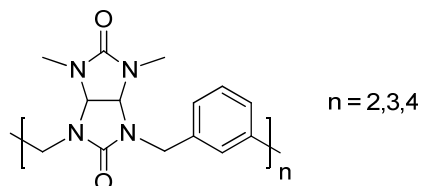


Figure 1. Xylylene-glycoluril macrocycle

This work was supported by Czech Science Foundation (18-21801S), and the RECETOX Research Infrastructure (LM2015051 and CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_013/0001761).

REFERENCES

- Freeman W., Mock W. L., Shih N. Y.: J. Am. Chem. Soc. 103, 7367 (1981).
- Švec J., Nečas M., Šindelář V.: Angew. Chem. Int. Ed. 49, 2378 (2010).
- Havel V., Yawer M. A., Šindelář V.: Chem. Commun. 51, 4666 (2015).
- Roy K., Wang C., Smith M. D., Pellechia P. J., Shimizu L. S.: J. Org. Chem. 75, 5453 (2010).

**5P-03****PSEUDOROTAXANES BASED ON BAMBUS[6]URIL****MARKÉTA KANDRNÁLOVÁ, VLADIMÍR ŠINDELÁŘ**

Department of Chemistry and RECETOX, Masaryk University, Kamenice 5, 625 00 Brno, Czech Republic  
 m.enderesova@mail.muni.cz

Bambus[*n*]urils are new family of macrocyclic anion receptors. They are synthesized by acidic condensation of 2,4-disubstituted glycolurils and formaldehyde leading to macrocyclic structure with alternate orientation of glycoluril units which are connected together by one row of methylene bridges. Methine protons of glycolurils, pointing to the center of cavity, interact with anions and association constants of complexes are remarkably high in both organic and water solutions<sup>1,2</sup>. Only binding of bambusurils with inorganic anions (from halides, through hexafluorophosphate to perchlorate) was described until now. Here we are presenting formation of complexes with organic salts and their properties. We used dodecabenzylbambus[6]uril and studied its binding with anionic rod in chloroform. The rod is bound inside the bambusuril cavity forming type of an inclusion complex known as a pseudorotaxane. We prepared rods with different terminal groups (stoppers) and found that the bambusuril is capable to slip even over aromatic substituents. Dendrons were used as a stopper which is bulky enough to mechanically interlock bambusuril on axle and formation of rotaxane was investigated.

This work was supported by Czech Science Foundation (18-21801S), and the RECETOX Research Infrastructure (LM2015051 and CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_013/0001761).

## REFERENCES

- Havel V., Sindelar V.: ChemPlusChem 80, 1601 (2015).
- Yawer M. A., Havel V., Sindelar V.: Angew. Chem. Int. Ed. 54, 276 (2015).

**5P-04****PREPARATION OF NON-SYMMETRIC BISIMIDAZOLIUM GUESTS FOR CYCLODEXTRINS AND CUCURBIT[*n*]URILS****HEDA SURMOVÁ, MICHAL ROUCHAL, ROBERT VÍCHA\***

Department of Chemistry, Faculty of Technology, Tomas Bata University in Zlín, Vavrečkova 275, 760 01 Zlín, Czech Republic  
 rvicha@utb.cz; hedasurmova@utb.cz

Cucurbit[*n*]urils (CBns) are family of synthetic molecular containers with superior molecular recognition properties. CBs are constructed from glycoluril units to feature a non-polar cavity. Two opposite symmetric portals of CBs are lined with polar carbonyl groups that allow CBs to bind to both polar and nonpolar organic molecules<sup>1</sup>.

Recently, symmetric bisimidazolium salts (BIMs) with

different hindering substituents were prepared in our group<sup>2</sup>. These BIMs were studied in the gas phase using ion-trap MS to revealed that structure of these guests allows or disables free movement of the CB7 unit along the guest axis (Fig. 1).

Non-symmetric BIMs were proposed to enable the different binding modes within one molecule. This phenomenon can lead to interesting behavior in both the gas phase and in the solution. These new guest molecules can bring new insights explaining fragmentation mechanism in the gas phase or they can serve as functional components in complex supramolecular systems.

Considering practicability of the synthesis, 1,4-xylylene was chosen as a suitable central motif and the attention was paid to implementation both imidazole and benzimidazole core within one molecule. Because of non-symmetric nature of desired guests, the key part of the guest was built up from methyl 4-methylbenzoate via successive joining of imidazole and benzimidazole core. Finally, the quarternization with 1-(1-adamantyl)-2-bromoethane was performed.

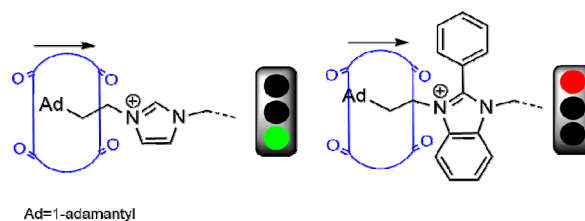


Figure 1. Ability of CB7 to move along the guest axis

This work was supported by grant IGA/FT/2018/001.

## REFERENCES

- Assaf K., Nau W.: Chem. Soc. Rev. 44, 394 (2015).
- Černochová J., Branná P., Rouchal M., Kulhánek P., Kuřitka I., Vícha R.: Chem. Eur. J. 18, 13633 (2012).

**5P-05****FLUORINATED BAMBUSURILS AS HIGHLY EFFECTIVE AND SELECTIVE TRANSMEMBRANE TRANSPORTERS FOR CHLORIDE AND BICARBONATE****HENNIE VALKENIER<sup>a</sup>, OMER AKRAWI<sup>b</sup>, PIA JURČEK<sup>b</sup>, KRISTÍNA SLEZIAKOVÁ<sup>b</sup>, TOMÁŠ LÍZAL<sup>b</sup>, KRISTIN BARTIK<sup>a</sup>, VLADIMÍR ŠINDELÁŘ<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Engineering of Molecular NanoSystems, Ecole polytechnique de Bruxelles, Université libre de Bruxelles (ULB), Avenue F.D. Roosevelt 50, CP165/64, B-1050 Brussels, Belgium, <sup>b</sup> Department of Chemistry and RECETOX, Masaryk University, Kamenice 5, 625 00 Brno, Czech Republic  
 241474@mail.muni.cz

Transmembrane anion transport is an important biological process which is generally performed by membrane proteins. Bicarbonate transporting proteins control the pH in cells and tissues and remove CO<sub>2</sub> from the mitochondria. In

red blood cells chloride and bicarbonate exchange is crucial for respiration<sup>1</sup>. Synthetic molecules<sup>2</sup> have been developed to function as anion transporters<sup>3</sup> for potential biomedical applications. Bambusurils are synthetic macrocycles with high affinity towards anions. Here, we report<sup>4</sup> on three fluorinated bambusurils and their anion ( $\text{Cl}^-/\text{NO}_3^-$  and  $\text{Cl}^-/\text{HCO}_3^-$ ) transport properties across liposome membranes which was monitored by fluorescence spectroscopy. All the bambusurils were shown to exchange  $\text{Cl}^-$  and  $\text{HCO}_3^-$ , and one of them showed exceptionally high rates of  $\text{Cl}^-/\text{HCO}_3^-$  exchange at the bilayer interface. This can be explained by simultaneous binding of  $\text{Cl}^-$  and  $\text{HCO}_3^-$  in some of the bambusurils which was observed by  $^1\text{H}$  NMR titration studies. However, anion transport was much slower for  $\text{Cl}^-/\text{NO}_3^-$  exchange which can be explained by high affinities of the macrocycles for  $\text{NO}_3^-$ , disfavoured decomplexation, and binding selectivity for  $\text{NO}_3^-$  over  $\text{Cl}^-$ .

*This work was supported by the Czech Science Foundation (18-21801S), and the RECETOX Research Infrastructure (LM2015051 and CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_013/0001761).*

#### REFERENCES

1. Cordat E., Casey J. R.: *Biochem. J.* 417, 423 (2009).
2. Valkenier H., Davis A. P.: *Acc. Chem. Res.* 46, 2898 (2013).
3. Davis J. T., Gale P. A., Okunola O. A., Prados P., Iglesias-Sánchez J. C., Torroba T., Quesada R.: *Nat. Chem.* 1, 138 (2009).
4. Valkenier H., Akrawi O., Jurček P., Sleziaková K., Lízal T., Bartík K., Šindelář V.: *manuscript submitted*.

**6L-01****POTENCIÁLOVÁ ODEZVA STRÍBRNÉ AMALGÁMOVÉ ELEKTRODY BĚHEM ČIŠTĚNÍ ELEKTRÁRENSKÝCH A IONEXY UPRAVOVANÝCH VOD****LADISLAV NOVOTNÝ, ANETA KARÁSKOVÁ**

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

Kontrola změn složení vod například během čistícího procesu<sup>1</sup> elektrárenských a ionexy upravovaných vod je nedílnou součástí aplikace těchto procesů. Vedle laboratorních metod jeho sledování je častou žádoucí mít k dispozici i operativní a provozně dostupné techniky, byť i jen na úrovni indikace nebo detekce zejména pravidelně se opakujících změn. Výběr takových technik (jako je konduktometrie) je dosud značně omezenější než výběr technik laboratorních.

Nedávno byla pro tento účel navržena<sup>2-4</sup> k otestování metoda založená na potenciometrii se stříbrnou amalgámovou elektrodou (AgAE). Její dostupnost a provozní opakovatelnost může dále zvýšit kombinace AgAE s rovněž nedávno navrženým mini-interface<sup>5,6</sup>, umožňující použití pro měření i obyčejný levný multimetr místo podstatně dražšího ionometru. Popsaná metoda navazuje na poměrně rozsáhlé zkušenosti z voltametrie s amalgámovými elektrodami<sup>7-11</sup>. Především však sama využívá nových poznatků o chování specificky připravených AgAE ve směru k nově odstartovanému<sup>2-6</sup> studiu možností potenciometrie s AE nové generace. To např. umožnilo charakterizovat postup čištění elektrárenských vod pomocí diagramu potenciál AgAE vs. pořadí vzorků odebraných po jednotlivých čistících krocích.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR SGSFChT\_2018\_003 a projektu Univerzity Pardubice č. SD373001/82/30352 (2016).*

**LITERATURA**

1. Pitter P.: *Hydrochemie*, VŠCHT, Praha 1999.
2. Novotný L.: ÚPV Praha, UV 2014-30527, 2014.
3. Novotný L.: ÚPV Praha, PV 2006-600, 2006.
4. Novotný L.: ÚPV Praha, UV 2007-19501, 2007.
5. Novotný L.: ÚPV Praha, PVZ 2017/41111, 2017.
6. Novotný L., Kočanová V., Kabutey A., Karásková A., Dušek L., Petránková R., Mikulášek P.: *Waste Forum* 2 (2018), přijato.
7. Novotný L.: *DrSc. Disertační práce*. AV ČR, Praha 1998.
8. Novotný L., Yosypchuk B.: *Chem. Listy* 94, 1118 (2000).
9. Yosypchuk B., Novotný L.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 32, 141 (2002).
10. Berek J., Fischer, Navrátil T., Pecková K., Yosypchuk B., Zima J.: *Electroanalysis* 19, 2003 (2007).
11. Šelešovská R.: *Habilitační práce*. Univerzita Pardubice, Pardubice 2015.

**6L-02****FAKTORY OVLIVŇUJÍCÍ SEPARACI ORGANICKÝCH LÁTEK Z VODNÝCH ROZTOKŮ POMOCÍ REVERZNÍ OSMÓZY****KAROLÍNA JASTŘEMBSKÁ, HANA JIRÁNKOVÁ, PETR MIKULÁŠEK**

Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta Chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice 2, Česká republika  
karolina.jastremska@student.upce.cz

Tlakové membránové procesy jsou známy jako moderní technologie, které nalézají uplatnění v mnoha různých odvětvích. Jedním ze zmíněných procesů je i reverzní osmóza. Ta je majoritně používána v procesu odsolování mořské vody a také v procesu přípravy velmi čisté vody<sup>1</sup>.

Nicméně, o reverzní osmóze lze také uvažovat v případě odstraňování organických látek z vodných roztoků. Tento směr výzkumu je zaměřen zejména na environmentální problematiku, kdy je posuzována možnost eliminace kontaminantů<sup>2</sup>.

Potenciál reverzní osmózy jako metody, pro separaci vybrané organické látky z roztoku, lze v současnosti určit především z experimentů. Uvažovanou separaci lze částečně predikovat s využitím znalostí matematického modelování. Pro studovanou oblast lze zmínit ireversibilní thermodynamický model a model rozpouštění-difuze<sup>3</sup>. Tyto modely byly postupně modifikovány, tak aby vyhovovaly studovaným systémům. Avšak komplikovanost predikce pouze poukázala na to, že samotná separace je jev komplexní, na kterém se podílí mnoho jevů a faktorů.

Cílem této práce je představit faktory, které mají vliv na separaci organických látek s využitím reverzní osmózy. Mezi nejznámější patří faktory procesní, např. aplikovaný tlakový rozdíl nebo koncentrace látky. Z fyzikálně-chemických faktorů lze zmínit molární hmotnost látky či geometrii molekuly.

*Tato práce vznikla za finanční podpory projektu SGS\_2018\_003.*

**LITERATURA**

1. Mikulášek P. a kol., v knize: *Tlakové membránové procesy*, kap. 14, s. 235. VŠCHT, Praha 2013.
2. Altalyan H. N., Jones B., Bradd J., Nghiem L. D., Alyazichi Y. M.: *J. Wat. Proc. Eng.* 21, 9 (2016).
3. Al-Obaidi M. A., Kara-Zaitri C., Mujtaba I. M.: *Comp. Chem. Eng.* 100, 79 (2017).

**6L-03****NEFROTOXICKÉ PŮSOBENÍ KADMIA U LIDSKÝCH PROXIMÁLNÍCH TUBULÁRNÍCH BUNĚK****JIRÍ HANDL, JAN ČAPEK, PAVLÍNA MAJTNEROVÁ, TOMÁŠ ROUŠAR\***

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická,  
Katedra biologických a biochemických věd,  
Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika  
jiri.handl@upce.cz

Testování cytotoxicity potenciálně rizikových látek, jako jsou například těžké kovy, je v současné době jedním z klíčových směrů *in vitro* testování na buňkách. Hlavním důvodem přibývajících zájmu o informace týkající se cytotoxického působení výše zmíněných látek je zejména jejich zvyšující se množství v životním prostředí, a proto i snaha o zlepšení ochrany lidského zdraví. Vzhledem k všeobecné rozšířenosti těžkých kovů v životním prostředí patří i testování působení a hledání cytotoxických mechanismů těžkých kovů k významným úkolům moderního výzkumu. Jedním z velmi rozšířených těžkých kovů je kadmium (Cd), které je v nízkých koncentracích prakticky všudypřítomné. Kadmium patří mezi látky s vysokou mírou cytotoxicity. Jeho toxické působení na lidský organismus může být jak akutní, tak chronické. Z pohledu buněčné toxicity má kadmium účinky neurotoxické, hepatotoxické, a zejména pak nefrotoxické. Pro testování nefrotoxického působení látek je v současnosti využívána zejména ledvinná buněčná linie HK-2 lidského původu, která byla použita i v naší studii. Ačkoliv je toxické působení CdCl<sub>2</sub> na ledvinné buňky studováno již mnoho let a informací o jeho působení je celá řada, my jsme překvapivě opakovaně našli, že inkubace HK-2 buněk s CdCl<sub>2</sub> může vést k přechodnému zvýšení intracelulární dehydrogenázové aktivity HK-2 buněk. Vzhledem k tomu, že buňky, u nichž je dehydrogenázová aktivita zvýšena, lze považovat za buňky se zvýšenou viabilitou, můžeme říci, že CdCl<sub>2</sub> přechodně zvyšuje viabilitu HK-2 buněk. Proto jsme se na podrobnější testování tohoto nálezu zaměřili i v této práci. Celková dehydrogenázová aktivita byla měřena u HK-2 buněk inkubovaných s 0–200 μM CdCl<sub>2</sub> po dobu 2–24 hodin. Kromě testu dehydrogenázové aktivity byl pro podrobnější posouzení nefrotoxického působení CdCl<sub>2</sub> u HK-2 buněk sledován i mitochondriální membránový potenciál a testována produkce reaktivních forem kyslíku. Během tohoto testování jsme potvrdili, že u všech testovaných koncentrací CdCl<sub>2</sub> lze detekovat zvýšení dehydrogenázové aktivity buněk, s výjimkou 5 μM koncentrace CdCl<sub>2</sub>, přičemž nástup přechodného zvýšení dehydrogenázové aktivity nepřímo úměrně souvisí s délkou inkubace a dávkou CdCl<sub>2</sub>.

**LITERATURA**

1. Hauschke M., Roušarová E., Flidr P., Čapek J., Libra A., Roušar T.: *Tox. In Vitro* 39, 52 (2017).
2. Iwatsuki M., Inageda K., Matsuoka M.: *Toxicol. Appl. Pharmacol.* 251, 209 (2011).

**6L-04****SEQUENTIAL DETERMINATION OF <sup>90</sup>Sr AND <sup>210</sup>Pb IN THE ENVIRONMENTAL SAMPLES****SILVIA DULANSKÁ, MICHAELA ŠTOFANÍKOVÁ, EUBOMÍR MÁTEL**

Univerzita Komenského, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15  
Bratislava, Slovakia  
dulanskas@gmail.com

The analysis of radiostrontium in bone samples is very important for environmental monitoring. <sup>90</sup>Sr is accumulated in bones and when in equilibrium with its short-lived daughter <sup>90</sup>Y may cause damage to the bone marrow. <sup>90</sup>Y is a pure beta emitter with a maximum energy of 2.27 MeV and half-life of 64.1 hours. Radiochemical isolation of strontium is necessary before the measurement<sup>1</sup>.

<sup>210</sup>Pb is a very useful radioactive element for environmental studies occurs naturally as one of the decay products of the <sup>238</sup>U series. Solvent extraction has proved to be a valuable tool in radiochemical and analytical studies of lead. The most widely used extraction system uses the extraction of the dithizone complex into carbon tetrachloride or into chloroform. The adsorption of lead (and bismuth) on a strong base quaternary amine anion-exchange resin (Dowex-1, 200–230 mesh) in hydrochloric acid solution has been investigated in detail by Nelson and Kraus<sup>2</sup>. It was found that the absorbability of Pb<sup>2+</sup> was low in dilute hydrochloric acid (and increased at first with increasing hydrochloric acid concentration). Adsorption reached a maximum near 1.5 mol dm<sup>-3</sup> and then HCl decreased rapidly. Negligible adsorption occurred above 8 mol dm<sup>-3</sup> HCl.

Wallová and col. described two different methods were used for <sup>90</sup>Sr determination (twosteps method using Dowex for <sup>210</sup>Pb separation and Sr purification with Sr Spec resin; and using 3M Empore Sr disk after removing of <sup>210</sup>Pb by Fe(OH)<sub>3</sub> co-precipitation). The data obtained from both methods were in good agreement. <sup>90</sup>Sr and <sup>210</sup>Pb activity concentrations were also measured in deer bone samples from various regions of Austria. The measurement of the <sup>90</sup>Sr and of the previously separated <sup>210</sup>Pb was done by low-level liquid scintillation counting<sup>3</sup>. The goal of our work was to test using of AnaLig<sup>®</sup>Sr01 gel for strontium and lead separation from ash bone sample.

The bone ash sample were stored deep frozen and after defrosting were dried at 105 °C (at least 48 h). Residual meat and tendons were removed, samples were weighed and ashed at 650 °C for 24 h (ash was weighed after ashing). For validation of method, a reference animal bone IAEA A-12 was taken. 10 g of IAEA A-12 bone was weighed and ashed at 650 °C for 24 h. Efficiency of separation was monitored by using <sup>85</sup>Sr tracer and ~ 10 Bq and 2 mg of stable lead carrier. The bone ash was completely dissolved in 30 cm<sup>3</sup> of 14.4 mol dm<sup>-3</sup> HNO<sub>3</sub>. Acidity of a sample was adjusted with deionized water to give the final concentration approximately 8 mol dm<sup>-3</sup>. The samples were loaded onto 0.5 g of AnaLig<sup>®</sup>Sr-01 column (long 15 cm and 1.5 cm wide). Each column was washed with 2 × 20 cm<sup>3</sup> of 2 mol dm<sup>-3</sup> HNO<sub>3</sub> and 2 cm<sup>3</sup> of deionized water. Lead was eluted with 20 cm<sup>3</sup> of 9 mol dm<sup>-3</sup> HCl. AnaLig<sup>®</sup>Sr-01 column was washed with

10 mL of deionized water. Strontium was eluted with 20 mL of 0,05 mol dm<sup>-3</sup> Na<sub>4</sub>EDTA with pH 10. Final fractions of strontium were measured on an HPGE detector for <sup>85</sup>Sr recoveries at 514 keV line and counted repeatedly by Cerenkov counting over a two-week period to monitor the ingrowth of <sup>90</sup>Y on TRI CARB 3100 TR (PerkinElmer).

The instrument was calibrated in low level counting mode by using certified <sup>90</sup>Sr solution from Czech Metrology Institute. The (1–25) keV energy window was chosen for activity measurement. As the quench parameter was SIS (spectral index of sample) used. The typical counting efficiency was between 50 and 60 %. Sr fractions were counted 90 min (4–5 times) after Sr separation.

Effluent of lead was collected into a beaker and was heated to dryness and dissolved in 5 cm<sup>3</sup> of 0.05 mol dm<sup>-3</sup> HNO<sub>3</sub>. Samples were counted repeatedly a four – week period to monitor the ingrowth of <sup>210</sup>Pb on TRI CARB 3100 TR (PerkinElmer) by adding 15 cm<sup>3</sup> of scintillation cocktail ULTIMA GOLD AB to determine <sup>210</sup>Pb activity.

The applicability of our method for sequential determination of <sup>210</sup>Pb and <sup>90</sup>Sr in bone was shown by investigating IAEA A-12 reference bone animal material with <sup>90</sup>Sr activity of 54.8 Bq kg<sup>-1</sup> (95% confidence interval 46.3–59.2 Bq kg<sup>-1</sup>) and <sup>210</sup>Pb activity in reference sample (the certificate activity 16.6 Bq). The results are shown in Table I. All results are in good agreement with the reference value and high chemical recovery. The AnaLig<sup>®</sup>Sr-01 procedure is a quick and very effective separation method with high flow rates through the column and high recoveries as well.

Table I  
Activity concentration of <sup>90</sup>Sr and <sup>210</sup>Pb in wild animals samples from different locations in Slovakia

Sample	A ( <sup>90</sup> Sr), [Bq kg <sup>-1</sup> ]	A ( <sup>210</sup> Pb), [Bq kg <sup>-1</sup> ]
Wild boar	24,9 ± 3,5	4,3 ± 0,7
Fallow deer (biger)	40,3 ± 4,4	10,9 ± 1,8
Fallow deer (smaller)	36,1 ± 4,2	9,2 ± 1,2
Deer	33,6 ± 3,8	7,1 ± 0,9
Wild boar	69,6 ± 5,9	< 2,2
Hind	12,9 ± 2,1	8,8 ± 1,3

One step separation on AnaLig<sup>®</sup>Sr-01 gel followed by liquid scintillation counting detection can be used for determination of <sup>90</sup>Sr and <sup>210</sup>Pb in animal bone samples.

*This work was supported by the KEGA 002UK-4/2016.*

#### REFERENCES

1. A new simplified determination method for environmental <sup>90</sup>Sr by ultra low-level liquid scintillation counting. [http://www.lsc-international.org/conf/pfiles/lsc1989\\_547.pdf](http://www.lsc-international.org/conf/pfiles/lsc1989_547.pdf) Accessed 5 Dec 2014.
2. Kraus K. A., Nelson F.: Anion Exchange Studies of the FisBion Products. Proc. of the First U.N. Conf. On Peaceful Uses of At. Energy, 113 (1955).
3. Wallová G., Kandler N., Wallner G.: J. Environ. Radioact. 107, 44 (2012).



**6P-01****TESTOVÁNÍ ZMĚN POTENCIÁLU STŘÍBRNÉ AMALGÁMOVÉ ELEKTRODY BĚHEM IONEXOVÉ ÚPRAVY VODY PO JEJÍ PŘEDÚPRAVĚ****LADISLAV NOVOTNÝ, ANETA KARÁSKOVÁ**

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

Téma tohoto příspěvku zaměřeného na ionexy upravované vody (po předúpravě) zapadá do problematiky sledování kvality vod v běžných (i provozních) podmínkách<sup>1</sup>. Mezi nejrozšířenější metody v tomto směru se řadí konduktometrie. I když jde o metodu oblíbenou a svým způsobem v praxi nyní nenahraditelnou, vykazuje pro uživatele i určitá omezení. Příkladem může být její nízká resp. i nedostatečná citlivost vůči přítomnosti stop neionogenních organických látek ve velmi čistých vodách. Jsou proto obory, např. oblast energetiky<sup>1</sup>, které mají zájem o dostupné a operativní kontrolní metody, založené na principech nezávislých na konduktometrii. Nedávno bylo navrženo<sup>2-5</sup> vyzkoušet novou aplikaci postupů s využitím stříbrné amalgámové elektrody AgAE a případně i dalších specificky připravených amalgámových elektrod<sup>3-9</sup>, a jejich opatření speciálním interface<sup>4</sup> pro zprostředkování propojení s multimetrem (nebo obdobným měřicím systémem). Pro sledování byla použita posloupnost 5 vzorků vody z jednotlivých kroků jejího technologického čištění, počínaje např. dvěma předčišťovacími kroky, následovanými aplikací katexu, poté aplikací anexu a konečně odběrem vzorku ze sběrného zásobníku. Ukázalo se, že když byla do každého vzorku vody daného objemu přidána vždy stejná koncentrace AgNO<sub>3</sub>, docházelo při přechodu od jednoho charakteristického vzorku k jinému k charakteristickým změnám potenciálu AgAE, umožňujícím např. kontrolu identity těchto vzorků.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR SGSFChT 2018\_003 a projektu Univerzity Pardubice č. SD373001/82/30352 (2016).

## LITERATURA

1. Hübner P.: *Úprava vody*. VŠCHT, Praha 2010.
2. Novotný L.: ÚPV Praha, UV 2014-30527, 2014.
3. Novotný L.: ÚPV Praha, UV 2007-19501, 2007.
4. Novotný L.: ÚPV Praha, PVZ 2017/41111, 2017.
5. Novotný L., Kočanová V., Kabutey A., Karásková A., Dušek L., Petráňková R., Mikulášek P.: Waste Forum 2 (2018), přijato.
6. Novotný L., Yosypchuk B.: Chem. Listy 94, 1118 (2000).
7. Yosypchuk B., Novotný L.: Crit. Rev. Anal. Chem. 32, 141 (2002).
8. Barek J., Fischer, Navrátil T., Pecková K., Yosypchuk B., Zima J.: Electroanalysis 19, 2003 (2007).
9. Šelešovská R.: *Habilitační práce*. Univerzita Pardubice, Pardubice 2015.

**6P-02****DOES DICLOFENAC AND PARACETAMOL UPTAKE BY PEA AND MAIZE AFFECT THEIR PRIMARY METABOLISM?****MICHAL ORAVEC<sup>a</sup>, MARIE KUMMEROVÁ<sup>b</sup>, ŠTĚPÁN ZEŽULKA<sup>b</sup>, KATEŘINA SVOBODOVÁ<sup>a</sup>, JAN TRÍSKA<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Laboratory of Metabolomics and Isotopic Analyses, Global Change Research Institute CAS, Bělidla 986/4a, 603 00 Brno,  
<sup>b</sup>Institute of Experimental Biology, Faculty of Science, Masaryk University, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Czech Republic  
oravec.m@czechglobe.cz

Pharmaceuticals are widely used in both human and veterinary medicine and their amount in environment is increasing considerably. Although contaminated municipal wastewaters are treated in wastewater treatment plants, many of these substances are unaffected by the current treatment processes. In the present study we concentrated on diclofenac (DCF) and paracetamol (PCT) as two typical candidates of non-steroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs) which belong to most widespread pharmaceuticals over the whole world. Application of wastewater for irrigation of agricultural crops mainly in arid areas represents a risk for both environment and crop plants.

There are some information in the literature about uptake and metabolism of diclofenac in barley (*Hordeum vulgare*) and horse radish (*Armoracia rusticana*)<sup>1</sup>, *Typha latifolia*<sup>2</sup> and cress (*Lepidium sativum*)<sup>3</sup> and for paracetamol in horse radish (*Armoracia rusticana*)<sup>4</sup> but there is no information how the uptake of pharmaceuticals influences primary metabolism of the plants. Therefore our main goal was to investigate changes in the primary metabolism of pea and maize which were selected for the study.

Pea (*Pisum sativum*) and maize (*Zea mays*) as representatives of dicot and monocot crops were cultivated in nutrient solution without (control) and with DCF or PCT (0.1, 1, 5, and 10 mg/L) for 20 days under controlled conditions. After harvesting plants were divided into roots, stem and leaves and oven-dried. Primary metabolites were analyzed in the extracts using HRMS LTQ Orbitrap XL. Amount of pentoses, hexoses and disaccharides is generally increasing with the concentration of both pharmaceuticals in all parts of the plants. The concentrations profiles of amino acids are different regarding their involvement in the metabolic pathways and are dependent on K<sub>OW</sub> of pharmaceuticals.

This work was supported by Czech Science Foundation, No. GF 17-33746L and by Ministry of Education, Youth and Sports, NPU, No. LO1415.

## REFERENCES

1. Huber Ch., Bartha B., Schröder P.: J. Hazardous Mat. 243, 250 (2012).
2. Bartha B., Huber Ch., Schröder P.: Plant Science 227, 12 (2014).
3. Emhofer L., Himmelsbach M., Buchberger W., Klampfl Ch. W.: J. Chromatogr. A 1491, 137 (2017).

4. Huber Ch., Bartha B., Harpaintner R., Schröder P.: Environ. Sci. Pollut. Res. 16, 206 (2009).

**6P-03****NOVÉ MOŽNOSTI STUDIA MIGRACE ELEMENTÁRNÍHO NANOŽELEZA V LABORATOŘI****PETR PARMA, MIROSLAV ČERNÍK**

*Ústav pro nanomateriály, pokročilé technologie a inovace, Technická univerzita v Liberci, Bendlova 1409/7, 461 17 Liberec, Česká republika*  
 petr.parma@tul.cz

Pro sanaci redukovatelných kontaminantů v životním prostředí metodou in.situ je již řadu let s výhodou používáno nanoželezo. S ohledem na povahu kontaminantů a v závislosti na podmínkách na sanované lokalitě jsou stále více používány preparáty nanoželeza s různou povrchovou modifikací. Pro efektivní použití nanoželeza je nutné znát jeho migrační schopnost v sanované zemině (horině).

Za účelem detailního studia migračních schopností různých typů nanoželeza bylo na TUL vyvinuto unikátní zařízení umožňující on-line sledování migrace v průběhu kolonových experimentů. Cílem bylo dosažení co nejvyšší citlivosti. Z tohoto důvodu, je měření založeno na zcela jiném principu, než je publikováno v literatuře<sup>1</sup>. Zařízení pracuje na principu velmi přesného měření změn frekvence oscilátoru, kde jádrem cívky je měřené prostředí. Při pracovní frekvenci 10 kHz je schopno měřit změny na úrovni 1 mHz. Díky optimalizované konstrukci, se detekční limit pohybuje pod hodnotou jednoho miligramu železa v prostoru uvnitř měřicí cívky.

Zařízení je možno využít pro laboratorní experimenty v rámci studia migračních vlastností nano a mikro částic železa. Současně je také využitelné pro efektivní nedestruktivní měření obsahu elementárního železa v pevných vzorcích jako jsou např. vrtná jádra odebraná po provedené aplikaci nanoželeza v rámci sanace a sledovat tak migraci v reálných podmínkách. Tím lze efektivně vyhodnotit dosah aplikace v okolí aplikačního vrtu.

Zařízení začleněné do komplexní aparatury umožňuje provádění dlouhodobých (i více než 36 hodin) migračních experimentů v dlouhých kolonách (200cm).

Pro kalibraci zařízení byly vyrobeny etalony s rovnoměrně distribuovanými mikročásticemi elementárního železa. Byl vyvinut nový matematický algoritmus umožňující vhodnou diskretizaci naměřeného signálu a díky tomu lze z naměřených dat získat informaci o koncentraci elementárního železa v koloně v průběhu experimentu.

*Výzkum prezentovaný v tomto článku byl podpořen projektem TE01020218 „Ekologicky šetrné nanotechnologie a biotechnologie pro čištění vod a půd“, operační program: TE – Program Technologické agentury ČR na podporu rozvoje dlouhodobé spolupráce ve výzkumu, vývoji a inovacích mezi veřejným a soukromým sektorem „Centra kompetence“.*

**LITERATURA**

1. De Boer C., Klaas N., Braun J.: *Measuring Techniques to Monitor the Application of Nano-Sized Zero-Valent Iron for Subsurface Remediation*. In: VEGAS-Kolloquium 2010 In-Situ-Sanierung – Stand und Entwicklung Nano und ISCO<sup>1</sup>, Eigenverlag, Institut für Wasserbau, Universität Stuttgart 2010, pp. 91–99.

**6P-04****SEPARACE ALKOHOLŮ Z VODNÝCH ROZTOKŮ S VYUŽITÍM REVERZNÍ OSMÓZY****KAROLÍNA JASTŘEMBSKÁ, HANA JIRÁNKOVÁ, PETR MIKULÁŠEK**

*Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta Chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice 2, Česká republika*  
 karolina.jastremska@student.upce.cz

Membránové procesy jsou v současnosti chápány jako moderní technologie ekvivalentní mnoha konvenčním separačním technikám. Mezi jejich hlavní výhody patří separace látek při teplotách nižších v porovnání s klasickými metodami, zvýšení účinnosti separace a nižší prostorová náročnost<sup>1</sup>. S tlakovými membránovými technologiemi se lze již běžně setkat v mlékárenském průmyslu či průmyslu zpracování odpadních vod<sup>2</sup>.

Cílem této práce je ověřit možnost separace vybraných alkoholů s využitím reverzní osmózy. V rámci experimentální práce byly studovány binární roztoky alkohol-demineralizovaná voda. Pro posouzení vlivu faktorů, které ovlivňují separaci látky, byly vybrány čtyři alkoholy: ethanol, *n*-propanol, *i*-propanol a butanol. Mezi faktory, které byly uvažovány, lze zahrnout zejména faktory procesní, tj. aplikovaný tlakový rozdíl či koncentraci látky. Na základě výsledků byly k posouzení dále navrženy fyzikálně-chemické parametry např. molární hmotnost látky, geometrie molekuly a polarita látky.

Analýzou experimentálních dat byl potvrzen pozitivní vliv aplikovaného tlakového rozdílu na výkon jednotky. Jako zajímavá oblast zde vystupuje separace složky, kterou lze vyjádřit koeficientem rejekce. V rámci experimentů nebyl potvrzen základní předpoklad: se zvyšující se molární hmotností látky roste i retence látky. Nejvyšší hodnotu koeficientu rejekce vykazoval *i*-propanol. Tento fakt poukazuje na komplexnost procesu separace, kdy nacházejí uplatnění i jiné fyzikálně-chemické jevy a faktory.

*Tato práce vznikla za finanční podpory projektu SGS\_2018\_003.*

**LITERATURA**

1. Mikulášek P. a kol., v knize: *Tlakové membránové procesy*, kap. 14, s. 230. VŠCHT, Praha 2013.
2. Sagne C., Fargues C., Lewandowski R., Lameloise M. L., Gavach M., Decloux M.: Chem. Eng. Proc. 339, 49 (2008).

**6P-05****VYUŽITÍ VYSOKOPECNÍCH STRUSEK PRO IMOBILIZACI FENOLU Z ROZTOKU****DIMITRIJ KOLNIČENKO, KAROLÍNA PEŠOVÁ, TOMÁŠ JUŘICA, LENKA BLÁHOVÁ, MARTIN MUCHA, ZUZANA NAVRÁTILOVÁ***Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, Česká republika  
dima.kol@seznam.cz*

Problematika ukládání odpadů obsahujících organické polutanty patří k často řešeným problémům současnosti. Pro odstraňování a imobilizaci různých organických polutantů z vodného prostředí se nejčastěji využívá adsorpce na vhodných materiálech<sup>1,2,3</sup>. Vysokopecní strusky představují materiály na bázi silikátů, které vznikají jako odpadní produkt při výrobě surového železa. Nacházejí využití ve stavebnictví, kdy jsou často po úpravě alkalickou aktivací používány do betonů<sup>4</sup>. Strusky představují také materiál použitelný pro odstraňování polutantů z vodného prostředí<sup>2,3</sup>. V této práci je zkoumána možnost využití surové a alkalicky aktivované vysokopecní strusky pro imobilizaci fenolu z vodného roztoku. Struska dodaná společností ArcelorMittal Ostrava a.s. byla alkalicky aktivovaná roztokem vodního skla (Kittfort s.r.o., Praha) s poměrem SiO<sub>2</sub>:Na<sub>2</sub>O 1:1.

Surová i alkalicky aktivovaná struska byla nasycena fenolem (p.a., Mach chemikálie s.r.o., Ostrava) z vodného roztoku o koncentraci 10 mmol/l (kontaktní čas 24 hodin). Adsorpce fenolu byla potvrzena analýzou roztoků po sorpci metodou UV-VIS spektrometrie (Varian Cary 50, USA). Nasycené strusky byly vysušeny při laboratorní teplotě a poté tepelně modifikovány při teplotách 100 a 500 °C s cílem stabilizace materiálu. Všechny materiály byly analyzovány metodou infračervené spektrometrie (FTIR) na přístroji Nicolet 6700 (Thermo scientific, USA). FTIR analýza potvrdila přítomnost fenolu v nasycených materiálech a také strukturální změny materiálů po tepelné modifikaci. Následně byly provedeny loužící experimenty demineralizovanou vodou s upravenou hodnotou pH na 3, 7 a 10 pomocí HCl a NaOH (obojí p.a., Mach chemikálie s.r.o., Ostrava). Bylo zjištěno, že materiály po tepelné modifikaci vykazují stabilní chování. Vysokopecní strusky se jeví jako možné materiály pro imobilizaci fenolu z vodných roztoků.

*Tato práce vznikla za podpory grantu studentské grantové soutěže OU reg. č. SGS08/PrF/2018.*

**LITERATURA**

1. Wang S. S., Qiao N. N., Yu J., Huang X. L., Hu M. X., Ma H. Z.: *Desalin. Water Treat.* 57, 4174 (2016).
2. Gao H., Song Z., Zhang W., Yang X., Wang X., Wang D.: *J. Environ. Sci.* 53, 68 (2017).
3. Genz A., Oguz A.: *Desalination* 264, 78 (2010).
4. Das B., Prakash S., Reddy P. S. R., Mista V. N.: *Resour. Conserv. Recycl.* 50, 40 (2007).

**6P-06****VYUŽITÍ VYSOKOPECNÍCH STRUSEK PRO IMOBILIZACI OLOVNATÝCH IONTŮ Z ROZTOKU****KAROLÍNA PEŠOVÁ, DIMITRIJ KOLNIČENKO, TOMÁŠ JUŘICA, LENKA BLÁHOVÁ, MARTIN MUCHA, ZUZANA NAVRÁTILOVÁ***Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, Česká republika  
karolina.pesova@centrum.cz*

Ukládání odpadů obsahujících sloučeniny těžkých kovů představuje v současnosti široce zkoumaný problém. Pro odstraňování a imobilizaci těžkých kovů z vodného prostředí se nejčastěji využívá adsorpce na vhodných materiálech<sup>1</sup>. Vysokopecní strusky představují materiály na bázi silikátů, které vznikají jako odpadní produkt při výrobě surového železa. Nacházejí využití ve stavebnictví, kdy jsou často po úpravě alkalickou aktivací používány do betonů<sup>2</sup>. Strusky představují také materiál použitelný pro odstraňování polutantů z vodného prostředí<sup>3,4</sup>. V této práci je zkoumána možnost využití surové a alkalicky aktivované vysokopecní strusky pro imobilizaci olovnatých iontů z roztoku. Struska dodaná společností ArcelorMittal Ostrava a.s. byla alkalicky aktivovaná roztokem vodního skla (Kittfort s.r.o., Praha) s poměrem SiO<sub>2</sub>:Na<sub>2</sub>O 1:1. Surová i alkalicky aktivovaná struska byla nasycena olovnatými ionty z roztoku PbNO<sub>3</sub> p.a. (Lach-ner s.r.o., Neratovice) o koncentraci 80 mmol/l (kontaktní čas 24 hodin). Alkalicky aktivovaná struska vykazovala větší imobilizované množství olovnatých iontů ve srovnání se surovou struskou. Nasycené strusky byly vysušeny při laboratorní teplotě a poté tepelně modifikovány při teplotách 100, 500 a 1000 °C s cílem stabilizace materiálu. Všechny materiály byly analyzovány metodou infračervené spektrometrie (FTIR) na přístroji Nicolet 6700 (Thermo scientific, USA). FTIR analýza potvrdila strukturální změny materiálu po tepelné modifikaci. Následně byly provedeny loužící experimenty demineralizovanou vodou s upravenou hodnotou pH na 3, 7 a 10 pomocí HCl a NaOH (obojí p.a., Mach chemikálie s.r.o., Ostrava). Bylo zjištěno, že stabilita materiálů vůči loužení olovnatých iontů stoupá s hodnotou pH loužícího roztoku a s rostoucí teplotou tepelné modifikace materiálu. Alkalicky aktivovaná vysokopecní struska může představovat vhodný materiál pro imobilizaci olovnatých iontů z vodných roztoků.

*Tato práce vznikla za podpory grantu studentské grantové soutěže OU reg. č. SGS08/PrF/2018.*

**LITERATURA**

1. El-Eswed B. I., Aldagag O. M., Khalili F. I.: *Appl. Clay Sci.* 140, 148 (2017).
2. Das B., Prakash S., Reddy P. S. R., Mista V. N.: *Resour. Conserv. Recycl.* 50, 40 (2007).
3. Dimitrova S. V.: *Water Res.* 36, 4001 (2002).
4. Bláhová L., Navrátilová Z., Mucha M., Gorošová S.: *Inzynieria mineralna – J. Pol. Miner. Eng. Soc.* 1, 59 (2017).

**6P-07****PLANT CELL WALLS AS DEFENCE MECHANISMS  
AGAINST ABIOTIC STRESS****ZUZANA VATEHOVA, KARIN KOLLAROVA, ANNA  
MALOVIKOVA, DESANA LISKOVA***Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences,  
Dubravska cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovakia  
zuzana.vatehova@savba.sk*

Cadmium is a well-known environmental pollutant with distinctly toxic effects on plants. To minimize the detrimental effects of cadmium and its accumulation, plants have evolved detoxification mechanisms. Such mechanisms are mainly based on chelation and subcellular compartmentalization. The plant cell wall is an important cell feature that performs numerous essential functions. As the first barrier it prevents the input of toxic metals into the cell and plant organ, but this defense mechanism is still fully unknown. In this connection the effect of toxic cations on cell wall polysaccharides composition in roots of maize has been studied.

*Zea mays* L. as a member of the Poales, has peculiar primary cell walls of the type II distinguished by higher content of hemicelluloses (arabinoxylan, glucurono-arabinoxylan, arabinogalactan) and lower content of xyloglucans and pectin compared to dicots. A combination of extractions (hot water and alkali), chemical (content of uronic acids, phenolics, proteins), and analytical (HPLC) methods for the characterization of cell wall composition in plants treated with cadmium cations were used. Alkali extractions with significant changes in the composition were applied to a column of DEAE Sephadex for further separation and purification. NMR analysis was used for better description of polysaccharide subextractions. The results indicate that the cell wall functions not only as a sink for toxic metal accumulation, but is under the metal stress also modified.

Better understanding of plant cell wall function in defense against toxic metals could point out plants utilizable in the green technique, phytoremediation, for cleaning up toxic metal-contaminated soils and water.

## 7L-01

**CHEMICKÁ CHARAKTERIZACE GENETICKÝCH ZDROJŮ ZELENIN A SPECIÁLNÍCH PLODIN**

**SANJA ČAVAR ZELJKOVIĆ<sup>a,b</sup>, SANDRA BENICKÁ<sup>a</sup>,  
LUCIE ČERNOCHOVÁ<sup>b</sup>, VĚRA DOSEDĚLOVÁ<sup>a</sup>,  
TIBOR BÉRES<sup>b</sup>, HELENA STAVĚLÍKOVÁ<sup>a</sup>, PETR  
TARKOWSKI<sup>a,b,\*</sup>**

<sup>a</sup> Oddělení genetických zdrojů zelenin, léčivých rostlin a speciálních plodin, Centrum regionu Haná pro biotechnologický a zemědělský výzkum, Výzkumný ústav rostlinné výroby, v.v.i., Šlechtitelů 29, 78371 Olomouc,

<sup>b</sup> Centrální laboratoře a podpora výzkumu, Centrum regionu Haná pro biotechnologický a zemědělský výzkum, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 27, 78371 Olomouc, Česká republika  
tarkowski@genobanka.cz

Systematický sběr, studium a konzervace genetických zdrojů rostlin je jednou z hlavních aktivit Výzkumného ústavu rostlinné výroby, v.v.i. Tato aktivita je podporována Ministerstvem zemědělství v rámci Národního programu konzervace a využívání genetických zdrojů rostlin a agrobiodiverzity. Oddělení aplikovaného výzkumu zelenin a speciálních plodin (Centrum region Haná pro biotechnologický a zemědělský výzkum) pečuje v Olomouci o širokou kolekci genetických zdrojů zelenin (více než 10 000 položek), léčivých, aromatických a kořeninových rostlin (LAKR; téměř 1000 položek). Jedná se o rostliny tradičně pěstované ve Střední Evropě. Položky genofondu představují významný potenciální zdroj nových znaků a vlastností pro šlechtění, farmacie a v ochraně a tvorbě životního prostředí (např. fenologické charakteristiky, geny rezistence, obsah nutričně významných látek a sekundárních metabolitů). Chemická charakterizace biologického materiálu je integrální součástí péče o genetické zdroje, nabízí doplňující informace o kvalitě materiálu. V prezentaci jsou představeny používané metody analýzy primárních (sacharidy, aminokyseliny, malé organické kyseliny) i sekundárních metabolitů (glukosinoláty, flavonoidy, terpenoidy, kanabinoidy, kapsaicinoidy, polyaminy) a využití výsledků k hodnocení kvality položek genofondu.

## 7L-02

**ROUSKOVÝ PYL A PERGA: VYUŽITÍ SCREENINGOVÝCH METOD PRO URČENÍ BOTANICKÉHO PŮVODU**

**ROMAN BLEHA<sup>a</sup>, ANDRIY SYNITSYA<sup>a</sup>, TETIANA SHEVTSOVA<sup>a</sup>, JÁN BRINDZA<sup>b</sup>, JANA ČOPÍKOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav sacharidů a cereálií, Fakulta potravinářské a biochemické technologie, VŠCHT Praha, 16628 Praha, Česká republika, <sup>b</sup> Institut ochrany biodiverzity a biologické bezpečnosti, Fakulta agrobiologie a potravinových zdrojov, Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, Slovenská republika  
blehar@vscht.cz

Květový pyl, nektar a včelí výměšky tvoří rouskový pyl. Ten je následně přinesen včelou do úlu, kde je ukládán do pláství a zakonzervován<sup>1</sup>. V průběhu skladování však dochází k fermentaci rouskového pylu a stává se z něj perga<sup>2</sup>.

Pro srovnací studium bylo použito šest vzorků monoflorálního rouskového pylu různých botanických druhů a pět vzorků pergy z různých oblastí Slovenské republiky a Ukrajiny. Od každého vzorku bylo naměřeno FTIR ATR a FT Ramanova spektra, byl stanoven obsah vody a aktivita vody. Struktura a botanický původ vzorků byly sledovány na základě obrázků SEM. Spektroskopická data byla vyhodnocena pomocí multivariační analýzy PCA v programu TQ analyst (ThermoScientific, USA). FTIR ATR a FT Ramanova spektroskopie se ukázaly jakou rychlé a nedestruktivní metody citlivé na chemické složení rouskového pylu a pergy. Pomocí statistického vyhodnocení je následně možné od sebe oddělit jednotlivé vzorky těchto včelích produktů podle chemického složení a botanického původu a zároveň určit jejich homogenitu.

*Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 21-SVV/2018).*

## LITERATURA

1. Anželkovič B., Jevtić G., Marković J., Mladenović M., Peševa V.: Proceedings of the International Symposium on Animal Science, Belgrade-Zemun, 2014.
2. Kieliszek M., Piwowarek K., Kot A. M., Błażej S., Chlebowska-Śmigiel A., Wolska I.: Trends in Food Science & Technology 71, 170 (2018).

## 7L-03

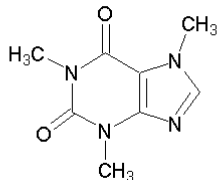
## STANOVENÍ KOFEINU V ČAJÍCH METODOU HPLC

**TEREZA KOLÁČKOVÁ, DANIELA SUMCZYNSKI**

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Ústav analýzy a chemie  
potravin, Vavrečkova 275, 760 01 Zlín, Česká republika  
kolackova@utb.cz

Nápoj ze sušených lístků rostliny *Camellia sinensis* L. patří k jednomu z nejoblíbenějších nápojů. Studie ukazují, že konzumace čaje může snížit riziko kardiovaskulárních onemocnění, což je připisováno vyšší antioxidační aktivitě spojené s vysokým obsahem fenolických látek<sup>1,2</sup>. Dle procesu výroby se dělí čaje na fermentované, polofermentované a nefermentované. Kofein, jedna z biologicky aktivních látek čaje, patří mezi rostlinné alkaloidy náležející do skupiny metylxantinů, stimulujících CNS. Kromě čaje je jeho vyšší množství také v kávě<sup>3</sup>. Pozitivní účinky kofeinu tedy spočívají např. ve zvýšení bdělosti a snížení únavy. Ovšem u citlivých osob může nadměrná spotřeba způsobit i problémy jako např. vysoký krevní tlak, bolest hlavy, nespavost, zvýšený tlukot srdce, nevolnost či nervozitu<sup>4,5</sup>. Dle vědeckého stanoviska European Food Safety Authority (EFSA) je stanoven bezpečný jednorázový příjem kofeinu až do 200 mg pro dospělého jedince vyjma těhotných žen a dětí<sup>6</sup>.

Metodou HPLC bylo zjištěno, že obsah kofeinu se pohyboval v rozmezí 34,5–36,8 mg/g u černých čajů, 18,3–22,4 mg/g u čajů zelených a 6,2–27,7 mg/g u oolong čajů.



Vzorec kofeinu

Tato práce vznikla za podpory grantu UTB ve Zlíně IGA/FT/2018/006.

## LITERATURA

1. Komes D., Horzic D., Belscak A., Ganic K. K., Vulic I.: *Food Res. Int.* 43, 167 (2010).
2. Bae I. K., Ham H. M., Jeong M. H., Kim D. H., Kim H. J.: *Food Chem.* 172, 469 (2015).
3. Jeon D. B., Hong Y. S., Lee G. H., Park Y. M., Lee Ch. M., Nho E. Y., Choi J. Y., Jamila N., Khan N., Kyong S. K.: *Food Chem.* 219, 443 (2017).
4. Rehman R., Ashraf S.: *Bulg. Chem. Commun.* 49, 823 (2017).
5. Smith A.: *Food Chem. Toxicol.* 40, 1243 (2002).
6. EFSA Panel Members: *EFSA J.* 13, 4102 (2015).

## 7P-01

**BIOLOGICKÝ ROZKLAD SMĚSNÝCH MATERIÁLŮ  
NA BÁZI TERMOPLASTIFIKOVANÉHO ŠKROBU  
URČENÝCH PRO ZEMĚDĚLSKÉ APLIKACE****MARKÉTA JULINOVÁ<sup>a</sup>, LUDMILA VAŇHAROVÁ<sup>a</sup>,  
MARTIN JURČA<sup>a</sup>, PETR DUCHEK<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Ústav inženýrství ochrany životního prostředí, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Vavrečkova 275, 760 01 Zlín, <sup>b</sup> Katedra materiálu a strojírenské metalurgie, Fakulta strojní, Západočeská univerzita v Plzni, Univerzitní 22, 306 14 Plzeň, Česká republika  
julinova@utb.cz

V současnosti je hlavním trendem využití škrobu na výrobu obalových materiálů na bázi termoplastifikovaného škrobu (TPS). Nicméně mezi nevýhody TPS patří retrogradace a neuspokojivé mechanické vlastnosti v suchém i vlhkém prostředí. Další podstatnou nevýhodou je jeho křehkost. Bylo zpozorováno, že při skladování a stárnutí podléhá TPS strukturálním změnám. Dochází k uvolňování změkčovadel a vody ze struktury. Tyto změny se projevují větší tuhostí a lámavostí materiálu. Proto byla velká část výzkumu TPS zaměřena na zlepšení vlastností pomocí ekologicky vhodných anorganických nebo organických plniv.

Hlavním cílem této studie bylo zkoumat vliv anorganického a organického plniva na rychlost biodegradace TPS materiálů (ve formě filmů) určených především pro zemědělské aplikace a agrochemii. Jako anorganická plniva byly použity komerčně dostupné minerální jíly s velikostí částic v nano rozměrech (Cloisite<sup>®</sup>Na<sup>+</sup>, Sabelil<sup>®</sup>-bentonit, Lutila<sup>®</sup>-bentonit, Kaolin, Silica powder, Křemelina). Jako organické plnivo byla zvolena odpadní celulóza, která je levná a snadno dostupná. Jedná se tak o zpracování odpadních materiálů. Vzhledem ke skutečnosti, že TPS plněné odpadní celulózą jsou více náchylné k adsorpci vlhkosti, byly otestovány také materiály vyztužené bambusovými vlákny a hydrofobizované fermeží.

Z výsledků biodegradčních respirometrických testů můžeme konstatovat, že kompatibilita a interakce mezi polymerní maticí a jíly nebo organickými plnivy nejsou v případě testovaných TPS materiálů (filmů) rozhodující pro rychlost a stupeň biologického rozkladu, i přesto že FTIR analýza potvrdila silné interakce mezi některými typy jílu (Lutila<sup>®</sup>-bentonite a Silika powder) a škrobem. Nepodařilo se najít prakticky žádnou souvislost mezi intenzitou interakcí jíl-škrob u jednotlivých materiálů a jejich konečnou biologickou rozložitelností. Rychlost biologického rozkladu závisela na rozpustnosti ve vodě (25 °C, 37 °C) a nasákavosti (relativní vlhkost 54 % resp. 100 %). TPS materiály, které měly nejvyšší procento nasákavosti a byly nejvíce ve vodě rozpustné, podléhaly biologickému rozkladu nejrychleji. TPS materiály hydrofobizované fermeží se rozkládaly nejhůře ze všech testovaných materiálů. Hydrofobizací bylo sice dosaženo zvýšené odolnosti proti vlhkosti, avšak za cenu snížené biologické rozložitelnosti.

*Tato práce vznikla za podpory interního grantového projektu Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně IGA/FT/2018/009.*

## 8L-01

## THERMAL PHYSICS OF NANOSTRUCTURED MATERIALS: THERMODYNAMIC (TOP-DOWN) AND QUANTUM (BOTTOM-UP) ISSUES

JAROSLAV ŠESTÁK

New Technology – Research Centre in the Westbohemian Region, West Bohemian University, Universitní 8, 301 14 Pilsen, Czech Republic  
sestak@fzu.cz

The subject is focusing on the newly adjusted thermodynamic degree of freedom which is *dimension*. Nanoworld thermodynamic groundwork unfolds from a single phase division into  $\alpha$  and  $\beta$  separated by interface the curvature of which request the higher pressure on the concave side with respect to the surrounding,  $p$ , i.e.,  $p_\alpha > p_\beta = p$  (Young-Laplace effect). It can happen by splitting up (division, cleavage) or nucleation, as well as by elastic deformation (strain) of already existing surface due to the impact if isotropic or nonisotropic stress,  $dw_{\text{surf}} = \gamma dA$ , where the scalar parameter  $\gamma$  (defined as a specific surface energy) is always positive (due to the stability criteria) and is independent on the surface,  $A$ . Performed work,  $dw_{\text{surf}} = f dA_{\text{elast}} = f A d\varepsilon$ , causes elastic deformation (*strain*  $\varepsilon$ ) of the original surface assuming  $d\varepsilon = dA/A$ . Unite specific surface work is called surface stress,  $f$ , and possesses generally tensor denomination but for isotropous environment become scalar following  $w_{\text{surf}} = f A_{\text{elast}}$ . As a result, we can say that any nanosystem possesses its size as an extra degree of freedom, equilibrium of which requires a modification of traditional macroscopic thermodynamics. Everything factually originates from the Kelvin historical relation,  $p/p_\infty = 2Vg/(RT_r)$ , and the related equation for temperatures,  $T/T_\infty = 2Vg/(\Delta H r)$ . In the other words it means that if we want to create any equilibrium modification for a variation of curvature upon the change of external conditions ( $T, p$ ) we have to change either pressure (from  $p_{\beta_\infty}$  to  $p_{\beta r}$  under constant  $T_\infty$ ) or temperature (from  $T_\infty$  to  $T_r$  under constant  $p$ ) so that the change in the difference of bulk chemical potentials  $\Delta\mu$  is compensated by negative  $2\gamma V_{\text{cm}}(1/r)$ . It associates similar effect as rapidly changed temperature when observing real shapes kinetic phase diagrams (temperature shifts) providing a new space for novel thermophysical studies including impact of eccentricity of heat transfer, heat capacities or phase relations in nanodimensional space. Modern description came with the paper introducing the term ‘microcluster’ as a new phase of matter and book showing that they cannot be formed fully accidentally but the atoms are combined according some ‘magic numbers’ (e.g. Fibonacci following the calcium clusters series 561, 923, 1415, 2057, etc). The particle is in order of size ( $\sqrt[3]{N} d$ ) where  $N$  is the number of atoms and  $d$  is their diameter showing that for  $d \sim 2-3 \text{ \AA}$  is  $N \sim 2-10$  nm. There exist metal model clusters describing systems up to 80 atoms. The number of atoms of a nanoparticle can be derived from the Loschmidt number giving  $2.6 \times 10^{19}$  atoms in a cubic cm of a substance so that about  $10^4$  atoms are contained in nanoparticle cube with a side of 100 nm. It associates with a notion of the so-cooled Planck’s mass amounting  $2.17 \times 10^5 \text{ g}$  and specifying the boundary of quantum world. In

a crystallographic view spheres of a given radius or regular tetrahedral with a given edge can be assumed as the most closely packed in space, i.e., crowded so that the ratio between the filled part of the space and the unfilled part would be as large as possible. Using polyhedra the whole space could be filled by appropriate packing of the congruent specimens of these polyhedra starting e.g. from a cube, edge,  $a$ , (surface/volume:  $A/V \cong 6/a$ ), tetrahedron, via penta-, hexa-, hepta-, nona-, deca-, dodeca-, icosahedron, triacontahedron, hexacontahedron, enneacontahedron, up to an infinite faceted ultimate sphere of radius,  $r$ , ( $A/V \cong 2/r$ ). Another important process of covering a space with polyhedra is the so called stellation, following the historical Kepler constructions (year 1611) of the first two other stellar polyhedrons from dodecahedron. This multiplication process of self-repetition yields the specificity of a self-similar system which shows statistically the same properties at many scales and which is well known as sourced on the Koch curves (i.e. snowflakes), further defining the self-similarity dimension in the sphere of fractals expressing thus the complexity of an object and giving the intermediary to chaos (supposing both ways from the top to bottom and vice versa). Similarly assumed clustering is close to the real pattern of a structure evolution from disorder (chaos), local ordering up to periodic structures sometimes including structural code or even inorganic gene and became close to the topic of chemistry beyond the molecule and special associated as superatoms exhibiting the quantum properties of nanoclusters (i.e. quantum nature of nanostes).

## REFERENCES

1. Schevchenko V. Y.: *Search of nanostate chemistry, biology, physics*, Lema, Petersburg 2011.
2. Leitner J.: *Struktura nanomateriálů – skripta VŠChT* (2011) <<http://www.vscht.cz/ipl/nanomaterialy/uvod.htm>>.
3. Mareš J. J., Šesták J.: *J. Therm. Anal. Cal.* 82, 681 (2005).
4. Šesták J.: *Composite materials and nano-structured systems: generalized description*. Invited lecture, ICCE-22: International conference on composites and nano-engineering, Malta, 2014.
5. Šesták J.: *Thermal physics of nanostructured materials: Thermodynamic (top-down) and quantum (bottom-up) issues*. Invited lecture, GNC-18: 4<sup>th</sup> Global Nanotechnology Congress and Expo, Dubai 2018, 2014.
6. Šesták J.: *J. Therm. Anal. Cal.* 120, 129 (2015).
7. Šesták J., Hubík P., Mareš J. J.: *Self-organized periodic processes: from macro-layers to micro-world of diffusion and down to the quantum aspects of light*. In: *Thermal Physics and Thermal Analysis* (Šesták J., Hubík P., Mareš J. J. eds), London, Springer 2017, pp 131-158 (ISBN: 978-3-31945897-7).



**8L-02****ANTIOXIDANT EFFECTS OF KERATIN HYDROLYSATES ON POLYETHYLENE GLYCOL STUDIED BY NONISOTHERMAL DSC****ZUZANA CIBULKOVÁ, ANNA VYKYDALOVÁ, PETER ŠIMON, TIBOR DUBAJ***Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak Technical University, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia  
zuzana.cibulkova@stuba.sk*

Keratins, naturally occurring fibrous biopolymers, are secondary raw materials from leather and food industry. These biomaterials are suitable for a range of different technical or medicinal applications. Due to the high content of thioaminoacids – methionine and cysteine and the presence of intermolecular disulfide bonds in their structure, the keratin hydrolysates can act as antioxidants<sup>1</sup>.

Thermooxidative degradation of materials occurs in two stages. The first one is the induction period (IP), where seemingly no chemical reaction takes place. At the end of the induction period oxidation begins. Oxidation of the material is connected with a sudden change in material properties. Therefore is the length of IP often taken as a measure of the material stability<sup>2</sup>.

In this study, the antioxidant properties of several keratin hydrolysates in polyethylene glycol matrix (PEG) was studied using nonisothermal DSC. From the nonisothermal measurements the kinetic parameters and IPs were obtained using Berthelot-Hood temperature function<sup>2</sup>. In order to characterize the antioxidant effect of individual keratin hydrolysates, protection factors and antioxidant effectiveness have been calculated. Their values document, that the antioxidant effect of keratin hydrolysates is dependent on the hydrolysis technology. In some cases only negligible antioxidant effect on PEG has been observed. Generally, the antioxidant effect of keratin hydrolysates can be compared to the effect of lignin in polypropylene matrix<sup>3</sup>.

*Financial support from the Slovak Research and Development Agency (APVV-15-0124) is gratefully acknowledged. The financial support from the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA 1/0592/15) is also acknowledged. The financial support from the Structural Funds of EU, OP R&D by implementation of the project “University Science Park of STU Bratislava” (ITMS 26240220084) is also acknowledged.*

## REFERENCES

1. Matyašovský J., Sedliačik J., Valachová K., Novák I., Jurkovič P., Duchovič P., Mičušík M., Kleinová A., Šoltés L.: *Journal of the American Leather Chemists Association* 112, 319 (2017).
2. Šimon P., Hynek D., Malíková M., Cibulková Z.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 93, 817 (2008).
3. Gregorová A., Cibulková Z., Košíková B., Šimon P.: *Polym. Degrad. Stab.* 89, 553 (2005).

**8L-03****THERMOOXIDATIVE STABILITY OF AGED COAXIAL CABLE INSULATION USING NON-ISOTHERMAL DSC MEASUREMENTS****ANNA VYKYDALOVÁ, ZUZANA CIBULKOVÁ, TIBOR DUBAJ, PETER ŠIMON***Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37, Bratislava, Slovakia  
anna.vykydalova@stuba.sk*

Polymer materials are sensitive to changes in chemical structure due to the effect of external conditions such as heat, light and radiation in the presence of oxygen. Chemical and physical changes in polymer materials caused by these factors are generally known as ageing or degradation of materials and are obviously unwanted. Thermooxidative degradation represents one of these undesirable aspects. It generally takes place in two stages: the first one is the induction period and the second one is the oxidation itself. At the end of the induction period, sudden changes in materials properties occur, so, that its length is often considered a measure of the material stability<sup>1</sup>.

The aim of this work was to study thermooxidative stability of coaxial cable used in a nuclear power plant. The samples contained the original unaged cable and cable aged by various degradation doses. The accelerated ageing of the cable was performed by heat,  $\gamma$ -radiation and combination of these factors. Non-isothermal DSC measurements were chosen to study the thermooxidative stability of the samples. Kinetic parameters of the induction periods were obtained from the experimental data using isoconversional method. They enabled to predict the thermooxidative stability of the studied materials. Induction periods were calculated using non-arrhenian Berthelot–Hood temperature function<sup>1</sup>. The stability of materials was evaluated by two criteria: the length of the IP and the residual stability. Based on the obtained results, it has been demonstrated that the heat, irradiation and combination of heat and  $\gamma$ -radiation exhibited a negative effect on the lifetime of the cable. In this case, the thermooxidative stability of cable coating decreases with increasing degradation dose.

*Financial support from the Slovak Research and Development Agency (APVV-15-0124) is gratefully acknowledged. The financial support from the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA 1/0592/15) is also acknowledged. The financial support from the Structural Funds of EU, OP R&D by implementation of the project “University Science Park of STU Bratislava” (ITMS 26240220084) is also acknowledged.*

## REFERENCE

1. Šimon P., Hynek D., Malíková M., Cibulková Z.: *J. Therm. Anal. Cal.* 93, 817 (2008).

**8L-04****EVALUATION OF THERMOOXIDATIVE STABILITY OF MATERIALS STUDIED BY THERMOANALYTICAL TECHNIQUES****PETER ŠIMON, ZUZANA CIBULKOVÁ, TIBOR DUBAJ, ANNA VYKYDALOVÁ***Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia  
peter.simon@stuba.sk*

Oxidation of materials is connected with evolution of heat or mass changes so that the thermoanalytical techniques such as the differential scanning calorimetry (DSC) or the thermogravimetry (TG) can be applied for its study. Thermooxidative degradation of organic materials occurs in two stages. The first one is the induction period (IP), where seemingly no chemical reaction takes place; then, the main oxidation stage proceeds. At the end of IP mostly a sudden deterioration of material properties occurs. Therefore, the length of IP is often taken as a measure of the material thermooxidative stability<sup>1</sup>.

In this paper, kinetic description of the lengths of IP will be presented<sup>1</sup>. The method is based on the generalized rate equation and, in fact, it is a special kind of isoconversional method. It will be shown how to use the kinetic parameters obtained for the predictions of the service life of materials. Application of non-arrhenian temperature functions will be justified<sup>2</sup> and the concepts of the protection factor, residual stability and antioxidant effectiveness will be introduced<sup>3,4</sup>. Application of the method will be demonstrated on the case studies of the oxidative degradation of biodiesels<sup>5</sup> and the performance of antioxidants for rubber matrices evaluated by differential scanning calorimetry<sup>6</sup>.

*Financial support from the Slovak Research and Development Agency (APVV-15-0124) and from the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA 1/0592/15) is acknowledged. The financial support from the Structural Funds of EU, OP R&D by implementation of the project “University Science Park of STU Bratislava” (ITMS 26240220084) is also acknowledged.*

**REFERENCES**

- Šimon P.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 84, 263 (2006).
- Šimon P., Hynek D., Malíková M., Cibulková Z.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 93, 817 (2008).
- Cibulková Z., Šimon P., Lehocký P., Balko J.: *Polym. Degrad. Stab.* 87, 479 (2005).
- Šimon P., Fratričová M., Schwarzer P., Wilde H.-W.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 84, 679 (2006).
- Polavka J., Paligová J., Cvengroš J., Šimon P.: *J. Amer. Oil Chem. Soc.* 82, 519 (2005).
- Cibulková Z., Šimon P.: *Kautsch. Gummi Kunst.* 71, 37 (2018).

**8L-05****STUDY OF THERMAL BEHAVIOUR AND CRYSTALLIZATION KINETICS IN SYSTEM  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-Re}_2\text{O}_3$** **ANNA PRNOVÁ, JANA VALÚCHOVÁ, MILAN PARCHOVIANSKÝ, ALFONZ PLŠKO, ROBERT KLEMENT, DUŠAN GALUSEK***FunGlass – Vitrum Laugaricio – Joint Glass Center of IIC SAS, TnU AD, and FChPT STU, Študentská 2, Trenčín, SK – 911 50, Slovak Republic  
anna.prnova@muni.sk*

Rare earth aluminate-based ceramics materials represent an interesting approach to ceramics with important mechanical properties (hardness, fracture strength/toughness), thermal stability and creep resistance at elevated temperatures. These properties designate these materials for various aerospace (jet aircraft engines) and industrial (high efficiency power generation gas turbines components) applications. Glasses in system  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-RE}_2\text{O}_3$  (RE=Y, La) with high alumina content Table I, were prepared in the form of glass microspheres (Figure 1.) by flame synthesis<sup>1</sup>.

Table I  
List of prepared compositions

Sample name	$\text{Al}_2\text{O}_3$ [mol.%]	$\text{Y}_2\text{O}_3$ [mol.%]	XRD
AY-E	76.8	23.2	amorphous
AY-G	81.8	18.2	YAG
ALa-E	76.2	23.8	amorphous
ALa-G	50.0	50.0	LAP

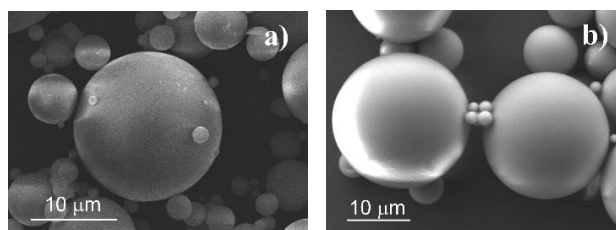


Fig. 1. SEM micrographs of prepared system: a) AY-E sample, b) ALa-E sample. Figure 1. SEM micrographs of prepared system: a) AY-E sample, b) ALa-E sample

The HT XRD results were compared with the results of DSC measurements, conducted in the temperature range 35–1200 °C at heating rates 2, 4, 6, 8 and 10 °C/min. In DSC records of samples with eutectic compositions two exothermic peaks were observed, on the contrary in DSC records samples with composition of corresponding aluminates only one exothermic effect was observed.

Table II  
The kinetics parameters of prepared samples

Sample	peak	m	A ± sd [min <sup>-1</sup> ]	E <sub>app</sub> ± sd [kJ mol <sup>-1</sup> ]
YAG		4.0	(5.2±9.6)×10 <sup>48</sup>	1100±10
AYE	first	1.5	(5.1±3.5)×10 <sup>52</sup>	1222±5
	second	2.0	(4.7±2.5)×10 <sup>71</sup>	1751±4
ALaP		2.0	(1.6±1.1)×10 <sup>48</sup>	1050±5
ALAE	first	2.0	(4.6±1.7)×10 <sup>47</sup>	1087±3
	second	2.5	(1.6±0.5)×10 <sup>44</sup>	1014±3

The crystallization kinetics of prepared glasses were examined in terms of JMAK model, modified for non-isothermal conditions, and kinetic triplet (frequency factor  $A$ , apparent activation energy  $E_{app}$ , and the Avrami coefficient  $m$ ) was determined (Table II) using RSS,  $R^2_{adj}$ , and AIC criteria. Isothermal crystallization experiments were performed and morphology of crystallised microspheres was studied by SEM. The obtained results are discussed and reported.

*This paper is a part of dissemination activities of project FunGlass. This project has received funding from the European Union's Horizon 2020, research and innovation programme under grant agreement No 739566. The financial support of this work by the projects APVV 0014-15, VEGA 1/0527/18, VEGA 2/0026/17 is gratefully acknowledged.*

#### REFERENCES

1. Prnová A., Galusek D., Hnatko M., Kozánková J., Vávra I.: *Ceramics – Silikáty* 55, 208 (2011).
2. Pechini M. P.: Method of preparing lead and alkaline – earth titanates and niobates and coating method using the same to form a capacitor. U.S. Pat. No. 3330697 (1967).

#### 8L-06

### TERMICKÝ ROZKLAD NANOSTRUKTURNÍCH LITHNÝCH, SODNÝCH A DRASELNÝCH METATITANÁTŮ

**MONIKA MOTLOCHOVÁ<sup>a</sup>, VÁCLAV SLOVÁK<sup>b</sup>, EVA PLÍŽINGROVÁ<sup>a</sup>, JAN ŠUBRT<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i., 250 68 Řež,

<sup>b</sup> Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, Česká republika  
motlochova@iic.cas.cz

Lithné, sodné a draselné soli metatitanicité kyseliny byly připraveny extrakcí sulfátových iontů ze struktury titanyl sulfátu a jejich výměnou za hydroxylové skupiny z LiOH, NaOH a KOH, zatímco jejich Ti-O kostra zůstala zachována<sup>1,2</sup>. Výsledné materiály vykazují specifické strukturální vlastnosti, které byly popsány metodami skenovací a transmisní elektronové mikroskopie, Rtg difrakce a termické analýzy spojené s hmotnostní spektrometrií.

Získané vzorky mají pravidelné tyčinkové krystaly

o velikosti asi 10 × 2 μm. Rtg difrakce prokázala, že hydrolyzní produkty jsou amorfni. Velikost a morfologie nežíhaných materiálů zůstává zachována i po vyžhání do 1000 °C, v případě vzorku sráženého LiOH nebyly v průběhu zahřívání pozorovány žádné změny tvaru krystalů, vzorek srážený NaOH v průběhu zahřívání krystalizuje ve větší krystaly, vzorek srážený KOH se skládá z tyčinek pokrytých nanovláknky.

Složení větších krystalů/nanovláken bylo porovnáno se složením tyčinek a bylo zjištěno, že se strukturálně ani chemickým složením neliší.

První krok termického rozkladu je charakterizován endotermickým píkem na DTA křivce, který je spojen s uvolněním vody a oxidu uhličitého. Termický rozklad do 300 °C je velmi podobný pro vzorky srážené LiOH a NaOH, ale materiál srážený KOH se chová odlišně. Zatímco je TIG-KOH stabilní do 150 °C, rozklad TIG-LiOH a TIG-KOH začíná hned na začátku ohřevu.

Při vyšších teplotách (400–650 °C dle vzorku) dochází ke krystalizacím amorfních vzorků ve směsi anatasu a titanátů, které byly detekovány jako exotermické píky na DTA a dále interpretovány pomocí HT-XRD<sup>3</sup>.

Výše popsané syntézní kroky otevírají nové způsoby přípravy lithných, sodných a draselných titanátů s kontrolovatelnou velikostí a tvarem.

*Tato práce vznikla za podpory grantu TH0202110.*

#### LITERATURA

1. Palkovska M., Slovak V., Subrt J., Bohacek J., Barbierikova Z., Brezova V., Fajgar R.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 125, 1071 (2016).
2. Klementova M., Motlochova M., Bohacek J., Kupcik J., Palatinus L., Plizingrova E., Szatmary L., Subrt J.: *Cryst. Growth Des.* 17, 6762 (2017).
3. Motlochova M., Slovak V., Plizingrova E., Klementova M., Bezdicka P., Subrt J.: *Therm. Acta*, under review.

#### 8L-07

### CALORIMETRIC MEASUREMENTS OF SYSTEMS BASED ON Fe-C-Cr

**EUBOMÍRA DROZDOVÁ, BEDŘICH SMETANA, MARIO MACHŮ, SIMONA ZLÁ, LENKA ŘEHÁČKOVÁ, VLASTIMIL NOVÁK, PETRA VÁŇOVÁ**

Faculty of metallurgy and materials engineering,  
VŠB-Technical University of Ostrava, 17. listopadu 15,  
708 33 Ostrava-Poruba, Czech Republic  
lubomira.drozдова@vsb.cz

The paper deals with a study of heat capacities of three model alloys based on Fe-C-Cr. Alloys contained carbon of 0.34 wt. % and chromium in a range of 0.92–4.76 wt. %. Heat capacities were studied in a low and high-temperature region. The experimental heat capacities (“apparent heat capacities”) were obtained using Differential Scanning Calorimetry (DSC) with use of a continuous method. The Setaram MHTC (Multi High-Temperature Calorimeter) 96 with a 3D DSC sensor was

used for experiments with the use of DSC method. Measurements were done in an inert atmosphere of pure argon by a heating rate of 5 °C/min. The experimental data were compared and discussed with the calculation results using SW Thermo-Calc with the use of the TCFE8.1 (Thermo-Calc Fe-based alloys) database. Structural and phase analysis was performed with the use of the Olympus IX70 optical microscope.

Experimentally and theoretically obtained values for all alloys show the same trend in the temperature range 457.15–1017.15 K, 1104.15–1713.15 K and 1804.15–1853.15 K. The experimentally obtained heat capacities are within the range of 0.44–1.19 J/K·g and the calculated ones are in the range of 0.52–1.11 J/K·g. The highest value of the experimentally determined maximum in the phase transformation of  $\alpha \rightarrow \gamma$  is 4.07 J/K·g and the calculated maximum of this transformation is 7.89 J/K·g. The highest value of the experimentally determined maximum in the melting range is 11.68 J/K·g and the calculated maximum is 9.42 J/K·g. Last two values are for alloy, which has the highest content of chromium.

The dependences of heat capacity on common variables (temperature, pressure) are also commonly used as the input data in software packages (e.g. ProCast, Magmasoft, ANSYS Fluent) that are applicable in the field of applied research for simulations of technological processes<sup>1</sup>.

*This paper was created on the Faculty of Metallurgy and Materials Engineering in the Project No. LO1203 "Regional Materials Science and Technology Centre – Feasibility Program" funded by Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic, GAČR project No. 17-18668S, student project SP2018/60, SP2018/93 and of the Moravian-Silesian Region as part of the project "Support of gifted students of doctoral studies at VŠB-TUO" (no.: 04766/2017 / RRC).*

#### REFERENCE

1. Smetana B., Žaludová M., Tkadlečková M., et al.: J. Therm. Anal. Calorim. 112, 473 (2013).

#### 8L-08

##### KINETICKÉ STUDIUM POVRCHOVÉ OXIDACE UHLÍKATÝCH MATERIÁLŮ

**GABRIELA HOTOVÁ, VÁCLAV SLOVÁK**

Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03, Ostrava, Česká republika  
G.Hotova@seznam.cz, Vaclav.Slovak@osu.cz

Kinetické studium nízkoteplotní (<300 °C) povrchové oxidace uhlíkatých materiálů bylo provedeno za účelem zjištění optimálních parametrů (teplota, obsah kyslíku v atmosféře) pro přípravu maximálně povrchově oxidovaného materiálu.

Neizotermické termogravimetrické experimenty byly provedeny zahříváním vzorku uhlíkatého materiálu v oxidační atmosféře (20, 50 a 80% směs O<sub>2</sub>:N<sub>2</sub>) rychlostí 10 K min<sup>-1</sup> do teploty 1000 °C. Na základě provedených neizotermických experimentů byly zjištěny teploty vhodné pro izotermické studium povrchové oxidace uhlíkatých materiálů. Samotné

izotermické experimenty byly provedeny zahříváním ~5 mg vzorku na zvolenou teplotu po dobu 2 hodin.

Na základě provedených izotermických experimentů lze předpokládat, že průběh nízkoteplotní oxidace uhlíkatých materiálů lze popsat třemi reakcemi: i) vznik kyslíkatých funkčních skupin, ii) samotná oxidace uhlíkatých materiálů vedoucí ke shoření vzorku a iii) rozklad vzniklých kyslíkatých funkčních skupin.

Uvedený model tří reakcí byl použit k získání kinetické rovnice celého procesu, která umožňuje simulovat oxidaci za různých podmínek a zjistit optimální parametry pro maximální míru povrchové oxidace. Pro popis oxidace uhlíkatých materiálů byl použit zkrácený Šestak-Berggren kinetický model a kinetické parametry byly nalezeny prostřednictvím nelineární regrese.

Zjištěné optimální parametry v 20, 50 a 80% atmosféře kyslíku vedly k ~4,5% hmotnostnímu nárůstu (odpovídající vytvořeným kyslíkatým skupinám), což bylo ověřeno i experimentálně (viz Schéma 1, (a)).

Zahrnutí závislosti parciálního tlaku do kinetické rovnice vedlo k predikci optimálních parametrů (100% O<sub>2</sub>, 201 °C, + 5,48 %), kterých nebylo možné experimentálně dosáhnout (Schéma 1, (b)). Zřejmý rozdíl mezi teoreticky a experimentálně naměřeným průběhem TG křivky je pravděpodobně způsoben nevhodným popisem závislosti na tlaku (model p<sub>O<sub>2</sub></sub><sup>p</sup>), což způsobilo snížení věrohodnosti a schopnosti predikce optimálních parametrů.

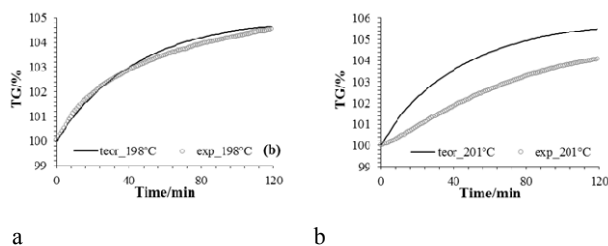


Schéma 1. Porovnání optimálních parametrů (teor., černá čára) pro maximální chemisorpci kyslíku na povrchu uhl. materiálů s experimentálně (exp, šedé body) naměřenými daty

#### 8L-09

##### KINETIKA KONDENZACE RESORCINOLU S FORMALDEHYDEM Z NEIZOTERMNÍCH DSC MĚŘENÍ

**VÁCLAV SLOVÁK, EVA KINNERTOVÁ**

Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, Česká republika  
vaclav.slovak@osu.cz

Acidobazicky katalyzovaná sol-gel kondenzace resorcinolu (R) s formaldehydem (F) je prvním krokem přípravy tzv. resorcinol-formaldehydových gelů, nejběžnějších prekursorů aplikačně zajímavých porézních uhlíkatých xero-, kryo- nebo aerogelů. Vlastnosti výsledných uhlíkatých materiálů lze účinně kontrolovat mj. podmínkami kondenzace (počáteční pH, teplota, doba kondenzace,

koncentrace reaktantů), vlivy jednotlivých faktorů jsou však vesměs studovány pouze empiricky. Pochopení souvislosti mezi podmínkami přípravy a vlastnostmi výsledných uhlíkatých materiálů by mohl přinést kinetický popis kondenzační reakce.

Jednou z mála možností přímého experimentálního sledování exotermické kondenzace R a F ve vodném roztoku je použití metody DSC. Po nalezení vhodných koncentračních poměrů reaktantů a katalyzátoru lze měřit uvolněné teplo při ohřevu reakční směsi do 100 °C v uzavřeném hliníkovém kelímku s různou rychlostí ohřevu.

Naznačeným způsobem byla sledována kondenzace R a F katalyzovaná  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  (C) v reakčních směsích s molárními poměry R/F = 0,5 a R/C = 25 nebo 50, s hmotnostním obsahem reaktantů 20 nebo 40 %.

Analýzou získaných dat (izokonverzní metody a nelineární model-fitting) bylo potvrzeno, že průběh kondenzační reakce je dvoustupňový (vznik solu a následná gelace). Rychlost prvního reakčního kroku je určena rychlostí chemické reakce a vyhovuje pro něj kinetický model reakce druhého řádu. Druhý reakční krok je řízen difúzí, která je omezena díky rostoucí viskozitě kondenzující směsi, a lze jej nejlépe popsat kinetickým modelem R3 (reakce na povrchu sférické částice). Zjištěné hodnoty aktivačních energií obou reakčních kroků ukázaly, že pouze první krok je výrazně ovlivněn množstvím přítomného katalyzátoru.

Získané výsledky (konkrétní kinetická rovnice) umožňují predikovat průběh kondenzace R a F a odhadnout okamžik vzniku gelu v závislosti na teplotě nebo rychlosti ohřevu, zatím v rozmezí studovaných hodnot.

## 8L-10

### ODBORNÁ SKUPINA TERMICKÉ ANALÝZY A JEJÍ SOUČASNÉ AKTIVITY

#### PETRA ŠULCOVÁ

*Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika  
petra.sulcova@upce.cz*

V uplynulém roce oslavila Odborná skupina termické analýzy (OSTA) při České společnosti chemické 45. výročí svého vzniku a při této příležitosti byl organizován druhý ročník Termoanalytického semináře, který se uskutečnil 10. 10. 2017 v Ostravě a jehož účastníci si připomněli toto výročí.

Přítom Odborná skupina termické analýzy (OSTA) je aktivní od roku 1972 a od svého vzniku je členem celosvětově působící odborné společnosti International Confederation for Thermal Analysis and Calorimetry (ICTA, od r. 1992 jako ICTAC – rozšíření o kalorimetrii), která je asociovaná s IUPAC. Mezinárodní konfederace pro termickou analýzu byla založena v roce 1965 za spolupůsobnosti také českých zástupců R. Bárty a J. Šestáka.

Národní skupina organizuje semináře a zvané přednášky, které jsou zaměřeny jak na teoretické základy, tak i přístrojovou techniku pro termickou analýzu. Cílem je umožnit především studentům, mladým i zkušeným vědcům

výměnu poznatků a zkušeností s využíváním termoanalytických technik v různých oblastech výzkumu.

Česká odborná skupina aktivně spolupracuje s dalšími národními odbornými skupinami zejména na Slovensku, ale také v Polsku, Maďarsku či Německu a také se účastní termoanalytických konferencí, které tyto národní odborné skupiny pořádají.

V rámci odborného programu sjezdu ve Zlíně je sekce termické analýzy zařazena již popáté. Vůbec poprvé se sekce s názvem „Termická analýza a kalorimetrie“ objevila v programu 62. Sjezdu asociací českých a slovenských chemických společností, který se konal v Pardubicích v roce 2010. Stala se tak historicky významnou, neboť se jednalo o první společné setkání termoanalytiků z Česka a Slovenska. Toto první setkání bylo symbolické pro Pardubice také tím, že termická analýza vždy měla a stále má na Fakultě chemicko-technologické Univerzity Pardubice hluboké kořeny. Tato sekce byla součástí programu také na 64. sjezdu v Olomouci (2012), 66. sjezdu v Ostravě (2014) a 68. sjezdu v Praze (2016).

Na webových stránkách OSTA ([www.thermal-analysis.cz](http://www.thermal-analysis.cz)) jsou k dispozici aktuální informace o odborné skupině včetně akcí z oblasti termické analýzy nejen v České republice, ale také ve světě, přičemž v letošním roce se koná 12<sup>th</sup> European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry (Brasov, Rumunsko), kde má Česká republika také své zástupce.

**9L-01****POLYMERACE  $\epsilon$ -KAPROLAKTONU INICIOVANÁ SLOUČENINOU NA BÁZI BIOGENNÍHO KOVU – BIS( $\epsilon$ -KAPROLAKTAMÁTEM) VÁPENATÝM****LENKA MALINOVÁ, ALENA JURÁSKOVÁ, JÚLIA MACEJKOVÁ, JIŘÍ BROŽEK***Ústav polymerů, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 - Dejvice, Česká republika**lenka.malinova@vscht.cz*

Poly( $\epsilon$ -kaprolakton) (PCLO) je semikrystalický biodegradovatelný a biokompatibilní polyester. Pro jeho pomalou degradaci se uplatňuje v systémech řízeného uvolňování léčiv a v chirurgii jako povlak na vstřebatelné šicí materiály. Díky jeho lepším reologickým a viskoelastickým vlastnostem v porovnání s ostatními vstřebatelnými polymery je PCLO používán jako fixační materiál a v tkáňovém inženýrství jako podpurné „lešení“ například pro chrupavky nebo srdeční chlopně<sup>1</sup>.

Jedním z nejvyužívanějších iniciátorů polymerace  $\epsilon$ -kaprolaktonu (CLO) je 2-ethylhexanoát cínatý ( $\text{Sn}(\text{Oct})_2$ ) v kombinaci s alkoholem jako koiniciátorem<sup>2</sup>. Tento iniciátor je oblíbený zejména pro svou vysokou aktivitu, ale je podezřelý z cytotoxicity. Proto se v současné době mnoho vědeckých skupin zaměřuje na využití iniciátorů na bázi biogenních kovů, tj. vápníku, hořčíku a zinku.

Příspěvek je zaměřen na otestování polymerační aktivity, dosud neprostudovaného iniciátoru, bis( $\epsilon$ -kaprolaktamátu) vápenatého ( $\text{CLA}_2\text{Ca}$ ) při polymeraci CLO. Vzhledem k omezené rozpustnosti a špatné dispergovatelnosti  $\text{CLA}_2\text{Ca}$  v monomeru byly nejprve provedeny polymerace CLO v roztoku toluenu. Průběh polymerace byl sledován v teplotním rozmezí 50–90 °C s různou koncentrací monomeru v toluenu. Zajímavým výsledkem bylo, že vzorky připravených PCLO vykazovaly vysoké obsahy krystalické fáze (63–87 %). Poté byla naše pozornost zaměřena na možnost provedení polymerace CLO iniciované  $\text{CLA}_2\text{Ca}$  v monomerní fázi. Tyto polymerace byly provedeny tak, že byla nejprve připravena disperze iniciátoru v  $\gamma$ -butyrolaktonu, což umožňovalo dobrou dispergaci  $\text{CLA}_2\text{Ca}$  v celém objemu monomeru. Opět byl sledován průběh polymerace v teplotním rozmezí 50–90 °C při různé koncentraci iniciátoru. Také jako u roztokové polymerace byl pozorován vysoký podíl krystalické fáze ve vzorcích. Nakonec byly porovnány termické a mechanické vlastnosti PCLO získaného iniciací  $\text{CLA}_2\text{Ca}$  s PCLO, který byl iniciován komerčně využívaným  $\text{Sn}(\text{Oct})_2$ .

*Tato práce vznikla za podpory VŠCHT Praha.***LITERATURA**

1. Woodruff M., Hutmacher D.: Prog. Polym. Sci. 35, 1217 (2010).
2. Labet M., Thielemans W.: Chem. Soc. Rev. 38, 3484 (2009).

**9L-02****ZESÍTĚNÍ HYALURONANU – VLVIV HYDRAZIDOVÝCH LINKERŮ NA VLASTNOSTI HYDROGELU****PETRA ŠEDOVÁ, PETER ŠILHÁR, RADOVAN BUFFA, LENKA KOVÁŘOVÁ, HANA VÁGNEROVÁ, JIŘÍ BEDNAŘÍK***Contipro, Dolní Dobrouč 401, 56102 Dolní Dobrouč, Česká republika**sedova@contipro.com*

V současné době medicína řeší problémy regenerace organismu poškozeného současným stylem života. Pro zlepšení regenerace organismu – při obnově tkání se s výhodou užívají hydrogely připravené zesítením biokompatibilních polymerů. Jedním z nich je hyaluronan, lineární polysacharid tvořený opakující se disacharidovou jednotkou  $[(1\rightarrow4)\text{-}\beta\text{-D-GlcA-(1}\rightarrow3)\text{-}\beta\text{-D-GlcNAc-}]$ , který hraje významnou signální roli během dynamických buněčných procesů, při morfogenezi, zánětech, rakovině či hojení ran<sup>1</sup>.

Pro tkáňové inženýrství se využívají hydrogely připravené za fyziologických podmínek, při kterých nevznikají nežádoucí vedlejší látky. Tuto podmínku splňuje zesítení aldehydů a hydrazidů za vzniku hydrazonů, které se vyznačují vysokou reaktivitou, vysokými výtěžky a jako vedlejší produkt vzniká netoxická voda. Naše studie srovnává tvorbu hydrogelů připravených reakcí polyaldehydu hyaluronanu<sup>2</sup> (HA-OX), nenasyceného polyaldehydu (DHA-OX) s linkery obsahujícími různý počet hydrazidových skupin (dihydrazid adipové kyseliny (**I**);  $N,N',N''$ -tris(hexanoyl-hydrazid-6-yl) triamid fosforečné kyseliny (**II**); 4-arm-PEG-2K-hydrazid (**III**)). MTT metoda byla použita pro získání prvotní informace o cytotoxicitě. Z výsledků vyplývá, že linkery jsou v koncentraci použité pro zesítení necytotoxické (nedochází ke změně viability myších fibroblastů vzhledem k neovlivněné kontrole). Zesítení 2% HA-OX vedlo k tvorbě gelu již po 5 h, delší čas však byl potřebný pro jeho zrání. Kinetika tvorby produktů (Schiffových bází) ve fosfátovém pufru (pH 8,8) byla sledována pomocí signálu v <sup>1</sup>H NMR (7,5–7,7 ppm). Gely byly charakterizovány botnavostí (%) a jejich mechanické vlastnosti Youngovým modulem (Tabulka I).

	Botnavost [%]		Youngův modul [kPa]
	24 h	48 h	48 h
<i>I</i>	232	218	5,0
<i>II</i>	194	183	5,3
<i>III</i>	269	220	5,1

**Tabulka I**

*Všechny informace uvedené v abstraktu, které lze patentově chránit, jsou chráněny, abstrakt nekoliduje s žádným cizím patentem.*

**LITERATURA**

1. Dosio F., Arpicco S., Stella B., Fattal E.: Adv. Drug Deliv. Rev. 97, 204 (2016).

2. Šedová P., Buffa R., Kettou S., Huerta-Angeles G., Hermannová M., Leierová V., Šmejkalová D., Moravcová M., Velebný V.: *Carbohydr. Res.* 371, 8 (2012).

**9L-03****POLYIMIDOVÉ KOPOLYMERY PRO PŘÍPRAVU MEMBRÁN**

**PETR SYSEL, HANA KULHÁNKOVÁ, KRISTÝNA WEINERTOVÁ, DAVID MALÝ**

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

Polyimidy (PI) jsou polymery s výbornými užitnými vlastnostmi. Velmi dobrá termická, mechanická, dielektrická a chemická odolnost umožňuje jejich aplikaci v mikroelektronice, v leteckém průmyslu a v posledních letech také v oblasti membránových separačních procesů. Všestranná stabilita PI je předurčena jejich chemickou strukturou, rigiditou polymerních řetězců a intermolekulárními interakcemi těchto řetězců. Díky tomu je však většina PI netavitelných a nerozpustných a s ohledem na to i nepracovatelných. Proto se PI převážně připravují ve více krocích. Při přípravě lineárních PI vzniká v prvním stupni ve vhodném rozpouštědle (např. 1-methyl-2-pyrrolidonu) z dianhydridu a diaminu polyimidový předpolymer, polyamidkarboxylová kyselina. V druhém stupni je tento prekurzor (často nanesený ve formě roztoku v tenké vrstvě na vhodnou podložku) většinou termicky převeden na příslušný PI. Tímto způsobem jsou obvykle připravovány i ploché, homogenní (neporézní) polyimidové membrány<sup>1</sup>.

Polyimidové membrány nacházejí uplatnění, resp. je testována jejich uplatnitelnost, jak ve velkých technologických celcích (např. čištění zemního plynu), tak menších, vysoce specializovaných procesech (např. dělení racemických směsí, cíleném transportu médií prostřednictvím syntetických amfifilních membrán). Jednou z cest potenciálního rozšíření využitelnosti polyimidových membrán je jejich precizace prostřednictvím kombinace více monomerů za vytváření kopolymerů.

V této práci byly připraveny a charakterizovány polyimidové kopolymery, v nichž jako komonomer byly využity (a) funkcionalizovaný cyklohexan nebo lysin pro přípravu potenciálně opticky aktivních produktů a (b) funkčními skupinami terminované siloxanové oligomery pro přípravu produktů s amfifilním charakterem. Byla testována možnost přípravy samonosných, plochých, homogenních membrán na jejich bázi. Bylo ukázáno, že vhodnou kombinací monomerů lze, alespoň do jisté míry, cíleně ovlivnit sledované vlastnosti.

*Tato práce vznikla za podpory grantů GA CR 17-00089S a GA CR 18-07619S.*

## LITERATURA

1. Liaw D. J., Wang K. L., Huang Y. C., Lee K. R., Lai J. Y., Ha C. S.: *Prog. Polym. Sci.* 37, 907 (2012).

**9L-04****ENVIRONMENTALLY FRIENDLY POLYURETHANE TO BE USED AS A MODIFIER FOR EPOXY RESIN NANOCOMPOSITES**

**MOHAMED BAKAR, ANITA BIALKOWSKA**

*University of Technology and Humanities, Faculty of Materials Science, Technology and Design, Radom, Poland  
mbakar@wp.pl*

The present work investigates the effect of synthesized nonisocyanate polyurethane (NIPU) on the properties, structure and morphology of an epoxy resin (EP) modified with nanoclays. Oligomers containing flexible segments were prepared from oligoxypropylenetriol and ethyl urethane, while oligomeric compounds with hard segments were synthesized by reacting 2-hydroxy-6-naphthalene sulfonic acid with urea, formaldehyde and different amount of phenol sulfonic acid. Impact strength (IS), flexural strength and critical stress intensity factor (KC) of epoxy resin modified with nanoclays were estimated as a function of NIPU content. FTIR and SEM methods were employed to analyse the structure and morphology of selected hybrid epoxy nanocomposites. The highest values of IS and KC were recorded for the composites containing 10 % NIPU and 1 % nanoclays. This composition was characterized by approximately 180 % higher impact strength and 80 % increased KC value in comparison with unmodified EP. The parameters values were higher by 85 % and 25 % in relation to EP modified with 1 % nanoclays. However, the enhancement of IS and KC reached respectively 85 % and 25 % in relation to EP modified with 1 % nanoclays without NIPU. SEM micrographs showed extensive yielding of EP associated with the formation of stratified elongated structures. However, characteristic bands for both EP and NIPU were identified by FTIR analysis, indicating that the polymers formed the IPN network without grafting reaction.

**9L-05****NOVÝ POHLED NA MĚKČENÍ POLYVINYLCHLORIDU POLYKAPROLAKTONEM**

**EDITA MORAVCOVÁ, RADKA KALOUSKOVÁ, LENKA MALINOVÁ, JIŘÍ BROŽEK**

*Ústav polymerů, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika  
radka.kalouskova@vscht.cz*

Poly( $\epsilon$ -kaprolakton) (PCL) patří k polyesterům, které jsou do určité míry dobře mísitelné s PVC. V závislosti na molární hmotnosti PCL snižuje teplotu skelného přechodu směsi, oproti nízkomolekulárním změkčovadlům nemigruje k povrchu. Je alternativou k nízkomolekulárním i polymerním

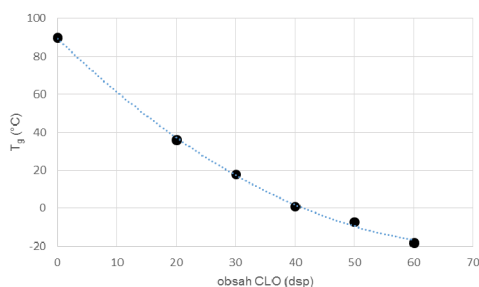


změkčovadlům (požívaným např. v zdravotnictví, při výrobě folií, knižních vazeb apod). Směsi PVC/PCL jsou běžně připravovány z roztoku či z taveniny míšením na dvouválci<sup>1,2</sup>.

Specifickým způsobem přípravy je míšení PVC s  $\epsilon$ -kaprolaktonem (CLO), přičemž v průběhu zpracování dochází k polymerizaci CLO a vzniku níže či vyšemolárního PCL<sup>3</sup>. Polymerizace je iniciována cínčitým nebo zinečnatým stabilizátorem PVC, přítomným ve směsi.

V otevřeném systému, v průběhu válcování však většina CLO vytěká a ve směsi PVC zůstane cca 15–20 % z původního množství, z toho 2/3 ve formě polymeru. Ztrátě CLO se lze vyhnout jeho předpolymerizací při zvýšené teplotě a získaný polymerizát (molární hmotnost 3–4 kg/mol) lze pak přidat k PVC a směs naválcovat. V hnětiči, tedy víceméně uzavřeném systému, lze mísit PVC přímo s CLO, který během hnětení zpolymerizuje. S původní koncentrací změkčovadla (CLO) klesá obsah vyšemolárních podílů PCL, klesá teplota skelného přechodu a bohužel i odolnost migraci při zatížení.

Byl získán PVC materiál, který rozsahem měkčení a mechanickými vlastnostmi odpovídá použití klasických změkčovadel.



Obr. 1. Závislost teploty skelného přechodu na obsahu CLO ve směsi PVC

Tato práce vznikla za podpory VŠCHT Praha a projektu NAKI II, MK ČR DG18PO2OVV001.

#### LITERATURA

- Deanin, R. D., Zheng-Bai Z.: J. Vin. Tech. 6, 18 (1984).
- Shi G., Cooper D. G., Maric M.: Polym. Deg. Stab. 96, 1639 (2011).
- Kalousková R., Fartáková H., Malinová L., Brožek J.: J. of Appl. Polym. Sci. 131, 22 (2014).

#### 9L-06

#### SELF-ASSEMBLY AMPHIPHILIC CHITOSAN NANOCARRIERS FOR ORAL CO-DELIVERY OF HYDROPHOBIC AND HYDROPHILIC DRUGS

ANTONIO DI MARTINO

Centre of Polymer Systems, University Institute, Tomas Bata University in Zlin, Tr. Tomas Bati 5678, 76001 Zlin, Czech Republic  
dimartino@utb.cz

Oral administration route is considered the most admissible among the patients due to convenience and

optimum blood drug concentration for chronic therapy<sup>1</sup>. However, hydrophobic drugs are not readily absorbed in the gastrointestinal tract requiring a frequent administration and higher dosage. Due to the variability of the pH along the digestive tract the use of pH-responsive carrier able to respond to the pH changes, enhance the stability of the payload in the stomach, control and prolong the release in the intestine have attracted considerable interest in the last decades<sup>2</sup>.

Chitosan (CS) is a polysaccharide derived from the partial deacetylation of chitin having interesting peculiarities such as biocompatibility, biodegradability, mucoadhesivity, low immunogenicity and polycation nature which permits the interaction with tight junction proteins increasing the cellular permeability of the CS-based carriers. Despite the peculiarities of CS nanoparticles, their use in the oral drug delivery is still limited due to two main issues; i) aggregation at physiological pH due to a decrease in positive charge and ii) unable to protect and control the release of small molecules in acidic conditions<sup>3</sup>. To overcome these drawbacks, several hydrophobic derivatives have been developed. Hydrophobically modified CS can self-assembly into structures having a hydrophobic core and a hydrophilic outer shell. The core-shell structure provides a loading space for allocating simultaneously hydrophobic and hydrophilic drugs<sup>4</sup>.

Therefore, an amphiphilic CS derivative based on the conjugation with a novel branched polylactic acid, self-assembled in nanoparticles and stabilised by further complexation with low molecular weight deoxyribonucleic acid were developed. The physicochemical properties of the carrier and the ability to load simultaneously a hydrophilic, doxorubicin (DOX) and hydrophobic, paclitaxel (PTX), drug and the release trend in simulating GI tract have been investigated. The in vitro cell inhibition of the drugs loaded nanoparticles was evaluated in two human model cell lines; HeLa (epitheloid cervix carcinoma) and MCF-7/ADR (multidrug-resistant breast cancer). The hemocompatibility of the carrier at concentrations up to 1000  $\mu\text{g}/\text{mL}$  was investigated.

The core-shell self-assembled nanoparticles have a spherical shape with hydrodynamic diameter around 100 nm (Figure 1 A), good stability up to one week in physiological conditions, hemocompatibility up to 50  $\mu\text{g}/\text{mL}$  (Figure 1B) and high sensibility to the external pH which represents a key-point to control and modulate the release in specific body compartments. Up to 300  $\mu\text{g}$  of drugs per mg of the carrier was loaded and held in the core (PTX) and the outer shell (DOX) mostly by steric effects, electrostatic, H-bond, hydrophobic interactions. The DOX and PTX release patterns in simulated GI conditions demonstrate a pH depended release described by an alternation of burst and stationary phases (Figure 1 A, B). In vitro test on HeLa and MCF-7/ADR cells showed a higher cell inhibitory of the double-loaded carriers compared to the single loaded and the free drug formulations implying a likely role played by the carrier in the drug uptake and bypass the multi-drug resistance in MCF-7/ADR. The cell viability results together with the in vitro hemocompatibility, indicate that the CS based nanoparticles could be a promising formulation for simultaneous loading and controlled delivery of hydrophobic and hydrophilic drugs.



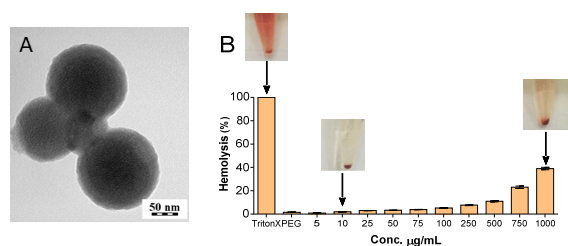


Fig. 1. A) TEM micrograph of nanocarriers in solution; B) Hemolysis assay at nanoparticles concentration 5–1000 µg/mL

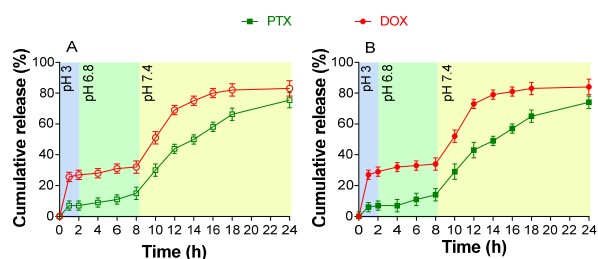


Fig. 2. Release patterns of DOX and PTX A) individually and B) simultaneously

*This research has received financial support from the Czech Ministry of Education, Youth and Sport (MEYS) grant LO1540.*

#### REFERENCES

1. Motiei M., Kashanian S.: *Eur. J. Pharm. Sci.* 99, 285 (2017).
2. Min K. A., Cho J. H., Song Y. K., Kim C. K.: *Arch. Pharm. Res.* 39, 94 (2016).
3. Diop M., Auberval N., Viciglio A., Langlois A., Ietinger W. B., Mura C., Peronet C., Bekel A., David D. J., Zhao M.: *Int. J. Pharm.* 491, 402 (2015).
4. Hecq J., Siepmann F., Siepmann J., Amighi K., Goole J.: *Drug. Dev. Ind. Pharm.* 41, 2037 (2015).

**9P-01****OPTIMALIZACE 3D TISKU  
ORODISPERGOVATELNÝCH FILMŮ PŘÍDAVKEM  
HYDROXYETHYLCELULLOSÝ****JAN ELBL, JAN MUSELÍK, ALEŠ FRANC, JAN  
GAJDZIOK***Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, Palackého tř.  
1946/1, 612 42 Brno, Česká republika  
elblj@vfu.cz*

3D tisk se stále více prosazuje v přípravě a výrobě lékových forem a oproti zavedeným výrobním procesům se vyznačuje vyšší variabilitou výstupů a menšími náklady na pořízení i provoz. Proto je vhodným nástrojem využitelným pro přípravu individualizovaných léčivých přípravků například i v nemocničních lékárnách<sup>1</sup>.

Cílem studie bylo zhodnotit možnosti přípravy orodispergovatelných filmů, jež jsou obvykle připravovány odléváním disperze nebo extruzí taveniny. Analogicky lze použít dvě metody 3D tisku a to extruzi polotuhých materiálů za normální teploty (SSE), kdy je materiál tlakově dávkován jehlou a poté vysoušen, nebo extruzi termoplastických materiálů za zvýšené teploty (FDM) kdy je materiál ve formě vlákna protlačován tavnou tryskou<sup>2</sup>.

Jako ideální byla vybrána metoda SSE u které oproti FDM odpadá krok přípravy samotného tiskového vlákna. Navíc díky možnosti vysušování materiálu deponovaného v malé vrstvě již v průběhu tisku je příprava filmů výrazně urychlena a přispívá i k rovnoměrnější distribuci komponent filmu.

Výchozím model byl film o rozměrech 20 × 30 mm a tloušťce 0,2 mm rozdělené do 10 vrstev. Disperze byla vytlačována jehlou o vnitřním průměru 0,84 mm na podložku o teplotě 75 °C. Vzhledem k nevhodným rheologickým vlastnostem výchozí disperze o složení voda: maltodextrin: sorbitol (87:8:5 hm.%) byl testován vliv přidavku 1 % různých typů hydroxyethylcelulosity (Cellosize® QP 40, 330 a 4400) za účelem zvýšení viskozity. Vliv byl sledován pomocí několika parametrů důležitých pro kvalitu filmu (hmotnostní stejnoměrnost, tloušťka a rychlost rozpadu). Výsledky shrnuje Tabulka I s uvedenými RSD pro jednotlivé parametry.

Tabulka I

Cellosize®	QP40	QP300	QP4400
Hmotnost [g]	0,1803	0,1874	0,1827
RSD [%]	1,08	1,06	1,03
Tloušťka [μm]	219,0	215,4	210,5
RSD [%]	10,8	2,5	3,1
Rozpad [s]	39,8	39,3	40,3
RSD [%]	3,4	1,5	3,7

Hmotnostní stejnoměrnost ovlivněna nebyla, neboť je závislá spíše na přesnosti dávkování disperze. Potvrdil se pozitivní vliv vyšší viskozity disperze na rovnoměrnost

tloušťky filmů a zároveň bylo zjištěno, že rozpad filmu není v rámci testovaných viskozit výrazně prodloužen. U disperze s obsahem Cellosize® QP4400 byla rovněž potvrzena linearita závislosti tloušťky, hmotnosti a rychlosti rozpadu filmu na počtu natištěných vrstev.

*Tato práce vznikla za podpory grantu IGA VFU Brno 318/2018/FaF.*

## LITERATURA

1. Aquino R. P., Barile S., Grasso A., Saviano M.: *Envisioning smart and sustainable healthcare: 3D Printing technologies for personalized medication*, Futures 2018.
2. Goole J., Amighi K.: *Int. J. Pharmaceutics 1-2*, 499 (2016).

**9P-02****GAMMA RAY ASSISTED MODIFICATION OF  
TRANSPARENT DOPED POLYURETHANE FILMS****BILJANA TODORVIĆ MARKOVIĆ<sup>a</sup>, MILICA  
BUDIMIR<sup>a</sup>, ZDENO ŠPITALSKY<sup>b</sup>, MATEJ MIČUŠIČ<sup>b</sup>,  
HELENA ŠVAJDLENKOVA<sup>b</sup>, ZORAN MARKOVIĆ<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> *Institute of Nuclear Sciences Vinča, University of Belgrade, P.O.B. 522, 11001 Belgrade, Serbia,* <sup>b</sup> *Polymer Institute, Slovak academy of Sciences, Dubravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovakia  
biljatod@vin.bg.ac.rs*

Gamma rays are a form of electromagnetic radiation of very short wavelengths and can be used for many different purposes (disinfection of surfaces, removing of different types of pathogens, modifications of different materials such as polymers). During interaction of polymers with low energy gamma rays very complex phenomena can be appeared: chain scission, bond breaking, formation of unsaturated bonds intermolecular crosslinking or free radical formation.

This study reports the results of structural modification and photocatalytic activity of transparent hydrophobic carbon quantum dots/polyurethane films (hCQDs/PU) modified by gamma rays of different doses. The hCQDs has been synthesized from poloxamer block copolymer PF68 according to procedure described in ref.<sup>1</sup>. Doping of transparent polyurethane films with hCQDs has been conducted by simple swell-encapsulation-shrink method. The hCQDs/PU samples were irradiated by gamma rays at doses of 1, 10 and 200 kGy. Besides surface morphology and photocatalytic activity we have investigated surface wettability and singlet oxygen generation of hCQDs/PU films. By applying different techniques (AFM, photoluminescence and contact angle measurements, electron paramagnetic resonance spectroscopy (EPR) and photocatalytic activity) it is found that gamma irradiation contributes surface roughness and wettability of investigated samples significantly. EPR spectroscopy showed increased singlet oxygen generation of samples irradiated by 10 kGy compared to non-irradiated samples. Photocatalytic activity of these samples showed complete degradation of rose bengal dye after 5 h. The most favorable results for the

degradation of used dye is observed for hCQDs/PU films irradiated by 10 kGy.

*This study has been supported by the Ministry of Education, Science and Technological Development of Republic of Serbia (grants number 172003 and DS021) as well as by the SASPRO Programme project 1237/02/02-b and the People Programme (Marie Curie Actions) European Union's Seventh Framework Programme under REA grant agreement No. 609427.*

#### REFERENCE

1. Stanković N. K., Bodik M., Šiffalovič P., Kotlar M., Mičušik M., Špitalský Z., Danko M., Milivojević D. D., Kleinova A., Kubat P., Capakova Z., Humpolíček P., Lehocký M., Todorović Marković B. M., Marković Z. M.: ACS Sustainable Chem. Eng. 6, 4154 (2018).

#### 9P-03

##### MICROALGAE AS PRODUCERS OF EXTRACELLULAR BIOPOLYMERS

**MICHAL HALAJ<sup>a\*</sup>, JOZEF TURJAN<sup>a</sup>, VLADISLAV CEPÁK<sup>b</sup>, JAROMÍR LUKAVSKÝ<sup>b</sup>, PETER CAPEK<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Institute of Chemistry, Center for Glycomics, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK-84538 Bratislava, Slovakia, <sup>b</sup> Institute of Botany of the Czech Academy of Sciences, Department of Plant Ecology, Biorefinery Research Center of Competence, Dukelská 135, CZ-37982 Třeboň, Czechia  
chemhami@savba.sk

Microscopic algae are the lowest plant organisms and ancestors of higher plants. They are photosynthetic organisms widely spread in freshwater, marine and all terrestrial environments<sup>1</sup>. Microalgae have been used for over two thousands years, but significant industrial applications have begun in the early sixties<sup>2</sup> due to the production of important high-value phytochemicals: omega-3 polyunsaturated fatty acids (PUFAs), proteins, carotenoids, sterols, vitamins, phycobilins, polyhydroxyalkanoates, etc. Some of microalgae release into their environment extracellular polymeric compounds, labeled as EPS. They are viscous mucilages, polysaccharides or polysaccharide-protein conjugates (proteoglycans or glycoproteins), etc. Their main role is to protect microalgal cells against harmful environmental conditions<sup>3</sup>.

The aim of our study was to screen seventeen different types of microalgal strains for the production of EPSs and their characterization in terms of yield, molecular weight distribution patterns, carbohydrate and protein contents and monosaccharide composition<sup>4</sup>.

*This work was supported by the Slovak Grant Agency VEGA (grant no. 2/0051/18) and Technology Agency of the Czech Republic (TE 01020080).*

#### REFERENCES

1. Hu C., Liu Y., Paulsen B. S., Petersen D., Klaveness D.:

Carbohydr. Polym. 54, 33 (2003).

2. Spolaore P., Joannis-Cassan C., Duran E., Isambert A.: J. Biosci. Bioeng. 101, 87 (2006).
3. Rossi F., De Philippis R., in: Borowitzka M.A., Beardall J., Raven J. A., *The physiology of microalgae*, chap. 21, pp. 565. Springer, Cham 2016.
4. Halaj M., Chválová B., Cepák V., Lukavský J., Capek P.: Chem. Pap., in press.

#### 9P-04

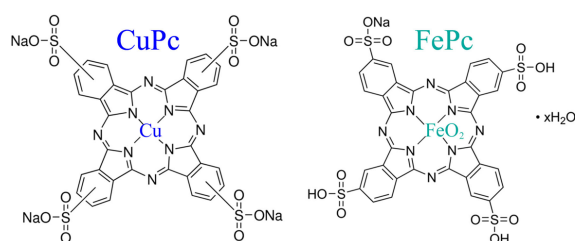
##### METALLOPHTHALOCYANINE (M= Cu, Fe) GRAFTED POLYETHYLENE AND ITS MAGNETIC AND SURFACE PROPERTIES

**ALENA REZNICKOVA<sup>a</sup>, MARTIN ORENDAC<sup>b</sup>, ERIK CIZMAR<sup>b</sup>, ZDENKA KOLSKA<sup>c</sup>, VACLAV SVORCIK<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> University of Chemistry and Technology Prague, Technická 5, 166 28 Prague 6, Czech Republic, <sup>b</sup> Faculty of Science, P. J. Safarik University, Park Angelinum 9, 04013 Kosice, Slovakia, <sup>c</sup> Faculty of Science, J. E. Purkyne University, 400 96 Usti nad Labem, Czech Republic  
reznicka@vscht.cz

Phthalocyanines (Pcs) are planar aromatic macrocycles constituted of four isoindole units linked together *via* nitrogen atoms (see Schema 1)<sup>1</sup>. Pcs are commonly used in optical and magnetic equipment such as optical switches, liquid crystals, nonlinear optics, single molecule magnets and storage devices<sup>2</sup>.

To employ advantageous tunable magnetic properties of metal Pcs in practical devices it is necessary to bind them to solid substrates. A simple method to bind Cu(II) and Fe(III) sulfonated phthalocyanines on plasma treated surface of polyethylene (PE) is proposed. Formation of reactive centres (radicals) on the PE surface after the plasma treatment was observed in electron-spin resonance (ESR) spectra at 330 mT and 350 mT. The signal at 350 mT disappears after grafting of the Pcs, which suggests the radical is spent on formation of a chemical bond. Successful grafting of Pcs was also confirmed by X-ray photoelectron spectroscopy and SEM-EDS measurements. In UV-Vis spectra Q and B bands typical for the  $\pi$ - $\pi$  interaction in Pcs were observed at 620 and 340 nm. Splitting of the Q band occurred due to reduction in symmetry of the peripherally substituted Pcs. Interestingly, lower concentration of CuPc solution during grafting process



Schema 1. Chemical formulas of copper (II) and iron (III) phthalocyanines

lead to higher amount grafted to the surface. In the case of FePc, the optimum grafting concentration is higher. The ESR spectra of PE samples with grafted FePc were similar to the bulk Pcs with the high-spin state ( $S=5/2$ ) of  $d^5$  Fe(III) ions.

*This work was supported by GACR under the project 17-00939S.*

## REFERENCES

1. Yeber M. C., García G.: *Desalin. Water Treat.* 56, 1793 (2014).
2. Smolko L., Černák J., Kuchár J., Boča R.: *Monatsh. Chem.* 146, 243 (2015).

## 9P-05

### BIOKOMPATIBILITA KOVOVÝCH POVRCHŮ MODIFIKOVANÝCH NANOSTRUKTUROU A NANOSTŘÍBREM

ADÉLA GALANDÁKOVÁ<sup>a</sup>, VERONIKA  
TOMŠÍČKOVÁ<sup>a</sup>, ALEŠ PANÁČEK<sup>b</sup>, LUDĚK JOSKA<sup>c</sup>,  
JIRÍ GALLO<sup>d</sup>, JITKA ULRICHOVÁ<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta  
Univerzity Palackého, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc,  
<sup>b</sup> Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity  
Palackého, tř. 17. listopadu 1192, 771 46 Olomouc, <sup>c</sup> Ústav  
kovových materiálů a korozního inženýrství, Vysoká škola  
chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6,  
<sup>d</sup> Ortopedická klinika, Lékařská fakulta Univerzity Palackého,  
I. P. Pavlova 6, 779 00 Olomouc, Česká republika  
alfa.baba@seznam.cz

Infekce kloubní náhrady je stále považována za jednu z nejzávažnějších komplikací endoprotetiky. Implantáty nabízejí bakteriím vhodný povrch ke kolonizaci a tlumí aktivitu a účinnost antibakteriální imunity. Velkým problémem je i vzrůstající rezistence bakterií vůči antibiotikům, které jsou využívány k potlačení pooperační infekce. Vhodnou alternativou k tradičně používaným antibiotikům by mohla být povrchová úprava používaných implantátů vrstvami s širokospektrým antibakteriálním účinkem na bázi nanotrubic a nanostříbra. Takové povrchy však nesmí dlouhodobě kompromitovat mechanické vlastnosti implantátu a současně musí být biokompatibilní, tzn. nesmí vyvolávat toxické, alergické ani zánětlivé reakce.

Tabulka I

Označení vzorku	Typ vzorku
A	Ti6Al4V
B	Ti6Al4V + nanostruktura 20V
C	Ti6Al4V + AgNPs připravené pomocí sonochemické redukce glukosou
D	Ti6Al4V + AgNPs připravené pomocí sonochemické redukce glukosou 20V

Naše studie byla zaměřena na testování biokompatibility vzorků titanové slitiny Ti6Al4V, jejichž povrch byl pokryt nanostrukturou nebo vrstvou nanočástic stříbra (AgNPs). K pokrytí povrchu vzorků byly použity různé metody viz Tabulka I.

Biokompatibilita byla hodnocena na buněčné linii Balb/c 3T3 testem extraktu a na buněčné linii NIH 3T3 metodou přímého kontaktu. Získané výsledky biokompatibility budou diskutovány na posterové prezentaci.

*Tato práce vznikla za podpory grantů IGA MZ ČR 15-27726A.*

## 9P-06

### BIOKOMPATIBILITA A TOXICITA OF SELECTED BIOMATERIALS

JANA FRANKOVÁ<sup>a</sup>, ABDEL-MOHSSEN  
M. ABDEL-LATIF<sup>b,c,d</sup>, JOSEF JANČÁŘ<sup>b,c,e</sup>,  
JITKA ULRICHOVÁ<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Palacky University, Faculty of Medicine and Dentistry,  
Department of Medical Chemistry and Biochemistry,  
Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc, <sup>b</sup> CEITEC-Central European  
Institute of Technology, Brno University of Technology,  
612 00 Brno, <sup>c</sup> SCITEG, a.s., 612 00 Brno, <sup>d</sup> Textile Research  
Division, National Research Centre, Dokki, Cairo, Egypt,  
<sup>e</sup> Faculty of Chemistry, Institute of Materials Chemistry, Brno  
University of Technology, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno,  
Czech Republic  
jana.frankova@upol.cz

Wound dressings are intended to protect wounds from physical, chemical, biological and other traumata<sup>1</sup>. An ideal dressing should protect the application side, allow gas exchange, remove excess of the exudates and act as physiological barrier<sup>1,2</sup>. Some wounds fail to progress through healing. The disturbance of the healing can be caused by several factors, such as, infection, necrosis and excess of inflammatory cytokines<sup>3</sup>. One of the traditional plant with anti-inflammatory properties is *Aloe vera*. It is an herbaceous succulent plant that belongs to Liliaceae family. Besides its pharmacological activity, which includes anti-inflammatory, antibacterial and antifungal properties, it has been reported to promote the wound healing process<sup>3</sup>.

The aim of the study was to find the proper combination of materials to improve the suitability of prepared wound dressing. It was tested eight samples: complex, collagen, Aloe Vera (powder) and their combination with different concentration of all the substances. Firstly, we prepared the extract/solution of all the samples. The concentration of the stock solution was 1 mg/mL in serum free medium that was diluted to 500 mg/mL, 250 mg/mL and 125 mg/mL. Extract was applied to the normal human dermal fibroblasts (NHDF), isolated from tissue section with approval from the ethics committee of the University Hospital of Olomouc and the patients consent. After 24 hours incubation period viability and biocompatibility was evaluated.

In conclusion, none of the tested materials were not found toxic and did not decrease the cell growth.

*This work was supported by grants: IGA\_LF\_2018\_012 and from project CEITEC 2020 (LQ1601) with financial support from the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic under the National Sustainability Programme II.*

## REFERENCES

1. Dutra J. A. P., Carvalho S. G., Zampiroli A. C. D., Daltoén R. D., Teixeira R. M., Careta F. P., Cotrim M. A. P., Oréfice R. L., Villanova J. C. O.: *Eur. J. Pharm. Biopharm.* 113, 11 (2017).
2. Kamoun E. A., Kenawy E. S., Chen X. J.: *Adv. Res.* 8, 217 (2017).
3. Abdel-Mohsen A. M., Jancar J., Abdel-Rahman R. M., Vojtek L., Dušková D., Nejezchlebová H.: *Int. J. Pharm.* 520, 241 (2017).

### 10L-01 ANTIBACTERIAL AND PHOTOCATALYTIC PROPERTIES OF POLYURETHANE DOPED WITH CARBON QUANTUM DOTS

ZORAN M. MARKOVIC

*Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dubravská  
cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovakia  
zoran.markovic@savba.sk*

Due to appearance of multidrug resistant bacteria infections, development of new types of antibacterial coatings or nanocomposites is of great importance<sup>1</sup>. Nearly 10 billion dollars is spent each year treating hospital-acquired infections. Commonly antibacterial nanocomposites are produced using antibiotics, copper or silver nanoparticles or antiseptics. However, surfaces that release antibacterial agents become exhausted and induce microbial resistance.

Antibacterial photodynamic therapy is novel approach in the treatment of microbes. It is based on action of visible light on photoactive drugs that convert neutral oxygen from air to highly toxic singlet oxygen. Basic advantage is that singlet oxygen cannot be depleted and microbial resistance cannot be developed<sup>2</sup>.

Novel types of photoactive nanoparticles that have ability to produce singlet oxygen with high yield are carbon quantum dots. Carbon quantum dots (CQDs) present zero dimensional carbon nanomaterials with lateral dimension smaller than 10 nm. This material has very interesting properties: low cost, high chemical stability, resistance to photobleaching, very good solubility in water or organic solvents, high photoluminescence, ability to produce singlet oxygen and kill cancer cells and bacteria<sup>3,4</sup>.

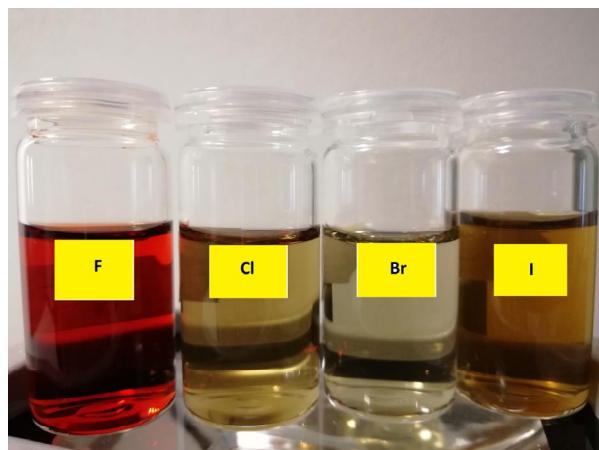


Fig. 1. Optical image of hydrophilic carbon quantum dots doped with halogen atoms

Herein, we present for the first time, synthesis and characterization of photodynamic antibacterial polyurethane nanocomposites doped with hydrophobic and hydrophilic CQDs. Bottom-up condensation method has been used for the formation of hydrophobic CQDs from a poloxamer pluronic F-68. Hydrophilic quantum dots (Fig. 1) were doped with halogen elements (F, Cl, Br and I) to accelerate singlet

oxygen production and reduce energy required for photosensitization. The swell-encapsulation-shrink method has been applied for production of these nanocomposites. Modified polyurethane nanocomposite is highly potent generator of singlet oxygen triggered by visible light irradiation. Antibacterial testing on two bacteria strains (*Staphylococcus aureus* and *Escherichia coli*) has shown 5 logs bactericidal effect of these nanocomposites within 1 h of irradiation. Nanocomposites were not cytotoxic against mouse embryonic fibroblast cell line whereas they have shown moderate cytotoxicity toward adenocarcinomic human epithelial cell line. Excellent photocatalytic degradation of several dyes demonstrated potential of CQDs based nanocomposites for water purification.

*This research was supported by the SASPRO Programme project 1237/02/02-b. The research leading to these results has received funding from the People Programme (Marie Curie Actions) European Union's Seventh Framework Programme under REA grant agreement No. 609427. Research has been further co-funded by the Slovak Academy of Sciences. Research was also supported by the Ministry of Education, Science and Technological Development of the Republic of Serbia (project no. 172003), bilateral project Serbia-Slovakia SK-SRB-2016-0038, and multilateral scientific and technological cooperation in the Danube region (DS021). We also acknowledge support of the APVV-15-0641, VEGA (2/0093/16) and Czech Science Foundation (17-05095S).*

#### REFERENCES

1. Abreu A., Tavares R., Borges A., Mergulha F., Manuel S.: *J. Antimicrob. Chemother.* 68, 2718 (2013).
2. Liu Y., Qin R., Zaat S., Breukink E., Heger M.: *J. Clin. Transl. Res.* 1, 140 (2015).
3. Markovic Z., Ristic B., Arsikin K., Klisic D., Harhaji-Trajkovic Lj., Todorovic-Markovic B., Kepic D., Kravic-Stevovic T., Jovanovic S., Milenkovic M., Milivojevic D., Bumbasirevic V., Dramicanin M., Trajkovic V.: *Biomaterials* 33, 7084 (2012).
4. Ristic B. Z., Milenkovic M. M., Dakic I. R., Todorovic-Markovic B. M., Milosavljevic M. S., Budimir M. D., Paunovic V. G., Dramicanin M. D., Markovic Z. M., Trajkovic V. S.: *Biomaterials* 35, 4428 (2014).

### 10L-02 FYZIKÁLNÍ, CHEMICKÉ A FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÉ MODIFIKACE MATERIÁLŮ PRO RŮZNÉ APLIKACE

ZDEŇKA KOLSKÁ<sup>a</sup>, MONIKA BENKOCKÁ<sup>a</sup>, TEREZA KNAPOVÁ<sup>a</sup>, VIKTORIE NEUBERTOVIČOVÁ<sup>a</sup>, SIMONA LUPÍNKOVÁ<sup>a</sup>, KATEŘINA KOLÁŘOVÁ<sup>b</sup>, VÁCLAV ŠVORČÍK<sup>b</sup>

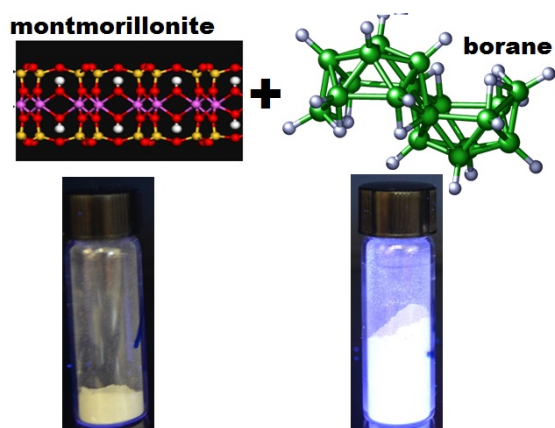
<sup>a</sup> Ústecké materiálové centrum, Přírodovědecká fakulta, Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem, České mládeže 8, 40096 Ústí nad Labem, <sup>b</sup> Ústav inženýrství pevných látek, Fakulta chemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 16628 Praha 6  
Zdenka.kolska@ujep.cz



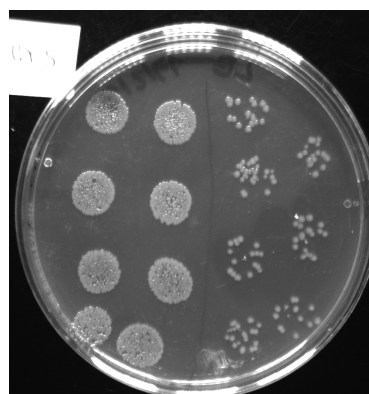
Mnohé materiály, přírodní i syntetické, hrají významnou roli v mnoha oblastech našeho života, v průmyslu, medicíně, díky svým, mnohdy excelentním, vlastnostem. Často však mohou „nehodně“, zejména povrchové, vlastnosti těchto materiálů limitovat jejich případné další aplikace. Proto se v posledních letech studují různé postupy vedoucí k modifikacím povrchu tak, aby došlo ke změnám pouze povrchových vlastností za současného zachování objemových (bulkových) vlastností studovaných materiálů. K těmto aktivacím a modifikacím povrchů slouží různé fyzikální či chemické postupy nebo jejich kombinace<sup>1-5</sup>. Díky těmto povrchovým úpravám můžeme připravovat materiály pro mnoho aplikací, např. pro biomedicínu, kdy tyto postupy modifikace vedou ke zvýšení cytocompatibility povrchu materiálů<sup>1</sup> nebo pro vývoj nových luminoforů<sup>2</sup>, apod.

V naší práci se zabýváme studiem povrchových vlastností nemodifikovaných a modifikovaných materiálů (silikátů, sklíčků, uhlíkových částic, různých polymerů ve tvaru folií či kuliček). Studujeme změny jejich povrchových vlastností po jednotlivých krocích fyzikální a/nebo chemické modifikace. Fyzikální aktivace či modifikace provádíme buď působením plazmatu, UV zářením, laserem, apod., chemické úpravy pak působením Piranha roztoků a/nebo chemickým roubováním. Povrchové vlastnosti nemodifikovaných a modifikovaných povrchů jsou studovány dostupnými technikami. Spektroskopické metody využíváme pro studium změny chemie povrchu (např. FTIR, rentgenovou fotoelektronovou spektroskopii, XPS, UV-Vis spektroskopii, atd.), pro změny morfologie povrchu využíváme mikroskopické metody (např. elektronovou mikroskopii, mikroskopii atomárních sil, ...) pro studium chemie a polaritu povrchu využíváme elektrokinetickou analýzu, goniometrii, a některé další techniky. Na vybraných površích jsou prováděny antimikrobiální testy (testy na inhibici růstu řas nebo antibakteriální testy) a/nebo testy na adhezi a proliferaci buněk.

Výsledné nanostrukturované materiály mají výrazně odlišné povrchové vlastnosti a tím se rozšiřují možnosti jejich uplatnění.



Obr. 1. Montmorillonit (MMT, vlevo) pod UV lampou (365 nm) a MMT chemicky modifikovaný cysteaminem a boranem (vpravo)



Obr. 2. Antibakteriální aktivita vzorků polymeru nemodifikovaného (vlevo) a modifikovaného roztokem Piranha, cysteaminem a boranem (vpravo, *E. coli*).

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury Ministerstva zdravotnictví (projekt 15-33018A) a Interní grantové agentury UJEP (projekt č. UJEP-SGS-163-07-03).

#### LITERATURA

1. Kolská Z., Řezníčková A., Nagyová M., Slepíčková Kasálková N., Sajdl P., Slepíčka P., Švorčík V.: Polym. Degrad. Stabil. 101, 1 (2014).
2. Kolská Z., Matoušek J., Čapková P., Braborec J., Benkocká M., Černá H., Londesborough M. G. S.: Appl. Clay Sci. 118, 295 (2015).
3. Lupínková S., Výborný K., Benkocká M., Kolská Z., Slepíčková Kasálková N., Švorčík V.: Chem. Listy 108, s237 (2014).
4. Benkocká M., Knapová T., Braborec J., Matoušek J., Černá H., Londesborough M. G. S., Švorčík V., Kolská Z.: Chem. Listy 109, 960 (2015).
5. Řezníčková A., Orendáč M., Kolská Z., Čižmár E., Dendisová M., Švorčík V.: Appl. Surf. Sci. 390, 728 (2016).

#### 10L-03 STŘÍBRNÉ NANOČÁSTICE V BOJI PROTI INFEKČÍM KLOUBNÍCH NÁHRAD

ŠÁRKA HRADILOVÁ<sup>a</sup>, ALEŠ PANÁČEK<sup>a</sup>, JIŘÍ GALLO<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Universita Palackého Olomouc, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, <sup>b</sup> Ortopedická klinika, Lékařská fakulta, Universita Palackého Olomouc, I. P. Pavlova 6, 779 00 Olomouc, Česká republika  
Sarka.hradilova@upol.cz

Infekce kloubní náhrady (IKN) je obávanou komplikací celkové kloubní arthroplastiky. Často je spojována se zvýšenou morbiditou i mortalitou; léčba je obtížná a výsledek nejistý i přes vysoké náklady spojené s terapií. IKN lze definovat jako replikaci bakterií, která probíhá na povrchu implantátu a v jeho okolí, kdy dochází k poškozování tkání hostitele. Přítomnost bakterií provokuje lokální či celkovou reakci

organismu různé intenzity. Významnou úlohu v patogenezi IKN sehrává implantát. Přítomnost implantátu se i přes jeho inertní charakter vždy pojí s vyšší pravděpodobností kolonizace bakteriemi. Důvodů je několik a ne všechny jsou plně pochopeny. Povrch materiálu slouží jako optimální živná půda pro založení kolonie a navíc velké cizí těleso, zvláště ve tkáních, tlumí lokální imunitní odpověď a tím znesnadňuje eradikaci bakterií přirozenou cestou.

Proto se obrací pozornost k úpravám povrchů ortopedických implantátů. Na toto téma bylo v poslední době napsáno několik přehledových článků, které popisují řadu slibných technologií potenciálně vhodných k přenosu do klinické praxe<sup>1</sup>. Povrchové modifikace založené na nanočásticích s výrazným antibakteriálním účinkem ukazují, že takto lze vytvořit povrch, který znemožní bakteriální růst v dlouhém časovém horizontu a současně nepředstavuje zdravotní riziko pro pacienta.

Náš výzkum je zaměřen na hledání metody, která umožní antibakteriální ochranu implantátů po dostatečně dlouhou dobu bez vedlejších účinků na zdraví pacienta. Ukazuje se, že sonochemická metoda generuje na testovaných titanových slitinách stříbrné nanočástice se silným antibakteriálním účinkem; povrch je mechanicky odolný a pro pacienta netoxický.

Kromě výběru vhodné metody pro povrchové úpravy implantátů hraje roli i sám materiál, z něhož je implantát vyroben. Srovnávali jsme materiál označovaný jako Ti6Al4V (leštěný povrch bez nanotrubic) a Ti6Al4V20V (povrchová úprava s nanotrubicemi). Na obou površích lze pomocí optimalizované sonochemické redukce připravit nanovrstvu stříbra s výraznými antibakteriálními účinky, přičemž povrch s nanotrubicemi vykazuje jak lepší antibakteriální účinnost, tak i nižší toxicitu.

*Tato práce vznikla za finanční podpory projektu LO1305 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky, GAČR (projekt No.15-22248S), grantu Ministerstva zdravotnictví České republiky (AZV VES 15-27726A) a IGA\_PrF\_2018\_021.*

#### LITERATURA

1. Gallo J., Panacek A., Pucek R., Kriegova E., Hradilova Š., Hobza M., Holinka M.: *Materials* 9, 337 (2016).

#### 10L-04

### NANOSTRUKTUROVANÉ VRSTVY PŘÍRODNÍCH POLYMERŮ DEPONOVANÝCH V SILNÉM ELEKTROSTATICKÉM POLI

**MAREK POKORNÝ, JAN KLEMEŠ, ADÉLA KOTZIANOVÁ, ZDENĚK MLYNÁŘ, ONDŘEJ ŽIDEK, VLADIMÍR VELEBNÝ**

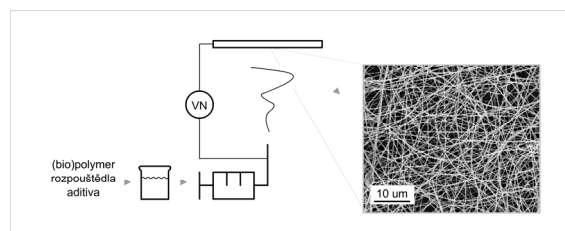
Contipro a.s., Dolní Dobrouč 401, 561 02, Česká republika  
marek.pokorny@contipro.com

Zpracování přírodních polymerů z roztoků, emulzí nebo disperzí ve vysokém elektrostatickém poli vede k unikátním vláknitým nebo i sférickým morfologiím v rozměrech od 80 do 250 nm. Přitom se jedná o efektivní jedнокrokovou

metodu<sup>1</sup>, která je relativně snadno dostupná a převeditelná do průmyslového měřítka. Na druhou stranu takové technologické postupy vyžadují velmi specifická a často komplexní technická řešení, která zajistí přípravu a výrobu nanostrukturovaných vrstev vysoké kvality z mikroskopického i makroskopického hlediska<sup>2</sup>.

Tento příspěvek se zaměří na principy a využití unikátních technologických prvků zahrnutých v přístrojích typu 4SPIN<sup>3</sup>, které jsou přímo navrhovány pro zpracování přírodních polymerů jako je kyselina hyaluronová, kolagen, dextran, želatina a další. Efektivní a stabilní produkce, kvalita a rovnoměrná distribuce biopolymerů v plošné vrstvě nebo na povrchu třídídimenzionálních objektů, anebo distribuce inkorporovaných aktivních látek jsou hlavní výzvy, které v našich technologiích řešíme. Současný výzkum se zaměřuje na depozice nových materiálů s využitím v oblasti moderní farmacie; například pro modifikaci povrchů různých typů fólií, trojrozměrných kovových implantátů, chirurgických stentů nebo jiných textilních materiálů.

Metody pro transformaci biopolymerů do nanostrukturovaných vrstev s využitím vysokého elektrostatického pole se stávají nenahraditelnými; zejména pak pro přípravu funkčních materiálů určených pro vybrané aplikace moderní medicíny.



Obr. 1. Postup transformace (bio)polymeru do nanostruktury

#### LITERATURA

1. Bhardway N., Kundu S. C.: *Biotechnol. Adv.* 28, 3 (2010).
2. Pokorný M., Klemeš J., Kotzianová A., Kohoutek T., Velebný V.: *AIP Adv.* 7, 10 (2017).
3. Pokorný M., Rassushin V., Wolfová L., Velebný V.: *Polym. Eng. Sci.* 56, 8 (2016).

#### 10L-05

### SPEKTROSKOPICKÉ VLASTNOSTI NANODIAMANTŮ

**PAVLA ŠTENCLOVÁ, ŠTĚPÁN STEHLÍK, MARIAN VARGA, MARTIN LEDINSKÝ, BOHUSLAV REZEK, ALEXANDER KROMKA**

Fyzikální ústav AVČR, Cukrovarnická 10, 162 00 Praha 6, Česká republika  
stenclova@fzu.cz

Nanodiamanty (ND) mezi jinými nanočásticemi vynikají svými jedinečnými vlastnostmi, jako je biokompatibilita, fotoluminiscence a bohatá povrchová chemie s možností komplexní funkcionalizace. Díky tomu dnes nacházejí



uplatnění v různých oborech od kvantové fyziky po biomedicínu.

Nanodiamanty připravené detonační syntézou (DND) o střední velikosti 4–5 nm jsou charakteristické relativně úzkou distribucí (3–8 nm), defektní strukturou a reaktivním povrchem s jistým podílem  $sp^2$  uhlíku. Nanodiamanty vzniklé drcením kvalitních syntetických diamantů připravených syntézou za vysokého tlaku a teploty (HPHT) obvykle vykazují širší distribuci velikostí, dobrou krystalinitu, menší množství a jinou strukturu povrchového  $sp^2$  uhlíku, ztěžující možnosti jejich povrchových modifikací a funkcionalizací. V tomto příspěvku budeme prezentovat vlastnosti nanodiamantů v závislosti na metodě jejich přípravy, velikosti či povrchových skupinách. Pozornost bude věnována především infračervené (IČ) a Ramanově spektroskopii, doplněné o měření zeta potenciálu.

IČ spektroskopie v reflexním módu umožňuje identifikovat funkční skupiny na nanodiamantech s velkou citlivostí a rozlišením. Povrch studovaných DND před modifikací vykazuje směsnou povrchovou chemii obsahující  $CH_x$  a různé typy kyslíkových skupin v nižších oxidačních stavech. Tyto DND mají pozitivní zeta potenciál cca +45 mV. Po žhání na vzduchu při 450 °C po dobu 30 min lze pozorovat jistý pokles koncentrace povrchového  $sp^2$  uhlíku, minimalizaci  $CH_x$ , oxidaci kyslíkových skupin na vyšší deriváty karboxylových kyselin a změnu zeta potenciálu na hodnoty kolem –35 mV jako důsledek změny povrchové chemie. Následná hydrogenace pomocí žhání v plynném vodíku vede k téměř kompletní terminaci povrchu vodíkovými skupinami a změně zeta potenciálu na hodnoty kolem +40 mV (cit.<sup>1</sup>). Díky tomu hydrogenované H-DND tvoří stabilní koloidní disperze. Bude ukázáno, že za stejných podmínek hydrogenované HPHT ND nemají dostatečně velký kladný zeta potenciál pro tvorbu stabilních koloidů, přestože ve spektrech hydrogenovaných HPHT ND lze pozorovat výskyt vodíkových atomů vázaných na rozdílné fasety ND částic. Rozdílné chování hydrogenovaných DND a HPHT nanodiamantů velmi pravděpodobně souvisí s různou koncentrací a strukturou nediamantového, povrchového  $sp^2$  uhlíku.

*Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (GAČR 18-11711Y).*

#### LITERATURA

1. Stehlik S., Varga M., Stenclová P., Ondic L., Ledinky M., Pangrac J., Vanek O., Lipov J., Kromka A., Rezek B.: ACS Appl. Mater. Interfaces 9, 38842 (2017).

#### 10L-06

#### PREPARATION AND CHARACTERISATION OF NOVEL 2D MATERIALS – MXENES

**MICHAL PROCHÁZKA<sup>a</sup>, SIMONA PROCHÁZKOVÁ<sup>b</sup>, DAIVA ZELENIAKIENĚ<sup>c</sup>, ANDREY ANISKEVICH<sup>d</sup>, MÁRIA OMASTOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava 45, Slovakia, <sup>b</sup> Department of Analytical Chemistry, Faculty of Natural Sciences Comenius

University, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava 4, Slovakia, <sup>c</sup> Kaunas University of Technology, Department of Mechanical Engineering, Studentu st. 56, 51424 Kaunas, Lithuania, <sup>d</sup> Institute for Mechanics of Materials, University of Latvia, 23 Aizkraukles str., Riga, Latvia  
michal.prochazka@savba.sk

MXenes are a new family of two-dimensional (2D) transition metal carbides and/or nitrides discovered in 2011 at Drexel University<sup>1</sup>. They are prepared by immersing the Al-containing MAX phases in aqueous solutions of HF, or in LiF and HCl, and selectively etching the Al layers (Fig. 1).

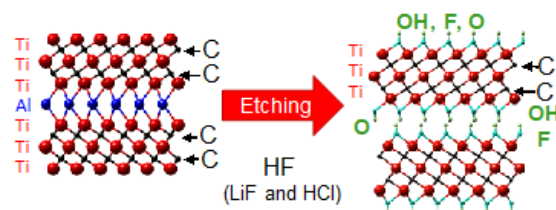


Fig. 1. Scheme of etching Al in MAX phase to preparation MXene

A unique combination of metallic conductivity, a hydrophilic surface, and excellent mechanical properties renders MXenes as an attractive candidate for many technological applications. Importantly, MXenes combined high electrical conductivity together with excellent mechanical properties. As a consequence of their layered structure, MXenes kink and delaminate during deformation also exhibit an unusual, and sometimes, unique, combination of properties.

In this work MXenes from different types of  $Ti_3AlC_2$  MAX phases were prepared by different procedures. The resulting products of preparation were investigated by SEM and XPS analyzes. In SEM images shown created layers after etching. By XPS analyzes decreasing of Al amount during the etching reactions were detected. Electrical properties of prepared MXenes were measured, and the conductivity value reached 130–200 S/cm.

MXenes as a novel 2D materials can be used as nanofillers to polymers composites for increasing their conductivity or for EMI shielding.

*This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No 777810 and by project VEGA 02/0010/18 (Slovakia).*

#### REFERENCE

1. Naguib M., Kurtoglu M., Presser V., Lu J., Niu J., Heon M., Hultman L., Gogotsi Y., Barsoum M. W.: Advanced Materials 23, 4248 (2011).

**10L-07****NOVEL MATERIALS FOR ORGANIC ELECTRONICS AND PHOTONICS**

**MARTIN WEITER, JOSEF KRAJČOVIČ,  
ALEXANDER KOVALENKO, STANISLAV  
STRÍTESKÝ, MARTIN VALA**

*Brno University of Technology, Faculty of chemistry,  
Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic  
weiter@fch.vut.cz*

The need for cheap mass production of electronic components and devices is believed to be partially addressed using organic electronics. Among others, mainly material printing is considered as the most promising devices and components fabrication technique. However, in order to overcome certain red brick walls, development of new materials with improved properties is needed. Among the most critical ones in the field of organic thin film transistors fall charge carrier mobility, and material stability and processability.

One of the common strategy in organic semiconductors development is transformation of old potential suitable pigments into soluble dyes and application them in the construction of new and complex semiconducting materials. The solubilization is usually done via various linear or branched alkyl side chains, e.g. ethylhexyl. While this strategy brings the required solubility and thus better processability, it often leads to increase of molecule distortion, intermolecular distance and reduced charge carrier mobility and thermal stability<sup>1,2</sup>.

In this contribution, we present study of diketopyrrolopyrrole based organic semiconductors substituted with various solubilization side groups. The novel derivatives possess advantageous features like high absorption coefficients, high quantum yield of fluorescence, hole or electron conductivity, sensitivity to various gasses, etc. Thus they can offer efficient base for optical applications (solid state lasers, two-photon absorption) and ambipolar high performing and high stable OFETs. The experimental outcomes of the studied structures are completed with quantum chemical calculations. Model devices were prepared and characterized.

In addition, the utilization of ethyl-adamantyl substituent leads to better molecular packing in solid state through self-organizing due to the bulky adamantane<sup>3,4</sup>. As a result, this substitution brings high charge carrier mobility of 0.2 cm<sup>2</sup>/Vs and the material remains soluble. The strategy can be applied for large variety of organic pigments regardless other substitutions by e.g. polar groups. The adamantyl substituents can thus provide useful tool in engineering of molecules for organic and printed electronics.

*This work was supported by the Czech Science Foundation via project No. 17-24707S; research infrastructure was supported by Project MŠMT No.LO1211..*

## REFERENCES

1. Vala M., Vynuchal J. Toman P., Weiter M., Luňák Jr. S.: *Dyes Pigm.* 84, 176 (2010).

2. David J., Weiter M., Vala M., Vyňuchal J., Kučerík J.: *Dyes Pigm.* 89, 137 (2011).
3. Krajčovič J., Kovalenko A., Heinrichová P., Vala M., Weiter M.: *J. Lumin.* 175, 94 (2016).
4. Kovalenko A., Yumusak C., Heinrichova P., Stritesky S., Fekete L., Vala M., Weiter M., Sariciftci N. S., Krajcovic J.: *J. Mater. Chem. C*, DOI: 10.1039/C6TC05076J. ISSN:2050-7526.

**10L-08****VPLYV DOPANTOV NA VLASTNOSTI TLAČENÝCH ELEKTROD VODIVÉHO POLYMÉRU PEDOT:PSS PRE HYBRIDNÉ SOLÁRNE ČLÁNKY**

**PAVOL GEMEINER<sup>a</sup>, JAROSLAV KULIČEK<sup>b</sup>, MATEJ  
MÍČUŠÍK<sup>b</sup>, MATEJ HVOJNÍK<sup>a</sup>, MICHAL HATALA<sup>a</sup>,  
MÁRIA OMASOVÁ<sup>b</sup>, MILAN MIKULA<sup>a</sup>**

*<sup>a</sup> Oddelenie polygrafie a aplikovanej fotochémie, FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, <sup>b</sup> Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovensko  
pavol.gemeiner@stuba.sk*

PEDOT:PSS poly(3,4-etyldioxytiofén) poly(styrén sulfonát) patrí k najštudovanejším a v oblasti tlačenej elektroniky aj najvyužívanejším vodivým polymérom. Svoje uplatnenie našiel v mnohých aplikáciách ako napr. senzorka, OLED displeje, organické a hybridné solárne články. Je to najmä vďaka jeho vlastnostiam akými sú spracovateľnosť v podobe vodných disperzií pre rôzne tlačové techniky, transparentnosť vrstiev, vysoká vodivosť a možnosť aplikácie vrstiev na flexibilné polymérne substráty<sup>1</sup>. Ďalšou výhodou je možnosť modifikácie elektrických vlastností PEDOT:PSS pomocou sekundárnych dopantov – rozpúšťadiel typu DMSO, etylenglykol, PEG, sorbitol, glycerol a i., ktoré môžu zvýšiť elektrickú vodivosť vrstiev až o tri rády<sup>2</sup>.

Cielom tejto práce bolo skúmať vplyv vybraných sekundárnych dopantov EG, PEG a DMSO na vlastnosti (reológia, kontaktný uhol zmáčania, UV-Vis spektroskopia) vysoko-viskózných disperzií PEDOT:PSS a následne aj na vlastnosti (elektrická vodivosť, AFM, UV-Vis-NIR, XPS spektroskopia, elektrochémia) sieťotlačných vrstiev PEDOT:PSS. Najúspešnejšie vzorky boli použité ako katalytické vrstvy protielektrod v tlačených farbivom-senzibilizovaných solárnych článkoch (DSSC) so zložením: FTO substrát s natlačenou TiO<sub>2</sub> vrstvou senzibilizovanou ruténiovým farbivom s úlohou fotoanódy, iodidový elektrolyt, PEDOT:PSS katalytická vrstva natlačená na FTO substráte s úlohou protielektrody.

Zistený bol vplyv sekundárnych dopantov na štruktúrne zmeny PEDOT:PSS vrstiev – separáciu fáz vodivých častí PEDOT a nevodivých PSS ako aj na čiastočné rozpúšťanie PSS vedúce k zníženiu energetickej bariéry prechodu elektrónov medzi PEDOT reťazcami. Tieto zmeny viedli k zvýšeniu elektrickej vodivosti tlačených vrstiev s prídavkom EG na úroveň  $\sigma = 260$  S/cm. S touto vzorkou bola dosiahnutá aj najvyššia účinnosť DSSC  $\eta = 3,2$  %.

*Tato práce vznikla za podpory grantu VEGA 1/0900/16.*

## LITERATURA

1. Gemeiner P., Peřinka N., Švorc L., et al.: *Mater. Sci. Semicond. Process.* 66, 162 (2017).
2. Saranya K., Rameez Md., Subramania A.: *Eur. Polym. J.* 66, 207 (2015).

## 10L-09

## MESOSCALE EFFECT BETWEEN NANO- AND SUB-MICROSCALE

PAVEL URBÁNEK, JAKUB ŠEVČÍK, IVO KUŘITKA

Centre of Polymer Systems, Tomas Bata University in Zlin, tř. T. Bati 5678, Zlin, 76001, Czech Republic  
urbanek@utb.cz

In this contribution, we summarize results and experience achieved in a specific field of study of conjugated polymers. We present an experimental study based on the optical, electrical and fluorescence investigation of thin  $\sigma$ - and  $\pi$ -conjugated polymer films, where the dependence of optical and optoelectrical properties on film thickness ranging from nano- to microscale was studied.

Conjugated polymers belong to a wide group of novel materials with interesting properties, such a semi-conductivity and optical activity, photo- and electroluminescence. This group of materials combines optoelectronic properties of semiconductors with the mechanical properties and processing advantages of plastics<sup>1,2</sup>.

As representatives of  $\sigma$ -conjugated polymer poly (methylphenylsilane) (PMPSi) and copolymer poly [(dimethylsilane)-(methylphenylsilane)] (P[DMSi-MPSi]) were used. On the other hand, as representatives of  $\pi$ -conjugated polymers Poly[2-methoxy-5-(2-ethylhexyloxy)-1,4-phenylene-vinylene] (MEH-PPV) and Poly(9,9-dioctyl-fluorene-alt-benzo-thiadiazole) (F8BT) were studied.

Films were prepared by using spin coater Laurell WS-650-MZ-23NPP and by drop-casting from the solution in mixture of toluene and chloroform. The absorption spectra were measured by the Lambda 1050 UV/VIS/NIR spectrometer from Perkin Elmer. The fluorimeter FSL 920 from Edinburgh Instruments (UK) was used for the measuring of PL spectra. The thickness was measured by using the profilometer Dektak XT-E (Bruker) with resolution less than 1 nm.

In case of  $\sigma$ -conjugated polymers, the material thicker than critical 500 nm has extremely small Stokes shift, maximum extended  $\sigma$ -delocalization along the silicon polymer backbone and exhibits remarkable UV degradation slowdown and self-recovery ability. On the contrary, the electronic properties of thin films below 80 nm resemble those of random coils in solutions. The films of moderate thickness show relatively steep transition between these two modes of structural ordering and resulting properties<sup>3</sup>. In case of  $\pi$ -conjugated polymers, we have observed that the ordering of the thin conjugated polymer film depending on the film thickness may vary with the film thickness in a non-trivial way and that it is allied to different levels of manifestation of nonlocalized (aggregate states) and localized (intrachain) transitions<sup>4</sup>. The competitive interplay between these two

modes due to electronic-vibrational coupling is governed by the development of intrachain ordering and by the ordering level of  $\pi$ -stacking of polymer chains of  $\pi$ -conjugated polymers.

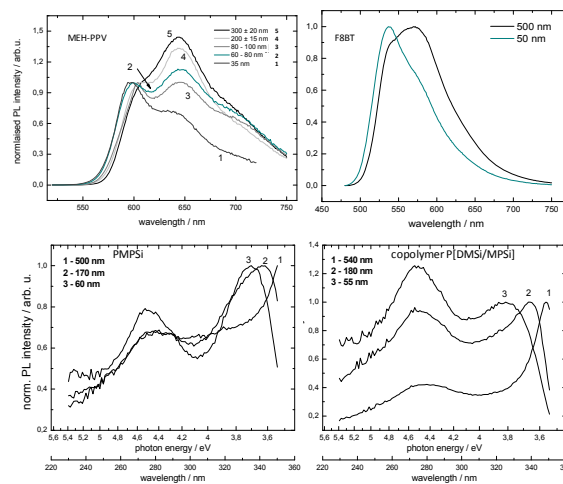


Fig. 1. Upper pictures are PL emission spectra with spectral shifts in case of  $\pi$ -conjugated polymers, on the bottom pictures are depicted PL spektra and maxima shifts in case of  $\sigma$ -conjugated polymers

To generalize, the a steep increase of structural ordering emerging with thickness threshold between nano- and sub-microscale in polymer films appears as a principle generally and a term – a mesoscale effect – can be coined to – describing such behavior of conjugated polymers. The synthesis of mesoscale effect concept and molecular JH aggregates concept can help understand and explain some observed phenomena deviating from expected polymer behavior as it allows interpret thickness dependence of properties such exciton diffusion length, exciton recombination, charge carrier transport and chain degradation. Hence, it can help extend the use of  $\sigma$ - and  $\pi$ -conjugated polymers into the real application wherever the thickness scale is appropriate.

*This work was supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic – Program NPU I (LO1504).*

## REFERENCES

1. Skotheim T. A., *Conjugated polymers: theory synthesis, properties and characterisation*. Third edition, CRC Press, Boca Raton 2007.
2. Burroughes J. H., Bradley D. D. C., Brown A. R., Marks R. N., Mackay K., Friend R. H., Burn P. L., Holmes A. B.: *Nature* 347, 539 (1990).
3. Urbanek P., Kuritka I.: *J. Lumin* 168, 261 (2015).
4. Urbanek P., Kuritka I., Danis S., Tousekova J., Tousek J.: *Polymer* 55, 4050 (2014).

**10L-10****COLLOIDAL  $\text{Co}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$  NANOPARTICLES BY MICROWAVE-ASSISTED SYNTHESIS AND THEIR UTILIZATION IN THIN COMPOSITE LAYERS WITH MEH-PPV AS AN ELECTROLUMINESCENT MATERIAL FOR POLYMER LIGHT EMITTING DIODES****DAVID SKODA, PAVEL URBANEK, JAKUB SEVCIK, LUKAS MUNSTER, PAVEL BAZANT, JAN ANTOS, IVO KURITKA***Centre of Polymer Systems, Tomas Bata University in Zlin, Tr. Tomase Bati 5678, 760 01 Zlin, Czech Republic  
dskoda@utb.cz*

$\text{Co}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$  ( $x = 0, 0.01, 0.05$  and  $0.1$ ) nanoparticles were prepared by solvothermal microwave-assisted polyol method from zinc acetate dihydrate and Co(II) acetylacetonate<sup>1,2</sup>. The reactions were performed in diethylene glycol (DEG) at 250 °C. To achieve homogeneous stable colloids, an oleic acid was used as a surfactant. Obtained nanoparticle (ca. 10 nm) precipitates were washed with methanol and dried or kept as colloidal solutions redispersed in toluene. In the case of ZnO nanoparticles, the size of the nanoparticles ranged from ca. 5 to 12 nm and they could be modified by the concentration of Zn precursor. Different morphologies as a result of oleic acid concentration were observed. Colloidal solutions were mixed with the Poly[2-methoxy-5-(2-ethylhexyloxy)-1,4-phenylene-vinylene] (MEH-PPV) polymer to produce homogeneous solutions suitable for the preparation of thin nanocomposite layers with specific optoelectronic properties<sup>3</sup>. The MEH-PPV polymer and its nanocomposites with ZnO or  $\text{Co}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$  nanoparticles were used as thin active layers in polymer light emitting diodes (PLED)<sup>1,2</sup>. Thin nanocomposite layers exhibited optoelectronic properties which were found to be beneficial as the active layer in PLEDs. The incorporation of prepared nanoparticles led to an order of magnitude enhancement in electroluminescence intensity of fabricated devices. A pronounced effect on the opening bias voltage of final devices with  $\text{Co}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$  nanoparticles was also observed.

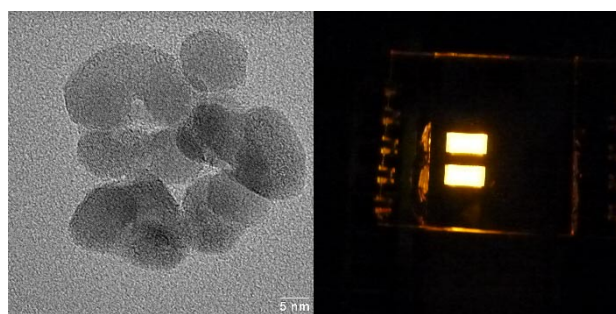


Fig. 1. ZnO nanoparticles on the left. PLED diode operated at 10 V on the right

*This work was supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic – Program NPU I (LO1504) and Internal Grant Agency of Tomas Bata University in Zlin (Grant Number: IGA/CPS/2016/007 and IGA/CPS/2017/008). This contribution was written with support of Operational*

*Program Research and Development for Innovations co-funded by the European Regional Development Fund (ERDF) and national budget of Czech Republic, within the framework of project CPS – strengthening research capacity (reg. number: CZ.1.05/2.1.00/19.0409).*

## REFERENCES

1. Skoda D., Urbanek P., Sevcik J., Munster L., Nadazdy V., Cullen D. A., Bazant P., Antos J., Kuritka I.: *Org. Electron.* 59, 337 (2018).
2. Skoda D., Urbanek P., Sevcik J., Munster L., Antos J., Kuritka I.: *Mater. Sci. Eng. B.*, submitted (2017)
3. Urbánek P., Kuřitka I., Daniš S., Toušková J., Toušek J.: *Polymer (Guildf.)* 55, 4050 (2014).

**10L-11****KATALYTICKÁ AKTIVITA NANOČÁSTIC UŠLECHTILÝCH KOVŮ****LIBOR KVÍTEK, PETR SUCHOMEL, LUCIE HOCHVALDOVÁ, ALEŠ PANÁČEK, ROBERT PRUCEK, RADEK ZBOŘIL***RCPTM a Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká republika  
libor.kvitek@upol.cz*

Nanočástice ušlechtilých kovů I.B podskupiny periodického systému (Cu, Ag, Au) patří mezi nejstudovanější kovové nanomateriály. Důvodem je jejich vysoká biologická aktivita i zajímavé optické vlastnosti využívané v oblastech vývoje nových typů biosenzorů. Zajímavé jsou ovšem i z chemického hlediska díky jejich vysoké katalytické aktivitě, projevující se zejména v redukčně oxidačních reakcích. V mnoha případech se jedná o technologicky zajímavé reakce, jako je oxidace oxidu uhelnatého na zlatém katalyzátoru<sup>1</sup>. Příprava těchto nanomateriálů je poměrně dobře zvládnutá, k dispozici jsou zejména redukční metody přípravy poskytující nanočástice v širokém rozsahu velikostí a morfologie<sup>2</sup>. Z tohoto pohledu se zároveň stávají tyto nanočástice častým objektem studia jejich katalytické aktivity za využití modelových reakcí, jako je redukce nitrofenolu či methylenové modře, jejichž průběh je snadno sledovatelný spektrofotometricky. Univerzálně je pak pro vyhodnocení průběhu těchto modelových reakcí používán model heterogenní katalýzy podle Langmuira a Hinshelwooda (LH)<sup>2</sup>.

Účelem této studie bylo posoudit, zda lze uvedený model průběhu heterogenní katalýzy univerzálně použít na tento typ reakcí. Jako katalytický systém byly použity nanočástice zlata připravené redukcí  $\text{Au}^{3+}$  redukcí maltózou za stabilizace neionickým tenzidem Tween 80 a nanočástice stříbra připravené redukcí  $\text{Ag}^+$  cínatou solí za stabilizace polyakrylátem sodným. Jako modelová reakce byla zvolena redukce nitrofenolu na aminofenol tetrahydridboritanem sodným za katalýzy výše uvedenými nanočásticemi. Analýza získaných kinetických dat následně ukázala, že pro katalýzu uvedené reakce nanočásticemi stříbra lze uplatnit zmíněný LH model heterogenní katalýzy, ovšem v případě nanočástic zlata

jsou kinetická data lépe vystižena modelem podle autorů Eley a Rideal (EL). Důvodem pro toto rozdílné katalytické chování může být rozdílná afinita obou kovů vůči reaktantu a jeho produktu.

*Tato práce vznikla za podpory vnitřního grantu Univerzity Palackého v Olomouci číslo IGA\_PrF\_2018\_021.*

#### LITERATURA

1. Méndez-Cruz M., Ramírez-Solís J., Zanella M.: *Catal. Today* 166, 172 (2011).
2. Wunder S., Lu Y., Albrecht M., Ballauff M.: *ACS Catal.* 1, 908 (2011).



**10P-01****GREEN NANOGOLD-BIOSILICA CATALYST FOR AIR POLLUTION TREATMENT**

**VERONIKA HOLIŠOVÁ<sup>a</sup>, MARTA NATŠINOVÁ<sup>a</sup>,  
GABRIELA KRATOŠOVÁ<sup>a</sup>, ZUZANA KONVIČKOVÁ<sup>a</sup>,  
ŽANETA CHROMČÁKOVÁ<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Nanotechnology Centre, VŠB – Technical University of Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava Poruba, <sup>b</sup> Institute of Environmental Technologies, VŠB – Technical University of Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava Poruba  
gabriela.kratosova@vsb.cz

Combustion of fossil fuels releases CO and NO<sub>x</sub> to the atmosphere. Oxides of nitrogen are emitted as NO that react strongly with ozone or radicals in the atmosphere forming NO<sub>2</sub> and organic compounds as the main products of these reactions. CO comes from incomplete combustion of fuels from motor vehicles as the main source. Different types of catalysts for NO<sub>x</sub> and CO conversion in a bulk<sup>1</sup> or nanoscale<sup>2</sup> form were developed by various physical or chemical methods. However, these methods may be energetically and economically demanding in some cases.

Our research is focused on biosynthesis – the using of biological source for metallic nanoparticles preparation<sup>3</sup>. During biosynthesis, metal ions from precursors in the presence of biomass (algae, fungi, plants, etc.) are reduced to nanoparticles under the action of biomolecules, acting both as reducing and stabilizing agent. In this study, biosynthesis of catalytically active gold nanoparticles (AuNPs) using algae *Diademes gallica* (DG) is described. Moreover, DG cells form biosilica casings called frustules, which serves as a carrier for AuNPs.

Biosilica-nanogold composite was tested for CO and NO<sub>x</sub> conversion. Bionanocomposite was not effective in the NO<sub>2</sub> conversion, however in the CO degradation, biosilica-nanogold composite was catalytically active (62% conversion of CO at 350 °C). Bionanocomposite was then magnetically modified by ferrofluid to further enhance catalytic effect, improve manipulation and stabilization. After magnetic modification, 100% conversion of CO at 350 °C was achieved.

Authors thank MSMT CR (project SGS No.SP2018/72) for the financial support.

## REFERENCES

1. Kim T., Kim D. H., Kim S., Kim Y. D., Bae Y. S., Lee C. Y.: *Polyhedron*. 90, 18 (2015).
2. Arán-Ais R. M., Vidal-Iglesias F. J., Farias M. J. S., Solla-Gullón J., Montiel V., Herrero E., Feliu J. M.: *J. Electroanal. Chem.* 793, 126 (2017).
3. Kratošová G., Konvičková Z., Vávra I., Zapomělová E., Rai M., Schrofel A.: *Adv. Sci. Lett.* 22, 637 (2016).

**10P-02****ANTIMICROBIAL EFFECT OF HYBRID POLYMERIC NANOCOMPOSITE FILM CONTAINING AMINE AND BIOSILVER**

**GRAŽYNA SIMHA MARTYNKOVÁ<sup>a,b</sup>, DIANA KLUSHINA<sup>a</sup>, ERICH PAZDZIORA<sup>c</sup>, SARA PAKSERESH<sup>d</sup>, GABRIELA KRATOŠOVÁ<sup>a</sup>, SYLVA HOLEŠOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Nanotechnology Centre, VŠB - Technical University of Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava-Poruba, Czech Republic, <sup>b</sup> IT4Innovation, VŠB - Technical University of Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava-Poruba, Czech Republic, <sup>c</sup> NRL, Institute of Public Health in Ostrava, Partyzánské náměstí 7, 702 00 Ostrava, Czech Republic, <sup>d</sup> Nanoscience and Nanoengineering Faculty, Sakarya University, Esentepe Campus, 54187, Sakarya, Turkey  
grazyna.simha@vsb.cz

The need of solving a microbial infection in various environments of life is constantly on demand. One of the possible solutions is nanotechnology of composites, where relatively small amount of active substance will provide sufficient antimicrobial effect compare to traditional disinfectant<sup>1,2</sup>.

Effect of antimicrobial hybrid polymeric nanocomposites was studied for several types of designed films. The functional matter in the polymeric matrix was double: metallic and organic species. Structure, chemistry and morphology of prepared samples were studied using X-ray diffraction methods, electron microscopy and atomic spectroscopy.

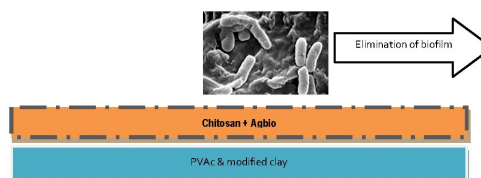


Fig. 1. Biofilm limitation on hybrid polymeric nanocomposite film

Testing of several combination of concentration of functional matter of hybrid nanocomposites brought important results for long term utilization of such nanocomposites.

The materials were very well working for bacterial strains of *E. Coli* and *P. aeruginosa* while *Enterococcus faecium* was active even after 96 h of testing.

The authors acknowledge the support by projects (NPU II) „IT4Innovations excellence in science LQ1602“ and SP2018/112.

## REFERENCES

1. Šupová M., Martynková G. S., Barabaszová K.: *Sci. Adv. Mater.* 3, 1 (2011).
2. Martynková G. S., Valášková M.: *J. Nanosci. Nanotechnol.* 14, 673 (2014).

**10P-03****PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF COPPER OXIDE NANOPARTICLES AND COPPER OXIDE /VERMICULITE NANOCOMPOSITES****KARLA ČECH BARABASZOVÁ<sup>a</sup>, MARTIN BÍLÝ<sup>a</sup>, MARIANNA HUNDÁKOVÁ<sup>a</sup>, ERICH PAZDZIORA<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> VŠB-TU Ostrava, Centrum Nanotechnologií, 17. listopadu 15/2172, 708 33 Ostrava-Poruba, <sup>b</sup> Zdravotní ústav Ostrava, Centrum klinických laboratoří, Partyzánské náměstí 7, 702 00 Ostrava, Czech Republic  
 karla.cech.barabaszova@vsb.cz

Copper oxide nanoparticles can be used in a wide range of applications due to its specific chemical, surface and microstructural characteristics, excellent physicochemical properties and cost effectiveness. The combination of the copper oxide nanoparticles with the vermiculite particles allows to the preparation of nanocomposite materials with specific properties.

Nanostructured materials were prepared by sonochemical synthetic method followed by a heat treatment (at 350 °C for 90 min) with the used of Cu(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> and NaOH precursors. Natural vermiculite from Brazil was used for nanocomposite copper oxide/vermiculite preparation. The samples were characterized using scanning electron microscopy, X-ray diffraction, Fourier transform infrared spectroscopy. The particle size,  $\zeta$ -potential and specific surface area were analysed also<sup>1,2</sup>.

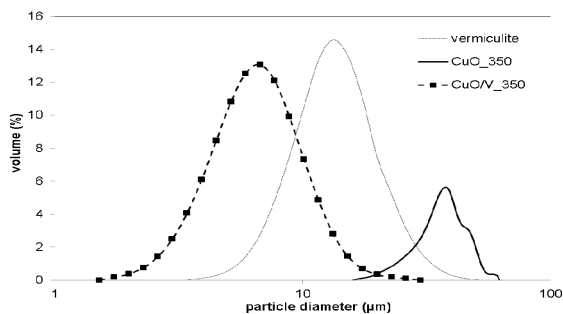


Fig. 1. Log-normal particle size distributions of samples

The antibacterial efficiency of nanostructured materials was evaluated by finding the minimum inhibitory concentration against *S. aureus*, *E. faecalis*, *E. coli* and *Pseudomonas a.*

This work was supported by the project No. SP2018/74 “Mechanically activated hybrid nanocomposite materials”.

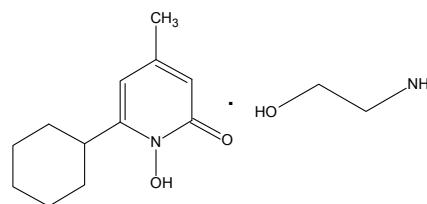
## REFERENCES

1. Bílý M.: Effect of the filler size on the PVAc nanocomposite preparation. *Bachelor thesis*, 2017, 49 p.
2. Čech Barabaszová K., Kalivoda P.: *J. Nanocompos. Nanoceram.* 4, 7 (2013).

**10P-04****SYNTHESIS AND ANTIMICROBIAL ACTIVITY OF CICLOPIROXOLAMINE/CLAY NANOCOMPOSITES****SYLVA HOLEŠOVÁ<sup>a</sup>, MARIANNA HUNDÁKOVÁ<sup>a</sup>, ERICH PAZDZIORA<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> VŠB-TU Ostrava, Nanotechnology Centre, 17. listopadu 15/2172, 708 33 Ostrava-Poruba, <sup>b</sup> Institute of Public Health Ostrava, Centre of Clinical Laboratories, Partyzánské náměstí 7, 702 00 Ostrava, Czech Republic  
 sylva.holesova@vsb.cz

The current topics of material research focused on medical use deal with development of hybrid organic-inorganic nanocomposites with antimicrobial activity based on layered materials. The clay minerals are commonly used materials in pharmaceutical field both as inorganic excipients or active agents<sup>1,2</sup>, because they may undergo ion exchange reaction with functional antimicrobial molecules via intercalation process<sup>3</sup>. Some of the antifungal drugs have limitation due to its low dissolution rate in the aqueous media resulting in low bioavailability. Therefore it is required to develop a drug delivery system that can minimize side effects and increase drug bioavailability. Ciclopiroxolamine is a hydroxypyridone antifungal agent that is structurally unrelated to the common imidazole derivatives or other antifungals (Scheme 1). It is broad-spectrum antifungal agent with additional antibacterial and anti-inflammatory activities.



Scheme 1. Ciclopiroxolamine

The aim of this study is to anchor antifungal drug ciclopiroxolamine on clay minerals via different intercalation techniques (from solution and by ultrasound) and compared their antimicrobial activity. The structural characteristics of all prepared nanocomposites are studied by XRD, FTIR, SSA and moreover organic carbon content was determined. Especially, antimicrobial properties of a these nanocomposites are tested *in vitro* for bacterial strains *Staphylococcus aureus* and *Escherichia coli* and mainly for yeast *Candida albicans*.

This work was supported by project No. SP2018/112 (Ministry of Education, Youth and a Sports of Czech Republic).

## REFERENCES

1. Carretero M. I.: *Appl. Clay Sci.* 21, 155 (2002).
2. Aguzzi C., Cerezo P., Viseras C., Caramella C.: *Appl. Clay Sci.* 36, 22 (2007).
3. Holešová S., Štembírek J., Bartošová L., Pražanová G., Valášková M., Samlíková M., Pazdziora E.: *Mater. Sci. Eng. C* 42, 466 (2014).

## 10P-05

## KOMPOZITNÁ STRUNA VHODNÁ NA PRÍPRAVU FUNKČNÝCH KERAMICKÝCH MATERIÁLOV POMOCOU 3D TLAČE

ZORA HAJDÚCHOVÁ<sup>a</sup>, PETER VETEŠKA<sup>a</sup>,  
KATARÍNA TOMANOVÁ<sup>b</sup>, KRISTÍNA RANDOVÁ<sup>a</sup>,  
RODERIK PLAVEC<sup>b</sup>, LEONA OMANÍKOVÁ<sup>b</sup>, JOZEF  
FERANC<sup>b</sup>, ĽUBOŠ BAČA<sup>a</sup>, MARIÁN JANEK<sup>a,c</sup>

<sup>a</sup> Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava,  
<sup>b</sup> Ústav polymérnych materiálov, FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, <sup>c</sup> Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, PriF UK, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovensko  
zora.hajduchova@stuba.sk

3D tlač, známa tiež pod pojmom aditívna výroba je technológia, ktorej princípom je tvorba trojrozmerných pevných objektov z počítačového modelu, kde sa objekt vytvára postupným pridávaním vrstvy po vrstve. Využitie 3D tlače je rozmanité: od výroby jedál, pri stavbe domov, výroba šperkov, funkčných súčiastok až výroba biologického tkaniva. Pre výrobu keramických materiálov existuje viacero technológií<sup>1</sup>, ktoré sa využívajú pri 3D tlači. Najlacnejšou a ľahko dostupnou možnosťou je FDC (Fused Deposition of Ceramics), kde sa keramický prášok zmiešava s termoplastickým polymérom, následne sa vytlačá do strún, ktoré sú použité v FDM (Fused Deposition Modeling) tlačiarňach. Na túto technológiu sa dá využiť široká škála polymérov a keramických práškov. Nevýhodou tejto technológie je dlhý čas tlače a viditeľnosť jednotlivých vrstiev. Na získanie keramického materiálu je potrebné následné odstránenie spojiva a spekanie.

Na prípravu kompozitnej struny sa použil keramický prášok (40 hm.%), ktorého hlavnými zložkami boli Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, SiO<sub>2</sub>, Na<sub>2</sub>O a termoplastický syntetický polymér. Na tlače keramických teliesok sa použila komerčne dostupná 3D tlačiareň (Leapfrog Creatr), s modifikovanými tryskami o priemere 0,8 mm. Rýchlosť tlače bola 5 mm/s a teplota tlače 215 °C. Teplota potrebná na odstránenie spojiva 850 °C bola zistená pomocou termickej analýzy (SeikoExstar TG/DTA 6300). Teplotné režimy výpalu boli stanovené na základe výsledkov získaných pomocou žiarového mikroskopu s rýchlosťou ohrevu 5 °C/min, kde zmena vo veľkosti a tvaru vzorky indikovala začiatok spekania na teplotu 1200 °C, kedy dochádzalo k vzájomnému spájaniu jednotlivých zŕn, čo bolo potvrdené aj sledovaním mikroštruktúry vzoriek na prístroji JEOL 7500F. Uvedeným postupom sa pripravili keramické telieska s dobrou tvarovou stálosťou a zmrštením 23 %.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA č. 1/0906/17 a APVV-16-0341.

## LITERATÚRA

1. Deckers J., Vleugels J., Kruth J. P.: J. Ceram. Sci. Tech. 5, 245 (2014).

## 10P-06

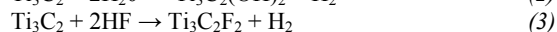
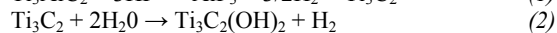
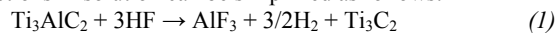
## PREPARATION AND CHARACTERISATION OF NOVEL 2D MATERIALS – MXENES

SIMONA PROCHÁZKOVÁ<sup>a</sup>, MICHAL PROCHÁZKA<sup>b</sup>,  
DAIVA ZELENIAKIENĚ<sup>c</sup>, ANDREY ANISKEVICH<sup>d</sup>,  
MÁRIA OMASTOVÁ<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Department of Analytical Chemistry, Faculty of Natural Sciences Comenius University, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava 4, Slovakia, <sup>b</sup> Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava 45, Slovakia, <sup>c</sup> Kaunas University of Technology, Department of Mechanical Engineering, Studentu st. 56, 51424 Kaunas, Lithuania, <sup>d</sup> Institute for Mechanics of Materials, University of Latvia, 23 Aizkraukles str., Riga, Latvia  
simona.prochazkova@uniba.sk

MXenes are a new family of two-dimensional (2D) transition metal carbides and/or nitrides discovered in 2011 at Drexel University<sup>1</sup>. These 2D layered materials are called ‘MXenes’ because we produce them by etching A layer from MAX phases, the suffix ‘ene’ is added to emphasize their similarity to graphene. MAX phases are a large family (90+ members) of hexagonal layered ternary transition metal carbides, carbonitrides and nitrides with composition of M<sub>n+1</sub>AX<sub>n</sub>, where M stands for an early transition metal (such as Ti, V, Cr, Nb, etc.), A stands for a group A element (such as Al, Si, Sn, In, etc.), X stands for carbon and/or nitrogen, and n = 1, 2, or 3.

In this work, we were focused on preparation of MXene Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub> by immersing Ti<sub>3</sub>AlC<sub>2</sub> powder in HF solution. Reactions in solution can be simplified as follows:



It is important to note here that MXene surfaces are terminated by O, OH, and/or F groups from the etching process. Henceforth, these terminated MXenes will be referred to as Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub>, where T represents terminating groups (O, OH, and/or F) and x is the number of terminating groups.

For characterization of prepared Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> materials were used SEM and XPS analysis. Results from XPS shows decreasing amount of Al during the etching reactions. In SEM images shown the multilayered Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> MXenes, which were than delaminated by different intercalators and procedures.

Prepared delaminated Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> MXenes should be used as nanofillers to polymers composites for preparation of conducting materials which can be used for EMI shielding.

This project was supported by project M-era.Net Nano2Com No. 5015, a grant No. S-M-ERA.NET-18-1 from the Research Council of Lithuania and by project VEGA 02/0010/18 (Slovakia).

## REFERENCE

1. Naguib M., Kurtoglu M., Presser V., Lu J., Niu J., Heon M., Hultman L., Gogotsi Y., Barsoum M. W.: Adv. Mater. 23, 4248 (2011).



## 10P-07

## SWIFT SYNTHESIS OF N-DOPED GQDs BY MICROWAVE IRRADIATION

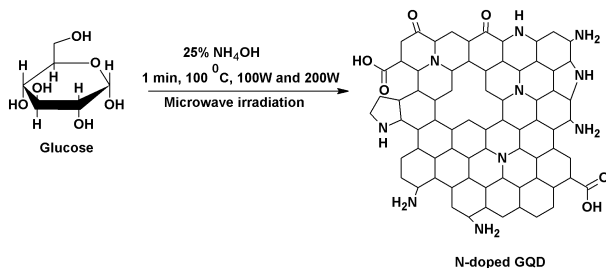
JOVANA PREKODRAVAC<sup>a</sup>, BOJANA VASILJEVIC<sup>b</sup>, ZORAN MARKOVIC<sup>c</sup>, MILICA BUDIMIR<sup>a</sup>, ZDENKO SPITALSKY<sup>c</sup>, MATEJ MICUSIK<sup>c</sup>, MARTIN DANKO<sup>c</sup>, BILJANA TODOROVIC-MARKOVIC<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Institute of nuclear sciences „Vinča“, University of Belgrade, P.O.B 522, 11001 Belgrade, Serbia, <sup>2</sup> Department of Chemistry, Biochemistry and Environmental Protection, Faculty of Sciences, University of Novi Sad, 21 000 Novi Sad, Serbia, <sup>3</sup> Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, 84541 Bratislava, Slovakia  
prekodravacj@gmail.com

Introduction of heteroatom's such as nitrogen (N) into the graphene quantum dots (GQDs), enable tailoring of photoluminescence (PL) properties of GQDs<sup>1</sup>.

We fabricated N-doped GQDs *via* swift and easy one-step microwave-assisted method. Synthesis was performed from water solution of glucose and GQD as precursors in the presence of ammonia hydroxide (NH<sub>4</sub>OH, 25%). Aqueous solutions were irradiated in closed-vessel system of CEM Discover BenchMate single mode microwave reactor for only 1 minute, at fixed temperature (100 °C) and power (100 W, 200 W).

The results obtained by different characterisation techniques showed that synthesized N-doped GQDs were approximately 10 nm in size and 1 nm in height. The percentage of bound nitrogen in this short amount of time is about 11 % in the form of pyridinic/NH<sub>2</sub>, pyrrolic-N and graphitic-N (Scheme 1).



Scheme 1. N-doped GQDs synthesis by MW irradiation from glucose as precursors

This work is supported by the Ministry of Education, Science and Technological development of Republic of Serbia (Projects 172003 and DS021).

## REFERENCE

- Xiaofen X., Fuhua G., Xiaohua B., Fuchi L., Wenije K., Ming L.: *J. Mater. Sci.* 10, 1328 (2017).

## 10P-08

## GOLD NANOPARTICLES/EXFOLIATED GRAPHENE HYBRID OBTAINED BY GAMMA IRRADIATION

DEJAN KEPIC<sup>a</sup>, ZORAN MARKOVIC<sup>a,b</sup>, DRAGANA JOVANOVIC<sup>a</sup>, MILICA BUDIMIR<sup>a</sup>, DUŠKA KLEUT<sup>a</sup>, DANICA BAJUK-BOGDANOVIĆ<sup>c</sup>, VLADIMIR PAVLOVIC<sup>d</sup>, BILJANA TODOROVIC MARKOVIC<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Vinča Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade, P.O.B. 522, 11001 Belgrade, Serbia, <sup>b</sup> Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dubravská cesta 9, 84541 Bratislava, Slovakia, <sup>c</sup> Faculty of Physical Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia, <sup>d</sup> Faculty of Agriculture, University of Belgrade, Nemanjina 6, 11080 Zemun, Serbia  
d.kepic@vin.bg.ac.rs

Gold nanoparticles decorated graphene sheets present a good surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) platform for the development of ultrasensitive analytical applications<sup>1</sup>. Here, we prepared gold nanoparticles/exfoliated graphene hybrid by gamma irradiation of chloroauric acid as a precursor in the presence of electrochemically exfoliated highly oriented pyrolytic graphite (HOPG). The effects of various irradiation doses (1, 5, 10 and 20 kGy) on the size and shape of synthesized nanoparticles were studied. It was found that the presence of HOPG leads to the formation of gold nanoparticles of triangular, spherical, hexagonal, trapezoidal and rod-shape morphology. On the other hand, irradiation of chloroauric acid solution without HOPG results mainly in irregular shaped nanoparticles, however, certain amount of square shaped nanoparticles is observed. According to statistical analysis of gold nanoparticles/graphene hybrid, nearly half of the nanoparticles have sizes in the 11–20 nm range for all of the applied doses. The increase of irradiation dose results in the increase of the amount of smaller nanoparticles (up to 10 nm in size). Nevertheless, for the highest applied dose agglomeration of nanoparticles takes place leading to the formation of particles that exceed 100 nm in size. Presented synthetic route is fast, simple and low-cost since it does not require the use of a gold nanoparticle stabilizer.

The research was supported by the Ministry of Education, Science and Technological Development of the Republic of Serbia (project no. 172003 and DS021), and bilateral project Serbia-Slovakia (SK-SRB-2016-0038). D. K. acknowledges the support of COST Action CA15107.

## REFERENCE

- Khalil I., Julkapli N., Yehye W., Basirun W., Bhargava S.: *Materials* 9, 406 (2016).

**10P-09****UTILIZATION OF DIMENSION-LESS NUMBERS FOR POLYMER INKJET PRINTABILITY EVALUATION****PAVOL ŠULY, JAN MAŠLÍK, PETR KRČMÁŘ,  
PAVEL URBÁNEK, IVO KUŘITKA***Centre of Polymer Systems, Tomas Bata University in Zlin,  
tr. Tomase Bati 5678, 76001 Zlin, Czech Republic  
suly@utb.cz*

Inkjet printing (IJP) represents a unique technique of preparation of tailored patterns on various surfaces. The patterns could be prepared in required shape, position and with required resolution. The main advantages of this technique are low waste of ink, cost-saving and non-contact process. IJP can be used for printed electronics, enzyme-based sensors, and tissue engineering, for example<sup>1,2</sup>.

Drop formation represents a key step of the printing process, which can be characterized by a number of dimensionless groupings of physical constants, namely by the Reynolds ( $Re$ ), the Weber ( $We$ ), the Ohnesorge ( $Oh$ ), and the Z number<sup>2,3</sup>. There are several recommendations for stable single drop formation. A definition of good printability was introduced by Kim&Baek who describe a good printing process when “a single drop is formed either directly without second pinch-off or the satellite drop merges with the main drop within its travel distance less than 20 times characteristic length forming thus a single drop”<sup>4</sup>.

It was found that the printing regime map can be replotted in the coordinates  $Re$  vs  $Ca$  with advantage. All critical criteria ranges derived in previous literature can be easily drawn into this new suggested graph. The range of parameters for optimum printing regime can be described by two  $We$  hyperbolic isolines. It means that the main factor deciding about success of the printing process is surface energy and relaxation time related to surface perturbation, and that the viscosity of prepared ink is of lesser importance. In fact, surface tension is the only form of energy that works against the purely Newtonian fluid thread prolongation and forms actively the drop spherical shape<sup>5</sup>.

*This work was supported by the Ministry of Education and Sport of the Czech Republic under the NPU I program (project LO1504). This work was supported within the framework of “International Mobility of TBU in Zlin Researchers” (project No. CZ.02.2.69/0.0/0.0/16\_027/0008464) funded from the EU Funds – OP Research, Development and Education in cooperation with the Ministry of Education, Youth and Sports, Czech Republic.*

## REFERENCES

1. Tekin E., Smith P. J., Schubert U. S.: *Soft Matter* 4, 703 (2008).
2. Derby B.: *Annu. Rev. Mater. Res.* 40, 395 (2010).
3. Jang D., Kim D., Moon J.: *Langmuir* 25, 2629 (2009).
4. Kim E., Baek J.: *Phys. Fluids* 24, 082103 (2012).
5. Šuly P.: *Dissertation*, Tomas Bata University in Zlin, Zlin, Czech Republic, 2017.

**10P-10****ANALYSIS OF WATER STRUCTURE IN DISPERSIONS OF METAL NANOPARTICLES BY RAMAN SPECTROSCOPY****PAULINA FILIPCZAK<sup>a,b</sup>, MARCIN KOZANECKI<sup>a</sup>***<sup>a</sup> Department of Molecular Physics, Lodz University of Technology, ul. Zeromskiego 116, 90-942 Lodz, Poland,  
<sup>b</sup> Student Section of Polish Chemical Society  
paulina.filipczak@edu.p.lodz.pl*

Despite of being so abundant, water has still remained as a not entirely known substance<sup>1</sup>. Anomalous properties, which water exhibit, are very different from other molecules of a similar mass, composition, dipole moment, etc. There are many models of water structure in liquid phase<sup>2</sup>, generally grouped into two types: models with a continuum of geometric and energetic states (assuming tetrahedral coordination of water molecules) and models of water as a mixture of discrete species (water clusters). It is difficult to choose between them, because the spatial network of hydrogen bonds has features of both continuous and discrete models. Beside differences, all models assume “flexibility” of water structure in liquid phase. Simultaneous breaking and formation of hydrogen bonds play a crucial role in explanation of many anomalous behaviors in water.

Raman spectroscopy is the most common technique used to investigate the water structure and intermolecular interactions in water systems. Raman spectrum of water contains three main components: broad OH stretching vibration band in range 3000–3800  $\text{cm}^{-1}$ , bending band, corresponding to the vibrations of the H-O-H angle in liquid water, observed around 1645  $\text{cm}^{-1}$  and acoustic modes in low-frequency part of spectrum below 300  $\text{cm}^{-1}$  assigned to intermonomer vibrations of water molecules.

Metal nanoparticles gain more and more popularity in many various applications, such as electronics, photonics and medicine<sup>3</sup>. Noble metal nanocolloids are also commonly used as an enhancing substrate in Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS)<sup>4</sup>. Due to growing popularity of metal nanoparticles applications and presence in our environment, knowledge about interactions with water is of great importance.

Analysis of Raman spectra of water dispersions of silver and gold nanoparticles (AgNPs, AuNPs) with different shape and size, in comparison to pure water in whole spectral range of water vibrations will be discussed.

*Work was partially financed by project PRELUDIUM from National Science Centre Poland (UMO 2017/25/N/ST4/01125).*

## REFERENCES

1. Ball P.: *Nature* 452, 291 (2008).
2. Eisenberg D., Kauzmann W., *The structure and properties of water*. Oxford University Press, London 1969.
3. Murphy C. J., et al.: *J. Phys. Chem. B* 109, 13857 (2005).
4. Stamplecoskie K. G., et al.: *J. Phys. Chem. C* 115, 1403 (2011).

**10P-11****SYNTÉZA NANOČÁSTIC FOSFOREČNANU ZINEČNATÉHO A OVĚŘENÍ JEJICH VYUŽITÍ V ANTIKOROZNÍCH NÁTĚRECH****JAKUB HOUDEK<sup>a</sup>, MIROSLAV VLČEK<sup>b</sup>, JIŘÍ ZELENKA<sup>c</sup>**

<sup>a</sup> Katedra obecné a anorganické chemie, FCHT, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice, <sup>b</sup> Centrum materiálů a nanotechnologií, FCHT, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 530 02 Pardubice, <sup>c</sup> TOSEDA, s.r.o. U Panasonicu 376, 530 06 Staré Ččivice, Česká republika  
jakub.houdek1@student.upce.cz

V této práci byla studována možnost syntézy fosforečnanu zinečnatého s lamelární morfologií, která by současně s aktivním antikoročním účinkem zvyšovala bariérový efekt nátěru<sup>1</sup>.

Syntéza částic byla provedena řízeným srážením vodných roztoků Zn<sup>2+</sup> solí pomocí (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>HPO<sub>4</sub> za různých podmínek. Byl sledován vliv typu aniontu výchozí Zn<sup>2+</sup> soli, vliv míchání, pH, teploty a koncentrace roztoků na tvar a velikost částic. Tyto základní parametry nanočástic fosforečnanu zinečnatého byly sledovány s využitím SEM a AFM. Krystalická struktura byla studována s využitím XRD.

Z důvodu obtížné dispergace a nestability částic v epoxidovém pojivu bylo nezbytné provést povrchovou modifikaci. Ta vedla ke zvýšení stability a kvalitnější dispergaci. Modifikace byla sledována pomocí TGA a kvalita dispergace s využitím SEM a EDAX. Antikoroční účinek nátěrů byl testován zrychlenými testy v solné komoře.

Jako stěžejní faktor ovlivňující tvar a velikost částic se jeví výchozí koncentrace Zn<sup>2+</sup> soli. Lamelární nanočástice vykazují lepší antikoroční účinek v porovnání s mikronovými částicemi stejného chemického složení.

Publikování této práce bylo podpořeno studentským grantem SGS\_2018\_004.

**LITERATURA**

1. Cabrera C. R., Miranda F. (ed.): *Advanced nanomaterials for aerospace applications*. CRC Press 2014.

**10P-12****VYSOKOTEPLNÍ SUPRAVODIČ YBCO, JEHO MODIFIKACE A APLIKACE****VILÉM BARTŮNĚK<sup>a,b</sup>, TOMÁŠ HLÁSEK<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> Vysoká škola chemicko-technologická, Fakulta chemické technologie, Technická 5, Praha 6, 166 28, Česká republika,  
<sup>b</sup> CAN SUPERCONDUCTORS, s.r.o., Ringhofferova 66, Kamenice, 251 68, Česká republika  
vilem.bartunek@vscht.cz

Vysokoteplotní supravodič YBCO na bázi supravodivé fáze YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>x</sub> je vícefázový keramický materiál, který má již relativně dlouhou tradici výzkumu i aplikací. Aplikace lze

rozdělit do dvou skupin, podle formy zpracování materiálu. První jsou supravodivé pásky s tenkými vrstvami YBCO supravodiče obvykle zpracované do formy vícevrstevných drátů složitější architektury. Ty jsou poté používány hlavně jako vodiče elektrického proudu s velmi vysokou proudovou hustotou. Druhým typem jsou objemové formy supravodiče, kterými se zabývá tento příspěvek. Objemové formy se nejčastěji využívají jako magnetické levitační prvky a jejich nejdůležitějšími vlastnostmi je proto levitační síla a zachycené magnetické pole. Pro maximalizaci jejich parametrů se používá zejména přidávání dalších nesupravodivých fází jako takzvaných pinningových center. Tyto fáze mohou při přípravě reagovat s materiálem supravodiče a vytvářet další nesupravodivé fáze nebo zůstat nereaktivní, což je výhodnější pro zachování jejich tvaru v požadované formě. V rámci práce byly vyvíjeny a testovány různé typy pinningových center na bázi nanočástic základních oxidů jako je například ZrO<sub>2</sub> nebo složitější směsné oxidy na bázi substituce prvků v supravodivé matici. Výsledky byly evaluovány s ohledem k aplikačnímu využití a také byly provedeny základní a demonstrační experimenty v tomto směru.

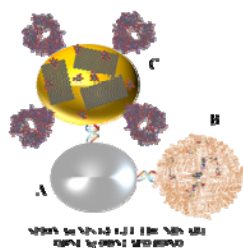
Tato práce vznikla za podpory grantu MPO, program TRIO, číslo grantu FV10522.

**10P-13****RYCHLÉ TERANOSTICKÉ PŘÍSTUPY PRO LÉČBU BAKTERIÁLNÍCH INFEKČÍ U NÁDOROVÝCH ONEMOCNĚNÍ****MICHAEL GARGULÁK<sup>a</sup>, MATOUŠ ČÍŽEK<sup>a</sup>, ANETA SUROVÍKOVÁ<sup>a</sup>, ALEŠ VAVŘÍŇK<sup>b</sup>, DAGMAR UHLÍŘOVÁ<sup>c</sup>, MICHAELA DOČEKALOVÁ<sup>c</sup>, BOŽENA HOSNEDLOVÁ<sup>b</sup>, JIŘÍ SOCHOR<sup>b</sup>, RENÉ KIZEK<sup>\*,a,c</sup>**

<sup>a</sup> Ústav humánní farmakologie a toxikologie, Farmaceutická fakulta, VFU Brno, Palackého tř. 1, 612 42 Brno, <sup>b</sup> Laborator mikrobiologie, Zahradnická fakulta, MENDELU Brno, Valtická 337, 691 44 Lednice, <sup>c</sup> Oddělení výzkumu a vývoje, Prevention medicals, s. r. o., Tovární 342, Butovice, 742 13 Studénka, Česká republika  
kizek@sci.muni.cz

Je známo, že nádorová onemocnění jsou velkou hrozbou pro lidské zdraví<sup>1</sup>. Léčba nádorových onemocnění zasahuje do celé řady biologických procesů. V důsledku toho se může usnadnit vstup patogenů do organismu a vyvolat závažnou infekci<sup>2</sup>. Koincidence nádorového onemocnění a bakteriální infekce jsou často pro lidský organismus fatální. Cílem projektu bylo navrhnout a ověřit teranostický konstrukt pro zacílení k bakteriální buňce<sup>3</sup>.

V průběhu projektu bylo připraveno 20 druhů stříbrných nanočástic (AgNPs). Nejlepší antibakteriální efekt (85% inhibice růstu) MIC<sub>50</sub> (*S. aureus*) 0,4 μg/ml, byl pozorován u AgNPs4 (*Thymus serpyllum*). SPION (20 mg/ml, magnetické zlaté nanočástice), byly modifikovány protilátkou (1 mg/ml IgY) a oxidovanými grafenovými listy (1 mg/ml). K navázání byl použit polymer EDC/NHS (2,2 mM EDC, 4 mM NHS, 3 h, 37 °C). Na SPION/Au nanočástice byl napojen apoferritin (SPION/Au/APO). Do dutiny SPION/Au/APO (12



**Schéma připraveného nanokonstrukt: A – stříbrná nanočástice, B – apoferritin, C – zlatá nanočástice**

nm) bylo modelově uzavřeno antibiotikum doxorubicin ( $2 \mu\text{M}$  DOX, efektivita enkapsulace DOX kolem 13 % aplikované koncentrace). Vytvořený konstrukt SPION/Au/AgNPsGS4/APO/DOX byl aplikován na modelovou kulturu *S. aureus*. V přítomnosti  $70 \mu\text{g}$  SPION/Au/AgNPsGS4/APO/DOX byla zaznamenána dramatická inhibice *S. aureus* (téměř 100% u růstových křivek a 13 mm na agarovém médiu). Biologickým efektem nanotransportéru je vznik ROS, destrukce nukleové kyseliny a poškození buněčné membrány.

*Práce byla podpořena projektem CA COST Action CA15114 3D ANTIMICROB LC18002.*

#### LITERATURA

1. McGuire S.: Adv. Nutr. Int. Rev. J. 7, 418 (2016).
2. Lanoix J.-P. et al.: BMC Inf. Dis. 11, 183 (2011).
3. Lyman G. H. et al: Cancer 116, 5555 (2010).

**11L-01****FAKTORY OVLIVŇUJÍCÍ ZDÁNlivÝ PŘÍSTĚNNÝ SKLUZ KOLOIDNÍCH DISPERZÍ****VĚRA PĚNKAVOVÁ, JAROSLAV TIHON, ONDŘEJ WEIN**

Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Rozvojová 135,  
165 02 Praha 6 – Suchbátka, Česká republika  
penkavova@icpf.cas.cz

Při toku kapalin je běžně uvažována okrajová podmínka úplného přilnutí na stěně, tj. rychlost kapaliny je v místě kontaktu se stěnou stejná jako rychlost stěny. V případě koloidních disperzí však může docházet k deformaci přístěnného rychlostního profilu v důsledku koncentračního spádu v přístěnné oblasti<sup>1</sup>. Změny koncentrace v blízkosti stěny mohou být zapříčiněny například sterickými nebo elektrochemickými vlivy. Výsledkem pak jsou tokové anomálie jako pozitivní zdánlivý přístěnný skluz (AWS – z anglického apparent wall slip) v důsledku ochuzené vrstvy nebo negativní AWS v důsledku tvorby stagnantní vrstvy.

Tvorba anomální vrstvy v přístěnné oblasti při toku koloidních disperzí, a tedy AWS, je ovlivňována řadou faktorů. Jsou to především koncentrace částic v disperzi, teplota a materiálové vlastnosti jak disperze, tak obtékané stěny, respektive jejich kombinace.

Vyšší koncentrace částic v disperzi vede k tomu, že anomální vrstva u stěny je tenčí, a tudíž zdánlivá skluzová rychlost v případě kladného AWS je nižší<sup>2</sup>, obdobně jako stagnantní vrstva je tenčí<sup>3</sup> v případě negativního AWS. Vyšší teplota vede ke zvýšení fluidity nosné kapaliny, což následně vede k vyšší skluzové rychlosti pro případ kladného AWS<sup>2</sup>. Tvorba anomální vrstvy je zásadně ovlivňována elektrochemickými interakcemi mezi stěnou a obtékající kapalinou. Pro inertní materiál stěny, jako je nerezová ocel a titan, lze očekávat pozitivní AWS, naproti tomu, tam, kde může docházet k elektrochemickým interakcím mezi stěnou a částicemi lze očekávat negativní AWS<sup>3</sup>. Toto chování lze ovlivnit přidáním vhodných elektrolytů.

Výskyt anomálií v přístěnné oblasti při toku koloidních disperzí (AWS) je tedy ovlivněn mnoha faktory. Těmto přístěnným jevům je třeba věnovat zvýšenou pozornost zejména při toku v zařízeních, jejichž hydraulický poloměr se pohybuje v mikrometrech až milimetrech, neboť zde je podíl AWS k celkovému toku velmi významný.

*Tato přednáška je věnována památce profesora Ondřeje Weina, bez jehož příspěví by nebylo možné proniknout tak hluboko do tajů přístěnných jevů.*

*Tato práce vznikla za podpory TAČR grantu TH03020313.*

**LITERATURA**

1. Barnes H. A.: Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics 56, 221 (1995).
2. Pěnkavová V., Tihon J., Wein O.: Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects 511, 272 (2016).
3. Pěnkavová V., Tihon J., Wein O.: Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects 533, 338 (2017).

**11L-02****SIMULTÁNNÍ ELEKTRICKO-RHEOLOGICKÁ MĚŘENÍ TAVENIN VODIVÝCH POLYMERNÍCH KOMPOZITŮ****ZDENĚK STARÝ**

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

Vodivé polymerní kompozity jsou perspektivní materiály se širokým použitím: v obalové technice pro své antistatické vlastnosti, ve stínění elektromagnetické interference nebo ve vývoji senzorů<sup>1,2</sup>. Elektrické vlastnosti polymerních kompozitů obsahujících vodivé částice jsou dány jejich morfologií, neboť k dosažení určitého stupně vodivosti je nezbytné vytvoření perkolovaných částicových struktur. Elektrická vodivost kompozitu je tak ovlivněna nejen koncentrací plniva a interakcemi mezi polymerem a částicemi, ale do velké míry i podmínkami jeho zpracování v tavenině. Na jedné straně je vyžadována nejnížší potřebná koncentrace plniva za účelem minimalizace změn tokového chování vyvolaných přítomností pevných částic. Na straně druhé při nízkých koncentracích jsou částicové struktury křehké a mohou být lehce zničeny vlivem napětí vloženého na materiál během zpracování, což může vést ke ztrátě elektrické vodivosti. Popis a pochopení chování částicových struktur v toku polymerní taveniny jsou tedy zásadní při produkci vodivých polymerních kompozitů s vyváženými elektrickými a zpracovatelskými vlastnostmi.

Simultánní elektro-reologická měření byly poprvé použity v roce 2004 pro studium systémů obsahujících uhlíkové nanotrubičky<sup>3</sup>. Od té doby se ukázaly být citlivým nástrojem umožňujícím sledovat strukturální změny ve vodivých polymerních kompozitech vyvolaných definovanou mechanickou deformací<sup>4,5</sup>. V tomto příspěvku budou stručně shrnuty výsledky získané pomocí smykových a elongačních elektro-reologických měření na systémech obsahujících vodivé saze a uhlíková mikrovlákna<sup>6,7</sup>. Z vývoje elektrické vodivosti lze usuzovat na destrukci nebo aglomeraci částicových struktur v tavenině a zároveň vyhodnotit účinek těchto změn na reologické vlastnosti kompozitu.

*Tato práce vznikla za podpory GA ČR (č. grantu 17-05654S).*

**LITERATURA**

1. Huang J. C.: Adv. Polym. Tech. 21, 299 (2002).
2. Villmow T., et al.: Materials Today 14, 340 (2011).
3. Kharchenko S.B., et al.: Nat. Mater. 3, 564 (2004).
4. Alig I., et al.: Polymer 53, 4 (2012).
5. Starý Z., et al.: Polymer 55, 3980 (2014).
6. Starý Z.: Polymer 55, 5608 (2014).
7. Starý Z., Krüchel J.: Polymer 139, 52 (2018).

**11L-03****TOKEM INDUKOVANÁ KOALESCENCE  
ZOHLEDŇUJÍCÍ PŘITAŽLIVÉ SÍLY****IVAN FORTELNÝ, JOSEF JŮZA**

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

Při přípravě polymerních směsí dochází ke změně průměrné velikosti částic polymeru. Jedním z důležitých dějů je koalescence, spočívající v kolizích částic následovaných splnutím. Její zvláštní případ, tokem indukovanou koalescenci, jejíž hnací silou je gradient rychlosti toku matrice, jsme v minulosti řešili s použitím Milnerovy tzv. balistické aproximace<sup>1</sup>. U ní v pohybových rovnicích nevystupují přitažlivé síly, ale jejich působení je nepřímo vyjádřeno kritickou vzdáleností, po jejímž dosažení se kapky považují za splnuté. Řešili jsme nejprve u elongačním tokem indukované koalescence, kdy bylo problém možno redukovat na řešení jednorozměrné závislosti vzdálenosti na úhlu<sup>2</sup>, poté i u koalescence indukované smykovým tokem, kde bylo v jednoduchém případě možno řešit jako samostatné závislosti polárního úhlu a vzdálenosti na azimutu<sup>3</sup>. Vliv přímého zahrnutí přitažlivých van der Waalsových sil jsme zkoušeli vyhodnotit pro elongačním tokem indukovanou koalescenci<sup>4</sup>.

Zjednodušení se ukázala být omezující při zahrnutí viskoelastického chování i přitažlivých sil, kdy nemusí splněny podmínky vzájemně jednoznačné závislosti vzdálenosti na azimutu. I proto jsme přešli na výpočty souběžnou integrací všech prostorových souřadnic dle času<sup>5</sup>, a pokusili jsme se místo balistické aproximace vzít v úvahu i pohyb v průběhu přibližování podle rovnic Wanga a spol.<sup>6</sup>

Působení přitažlivých sil má za následek, že při dosažení určité vzdálenosti se kapky již nebudou vzdalovat a určité splnou; u elongačním tokem indukované koalescence pak nastavení kritické vzdálenosti, při jejímž dosažení se považují kapky za splnuté, mohlo plně nahradit zahrnutí přitažlivých sil do rovnic pohybu. U smykového toku je ale taková vzdálenost pro každou počáteční polohu jiná, náhrada jednotnou hodnotou kritické vzdálenosti nevede tedy k totožným výsledkům. Jak jsme už zjistili dříve, výslovně nastavená kritická vzdálenost ovlivní výsledek jen tehdy, je-li delší než limit plynoucí z řešení pohybových rovnic zahrnujících van der Waalsovy síly.

**LITERATURA**

1. Milner S. T., Xi H.: *J. Rheol.* 40, 663 (1996).
2. Fortelný I., Živný A.: *Rheol. Acta* 42, 454 (2003).
3. Fortelný I., Jůza J.: *J. Rheol.* 56, 1393 (2012).
4. Fortelný I., Jůza J.: *Polimery* 60, 628 (2015).
5. Jůza J., Fortelný I.: *Macromol. Symp.* 373, 1600097 (2017).
6. Wang H., Zinchenko A. Z., Davis R. H.: *J. Fluid Mech.* 265, 161 (1994).

**11L-04****APLIKOVANÁ REOLOGIE PRO CHARAKTERIZACI  
POLYMERŇNÍCH NANOVLÁKENNÝCH STRUKTUR****MARTIN ZATLOUKAL, WANNES SAMBAER**

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická,  
Centrum polymerních materiálů, Vavrečkova 275, 760 01  
Zlín, Česká republika  
mzatloukal@utb.cz

Polymerní nanovláknové netkané textilie mají velký potenciál nálezt široké uplatnění v řadě oblastí jako např. filtrace vzduchu a kapalin, tkáňové inženýrství, hojení ran, zdravotnické ochranné oděvy a bioaktivní materiály pro distribuci léčiv. Jednou z velmi slibných oblastí pro masové využití polymerních nanovláken je výroba filtračních substrátů a membrán vykazující jak vysokou prodyšnost tak filtrační účinnost<sup>1-5</sup>. Jedním z klíčových problémů pro detailní pochopení procesu filtrace pomocí filtrů obsahující polymerní nanovlákná je jak nemožnost vytvořit reprezentativní 3D model reálného nanovláknového filtru pomocí standardních technik pro jejich malé rozlišení, tak absence dostatečně realistického modelu filtrace. Tento fakt pak brání jak fundamentálnímu pochopení procesu filtrace přes nanovláknové filtry tak jejich efektivní optimalizaci s ohledem na konkrétní aplikaci.

V dané práci je představen nový způsob modelování procesu filtrace plynů přes polymerní nanovláknové filtry, který využívá realistického 3D modelu filtru získaného specifickým postupem ze snímků skenovacího elektronového mikroskopu. Navržený model pak zahrnuje kontinuální, přechodové i molekulární proudění, Brownův pohyb, interakci mezi filtrovanými částicemi a polymerními vlákny, tvorbu filtračního koláče, různorodost průměrů filtrovaných částic, aerodynamický skluz a 'Knudsenovsky neneutonský' charakter viskozity filtrovaného média. Metodika pro získání realistického 3D modelu nanovláknového filtru v kombinaci s modelováním procesu filtrace je využitelná jak k detailnímu porozumění fundamentálních principů, faktorů a vlivů jednotlivých parametrů na průběh samotné filtrace, tak k návrhu či optimalizaci struktury nanovláknových filtrů pro danou konkrétní aplikaci.

*Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (grant č. 16-05886S).*

**LITERATURA**

1. Liao Y., Loh C. H., Tian M., Wang R., Fane A. G.: *Prog. Polymer Sci.* 77, 69 (2018).
2. Kenry, Lim C. T.: *Prog. Polymer Sci.* 70, 1 (2017).
3. Sun B., Long Y. Z., Zhang H. D., Li M. M., Duvail J. L., Jiang X. Y., Yin H. L.: *Prog. Polymer Sci.* 39, 862 (2014).
4. Sambaer W., Zatloukal M., Kimmer D.: *Chem. Eng. Sci.* 66, 613 (2011).
5. Sambaer W., Zatloukal M., Kimmer D.: *Chem. Eng. Sci.* 82, 299 (2012).

**11L-05****APLIKOVANÁ REOLOGIE PRO PRODUKCI  
POLYMERNÍCH NANOVLÁKEN POMOCÍ  
TECHNOLOGIE MELT BLOWN****JIRÍ DRÁBEK, MARTIN ZATLOUKAL**

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická,  
Centrum polymerních materiálů, Vavrečkova 275, 760 01  
Zlín, Česká republika  
drabek@ft.utb.cz, mzatloukal@utb.cz

Melt blown je technologický proces při němž se polymerní tavenina přetlačuje přes plochou vytlačovací hlavu, na jejímž konci je velký počet zpravidla kruhových otvorů o velmi malém průměru (0,064–0,4 mm). Polymerní tavenina je následně protahována předeřhřátým vzduchem, jehož rychlost je blízká rychlosti zvuku<sup>1-3</sup>. I přesto, že se typická hodnota průměrů vyrobených vláken pohybuje v intervalu 1–2 mm, je možné, v závislosti na zvoleném polymerním systému, zpracovatelských podmínkách a designu vytlačovací hlavy, dosáhnout průměrů vláken v řádech několika desítek nanometrů<sup>4</sup>. Pro dosažení stabilní produkce je však nezbytné zajistit, aby tokové charakteristiky použité polymerní taveniny byly optimální. Jejich experimentální a teoretické ohodnocení je však velmi obtížné<sup>5</sup>, neboť příslušná reologická měření musí být provedena za stejných podmínek, které se vyskytnou při zpracování (tj. při velmi vysokých teplotách, extrémních deformacích a deformačních rychlostech), což významně omezuje možnost materiálové a procesní optimalizace.

V dané práci byl proveden výzkum vlivu molární hmotnosti, teploty a větvení polypropylenů na jejich tokové chování v oblasti velmi vysokých deformačních rychlostí,  $\dot{\gamma}$ , a to s cílem porozumět stabilitě procesu výroby nanovláken. Bylo zjištěno, že při  $\dot{\gamma} > 2 \cdot 10^6$  1/s se viskozita taveniny stává konstantou ( $h_{\dot{\gamma}}$ ) lineárně závisící na molární hmotnosti, což indikuje kompletní vymizení zapletenin mezi makromolekulárními řetězci v důsledku intenzivního smykového toku. Bylo experimentálně prokázáno, že větvení snižuje  $h_{\dot{\gamma}}$  a současně zvyšuje smykovou elasticitu, což pozitivně přispívá ke stabilizaci produkce polypropylenových vláken pomocí technologie melt blown.

*Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (grant č. 16-05886S).*

**LITERATURA**

1. Hassan M. A., Yeom B. Y., Wilkie A., Pourdeyhimi B., Khan S. A.: *J. Membr. Sci.* **427**, 336 (2013).
2. Ward G. F.: *Filtr. Separ.* **38**, 42 (2001).
3. Dutton K. C.: *J. Tex. App., Tech. Man.* **6**, 1 (2008).
4. Soltani I., Macosko C. W.: *Polymer* **145**, 21 (2018).
5. Drabek J., Zatloukal M.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **251**, 107 (2018).

**11L-06****VÝZKUM JEVU NECK-IN PŘI VÝROBĚ PLOŠNÝCH  
POLYMERNÍCH FÓLIÍ****TOMÁŠ BARBOŘÍK, MARTIN ZATLOUKAL**

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická,  
Centrum polymerních materiálů, Vavrečkova 275, 760 01  
Zlín, Česká republika  
barborik@utb.cz, mzatloukal@utb.cz

Speciální polymerní fólie se v současné době hojně využívají v kondenzátorech, bateriích pro mobilní zařízení a elektrická vozidla, v displejích na bázi tekutých krystalů a obalech pro čerstvé potraviny. Pro jejich výrobu se nejčastěji používá technologie lití, kdy polymerní granulát je ve vytlačovacím stroji nejprve roztaven a následně přetlačen přes plochou vytlačovací hlavu. Za vytlačovací hlavou je plošný extrudát intenzivně protahován v podélném směru pro dosažení požadované tloušťky. K fixaci rozměrů fólie poté dochází na odtahových válcích, které jsou účinně chlazeny. Při samotné výrobě však, v důsledku viskoelastické povahy polymerních tavenin, vznikají tokové nestability, které zapříčiňují vznik defektů či zcela znemožňují realizaci výrobního procesu. Mezi nejčastěji se vyskytující nestability patří *Neck-in* (smrštění fólie v příčném směru při podélném protahování), *Dog-bone* (nárůst tloušťky okrajů fólie), *Draw resonance* (elastické kmitání zvyšující variaci v šířce/tloušťce fólie). Velmi účinným nástrojem pro porozumění vzniku tokových nestabilit je realistické modelování daného procesu.

Tato práce je zaměřena na teoretický výzkum jevu *Neck-in* pomocí 1.5D membránového modelu s využitím pokročilé viskoelastické konstituční rovnice – modifikovaného Leonovova modelu<sup>1-4</sup>. Byl zkoumán vliv prvního a druhého rozdílu normálových napětí, jednoosé/planární tahové viskozity, Debořina čísla, přestupu tepla a krystalizace na negativní jev *Neck-in*. Numerická řešení použitého modelu byla úspěšně aproximována bezrozměrnou analytickou rovnicí, která usouvztahuje *Neck-in* s vybranými materiálovými a procesními parametry. Bylo zjištěno, že predikce navržené aproximační rovnice popisuje experimentální realitu. Autoři věří, že získané know-how může být použito pro optimalizaci designu vytlačovacích hlav, molekulární architektury polymerních tavenin a procesních podmínek, a to s cílem potlačit negativní jev *Neck-in* při výrobě velmi tenkých polymerních filmů a fólií.

*Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky č. 16-05886S.*

**LITERATURA**

1. Silagy D., Demay Y., Agassant J. F.: *Polym. Eng. Sci.* **36**, 2614 (1996).
2. Zatloukal M.: *J. Nonnewton. Fluid Mech.* **113**, 209 (2003).
3. Barborik T., Zatloukal M., Tzoganakis C.: *Int. J. Heat Mass Transf.* **111**, 1296 (2017).
4. Barborik T., Zatloukal M.: *J. Nonnewton. Fluid Mech.* **255**, 39 (2018).



**11L-07****STUDIUM VÍRŮ PŘI EXTRUZI LDPE  
METODOU TOKEM INDUKOVANÉHO DVOJLOMU****JAN MUSIL, MARTIN ZATLOUKAL**

*Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická,  
Centrum polymerních materiálů, Vavrečkova 275, 760 01  
Zlín, Česká republika  
j1musil@utb.cz, mzatloukal@utb.cz*

Při zpracování polymerů vytlačováním vznikají tokové nestability, které významně zužují zpracovatelské okno a současně snižují kvalitu výsledného produktu<sup>1-4</sup>. V řadě případů je možné tokové nestability (jako např. polymerní slinty – *die drool* či lom taveniny – *melt fracture*) detekovat a kvantifikovat přímo na extrudátu, což významně usnadňuje jejich studium. V důsledku viskoelastické povahy polymerních tavenin však mohou uvnitř zpracovatelských strojů a zařízení vznikat sekundární toky, tzv. víry, ve kterých se v důsledku velmi dlouhých zdržných dob a vysokých zpracovatelských teplot zvyšuje pravděpodobnost vzniku nežádoucí termální degradace. Tento typ nestability je pak možné studovat pouze s využitím speciálních vizualizačních cel a experimentálních technik, které umožňují mapovat rychlostní pole (např. trasováním částic či použitím laserové Dopplerovy velocimetrie) anebo napěťové pole (např. pomocí tokem indukovaného dvojlomu). Přestože jsou víry napětím indukovaná nestabilita, jejich experimentální studium je zpravidla založeno pouze na analýze rychlostních polí, což je z fundamentálního pohledu nedostačující.

Tato práce je zaměřena na vývoj nové metody umožňující studovat vznik vírů při vytlačování polymerních tavenin pomocí tokem indukovaném dvojlomu. Testování navržené metody bylo provedeno pro materiál LDPE. Naměřená napěťová pole byla porovnána s rychlostními konturami vírů získaných trasováním rotujících částic gelu. Následně byl studován vliv teploty a rychlosti smykové deformace na velikost (plochu) víru. Získaná data byla následně úspěšně korelována s korespondujícími daty získanými pomocí velmi přesné laserové Dopplerovy velocimetrie.

*Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (grant č. 16-05886S).*

**LITERATURA**

1. Hatzikiriakos S. V., Migler K.: *Polymer Processing Instabilities: Control and Understanding*, Marcel Dekker, New York 2005.
2. Musil J., Zatloukal M.: *Polym. Rev.* 54, 139 (2014).
3. Musil J., Zatloukal M.: *Polym. Rev.* DOI: 10.1080/15583724.2018.1481428 (2018).
4. Hertel D., Münstedt H.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 153, 73 (2008).

### 11P-01 TEPLOSMĚNNÉ KAPALINY S VYUŽITÍM NANOČÁSTIC

**JAROSLAV TIHON, VĚRA PĚNKAVOVÁ**

*Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Rozvojová 135,  
135 02 Praha 6, Česká republika  
tihon@icpf.cas.cz*

Pojmem nanotekutiny jsou označovány suspenze pevných nanočástic (obvykle kovů či oxidů kovů o velikosti 1 až 100 nm) v běžných základních kapalinách (voda, olej, či etylenglykol). Tyto suspenze vykazují již při malých koncentracích zvýšenou teplotní vodivost a nabízí se tedy jejich využití jako teplosměnných medií<sup>1-4</sup>. I přes dvě desetiletí intenzivního výzkumu se však zatím stále nepodařilo uplatnit tyto materiály například jako komerčně využívaná chladiva. Důvodem je především zatím stále vysoká cena nanočástic a též často nedostatečná dlouhodobá stabilita těchto suspenzí.

Rychlejšímu pokroku výzkumu směrem k aplikacím brání rovněž nedostatečné pochopení fyzikálních mechanismů vedoucích k zlepšenému přestupu tepla v nanotekutinách, nedostatečná charakterizace připravených suspenzí a s tím související nepříliš velká shoda výsledků dosažených různými autory. Chybí též korelování naměřených termofyzikálních závislostí s požadavky průmyslových aplikací. Další výzkum proto vyžaduje multidisciplinární přístup se současným studiem syntézy nanočástic, přípravy a charakterizace suspenzí, měření termofyzikálních a reologických vlastností, spolu s následným modelováním celkového přestupu tepla v různých režimech proudění.

V tomto příspěvku shrnujeme naše výsledky dosažené při studiu vodných suspenzí s malým přídatkem nanočástic Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Stabilita suspenzí byla ovlivněna jak velikostí částic, tak i jejich povrchovými vlastnostmi (vliv přídatku surfaktantu či regulace pH směrem k optimalizaci Zeta-potenciálu částic). Reologická měření navíc poskytla informace o rozsahu koncentrací, při nichž ještě nedochází k nadměrnému zvýšení viskozity suspenzí. Pro počáteční kvalitativní srovnání termofyzikálních vlastností různých suspenzí byla též navržena jednoduchá metoda sledující teplotní změny přímo v rotačním viskozimetru.

*Tato práce vznikla za podpory TAČR grantu TH03020313.*

#### LITERATURA

1. Saidur R., Leong K. Y., Mohammad H. A.: *Renew. Sust. Energ. Rev.* 15, 1646 (2011).
2. Yu W., Xie H. Q.: *J. Nanomaterials* 2012, 435873 (2012)
3. Taylor R., Coulombe S., Otanicar T., Phelan P., Gunawan, A.: *J. Appl. Phys.* 113, 011301 (2013)
4. Devendiran D. K., Amirtham V. A.: *Renew. Sust. Energ. Rev.* 60, 21 (2016).

### 11P-02 REOLOGICKÉ A ELEKTRICKÉ VLASTNOSTI POLYMERNÍCH SMĚSÍ SE SELEKTIVNÍ LOKALIZACÍ VODIVÝCH SAZÍ

**MARTINA NEVORALOVÁ, ZDENĚK STARÝ**

*Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v. v. i., Heyrovského  
nám. 2, Praha 6, 16206  
nevoralova@imc.cas.cz*

Nemisitelné polymerní směsi jsou dle odborné literatury perspektivní materiály, které mohou vykazovat vlastnostní profily, jež jsou pro čisté polymery nedosažitelné. Aplikační možnosti těchto materiálů jsou však mnohdy limitovány jejich nedostatečnými mechanickými vlastnostmi, které jsou dány především nízkou mezifázovou adhezí jednotlivých složek směsi. Fázová struktura nemisitelných polymerních systémů je navíc nestabilní a během zpracování tudíž často dochází k jejímu hrubnutí<sup>1</sup>.

Jedním ze způsobů, kterým lze účinně ovlivňovat mechanické vlastnosti a mezifázovou adhezí nemisitelných polymerních systémů, je přísada vhodného plniva. Značná pozornost je pak v posledních letech věnována vodivým polymerním kompozitům, jakožto perspektivním materiálům pro obalovou techniku, elektromagnetické stínění nebo senzorku<sup>2</sup>. K dosažení požadovaného stupně elektrické vodivosti je nezbytné vytvoření perkolovaných struktur částic vodivého plniva, což však negativně ovlivňuje tokové a zpracovatelské vlastnosti kompozitů. Díky termodynamicky podmíněné selektivní lokalizaci vodivých částic v jedné složce směsi nebo na mezifázi se navíc snižuje koncentrace plniva potřebná k perkolaci<sup>3</sup>. Zároveň je často pozorováno jak zlepšení mezifázové adheze, tak i stabilizace fázové struktury ve směsi<sup>4,5</sup>.

V prezentovaném příspěvku jsou diskutovány reologické a elektrické vlastnosti směsí polystyren/ polymethylmethakrylát obsahujících vodivé saze. Zejména je analyzován vliv složení směsi a přítomnosti uvedeného plniva. Z hlediska charakterizace fázové struktury plněných polymerních směsí jsou studované materiály vyhodnocovány prostřednictvím skenovací elektronové mikroskopie a obrazové analýzy.

*Tato práce vznikla za podpory GA ČR (č. grantu 17-05654S).*

#### LITERATURA

1. Pötschke P., Paul D. R.: *J. Macromol. Sci. Part C: Polym. Rev.* 43, 87 (2003).
2. Huang J. C.: *Adv. Polym. Technol.* 21, 299 (2002).
3. Brigandi P. J., Cogen J. M., Pearson R. A.: *Polym. Eng. Sci.* 54, 1 (2014).
4. Trifkovic M., Hedegaard A. T., Sheikhzadeh M., Huang S., Macosko C. W.: *Macromolecules* 48, 4631 (2015).
5. Scherzer S., Pavlova E., Esper J., Starý Z.: *Compos. Sci. Technol.* 119, 138 (2015).

**11P-03****VLIV UV ZÁŘENÍ A PŘÍDAVKU ZEOLITU NA TOKOVÉ VLASTNOSTI A BIODEGRADABILITU POLY(BUTYLEN-ADIPÁT-TEREFTALÁTU)****MARIE DVOŘÁČKOVÁ, MARTIN ZATLOUKAL, MARTIN JURČA**

*Ústav inženýrství ochrany životního prostředí, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati, Vavrečkova 275, Zlín, Česká republika  
dvorackova@utb.cz*

Aromaticko-alifatický kopolyester poly(butylénadipát tereftalát) (PBAT), dodávaný na trh pod komerčním názvem Ecoflex, patří mezi biologicky rozložitelné a kompostovatelné plasty, sloužící v zemědělství jako mulčovací fólie. V této práci byly připraveny směsi Ecoflexu s minerálním plnivem (syntetickým zeolitem), posouzeny jejich reologické vlastnosti a stanoven stupeň biodegradace v kompostu. Fólie vyrobené z PBAT, jsou citlivé na fotodegradaci, což vede k rozdělení hlavního řetězce a síťování<sup>1</sup>. Přítomnost zesíťovaných struktur nejenže snižuje mechanické vlastnosti filmu kvůli křehnutí, ale také brání biodegradaci omezením přístupu vody a mikroorganismů k polymerním řetězcům. Přídavek zeolitu může zabránit tvorbě zesíťovaných struktur a současně může mírně zvyšovat stupeň biodegradace materiálu. K posouzení vlivu slunečního záření byly vzorky PBAT se zeolitem vystaveny působení UV záření.

Připravené materiály ve formě folií i materiály vystavené působení UV radiaci byly nejprve ohodnoceny na základě oscilační reometrie, a poté biodegradovány v kompostu při teplotě 58 °C po dobu 128 dní. Bylo zjištěno, že s rostoucí dobou působení UV záření roste jak komplexní viskozita,  $h^*$ , tak smyková elasticita (kvantifikovaná pomocí tand), což indikuje růst molekulové hmotnosti neplněných vzorků, a to z důvodu větvení a síťování makromolekulárních řetězců. U zeolitem plněných vzorků byl překvapivě pozorován trend opačný, tj. snižování  $h^*$  a smykové elasticity s rostoucí dobou UV záření (zvláště pak v oblasti vysokých frekvencí), což je možné vysvětlit zkrácováním krátkých a středně dlouhých řetězců. Biodegradací testy prokázaly, že neozářené plněné vzorky vykazovaly větší stupeň mineralizace (z 67,24 hm.%) ve srovnání s neplněnými vzorky vystavenými UV radiaci (biodegradace pouze 17,16 %), což potvrzuje zvýšený stupeň zesíťování po expozici UV záření. Mechanické vlastnosti směsi PBAT se přídavkem zeolitů mírně zhoršily. Po biodegradaci folií za termofilních podmínek, docházelo k výraznému nárůstu teploty krystalizace  $T_c$ , a to v řádu desítek °C a mírnému nárůstu teploty tání  $T_m$  jak u ozářených, tak neozářených vzorků, k čemuž dochází pravděpodobně z důvodů hydrolyzy v esterových vazbách, a tím ke snižování alifatického podílu v řetězci PBAT.

*Tato práce vznikla za podpory interního grantového projektu Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně IGA/FT/2018/009.*

**LITERATURA**

1. Kijchavengkul T., Auras R., Rubino M., Selke S., Ngouajio M., Fernandez R. T.: Polym. Degrad. Stabil. 96, 1919 (2011).

## 12L-01

NIEKOĽKO PRÍBEHOV Z DEJÍN FYZIKÁLNEJ  
CHÉMIE

## JÁN REGULI

Katedra chémie, Pedagogická fakulta Trnavskej univerzity  
v Trnave, Priemyselná 4, 918 43 Trnava, Slovenská republika  
jan.reguli@truni.sk

Pri písaní učebnice fyzikálnej chémie<sup>1</sup> som sa zoznámil s príbehmi viacerých jej zakladateľov<sup>2</sup>. Životné osudy, ako aj mnohé náhody, v súčasnosti už takmer nepredstaviteľná nemožnosť vzájomnej komunikácie (inak ako dostavnicovou a neskôr vlakovou poštou) a často aj povahové črty vedcov výrazne ovplyvnili (niekedy urýchlili, inokedy zabrzdlili) vývoj fyzikálnej chémie.

V príspevku sa stručne pozrieme na príbehy Antoina Lavoisiera a jeho manželky Marie-Ann, markíza Laplacea a Benjamina Thompsona (lorda Rumforda).

Mladého Nicolasa Sadi Carnota by sme nepoznali bez Emila Clapeyrona. Na ich práce nadviazal Rudolf Clausius.

Nerozlučnú dvojicu priateľov tvorili James P. Joule a William Thomson (lord Kelvin).

Wilhelma Ostwalda treba chváliť nielen za jeho vlastné objavy, ale aj ako objaviteľa dvojice Cato Guldberg – Peter Waage a tiež Hermana Hessa ako zakladateľa termochémie.

James Clerk Maxwell a až 13 rokov po ňom W. Ostwald objavili pre Európu Josiaha W. Gibbsa. Američania ho spoznali až 40 rokov po jeho smrti.

Kontroverznou postavou bol Nemeč Walter Nernst, ktorého študenti mali pocit, že všetko, čo im prednáša, vymyslel sám. Na študijnom pobyte u Nernsta v Göttingene sa s ním zoznámil aj mladý Gilbert N. Lewis. Tento pobyt asi neskončil dobre, pretože Lewis celý život na Nernsta spomínal už len v zlom a keď mohol, kritizoval ho za každú nepresnosť. Táto nevraživosť asi bola príčinou, prečo Lewis napriek nesporným zásluhám a 35-násobnej nominácii nedostal Nobelovu cenu. Ku cti Nernsta treba pripísať, že po nástupe nacizmu odmietol z berlínskeho Ústavu fyzikálnej chémie (ktorý riadil od roku 1905) prepustiť židovských vedcov a radšej odišiel do dôchodku.

*Príspevok bol pripravený v rámci riešenia a vďaka podpore grantu KEGA 003TTU-4/2016 **Chémia a spoločnosť**: Návrh alternatívneho obsahu stredoškolskej chémie a tvorba učebnice pre zvýšenie chemickej gramotnosti študentov a lepší vzťah verejnosti k chémii.*

## LITERATÚRA

1. Reguli J.: *Fyzikálna chémia pre bakalárske štúdium*, 2. vydanie, TYPI Universitatis Tyrnaviensis, Trnava 2017.
2. Laidler K. J.: *The World of Physical Chemistry*, Oxford University Press 1995.

## 12L-02

## MILNÍKY CHEMOTERAPIE TUBERKULÓZY

## MARTIN KRÁTKÝ, JARMILA VINŠOVÁ

Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta, Akademia  
Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Česká republika  
martin.kratky@faf.cuni.cz

Tuberkulóza (TB) provází lidstvo od nepaměti. Její původce, *Mycobacterium tuberculosis*, byl izolován r. 1882 Robertem Kochem a od té doby se datují cílené pokusy o chemoterapii TB<sup>1</sup>. Hledání antituberkulotik prodělalo řadu proměn – od předvědeckého období, přes více méně empirické hledání, po „zlatá“ padesátá a šedesátá léta, až po útlum v 70. a 80. letech a nynější boom nastartovaný na konci 90. let.

První pokusy s chemickými léčivými zahrnovaly přírodní látky, desinficientia (fenoly, barviva), soli kovů (Au, Ca<sup>2+</sup>)<sup>1,2</sup>, experimentovalo se s klimatoterapií a chirurgickými postupy.

Po pokusech se sulfonamidy a sulfony byl prvním skutečně účinným léčivem aminoglykosid streptomycin (1944, Waksman), následován kyselinou *p*-aminosalicylovou (1948) a zejména isoniazidem (1952). Obě tyto sloučeniny byly připraveny již dříve, ale jejich účinnost nebyla rozpoznána. V souvislosti s vývojem rezistence na jednotlivá léčiva začaly experimenty s kombinačními režimy. Teprve ty znamenaly převrat v prognóze TB. V 50. letech byly objeveny a zavedeny do praxe i thioamidy, cykloserin a thiosemikarbazony<sup>1,2</sup>.

Zkrácení terapie přineslo zavedení ethambutolu (1961) a především ansamycinového antibiotika rifampicinu (1965). V této době se na trh dostal i pyrazinamid s dobrou účinností na intracelulární a pomalu rostoucí bakterie. Tehdy se všeobecně soudilo, že se TB stane minulostí, což se nespěnilo<sup>1,2</sup>.

Další účinná léčiva, a to ze skupiny fluorochinolonů, se objevila až na konci 80. let, jejich antimykobakteriální aktivita nebyla původně vůbec studována. Od konce 90. let se datuje zvýšený zájem (zejm. pro nárůst rezistence a koinfekci s HIV) o tuto lékovou skupinu. Rozvíjí se chemie derivátů antituberkulotik, repuposing známých léčiv, nejenom antibiotik, a vývoj nových vakcín. Velká očekávání, zatím ne zcela naplněná, přineslo rozluštění genomu *M. tuberculosis* (1998) a s tím související enzymový targeting, kdy byla identifikována celá řada cílových struktur a jejich účinných inhibitorů, bohužel zatím bez výrazného úspěchu v podobě nového léčiva<sup>3</sup>.

V r. 2012 byl po více než 40 letech schválen nový lék bedachilin, vyvinutý cíleně proti TB, následován delamanidem. Řada perspektivních sloučenin podstupuje (pre) klinické testy<sup>3</sup>.

*Tato práce vznikla za podpory grantů GAČR 17-27514Y a Univerzity Karlovy SVV 260 401.*

## LITERATURA

1. Ducati R. G., Ruffino-Netto A., Basso L. A., Santos D. S.: *Mem. Inst. Oswaldo Cruz* 101, 697 (2006).
2. Hartl J., Dolež M., Miletín M., Opletalová V., Zimčík P. *Farmaceutická chemie IV*, Karolinum, Praha 2012.

3. Mdluli K., Kaneko T., Upton A.: Cold Spring Harb. Perspect. Med. 5, a021154 (2015).

4. Čtrnáctová H.: Nový akreditační systém a vzdělávání učitelů chemie v ČR. In: *Aktuální aspekty vzdělávání učitelů chemie*, PČF OU, Ostrava 2017, s. 13–23.

### 12L-03

#### VZDĚLÁVÁNÍ UČITELŮ CHEMIE V ČR V SOULADU S POŽADAVKY NOVÝCH AKREDITACÍ NAÚ

HANA ČTRNÁCTOVÁ

*Univerzita Karlova – Přírodovědecká fakulta, Albertov 6, 12843 Praha 2, Česká republika  
hana.ctrnactova@natur.cuni.cz*

Skutečnost, že zájem žáků a studentů o chemii závisí především na jejich vyučujícím, je známá z řady výzkumů. Proto je tak významné věnovat přípravě učitelů chemie adekvátní pozornost. To si uvědomují nejen odborníci, ale i státní orgány, které formou zákonů, vyhlášek a dalších nařízení určují základní pravidla nejen pro výuku chemie na ZŠ a SŠ, ale i pro vysokoškolskou přípravu učitelů.

Od 90. let 20. století proběhla ve studiu učitelství chemie řada velmi výrazných změn<sup>1</sup>. Původně jednotná pětiletá příprava učitelů ZŠ a SŠ ve dvouoborových aprobacích se postupně změnila na strukturované studium dvou oborů s kreditovým hodnocením. Zatímco v pětiletém studiu byly rovnoměrně zastoupeny předměty obou oborů, oborových didaktik a pedagogiky a psychologie, nyní jsou v bakalářském studiu soustředěny převážně předměty dvou studovaných oborů a v navazujícím magisterském studiu pak oborové didaktiky a předměty pedagogicko-psychologické<sup>2</sup>. Výhodou uvedeného studia je naopak možnost kombinace různých oborů aprobace podle zájmu studenta.

Novým vysokoškolským zákonem z r. 2016 (cit.<sup>3</sup>) se tento systém výrazně změnil a vzdělávání učitelů chemie bude v rámci nových akreditací, stanovených tímto zákonem, klást na organizaci a obsah studijních programů zcela nové požadavky. Především nový zákon vůbec neuvádí studijní obory a před VŠ připravující učitele tak postavil obtížný úkol, jak dvouoborové studium změnit v jednooborový program a přitom zachovat možnost volby oborů aprobace. Zde je snaha řešit situaci tzv. sdruženým studiem, příp. studiem se specializacemi, ale obě tyto varianty původní dvouoborové studium učitelství dosti zkomplikují<sup>4</sup>. Komplikací také je zařazení učitelství mezi regulovaná povolání, jejichž studium schvaluje mj. i MŠMT. Také zajištění kompatibility standardů studia učitelství a požadavků chemických oborů je velmi obtížné. Před tvůrce studijních programů tak byla postavena řada překážek, jejichž překonání však evidentně nepovede ke zlepšení kvality přípravy učitelů, které by bylo velmi žádoucí.

*Tento příspěvek vznikl díky podpoře projektu PROGRES UK.*

#### LITERATURA

1. Vašutová J.: *Profese učitele v českém vzdělávacím kontextu*, Paido, Brno 2004.
2. Zákon č. 137/2016 Sb.: Zákon, kterým se mění zákon č. 111/1998 Sb., o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů, MŠMT, Praha 2016.
3. Čtrnáctová H.: *Pregraduální vzdělávání učitelů chemie*, NUV, Praha 2014.

### 12L-04

#### JAK MOTIVOVAT ŽÁKY KE STUDIU PŘÍRODOVĚDNÝCH OBORŮ? DEJTE JIM PROBLÉM, AŤ JEJ ŘEŠÍ

KVĚTOSLAVA STEJSKALOVÁ

*Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 2155/3, 182 23 Praha 8, Česká republika  
kvetoslava.stejskalova@jh-inst.cas.cz*

Otázka Proč jsou dnes přírodovědné a technické obory nepopulární mezi žáky a studenty? trápí značný počet subjektů, asi nejvíce vysoké školy a firmy čekající na své studenty a zaměstnance. Řešení není složité: v ÚFCH JH jsme vsadili na osvědčenou a letitou zkušenost, že člověk je tvor hravý, tvořivý a zvědavý. Probudíte li v žácích v pravý čas zvědavost, nevšimnou si, že řeší "svůj" problém. V chemii a fyzice je to o pokusech, které se z výuky, často přecházející do "virtuální reality", vytratily. Vraťme je do ní zpět a výsledky se dostaví.

Náš popularizační tým PEXED (Popularization EXperimental EDucation) dlouhodobě pracuje s modelem, který získal řešením projektu se zkáceným názvem "Tři nástroje" (<http://www.jh-inst.cas.cz/3nastroje>)<sup>1</sup>. V projektu jsme navrhli a ověřili metodiku, kterou nyní, již více než 10 let, úspěšně využíváme v praxi, tj. ve vzdělávacím procesu, do kterého jsou zapojeni hlavně studenti středních škol, žáci základních škol a dnes významně i předškoláci škol mateřských. Rovněž se do něj samozřejmě zapojují i pedagogové. Projekt má dlouhodobou udržitelnost a s poměrně nízkou finanční podporou oslovuje ročně tisíce zájemců (např. v roce 2017 navštívilo našich 90 vzdělávacích a popularizačních programů celkem 7830 návštěvníků).

Spektrum programů pro žáky a studenty od škol mateřských po vysoké<sup>2</sup> je bohaté a zahrnuje: chemické divadlo, workshopy, praktika v laboratořích, stáže v týmech a odborné praxe v laboratořích, popularizační přednášky, exkurse, letní týdenní školy, sobotní programy pro děti, zájmový kroužek, přírodovědně a technicky zaměřené výstavy<sup>3</sup>.

Velkou pozornost věnujeme výběru témat experimentálních úloh, pomůcek a přípravě výukových materiálů ať již v podobě pracovních listů či manuálů pro praktická měření v laboratořích. Žáci a studenti pracují s moderním laboratorním vybavením, pomůckami a přístroji.

Na realizaci programů se střídavě podílí téměř padesátka vědců a VŠ studentů a tento dynamický tým sjednocuje společná filosofie vzdělávat prostřednictvím experimentování.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR CZ.02.2.69/0.0/0.0/16\_028/0006251.*

#### LITERATURA

1. Ježková M.: Integrace a inkluze ve školní praxi 5, 14 (2017).

2. Stejskalová K.: *Integrace a inkluze ve školní praxi* 8, 25 (2017).
3. Stejskalová K., v knize: *Vědci, vynálezci a podnikatelé v českých zemích – svazek třetí*, kap. 1, s. 11. Jonathan Livingston, s.r.o., Praha 2017.

**12L-05****DIDAKTICKÉ STÁŽE PRO STUDENTY SE ZÁJMEM O CHEMII: POPULARIZACE PŘÍRODNÍCH VĚD – OD NÁPADU PO REALIZACI****MAGDA ZLÁMALOVÁ**

*Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.,  
Dolejškova 2155/3, 182 23 Praha 8, Česká republika  
magda.zlamalova@jh-inst.cas.cz.*

Jak zaujmout dnešní žáky a studenty a probudit v nich zájem o přírodní vědy, je často kladenou otázkou pedagogů ale i nás popularizátorů z řad začínajících vědců. Správnou cestou pro začátek je názorná a zábavná forma experimentu – tedy něco, co dnešní osnovy (a svého času i ministerské vyhlášky) na školách většinou neumožňují.

Jak probíhá cesta od prostého studenta analytické chemie k popularizátorovi se schopností zaujmout žáka? Jak se zrodí projekt, který má potenciál žáka pro danou věc získat? Jak dál šířit nadšení pro vzdělávání a popularizaci samotnou ve studentech a žácích? Pro mne je odpovědí být součástí týmu PEXED (Popularization EXperimental EDucation), který již pátým rokem pracuje v ÚFCH JH při tvorbě popularizačně vzdělávacích programů, jež denně ověřuje praxí, tedy prací se žáky všech úrovní škol (MŠ, ZŠ a SŠ).

Popularizátorem totiž nemusí být pouze vědec s letitými zkušenostmi ve svém oboru. Na počátku musí být ale dobrý nápad, solidní znalosti oboru/tématu, velké nadšení a ještě větší dávka úsilí a trpělivosti.

Jako lektorka v týmu PEXED se několik let spolupodílím na vedení tematických workshopů v průběhu školního roku, ale i prázdnin (letní škola pro žáky SŠ a kurzy pro učitele ZŠ a SŠ), jež dlouhodobě realizujeme. Posledních několik let se však stále systematictěji věnuji organizaci stáží určených studentům, kteří se zajímají o přírodní vědy – především o chemii a její didaktiku. Studenti jsou zapojeni do popularizačního týmu s cílem vytvořit program pro atraktivnější hodiny chemie příběhem, který staví na fyzikálně chemických pokusech a analytice. Během stáží jsou studenti pod vedením nás lektorů stáží tvůrci vlastního popularizačního programu – kriminálního případu. V něm se stávají jak jeho scénáristy, tak i odbornými řešiteli z pohledu pracovníků forenzní laboratoře. Náplní jejich stáží tak jsou nejen laboratorní experimenty ve formě základních důkazových a forenzních analýz, ale i kreativní složka vlastního "krimi" případu. Pro širokou využitelnost na školách je navíc veškerá práce koncipována s důrazem na jednoduchost experimentů, materiálovou i finanční nenáročnost a dostupnost pomůcek. Studenti tak během své roční stáže rozvíjí nejen své dovednosti při práci v laboratoři, ale i schopnost samostatné práce, od myšlenky po realizaci. Učí se odpovědnosti za svěřený úkol v týmu, pilují

komunikační dovednosti (mluvený i písemný projev) či vlastní tvořivost např. v oblasti grafického zpracování tématu.

Velké naděje, jež se jeví jako splnitelné, vkládáme také do toho, že tento náš program může vychovat novou generaci učitelů či vědců popularizátorů s novými nápady a velkým potenciálem šířit své nadšení dál.

**12L-06****UPLATNĚNÍ PROJEKTOVÉHO PŘÍSTUPU VE VÝUCE TECHNOLOGICKÝCH PŘEDMĚTŮ NA VŠCHT PRAHA – OD ZNALOSTI KE KOMPETENCI****HUGO KITTEL**

*VŠCHT Praha, Technická 1905, 166 28 Praha 6, Česká republika  
hugo.kittel@vscht.cz*

Studium na VŠCHT Praha je zaměřeno teoreticky a výsledky jsou závislé především na individuálním výkonu studenta. Významná část absolventů ale nastupuje do praxe v organizacích, kde standardní metodu představují projektový přístup a týmová práce<sup>1</sup>. Z tohoto důvodu byl v roce 2016 na VŠCHT Praha formulován záměr na zavedení projektového přístupu do vyučování technologických předmětů. Na MŠMT ČR byla podána žádost a byl získán grant na projekt OP VVV nazvaný „**Zkvalitnění vzdělávání-priorita VŠCHT Praha**“. Základními cíli projektu jsou, aby absolventi VŠCHT<sup>2</sup>:

- Posílili kompetenci aplikovat teoretické znalosti.
- Porozuměli aplikaci chemie v praxi současně v kontextu odborném, právním, ekonomickém, bezpečnosti a vlivu na životní prostředí a uvědomili si význam realizovatelnosti a ekonomické návratnosti technických projektů.
- Seznámili se s reálnými postupy, metodami a standardy aplikovanými při implementaci technických projektů a s výsledky úspěšných technických projektů.
- Osvojili si zásady tvorby týmů, týmové práce a komunikace.

Dosavadní výsledky projektu OP VVV na VŠCHT v Praze lze charakterizovat následovně – Byl vytvořen tým z pedagogů a harmonogram pro implementaci projektu. Pomocí internetu i osobních kontaktů byly získány zkušenosti z využití projektového přístupu ve výuce na univerzitách v ČR. Byly rekapitulovány zkušenosti z projektového přístupu ve výuce na VŠCHT Praha. Bylo popsáno 13 základních modulů reálných technických projektů. Do činnosti týmu a tvorby modulů byli zapojeni externí konzultanti z praxe. Bylo vybráno celkem 6 technologických předmětů pro pilotní ověření projektu a pedagogové těchto předmětů byli zapojeni do činnosti týmu. V zimním semestru akademického roku 2018/2019 bude zahájeno ověřování projektového přístupu v pilotních předmětech. Výsledky pak budou využity i k výuce dalších technologických předmětů na VŠCHT Praha.

Očekává se, že projekt přispěje k lepšímu uplatnění absolventů na trhu práce, jejich rychlejší adaptaci na požadavky praxe, k zrychlení jejich kariérního růstu a že posílí zpětnou vazbu těchto absolventů na pedagogické aktivity VŠCHT Praha.

*Tato práce vznikla za podpory MŠMT ČR projektu CZ.02.2.69/0.0/0.0/16\_015/0002374 „Zkvalitnění vzdělávání – prioritní VČHT Praha“.*

#### LITERATURA

1. Fotr J., Souček I.: *Tvorba a řízení portfolia projektu*, Grada Publishing, Praha 2015.
2. Kittel H.: *Teaching Project Approach in Technologically Oriented Subjects*, ECTN General Assembly 2018, Prague, Apr. 20–22, 2018.

#### LITERATURA

1. Cheung O.: *J. Chem. Educ.* 91, 1468 (2014).
2. Marková J.: *Databanka žákovských pokusů pro základní školu. Diplomová práce*, Masarykova univerzita, Brno 2008.
3. Zouzalík J.: *Žákovské chemické pokusy s použitím běžně dostupných chemikálií. Diplomová práce*, Technická univerzita Liberec, Liberec 2008.

### 12L-07

#### ADSORPCE JAKO DEMONSTRAČNÍ EXPERIMENTY

##### MICHAL GOLAS, VÁCLAV SLOVÁK

*Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta,  
30. dubna 22, 701 03 Ostrava, Česká republika  
GolasMichal@seznam.cz*

Tato práce je zaměřena na přípravu demonstračních experimentů, které by přiblížily problematiku adsorpce a jejího využití široké veřejnosti a současně budou využitelné jako demonstrace ve výuce chemie na základních a středních školách. V práci jsou využity experimenty, které lze provést z běžně dostupných, levných a většinou bezpečných surovin. Na základě dostupné literatury byla připravena sada experimentů demonstrujících jak adsorpci z kapalných, tak i z plynné fáze<sup>1-3</sup>. Jako adsorbent pro všechny demonstrace bylo použito aktivní uhlí – práškové, granulované i medicínální. Pro adsorpci z kapalných fází byly jako vhodné roztoky, demonstrující znečištěnou vodu, použity nápoje, zředěné roztoky potravinářských barviv a zředěný roztok manganistanu draselného. Z nápojů byla využita Kofola, červené víno, Fanta a čaj. Ke všem roztokům bylo přidáno aktivní uhlí, jak práškové, tak medicínální, vzniklý roztok byl promíchán a následně přefiltrován. Výsledkem demonstrace je porovnání původní barvy roztoku s barvou po adsorpci. Pro přípravu demonstračních experimentů adsorpce z plynné fáze byl použit oxid uhličitý a dusičitý. Pro přípravu oxidu dusičitého byla využita reakce koncentrované kyseliny dusičné a mědi. Výsledkem demonstrace bylo pozorování odbarvení oranžového oxidu dusičitého po přidání aktivního uhlí. Pro přípravu oxidu uhličitého byla využita reakce kyseliny octové a sody. I přesto, že oxid uhličitý je bezbarvý plyn, podařilo se jeho adsorpci vizualizovat, díky použití plastových lahví a pozorování jejich deformace vlivem adsorpce oxidu uhličitého na aktivním uhlí. Na základě těchto experimentů je následně možno poukázat na praktické využití adsorpce. Takovým příkladem může být průmyslové využití adsorpce jako techniky pro odstraňování iontů ze znečištěné vody. V případě plynné adsorpce je to zejména využití ve vzduchových filtrech, hlavně pro odstraňování průmyslových plynů. Jako další příklad může být využití adsorpce, se kterým se setkáváme v každodenním životě. Může to být například medicínální aktivní uhlí využívané při zažívacích problémech, filtry s aktivním uhlím využívané jako domácí čističky vody, popřípadě sáčky oxidu křemičitého, se kterými je možno setkat se v baleních sušených potravin, v baleních s novou elektronikou, popřípadě v nové obuvi.



**12P-01****VÝSTAVA PŘÍBĚH KAPKY: CESTA JAROSLAVA HEYROVSKÉHO ZA NOBELOVOU CENOU ŽIJE JIŽ 10 LET****KVĚTOSLAVA STEJSKALOVÁ**

*Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.,  
Dolejškova 2155/3, 182 23 Praha 8, Česká republika  
kvetoslava.stejskalova@jh-inst.cas.cz.*

Putovní výstava s názvem Příběh kapky<sup>1</sup> se již desátým rokem (premiéra v září 2009 na FCHT Univerzity Pardubice) snaží přiblížovat svým návštěvníkům osobnost Jaroslava Heyrovského (20. 12. 1890 – 27. 3. 1967) nejen jako vědce, nositele Nobelovy ceny za chemii, ale i jako člověka.

Expozice je tvořena sadou dvanácti plakátů (formát A0), které velkým množstvím dobových fotografií ilustrují život a vědeckou práci Jaroslava Heyrovského (polarografický výzkum). Rodinou Heyrovských byly k pořízení kopií zapůjčeny i některé dosud nepublikované fotografie z rodinného alba. Druhou část expozice tvoří přístroje (vývojová řada 8–10 polarografů), skleněné polarografické nádoby, diapozitivy, se kterými polarografisté přednášeli, ukázky knih a publikací o polarografii v různých světových jazycích a další předměty. Filmy zhotovené v 50. a 60 letech minulého století dokumentující Heyrovského výzkum bývají promítány v průběhu výstavy ve formě nekonečné smyčky. Výstava je doplněna doprovodným programem řady popularizačních přednášek nejen o Jaroslavu Heyrovském a jeho výzkumu v oboru polarografie, ale i o současné vědě a výzkumu v oboru fyzikální chemie, kterou se vědci v ÚFCH JH zabývají dnes.

Od svého vzniku měla výstava již 26 zastavení, různých expozic na řadě míst České republiky, ať to byly univerzity, školy střední či základní, muzea, výstavní síně. Počet návštěvníků přesáhl úctyhodných 27 000, což je v případě takto odborně zaměřené výstavy pěkné číslo. Život exponátů v terénu zahrnuje již 39 měsíců!

V současné době vzniká její zjednodušená grafická podoba (obrázky s "bublinami" textů) coby verze, jež by mohla, vystavená spolu s klasickou expozicí, zaujmout i její menší návštěvníky, děti z 1. stupně základních škol, pro které je dosavadní koncept výstavy náročný. V rámci stáže v projektu Otevřená věda 2018 na ni spolupracuje K. Stejskalová, autorka výstavy, se studentkou D. Kořánovou z Gymnázia J. Gutha-Jarkovského z Prahy.

Aktuální informace o výstavě se všemi jejími zastaveními přinášejí neustále doplňované webové stránky (<http://www.jh-inst.cas.cz/heyrovsky>).

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR CZ.02.2.69/0.0/0.0/16\_028/0006251.*

**LITERATURA**

1. Stejskalová K., v knize: *Vědci, vynálezci a podnikatelé v českých zemích – svazek třetí*, kap. 1, s. 11. Jonathan Livingston, s.r.o., Praha 2017.

**13L-01****PROBLEMATIKA VÝROBY PIGMENTOVÉHO LAKU  
PIGMENT YELLOW 183****TOMÁŠ WEIDLICH, LIBOR DUŠEK, BARBORA  
KAMENICKÁ**

*Skupina chemických technologií, Ústav Environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 573, 532 10 Univerzita Pardubice, Česká republika*  
tomas.weidlich@upce.cz

Příspěvek se bude týkat problematiky produkce žlutého pigmentového laku na bázi vápenatých solí sulfonované azosloučeniny označované jako Pigment Yellow 183 (*I*). Tato výroba je stejně jako výroba jiných tzv. kyselých barviv založena na diazotaci a následné azokopulaci výchozího aromatického aminu<sup>1</sup> (v tomto případě se jedná o tzv. 3,4-dichloranilinsulfonovou kyselinu, *II*, 2-amino-4,5-dichlorbenzensulfonovou kyselinu) na příslušný pyrazolon používaný jako pasivní komponenta přeměňuje na sulfonované (kyselé) azobarvivo, jež se v následném kroku přidávkem vápenatých solí sráží na požadovaný produkt, pigmentový lak. Na první pohled by se tato výroba dala označit za příklad „green chemistry“, protože všechny reakce jsou prováděny ve vodě, tedy „nejzelenějším“ rozpouštědlem. Navíc je tento pigmentový lak na trhu velmi žádaným zbožím. Problémem této výroby je ale použití chlorovaných aromatických sloučenin v procesu výroby a jejich následný výskyt v produkovaných odpadních vodách, který je nutné řešit použitím sorpce.

*Tato práce vznikla za podpory grantu TA ČR TH 02030200.*

**LITERATURA**

1. *Integrated Pollution Prevention and Control, Reference Document on Best Available Techniques for the Manufacture of Organic Fine Chemicals*, August 2006, available on: <https://www.mpo.cz/ippc/bref/--143226/>.

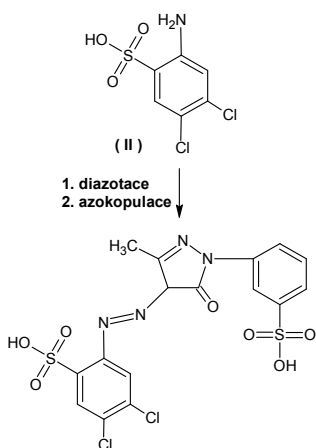


Schéma 1. Schéma výroby kyselého barviva používaného pro získávání Pigment Yellow 183

**13L-02****MOŽNOSTI VYUŽITÍ OXIDU UHLIČITÉHO JAKO  
SUROVINY PRO PRŮMYSL VÝROBY  
CHEMICKÉ****JAROMÍR LEDERER**

*Unipetrol výzkumně vzdělávací centrum, a.s., Chempark Litvínov, 436 70 Litvínov, Česká republika*  
jaromir.lederer@unicre.cz

V důsledku platnosti nové emisní legislativy se významně do budoucna omezuje celosvětově uvolňování oxidu uhličitého do atmosféry. Studují se možnosti této látky, která má velmi nízký reakční potenciál, v procesech označovaných jako CCS (Carbon capture and storage) a CCU (Carbon capture and use). Zatímco prvá možnost je pro Evropu a tím spíše pro Českou republiku málo schůdná, je výzkum procesů transformace oxidu uhličitého na užitečné látky důležitá pro zachování další dynamiky chemického průmyslu i jako významná výzva pro vědecké bádání i aplikovaný výzkum. V příspěvku bude prezentována možnost využití oxidu uhličitého pro výrobu důležitých polymerních látek – zejména akrylátů cestou kondenzace oxidu uhličitého a ethenu nebo polykarbonátů využitím reakce CO<sub>2</sub> s cyklickými epoxidy. V oblasti petrochemického využití je prioritní katalytická transformace oxidu uhličitého na methanol případně až na methan methanizační reakcí poskytující syntetický zemní plyn (SNG). Potenciálně významným procesem pro případ dostupné energie z obnovitelných zdrojů je výroba vodíku tzv. suchým reformingem, to je vysokoteplotní katalytickou reakcí oxidu uhličitého a methanu (jako zemního plynu). Naopak v případě dostupného vodíku, který je ovšem vyráběn s využitím elektrolýzy na bázi obnovitelného zdroje energie (větrná, solární) bude atraktivní proces tzv. reverzní konverze (RWGS), kdy je oxid uhličitý redukován na oxid uhelnatý, který je v dalším stupni transformován jako syntézní plyn na uhlovodíky „ropného“ typu pomocí Fischerovy a Tropschovy syntézy.

**13L-03****VODÍK – VÝZVA PRO BUDOUCNOST****JIŘÍ HÁJEK**

*Unipetrol výzkumně vzdělávací centrum, a.s., Chempark Litvínov, 436 70 Litvínov, Česká republika*  
jiri.hajek@unicre.cz

EU usiluje o snížení emisí oxidu uhličitého ve všech průmyslových odvětvích. Důraz se projevuje zejména změnou legislativy podporující zavádění pokročilých biopaliv a alternativních paliv v dopravě. V případě pokročilých biopaliv brání širšímu uplatnění především neukončený vývoj technologií pro konverzi odpadních surovin na paliva, v případě alternativních paliv je omezujícím aspektem i chybějící distribuční infrastruktúra. Většina automobilek v souladu s nařízením regulátorů uvádí, nebo alespoň plánuje uvedení vozů využívajících pro pohon energii akumulovanou

v bateriích. Jiné hledící dale do budoucnosti vidí perspektivu především ve využití vodíku. Ačkoliv vývoj a první aplikace vodíkových technologií v dopravě byl zaznamenán především ve vyspělých západních ekonomikách, jakými jsou například Německo, Norsko, Velká Británie, Kanada a Japonsko, současným lídrem v oblasti využívání vodíkových technologií je Čína. V rámci ČR jsou vodíkové technologie spíše tématem výzkumných a vývojových projektů, nicméně plánovaná podpora Ministerstva dopravy na rozvoj vodíkových plnicích stanic a dotace uvažované Ministerstvem životního prostředí na podporu vodíkové mobility umožní rozšíření alternativních pohonů na území ČR právě o vodík.

---

## SEZNAM PLENÁRNÍCH PŘEDNÁŠEK

---

PL-01	<i>J. Janata</i>	Atomic catalysts
PL-02	<i>J. Hajšlová, V. Hrbek, V. Kosek, K. Hůrková, J. Pulkrabová</i>	Metabolomika – nová, efektivní strategie pro hodnocení kvality potravin a ochranu zdraví populace
PL-03	<i>K. Lemr</i>	Desorpční nanoelektrosprej – vývoj iontového zdroje pro hmotnostní spektrometrii
PL-04	<i>R. Zbořil, M. Otyepka</i>	Uhlíkové nanostruktury pro pokročilé biomedicínské, environmentální a magnetické aplikace
PL-05	<i>F. Štěpánek</i>	Dálkové řízení reakčně difúzních procesů pomocí chemických robotů
PL-06	<i>V. Milata</i>	Chémia selénu a jej potenciál

---

## SEZNAM PŘÍSPĚVKŮ PODLE SEKCI

---

### Sekce 1 – Anorganická chemie

#### Přednášky

1L-01	<i>M. Vlček, K. Pálka, S. Šlang, L. Loghina, A. Iakovleva, M. Grinco</i>	Chalkogenidová skla – netradiční materiály s netradičními vlastnostmi a aplikacemi
1L-02	<i>E. Plížingrová, M. Motlochová, M. Klementová, J. Kupčík, L. Palatinus, L. Szatmáry, J. Šubrt</i>	Titanyl sulfát jako templát pro přípravu 1D titanových struktur
1L-03	<i>J. Pavlík, M. Puchoňová, J. Moncol, D. Valigura</i>	Weak magnetic exchange interaction in two novel binuclear copper(II) complexes

### Sekce 1 – Anorganická chemie

#### Postery

1P-01	<i>B. Vranovičová, R. Boča</i>	Nové magnetoštruktúrne korelácie v dvojjadrových komplexoch železa
1P-02	<i>S. Matejová, M. Puchoňová, M. Mazúr, J. Moncol</i>	Structural and spectral characterisation of methyl and methoxy-salicylatocopper complexes with benzimidazole
1P-03	<i>J. Maroszová, J. Vaisová, M. Puchoňová, J. Moncol, M. Koman</i>	Nové typy polymérnych karboxylátomednatých komplexov so 4-pyridylmetanolom
1P-04	<i>M. Rendošová, Z. Vargová, D. Sabolová, D. Hudcová, H. Paulíková, R. Gyepes, B. Lakatoš, J. Kuchár, D. Mudroňová, M. Vilková</i>	Strieborné koordinačné zlúčeniny ako perspektívne antimikrobiálne činidlá
1P-05	<i>E. Samolová, J. Kuchár</i>	Príprava a charakterizácia nových heterobimetalických zlúčenín na báze Mn(II) a Cu(II)
1P-06	<i>M. Puchoňová, J. Moncol, V. Kuchtanin</i>	Various supramolecular structures in methylsalicylatocopper(II) complexes with benzimidazole derivatives
1P-07	<i>P. Kaule, V. Šícha, J. Čermák</i>	Nové halogenderiváty kobalt bis-dikarbolidového aniontu

- 1P-08 J. Švorec, Z. Švajdová, I. Šalitroš, J. Moncol  
 1P-09 K. Skrbek, O. Jankovský, M. Dendisová, M. Švecová, V. Bartůněk

Fe(III) komplexy s pentadentátními schiffovými bázami odvozenými od 5-bromo-3-metoxysalicylaldehydu

Halogenované pesticidy a možnosti jejich odstraňování z vod a půdy

**Sekce 2 – Organická chemie**

## Přednášky

- 2L-01 A. Markos, V. Motornov, Z. Blastik, S. Voltrová, P. Beier\*  
 2L-02 N. Almonasy, M. Michl, M. Dvořák, M. Nepraš  
 2L-03 P. Králová  
 2L-04 J. Varga, P. Pařík, F. Bureš  
 2L-05 M. Urban, M. Soural, S. Krajcovicova, J. Hodon, J. Stankova, P. Dzubak, J. Sarek  
 2L-06 J. Jakubčinová, M. Baráth, J. Hirsch, I. Tvaroška  
 2L-07 D. Miličević, R. Kimmel, J. Košmrlj, S. Kafka  
 2L-08 P. Drabina  
 2L-09 R. Machníková, L. Janovská, L. Brulíková\*  
 2L-10 R. Balogh, M. Danko, A. Eckstein-Andicsová, E. Kozma  
 2L-11 M. Porubský, J. Hlaváč\*  
 2L-12 A. Lyčka  
 2L-13 Ya. Okorochenkova, M. Porubský, S. Benická, J. Hlaváč  
 2L-14 R. Nencka, M. Šála, A. Thomas, R. Rais, B. Slusher, C. Rojas

Azido(per)fluoroalkanes – useful fluorinated building blocks

Modelové bichromofory pro zkoumání přenosu excitační energie

Použití imobilizovaných  $\alpha$ -acyl aminoketonů pro syntézu chirálních heterocyklů

Imidazol a imidazolium jako strukturální motivy v push-pull systému

Cytotoxic triterpenoids – synthesis and mechanism of action

Stabilita a příprava potenciálních inhibitorů lidských glykozyltransferáz

New compounds with 1,2,3-triazole moiety

Nové recyklovatelné katalyzátory asymetrické Henryho reakce

Solid phase synthetic approach towards new pyrimidines as promising antitubercular and antimicrobial agents

Thiazolo[5,4-d]thiazole derivatives as building blocks for  $\pi$ -conjugated semiconductors

Development of novel off-on bodipy fluorescent system for visualization of drug release

Multinuclear NMR studies of tautomerism and E/Z isomerism in azo dyes: past and present

Novel fluorescent system for multiple protease detection

Neutral sphingomyelinase 2 inhibitors as potential therapeutics for the treatment of brain injury and neurodegenerative diseases

**Sekce 2 – Organická chemie**

## Postery

- 2P-01 J. Špaková Raschmanová, M. Martinková, J. Gonda, M. Bago Pilatová  
 2P-02 M. Široký, J. Gonda  
 2P-03 S. Hirková, J. Gonda, T. Mitriková, V. Bodnárová, M. Martinková, D. Roman  
 2P-04 M. Spišáková, M. Bella, J. Moncol, M. Kooš

Totální syntéza L-lyxo- A L-xylo-fytosfingozinův

Stereokonvergentná syntéza hydroxylovaných oktahydroindolův

Syntéza analogův biologicky aktivních zlúčenin so zabudovanými molekulovými prepínačmi

Syntéza hybridu (–)-swainsonínu a manostatínu A: nový prístup k syntéze 1-aminokarba-D-lyxofuranóv

- 2P-05 J. Elečko, M. Martinková, J. Gonda Stereoselektivna syntéza C-8a substituovaných polyhydroxylovaných indolizidínových alkaloidov
- 2P-06 R. Rončák, M. Tvrdoňová, J. Gonda Využitie nových tiomočovín obsahujúcich sacharidový fragment ako potenciálnych organokatalyzátorov pri syntéze biologicky účinných látok
- 2P-07 M. Fábian, M. Martinková, J. Gonda Stereoselektivna syntéza pokročilého prekurzora laktacystin- $\beta$ -laktonu
- 2P-08 M. Krátký, K. Mikušová, J. Stolaříková, J. Vinšová\* Od staré molekuly isoniazidu k antituberkulotikům s novým mechanismem účinku
- 2P-09 F. Zatloukal\*, D. Gergela, R. Vícha, M. Rouchal\* Synthesis of novel disubstituted purines and pyrrolo[2,3-*d*]pyrimidines bearing adamantane moiety
- 2P-10 P. Slepčiková, M. Bečka, J. Imrich Syntéza kojugátov akridínu s aminokyselinami a ich využitie v asymetrickej syntéze
- 2P-11 P. Šimon, J. Kulhánek, J. Zelenka Studie vlivu struktury diaminů s 1,3,5-triazinovým skeletem na jejich fyzikálně chemické vlastnosti a na vlastnosti od nich odvozených polyimidů
- 2P-12 V. Šlachtová, L. Janovská, L. Brulíková Solid phase synthesis of new thiazolidinediones and their antimicrobial activity
- 2P-13 A. Kumar, G. Gutti, K. Arya, D. Sriram, S. Kumar Singh 3,5-Diaryl-1H-pyrazole derivatives as *Mycobacterium tuberculosis* protein kinase G (MTBPKNG) inhibitors: synthesis, *in-silico* and *in-vitro* screening
- 2P-14 S. Kumar Singh, D. Kumar, A. Ganeshpurkar Piperazinediones as acetylcholinesterase and matrix metalloproteinase-2 inhibitors for treatment of Alzheimer's disease
- 2P-15 J. Podlesný, F. Bureš Thieno[3,2-*b*]thiofen a thieno[2,3-*b*]thiofen jako elektron-donorní jednotky push-pull chromoforů
- 2P-16 A. Reza Karimi, A. Khodadadi, R. Davoodabadi Synthesis, photochemistry and photosensitizing properties of metallophthalocyanines bearing spiropyrrolizidine oxindoles
- 2P-17 J. Jansa, T. Řezníček, A. Lyčka Syntéza *p*-terfenyl-4-olů a z nich odvozených *p*-quaterfenylů
- 2P-18 T. Elbert The fate of high energetic species generated by radioactive decay of tritium in tritium-labelled compounds

### Sekce 3 – Analytická chemie

#### Přednášky

- 3L-01 J. Vacek Využití elektrochemických metod v biochemii a medicínských oborech: kritický pohled
- 3L-02 D. Novák, J. Viskupičová, M. Zatloukalová, M. Májeková, J. Vacek Chronopotenciometrická analýza karbonylace Ca<sup>2+</sup>-atpasy
- 3L-03 S. Skaličková, M. Gargulák, B. Ruttkay-Nedecký, M. Dočekalová, M. Staňková, D. Uhlířová, P. Pantůčková, M. Kepinska, R. Kizek\* Metallothioneiny – elektrochemická analýza
- 3L-04 J. Fischer, H. Dejmková, R. Šelešovská, J. González Martín, P. Martín Miján, K. Schwarzová Possibilities of electrochemistry in analysis of azoles
- 3L-05 R. Šelešovská, L. Janíková, J. Chýlková Voltametrické stanovení pesticidů s využitím elektrod na bázi stříbrného amalgámu a borem dopovaného diamantu
- 3L-06 J. Hovancová, I. Šišoláková, R. Oriňaková, A. Oriňak Neenzymatické elektrochemické senzory pre stanovenie glukózy
- 3L-07 J. Piechocka, M. Wyszczelska-Rokiel, R. Głowacki Searching for a proverbial needle in a haystack – identifying new metabolite(s) of endogenic thiols and aldehydes in human biological fluids

3L-08	<u>J. Sokol</u> , M. Maliarová, D. Gebhardtová	Stanovenie biogénnych aminov vo vybraných vzorkách potravín
3L-09	<u>D. Baron</u> , T. Pluháček, A. Šebestová, R. Pechancová, J. Petr	Využití ICP-MS jako detektoru pro analýzy kapilární elektroforézou
3L-10	<u>J. Petr</u> , D. Baron, A. Šebestová, P. Švecová, T. Pluháček	Charakterizace nanomateriálů pomocí kapilární elektroforézy
3L-11	<u>A. Kotzianová</u> , O. Židek, J. Klemeš, M. Pokorný, V. Velebný	Analýza nanovlákných materiálů Ramanovou a energiově disperzní spektroskopií
3L-12	<u>T. Zelenka</u> , V. Stefan, V. Slovák, M. Lhotka, S. Študentová, G. Hotová, L. Bláhová	Měření skeletální hustoty pevných látek pomocí fyzisorpčního zařízení

### Sekce 3 – Analytická chemie

#### Cena Shimadzu

3S-01	<u>V. Dosedělová</u> , T. Béres, H. Stavěliková, P. Tarkowski*	Chemická charakterizace genofondu cibule šalotky
3S-02	<u>Z. Farka</u> , M. J. Mickert, A. Hlaváček, H. H. Gorris, P. Skládal	Single-molecule upconversion-linked digital immunosensing of cancer biomarkers
3S-03	<u>O. Guselnikova</u> , Ye. Kalachyova, P. Postinikov, O. Lyutakov, V. Svorcik	Functional SERS: high selectivity, low detection limit, perfect reproducibility and compatibility with portable Raman spectrometer
3S-04	<u>M. Háková</u> , L. Chocholoušová Havlíková, J. Erben, J. Chvojka, D. Šatinský	Nové typy nanovlákných sorbentů pro extrakci na bázi univerzálního coatingu polydopaminem
3S-05	<u>M. Havlíková</u> , Z. Bosáková, R. Čabala	Analýza obranných sekretů ploštic druhu <i>Lygaeus equestris</i> pomocí jedno- a dvoudimenzionální plynové chromatografie
3S-06	<u>P. Holčapková</u> , A. Hurajová, V. Sedlařík	Liquid chromatography as a tool for identification of bacteriocin nisin incorporated into polymers
3S-07	<u>L. Khvalbota</u> , I. Špánik	Enantiomer distribution of major chiral volatile organic compounds in slovak tokaj wines
3S-08	<u>M. Král</u> , M. Dendisová, P. Matějka	Studium interakce aminokyselin a peptidů s povrchem plasmonických kovů metodami vibrační mikrospektroskopie a nanoskopickými technikami
3S-09	<u>F. Květoň</u> , B. Jansson, J. Tkáč	Detekcia tumor asociovanej protilátky GOD3-2C4 glykánovým biosenzorom na báze Tn antigénu
3S-10	<u>I. Mejdrová</u> , D. Chalupská, E. Bouřa, R. Nencka	Selective inhibitors of phosphatidylinositol 4-kinase III $\beta$ as broad-spectrum antiviral agents

### Sekce 3 – Analytická chemie

#### Postery

3P-01	<u>A. Kostelník</u> , P. Martinková, M. Pohanka	Porovnání pokovení povrchu elektrody QCM senzoru pro tvorbu imunosenzoru a optimalizace měřicího systému
3P-02	L. Šenkárová	Příprava, charakterizace a vlastnosti syntetických zeolitů
3P-03	<u>K. Záruba</u> , A. Tatar, D. Sýkora, V. Král	Ugi four component reaction as an efficient platform for multimodal HPLC stationary phase synthesis
3P-04	<u>P. Řezanka</u> , V. Rach, V. Král	Preparation of multimodal stationary phase for capillary electrophoresis by Ugi reaction

- 3P-05 K. Blažková, P. Šimon, T. Knedlík, P. Dvořáková, A. Březinová, L. Kostka, V. Šubr, J. Konvalinka, P. Šácha Stochastically-linked photomodified probes enable successful identification of protein targets of bioactive small molecules
- 3P-06 P. Solich, H. Sklenářová, P. Chocholeouš Flow techniques – tool for research in pharmaceutical area
- 3P-07 I. Lhotská, A. Kholová, A. Machyňáková, K. Hroboňová, D. Šatinský Příprava molekulárně vtištěného polymeru pro mykotoxin citrinin: selektivní sorbent pro on-line SPE-HPLC
- 3P-08 R. Valeš, H. Rezková, Z. Topinková, B. Dvořák Stanovení stupně redukce NiO v Ni/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> katalyzátorech a jeho vliv na aktivitu
- 3P-09 P. Šebest, P. Vidláková, F. Ligmajer, A. Daňhel Elektrochemické chování 4-nitrofenolu na elektrodách z pyrolytického grafitu
- 3P-10 K. Musil, R. Čabala Vývoj a optimalizace dvoukanálového tlakového pulzního modulátoru pro komprehenzivní plynovou chromatografii (GCxGC)
- 3P-11 J. Fischer, J. Barek Vlastnosti stříbrných amalgamových elektrod významné z hlediska analytických aplikací
- 3P-12 M. Švidrnoch, L. Skácelová, V. Maier Vývoj analytické metody pro stanovení a identifikaci meskalinu v rostlinném a biologickém materiálu
- 3P-13 K. Fenclová\*, M. Daňo, M. Bilous, T. Prášek, M. Němec, J. John Urychlovačová hmotnostní spektrometrie v ČR – nové možnosti pro stanovení vybraných aktinoidů v rámci projektu RAMSES
- 3P-14 T. Prášek, M. Němec, P. Steier, X. Zhang Preparation of fluoride target matrices for <sup>236</sup>U AMS measurement
- 3P-15 M. Daňo, J. Kučera, J. John, M. Němec, I. Světlík, D. Dreslerová First accelerator mass spectrometry laboratory in the Czech Republic
- 3P-16 J. Klapetek, V. Šícha, J. Čermák Použití boranoxonia k HPLC derivatizaci a stanovení nukleofilů ve vodách
- 3P-17 P. Pantůčková, D. Uhlířová, M. Dočekalová, M. Staňková, Z. Tóthová, R. Kizek\* Stanovení sarkosinu v umělé a reálné moči za využití iontovýměnné kapalinné chromatografie
- 3P-18 Z. Tóthová, M. Dočekalová, M. Staňková, D. Uhlířová, P. Pantůčková, R. Kizek\* Elektrochemická analýza vlivu zinku na sarkosin oxidasu
- 3P-19 L. Benešová, J. Klouda, A. Zárybnická, P. Yershova, K. Schwarzová Elektrochemická detekce cholesterolu a jeho prekursoru v průtokové injekční analýze

## Sekce 4 – Elektrochemie a další oblasti fyzikální chemie

### Přednášky

- 4L-01 L. Trnková Understanding elimination voltammetry
- 4L-02 Z. Kinart The determination of formation constants inclusion complexes of derivatives of cinnamon acid with  $\alpha$ -cyclodextrin by conductometric methods in a wide range of temperatures
- 4L-03 E. Melniková, K. Tomčíková, F. Květoň, J. Tkáč, M. Gál Impedimetrický biosenzor pre detekciu vírusu chrípky
- 4L-04 K. Gavalierová, A. Straková Fedorková, P. Gomez-Rómero, D. Rueda Katódové materiály na báze síry s využitím pre Li-S batérie
- 4L-05 V. Novák, L. Řeháčková, B. Smetana, L. Drozdová Methodology for determining surface properties of Fe-C-Cr alloys
- 4L-06 J. Klíma Nanobubliny – existují nejen na hydrofobním povrchu, ale i v objemu kapaliny?



4L-07	<i>A. Daňhel, F. Ligmajer</i>	Chemická koprecipitace bimetalických částic stříbrného amalgámu a jeho spektro-elektrochemické vlastnosti
4L-08	<i>A. Liška, J. Ludvík</i>	Stereoelektrochemie kalixarenů substituovaných karbonylovými a příbuznými skupinami
4L-09	<i>P. Rapta</i>	Spektroelektrochemie biologicky aktivních komplexů osmia a ruténia
4L-10	<i>M. Fojta, J. Špaček, A. Daňhel, M. Hejduková, P. Havranová, L. Havran</i>	Elektrochemicky „přepínatelná“ elektroaktivní centra v přirozených a chemicky modifikovaných nukleových kyselinách
4L-11	<i>M. Zatloukalová, D. Novák, E. Nazaruk, R. Bilewicz, J. Vacek</i>	Elektrochemické stanovení aktivity transmembránového proteinu Na <sup>+</sup> /K <sup>+</sup> -atpasy
4L-12	<i>T. Navrátil, I. Šestáková, B. Josypčuk, J. Langmaier</i>	Studium fytochelatinů a metalothioneinů na rtuťové a amalgámové elektrodě, tvorba jejich komplexů s těžkými kovy

#### Sekce 4 – Elektrochemie a další oblasti fyzikální chemie

##### Cena Metrohm

4M-01	<i>S. Baluchová, J. Barek, L. I. N. Tomé, C. M. A. Brett, K. Schwarzová-Pecková</i>	Anodically activated boron-doped diamond and non-modified and polymer-modified glassy carbon electrodes for electroanalysis of tumour biomarkers
4M-02	<i>D. Dobrovodský, P. Orság, A. Daňhel</i>	Elektrochemická elisa metoda na detekci nádorového supresorového proteinu p53
4M-03	<i>M. Hermanová, P. Orság, M. Fojta</i>	Voltametrická detekce protein-DNA interakcí založená na duálním redoxním značení DNA
4M-04	<i>M. Herynková, R. Šelešovská, P. Martinková</i>	Voltametrické chování azoxystrobinu a vývoj metody jeho stanovení
4M-05	<i>J. Klouda, J. Barek, F.-M. Matysik, K. Schwarzová-Pecková</i>	Elektrochemická oxidace chemicky aktivovaných žlučových kyselin
4M-06	<i>P. Marvan</i>	Příprava vrstevnatých chalkogenidů galia a india a studium jejich senzorových vlastností
4M-07	<i>V. Müllerová, R. Jerga, J. Skopalová</i>	Modifikace uhlíkových štětičkových elektrod fosfolipidy
4M-08	<i>D. Novák</i>	Elektrochemie cytochromu <i>c</i>
4M-09	<i>J. Špaček</i>	Electrochemistry of natural and unnatural DNA

#### Sekce 4 – Elektrochemie a další oblasti fyzikální chemie

##### Postery

4P-01	<i>I. Šišoláková, J. Hovancová, R. Oriňaková, A. Oriňak</i>	Elektrochemická detekce inzulínu na uhlíkových elektrodách modifikovaných nanočásticami
4P-02	<i>O. Petruš, A. Oriňak, R. Oriňaková</i>	Kombinácia koloidnej litografie a elektrochemickej depozície ako vhodná metóda na prípravu plazmónových povrchov
4P-03	<i>L. Šimková, J. Ludvík</i>	Elektrochemické studium fluorovaných derivátů 1,3-difenyliisobenzofuranu – chromofory pro singletové štěpení
4P-04	<i>L. Koláčná, P. Polák, T. Tobrman, J. Ludvík</i>	Elektrochemické studium prekursorů pro organické polovodiče na bázi pyrenu
4P-05	<i>J. Ludvík, J. Donkeng Dazie, K. Kantnerová</i>	Elektrochemické monitorování reakcí ftalaldehydu (OPA) s <i>N</i> -, <i>S</i> - a <i>O</i> -nukleofily
4P-06	<i>K. Modi, A. Liska, U. Panchal, S. Dey, J. Ludvik, V. K. Jain</i>	Electrochemical & spectroscopic investigation of ferrocene bearing thiacalix[4]arene and its Cu(II) complex
4P-07	<i>F. Ligmajer, A. Daňhel</i>	Plazmonické vlastnosti nanočástic stříbrného amalgámu

4P-08	<i>M. Jerigová, V. Szöcs, D. Lorenc, D. Velič</i>	SIMS data analysis of lignin composites
4P-09	<i>L. Slušná, D. Bondarev, E. Jané, E. Haizer, M. Držik, V. Szocs, M. Jerigová, D. Velič</i>	Absorpční a fluorescenční dynamika systému tiofénový kopolymér/fenylovaný fullerén
4P-10	<i>E. Noskovičová, D. Lorenc, L. Slušná, M. Jerigová, D. Velič</i>	Hybridný polovodič na báze perovskitu v časovo rozlišenom terahertzovom experimente
4P-11	<i>K. Kulpová, M. Jerigová, D. Velič</i>	Štruktúra lignínu pomocou hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov
4P-12	<i>T. Vojteková, D. Lorenc, D. Velič</i>	Infračervená spektroskopía kompozitných materiálov na báze polyvinylchloridu a lignínu
4P-13	<i>J. Svoboda*, L. Šimková, J. Pinkas, J. Ludvík</i>	Elektrochemické studium dihalogen cyklopentadienylových ligandů titanu v nevodném prostředí
4P-14	<i>J. Věžník, M. Konhefr, L. Trnková, K. Lacina</i>	Differences of redox behaviour of aminoferrocene in buffered and unbuffered aqueous solutions
4P-15	<i>J. Kožíšková, B. Pavilek, D. Věgh, J. Kožíšek</i>	Experimental charge-density studies of bis (2-methoxyethyl)-4,8-dibromo-3,7-dichlorobenzo [1,2-b: 4,5-b ' ] dithiophen-2,6-dicarboxylate
4P-16	<i>D. Darvasiová, Z. Barbieriková, M. Zalibera, A. Eibel, M. Schmalleger, G. Gescheidt, D. Neshchadin</i>	Probing the first steps of photoinduced free radical polymerization at water-oil interfaces
4P-17	<i>M. Šimunková, M. Valko, J. Moncol'</i>	Bifunctional copper(II) complexes with non-steroidal anti-inflammatory drugs and intercalating ligands as prospective anticancer drugs

## Sekce 5 – Supramolecular chemistry

### Přednášky

5L-01	<i>P. Slavík, P. Lhoták</i>	<i>meta</i> -Mercuration as a direct way to unusual derivatives of calix[4]arenes
5L-02	<i>M. Sojka, M. Kratochvilová, M. Nečas</i>	Pseudorotaxanes as carriers for ruthenium prodrugs
5L-03	<i>P. Zimčík, V. Nováková, L. Lochman, A. Cidlina</i>	Azaphthalocyanines as fluorescent sensors for pH and cations
5L-04	<i>P. Lubal, J. Vaněk, R. Ševčíková, P. Hermann, V. Kubiček</i>	Thermodynamic and kinetic study of Cu(II) complexes with nota, dota and teta macrocyclic ligands
5L-05	<i>J. Vázquez, V. Šindelar*</i>	Supramolecular complexes of bambusurils with sulfide and hydrosulfide anions
5L-06	<i>R. Vicha, A. Čablová, J. Tomeček, Z. Prucková, J. Vicha, M. Rouchal, L. Dastychová</i>	Rational design of binding motifs for cucurbit[ <i>n</i> ]urils and cyclodextrins
5L-07	<i>Z. Zawada, A. Tatar, P. Mocilac, M. Buděšínský, T. Kraus*</i>	Transport of nucleoside triphosphates into cells by artificial molecular transporters
5L-08	<i>J. Chyba, M. Knor, P. Munzarová, J. Novotný, R. Marek</i>	Host-guest complexes of potential platinum(IV) and ruthenium(III) metallodrugs with macrocyclic carriers
5L-09	<i>V. Reichová*, P. Lubal, P. Hermann</i>	The thermodynamic and kinetic study of Pb(II) complexes with tetraazamacrocyclic ligands
5L-10	<i>J. Jindřich</i>	Syntheses and applications of regioselectively substituted cyclodextrin derivatives
5L-11	<i>K. Jelínková, Z. Prucková, M. Rouchal, R. Vicha</i>	Tritopic cubane-based guest
5L-12	<i>O. Jurček, Nonappa, P. Jurček, K. Rissanen, R. Marek</i>	Bile acids – natural building blocks for coordination self-assemblies

**Sekce 5 – Supramolecular chemistry**

## Postery

- 5P-01 *J. Kovačević, V. Kašpárková, Z. Prucková, T. Pospíšil, R. Vícha* Biopolymers modified with cyclodextrins for supramolecular hydrogels
- 5P-02 *T. Lízal, V. Šindelář* Xylylene-glycoluril macrocycles: new bambusuril derivatives
- 5P-03 *M. Kandrňalová, V. Šindelář* Pseudorotaxanes based on bambus[6]uril
- 5P-04 *H. Surmová, M. Rouchal, R. Vícha* Preparation of non-symmetric bisimidazolium guests for cyclodextrins and cucurbit[*n*]urils
- 5P-05 *H. Valkenier, O. Akrawi, P. Jurček, K. Sleziaková, T. Lízal, K. Bartík, V. Šindelář* Fluorinated bambusurils as highly effective and selective transmembrane transporters for chloride and bicarbonate

**Sekce 6 – Chemie životního prostředí**

## Přednášky

- 6L-01 *L. Novotný, A. Karásková* Potenciálová odezva stříbrné amalgámové elektrody během čištění elektrárenských a ionexy upravovaných vod
- 6L-02 *K. Jastřembská, H. Jiránková, P. Mikulášek* Faktory ovlivňující separaci organických látek z vodných roztoků pomocí reverzní osmózy
- 6L-03 *J. Handl, J. Čapek, P. Majtnerová, T. Roušar\** Nefrotoxické působení kadmia u lidských proximálních tubulárních buněk
- 6L-04 *S. Dulanská, M. Štofaničková, L. Mátel* Sequential determination of <sup>90</sup>Sr and <sup>210</sup>Pb in the environmental samples

**Sekce 6 – Chemie životního prostředí**

## Postery

- 6P-01 *L. Novotný, A. Karásková* Testování změn potenciálu stříbrné amalgámové elektrody během ionexové úpravy vody po její předúpravě
- 6P-02 *M. Oravec, M. Kummerová, Š. Zezulka, K. Svobodová, J. Tříška* Does diclofenac and paracetamol uptake by pea and maize affect their primary metabolism?
- 6P-03 *P. Parma, M. Černík* Nové možnosti studia migrace elementárního nanoželeza v laboratoři
- 6P-04 *K. Jastřembská, H. Jiránková, P. Mikulášek* Separace alkoholů z vodných roztoků s využitím reverzní osmózy
- 6P-05 *D. Kolničenko, K. Pešová, T. Juřica, L. Bláhová, M. Mucha, Z. Navrátilová* Využití vysokopecních strusek pro imobilizaci fenolu z roztoku
- 6P-06 *K. Pešová, D. Kolničenko, T. Juřica, L. Bláhová, M. Mucha, Z. Navrátilová* Využití vysokopecních strusek pro imobilizaci olovnatých iontů z roztoku
- 6P-07 *Z. Vatehova, K. Kollarova, A. Malovikova, D. Liskova* Plant cell walls as defence mechanisms against abiotic stress

**Sekce 7 – Potravinářská a agrikulturní chemie**

## Přednášky

- |       |  |  |
|-------|--|--|
| 7L-01 | <i>S. Čavar Zeljković, S. Benická, L. Černochová, V. Dosedělová, T. Béres, H. Stavěliková, P. Tarkowski*</i> | Chemická charakterizace genetických zdrojů zelenin a speciálních plodin          |
| 7L-02 | <i>R. Bleha, A. Synytsya, T. Shevtsova, J. Brindza, J. Čopíková</i>  | Rouskový pyl a perga: využití screeningových metod pro určení botanického původu |
| 7L-03 | <i>T. Koláčková, D. Sumczynski</i>   | Stanovení kofeinu v čajích metodou HPLC  |

**Sekce 7 – Potravinářská a agrikulturní chemie**

## Postery

- |       |   |   |
|-------|---|---|
| 7P-01 | <i>M. Julinová, L. Vaňharová, M. Jurča, P. Duchek</i> | Biologický rozklad směsných materiálů na bázi termoplastifikovaného škrobu určených pro zemědělské aplikace |
|-------|---|---|

**Sekce 8 – Termická analýza**

## Přednášky

- |       |   |  |
|-------|---|--|
| 8L-01 | <i>J. Šesták</i>  | Thermal physics of nanostructured materials: thermodynamic (top-down) and quantum (bottom-up) issues                             |
| 8L-02 | <i>Z. Cibulková, A. Vykydalová, P. Šimon, T. Dubaj</i>                              | Antioxidant effects of keratin hydrolysates on polyethylene glycol studied by nonisothermal DSC                                  |
| 8L-03 | <i>A. Vykydalová, Z. Cibulková, T. Dubaj, P. Šimon</i>                              | Thermooxidative stability of aged coaxial cable insulation using non-isothermal DSC measurements                                 |
| 8L-04 | <i>P. Šimon, Z. Cibulková, T. Dubaj, A. Vykydalová</i>                              | Evaluation of thermooxidative stability of materials studied by thermoanalytical techniques                                      |
| 8L-05 | <i>A. Prnová, J. Valúchová, M. Parchovianský, A. Plško, R. Klement, D. Galusek</i>  | Study of thermal behaviour and crystallization kinetics in system Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -Re <sub>2</sub> O <sub>3</sub> |
| 8L-06 | <i>M. Motlochová, V. Slovák, E. Plížingrová, J. Šubrt</i>                           | Termický rozklad nanostrukturálních lithných, sodných a draselných metatitanátů  |
| 8L-07 | <i>L. Drozdová, B. Smetana, M. Machů, S. Zlá, L. Řeháčková, V. Novák, P. Váňová</i> | Calorimetric measurements of systems based on Fe-C-Cr  |
| 8L-08 | <i>G. Hotová, V. Slovák</i>   | Kinetické studium povrchové oxidace uhlíkatých materiálů   |
| 8L-09 | <i>V. Slovák, E. Kinnertová</i>   | Kinetika kondenzace resorcinolu s formaldehydem z neizotermních DSC měření   |
| 8L-10 | <i>P. Šulcová</i>   | Odborná skupina termické analýzy a její současné aktivity  |

**Sekce 9 – Polymery, biomateriály a biokompozity**

## Přednášky

9L-01	<i>L. Malinová, A. Jurásková, J. Macejková, J. Brožek</i>	Polymerace $\epsilon$ -kaprolaktonu iniciovaná sloučeninou na bázi biogenního kovu – bis( $\epsilon$ -kaprolaktamát) vápenatým
9L-02	<i>P. Šedová, P. Šilhár, R. Buffa, L. Kovářová, H. Vágnerová, J. Bednařík</i>	Zesítnění hyaluronanu – vliv hydrazidových linkerů na vlastnosti hydrogelu
9L-03	<i>P. Sysel, H. Kulhánková, K. Weinertová, D. Malý</i>	Polyimidové kopolymery pro přípravu membrán
9L-04	<i>M. Bakar, A. Bialkowska</i>	Environmentally friendly polyurethane to be used as a modifier for epoxy resin nanocomposites
9L-05	<i>E. Moravcová, R. Kalousková, L. Malinová, J. Brožek</i>	Nový pohled na měkčení polyvinylchloridu polykaprolaktonem
9L-06	<i>A. di Martino</i>	Self-assembly amphiphilic chitosan nanocarriers for oral co-delivery of hydrophobic and hydrophilic drugs

**Sekce 9 – Polymery, biomateriály a biokompozity**

## Postery

9P-01	<i>J. Elbl, J. Muselík, A. Franc, J. Gajdziok</i>	Optimalizace 3D tisku orodispergovatelých filmů přídatkem hydroxyethylcelulosy
9P-02	<i>B. Todorović Marković, M. Budimir, Z. Špitalsky, M. Mičušík, H. Švajdlenkova, Z. Marković</i>	Gamma ray assisted modification of transparent doped polyurethane films
9P-03	<i>M. Halaj*, J. Turjan, V. Cepák, J. Lukavský, P. Capek</i>	Microalgae as producers of extracellular biopolymers
9P-04	<i>A. Reznickova, M. Orendac, E. Cizmar, Z. Kolska, V. Svorcik</i>	Metallophthalocyanine (M= Cu, Fe) grafted polyethylene and its magnetic and surface properties
9P-05	<i>A. Galandáková, V. Tomšičková, A. Panáček, L. Joska, J. Gallo, J. Ulrichová</i>	Biokompatibilita kovových povrchů modifikovaných nanostrukturou a nanostříbrem
9P-06	<i>J. Franková, A.-M. M. Abdel-Latif, J. Jančář, J. Ulrichová</i>	Biocompatibility and toxicity of selected biomaterials

**Sekce 10 – Nanotechnologie a pokročilé materiály**

## Přednášky

10L-01	<i>Z. M. Markovic</i>	Antibacterial and photocatalytic properties of polyurethane doped with carbon quantum dots
10L-02	<i>Z. Kolská, M. Benkocká, T. Knapová, V. Neubertová, S. Lupínková, K. Kolářová, V. Švorčík</i>	Fyzikální, chemické a fyzikálně-chemické modifikace materiálů pro různé aplikace
10L-03	<i>Š. Hradilová, A. Panáček, J. Gallo</i>	Stříbrné nanočástice v boji proti infekcím kloubních náhrad
10L-04	<i>M. Pokorný, J. Klemeš, A. Kotzianová, Z. Mlynář, O. Židek, V. Velebný</i>	Nanostrukturované vrstvy přírodních polymerů deponovaných v silném elektrostatickém poli
10L-05	<i>P. Štenclová, Š. Stehlik, M. Varga, M. Ledinský, B. Rezek, A. Kromka</i>	Spektroskopické vlastnosti nanodiamantů

10L-06	<i>M. Procházka, S. Procházková, D. Zeleniakienė, A. Aniskevich, M. Omastová</i>	Preparation and characterisation of novel 2D materials – MXenes
10L-07	<i>M. Weiter, J. Krajčovič, A. Kovalenko, S. Střiteský, M. Vala</i>	Novel materials for organic electronics and photonics
10L-08	<i>P. Gemeiner, J. Kuliček, M. Mičušík, M. Hvojník, M. Hatala, M. Omastová, M. Mikula</i>	Vplyv dopantov na vlastnosti tlačených elektrod vodivého polyméru PEDOT:PSS pre hybridné solárne články
10L-09	<i>P. Urbánek, J. Ševčík, I. Kuřitka</i>	Mesoscale effect between nano- and sub-microscale
10L-10	<i>D. Skoda, P. Urbanek, J. Sevcik, L. Munster, P. Bazant, J. Antos, I. Kuritka</i>	Colloidal Co <sub>x</sub> Zn <sub>1-x</sub> O nanoparticles by microwave-assisted synthesis and their utilization in thin composite layers with MEH-PPV as an electroluminescent material for polymer light emitting diodes
10L-11	<i>L. Kvítek, P. Suchomel, L. Hochvaldová, A. Panáček, R. Prucek, R. Zbořil</i>	Katalytická aktivita nanočástic ušlechtilých kovů

## Sekce 10 – Nanotechnologie a pokročilé materiály

### Postery

10P-01	<i>V. Holišová, M. Natšínová, G. Kratošová, Z. Konvičková, Ž. Chromčáková</i>	Green nanogold-biosilica catalyst for air pollution treatment
10P-02	<i>G. S. Martynková, D. Klushina, E. Pazdziora, S. Pakseresht, G. Kratošová, S. Holešová</i>	Antimicrobial effect of hybrid polymeric nanocomposite film containing amine and biosilver
10P-03	<i>K. Čech Barabaszová, M. Bílý, M. Hundáková, E. Pazdziora</i>	Preparation and characterization of copper oxide nanoparticles and copper oxide /vermiculite nanocomposites
10P-04	<i>S. Holešová, M. Hundáková, E. Pazdziora</i>	Synthesis and antimicrobial activity of ciclopiroxolamine/clay nanocomposites
10P-05	<i>Z. Hajdúchová, P. Veteška, K. Tomanová, K. Randová, R. Plavec, L. Omaniková, J. Feranc, L. Bača, M. Janek</i>	Kompozitná struna vhodná na prípravu funkčných keramických materiálův pomocou 3D tlače
10P-06	<i>S. Procházková, M. Procházka, D. Zeleniakienė, A. Aniskevich, M. Omastová</i>	Preparation and characterisation of novel 2D materials – MXenes
10P-07	<i>J. Prekodravac, B. Vasiljevic, Z. Markovic, M. Budimir, Z. Spitalsky, M. Micusik, M. Danko, B. Todorovic-Markovic</i>	Swift synthesis of N-doped GQDs by microwave irradiation
10P-08	<i>D. Kepić, Z. Marković, D. Jovanović, M. Budimir, D. Kleut, D. Bajuk-Bogdanović, V. Pavlović, B. Todorović Marković</i>	Gold nanoparticles/exfoliated graphene hybrid obtained by gamma irradiation
10P-09	<i>P. Šuly, J. Mašlík, P. Krčmář, P. Urbánek, I. Kuřitka</i>	Utilization of dimension-less numbers for polymer inkjet printability evaluation
10P-10	<i>P. Filipczak, M. Kozanecki</i>	Analysis of water structure in dispersions of metal nanoparticles by Raman spectroscopy
10P-11	<i>J. Houdek, M. Vlček, J. Zelenka</i>	Syntéza nanočástic fosforečnanu zinečnatého a ověření jejich využití v antikoročních nátěrech
10P-12	<i>V. Bartůněk, T. Hlásek</i>	Vysokoteplotní supravodič YBCO, jeho modifikace a aplikace

- 10P-13 *M. Gargulák, M. Čížek, A. Surovíková, A. Vavřínek, D. Uhlířová, M. Dočekalová, B. Hosnedlová, J. Sochor, R. Kizek\** Rychlé teranostické přístupy pro léčbu bakteriálních infekcí u nádorových onemocnění

## Sekce 11 – Reologie

### Přednášky

- 11L-01 *V. Pěnkavová, J. Tihon, O. Wein* Faktory ovlivňující zdánlivý přístěnný skluz koloidních disperzí
- 11L-02 *Z. Starý* Simultánní elektricko-rheologická měření tavenin vodivých polymerních kompozitů
- 11L-03 *I. Fortelný, J. Jůza* Tokem indukovaná koalescence zohledňující přitažlivé síly
- 11L-04 *M. Zatloukal, W. Sambaer* Aplikovaná reologie pro charakterizaci polymerních nanovlákných struktur
- 11L-05 *J. Drábek, M. Zatloukal* Aplikovaná reologie pro produkci polymerních nanovláken pomocí technologie Melt blown
- 11L-06 *T. Barbořík, M. Zatloukal* Výzkum jevu Neck-in při výrobě plošných polymerních fólií
- 11L-07 *J. Musil, M. Zatloukal* Studium vírů při extruzi LDPE metodou tokem indukovaného dvojlomu

## Sekce 11 – Reologie

### Postery

- 11P-01 *J. Tihon, V. Pěnkavová* Teplosměnné kapaliny s využitím nanočástic
- 11P-02 *M. Nevoralová, Z. Starý* Reologické a elektrické vlastnosti polymerních směsí se selektivní lokalizací vodivých sazí
- 11P-03 *M. Dvořáčková, M. Zatloukal, M. Jurča* Vliv UV záření a přídavku zeolitu na tokové vlastnosti a biodegradabilitu poly(butylem-adipát-tereftalátu)

## Sekce 12 – Chemické vzdělávání a historie chemie

### Přednášky

- 12L-01 *J. Reguli* Několko příběhů z dějin fyzikální chemie
- 12L-02 *M. Krátký, J. Vinšová* Milníky chemoterapie tuberkulózy
- 12L-03 *H. Čtrnáctová* Vzdělávání učitelů chemie v ČR v souladu s požadavky nových akreditací NAÚ
- 12L-04 *K. Stejskalová* Jak motivovat žáky ke studiu přírodovědných oborů? Dejte jim problém, ať jej řeší
- 12L-05 *M. Zlámalová* Didaktické stáže pro studenty se zájmem o chemii: popularizace přírodních věd – od nápadu po realizaci
- 12L-06 *H. Kittel* Uplatnění projektového přístupu ve výuce technologických předmětů na VŠCHT Praha – od znalosti ke kompetenci
- 12L-07 *M. Golas, V. Slovák* Adsorpce jako demonstrační experimenty

**Sekce 12 – Chemické vzdělávání a historie chemie**

## Postery

- 12P-01      *K. Stejskalová*      Výstava příběhů kapky: Cesta Jaroslava Heyrovského za Nobelovou cenou žije již 10 let

**Sekce 13 – Průmyslová chemie**

## Přednášky

- 13L-01      *T. Weidlich, L. Dušek, B. Kamenická*      Problematika výroby pigmentového laku Pigment Yellow 183
- 13L-02      *J. Lederer*      Možnosti využití oxidu uhličitého jako suroviny pro průmyslové chemické výroby
- 13L-03      *J. Hájek*      Vodík – výzva pro budoucnost



---

**AUTORSKÝ REJSTŘÍK**

---

- Abdel-Latif A.-M. M. 9P-06  
Akrawi O. 5P-05  
Almonasy N. 2L-02  
Aniskevich A. 10L-06, 10P-06  
Antos J. 10L-10  
Arya K. 2P-13
- Bača L. 10P-05  
Bago Pilatová M. 2P-01  
Bajuk-Bogdanović D. 10P-08  
Bakar M. 9L-04  
Balogh R. 2L-10  
Baluchová S. 4M-01  
Baráth M. 2L-06  
Barbieriková Z. 4P-16  
Barbořík T. 11L-06  
Barek J. 3P-11, 4M-01, 4M-05  
Baron D. 3L-09, 3L-10  
Bartík K. 5P-05  
Bartůněk V. 1P-09, 10P-12  
Bazant P. 10L-10  
Bečka M. 2P-10  
Bednařík J. 9L-02  
Beier P. 2L-01  
Bella M. 2P-04  
Benešová L. 3P-19  
Benická S. 2L-13, 7L-01  
Benkocká M. 10L-02  
Béres T. 3S-01, 7L-01  
Białkowska A. 9L-04  
Bilewicz R. 4L-11  
Bilous M. 3P-13  
Bílý M. 10P-03  
Bláhová L. 3L-12, 6P-05, 6P-06  
Blastik Z. 2L-01  
Blažková K. 3P-05  
Bleha R. 7L-02  
Boča R. 1P-01  
Bodnárová V. 2P-03  
Bondarev D. 4P-09  
Bosáková Z. 3S-05  
Bouřa E. 3S-10  
Brett C. M. A. 4M-01  
Brindza J. 7L-02  
Brožek J. 9L-01, 9L-05  
Brulíková L. 2L-09, 2P-12  
Březinová A. 3P-05  
Buděšinský M. 5L-07  
Budimir M. 9P-02, 10P-07, 10P-08  
Buffa R. 9L-02  
Bureš F. 2L-04, 2P-15
- Capek P. 9P-03  
Čavar Zeljković S. 7L-01  
Cepák V. 9P-03  
Cibulková Z. 8L-02, 8L-03, 8L-04
- Cidlina A. 5L-03  
Cizmar E. 9P-04
- Čabala R. 3P-10, 3S-05  
Čablová A. 5L-06  
Čapek J. 6L-03  
Čech Barabaszová K. 10P-03  
Čermák J. 1P-07, 3P-16  
Černík M. 6P-03  
Černochová L. 7L-01  
Čížek M. 10P-13  
Čopíková J. 7L-02  
Čtrnáctová H. 12L-03
- Daňhel A. 3P-09, 4L-07, 4L-10, 4M-02, 4P-07  
Danko M. 2L-10, 10P-07  
Daňo M. 3P-13, 3P-15  
Darvasiová D. 4P-16  
Dastychová L. 5L-06  
Davoodabadi R. 2P-16  
Dejmková H. 3L-04  
Dendisová M. 1P-09, 3S-08  
Dey S. 4P-06  
di Martino A. 9L-06  
Dobrovodský D. 4M-02  
Dočekalová M. 3L-03, 3P-17, 3P-18, 10P-13  
Donkeng Dazie J. 4P-05  
Dosedělová V. 3S-01, 7L-01  
Drábek J. 11L-05  
Drabina P. 2L-08  
Dreslerová D. 3P-15  
Drozdová E. 4L-05, 8L-07  
Držík M. 4P-09  
Dubaj T. 8L-02, 8L-03, 8L-04  
Duchek P. 7P-01  
Dulanská S. 6L-04  
Dušek L. 13L-01  
Dvořáčková M. 11P-03  
Dvořák B. 3P-08  
Dvořák M. 2L-02  
Dvořáková P. 3P-05  
Dzubak P. 2L-05
- Eckstein-Andicsová A. 2L-10  
Eibel A. 4P-16  
Elbert T. 2P-18  
Elbl J. 9P-01  
Elečko J. 2P-05  
Erben J. 3S-04
- Fabian M. 2P-07  
Farka Z. 3S-02  
Fenclová K. 3P-13  
Feranc J. 10P-05
- Filipczak P. 10P-10  
Fischer J. 3L-04, 3P-11  
Fojta M. 4L-10, 4M-03  
Fortelný I. 11L-03  
Franc A. 9P-01  
Franková J. 9P-06
- Gajdziok J. 9P-01  
Gál M. 4L-03  
Galandáková A. 9P-05  
Gallo J. 9P-05, 10L-03  
Galusek D. 8L-05  
Ganeshpurkar A. 2P-14  
Gargulák M. 3L-03, 10P-13  
Gavalierová K. 4L-04  
Gebhardtová D. 3L-08  
Gemeiner P. 10L-08  
Gergela D. 2P-09  
Gescheidt G. 4P-16  
Głowacki R. 3L-07  
Golas M. 12L-07  
Gomez-Rómero P. 4L-04  
Gonda J. 2P-01, 2P-02, 2P-03, 2P-05, 2P-06, 2P-07  
González Martín J. 3L-04  
Gorris H. H. 3S-02  
Grinco M. 1L-01  
Guselnikova O. 3S-03  
Gutti G. 2P-13  
Gyepes R. 1P-04
- Haizer L. 4P-09  
Hajdúchová Z. 10P-05  
Hájek J. 13L-03  
Hajšlová J. PL-02  
Háková M. 3S-04  
Halaj M. 9P-03  
Handl J. 6L-03  
Hatala M. 10L-08  
Havlíková M. 3S-05  
Havran L. 4L-10  
Havranová P. 4L-10  
Hejduková M. 4L-10  
Hermann P. 5L-04, 5L-09  
Hermanová M. 4M-03  
Herynková M. 4M-04  
Hirková S. 2P-03  
Hirsch J. 2L-06  
Hlásek T. 10P-12  
Hlaváč J. 2L-11, 2L-13  
Hlaváček A. 3S-02  
Hodon J. 2L-05  
Hochvaldová L. 10L-11  
Holčapková P. 3S-06  
Holešová S. 10P-02, 10P-04  
Holišová V. 10P-01

- Hosnedlová B. 10P-13  
 Hotová G. 3L-12, 8L-08  
 Houdek J. 10P-11  
 Hovancová J. 3L-06, 4P-01  
 Hradilová Š. 10L-03  
 Hrbek V. PL-02  
 Hroboňová K. 3P-07  
 Hudecová D. 1P-04  
 Hundáková M. 10P-03, 10P-04  
 Hurajová A. 3S-06  
 Hůrková K. PL-02  
 Hvojník M. 10L-08  
  
 Chalupská D. 3S-10  
 Chocholouš P. 3P-06  
 Chocholoušová Havlíková L. 3S-04  
 Chromčáková Ž. 10P-01  
 Chvojka J. 3S-04  
 Chyba J. 5L-08  
 Chýlková J. 3L-05  
  
 Iakovleva A. 1L-01  
 Imrich J. 2P-10  
  
 Jain V. K. 4P-06  
 Jakubčínová J. 2L-06  
 Janata J. PL-01  
 Jančář J. 9P-06  
 Jané E. 4P-09  
 Janek M. 10P-05  
 Janíková L. 3L-05  
 Jankovský O. 1P-09  
 Janovská L. 2L-09, 2P-12  
 Jansa J. 2P-17  
 Jansson B. 3S-09  
 Jastřembská K. 6L-02, 6P-04  
 Jelínková K. 5L-11  
 Jerga R. 4M-07  
 Jerigová M. 4P-08, 4P-09, 4P-10, 4P-11  
 Jindřich J. 5L-10  
 Jiráňková H. 6L-02, 6P-04  
 John J. 3P-13, 3P-15  
 Joska L. 9P-05  
 Josypčuk B. 4L-12  
 Jovanović D. 10P-08  
 Julinová M. 7P-01  
 Jurásková A. 9L-01  
 Jurča M. 7P-01, 11P-03  
 Jurček O. 5L-12  
 Jurček P. 5L-12, 5P-05  
 Juřica T. 6P-05, 6P-06  
 Jůza J. 11L-03  
  
 Kafka S. 2L-07  
 Kalachyova Ye. 3S-03  
 Kalousková R. 9L-05  
 Kamenická B. 13L-01  
 Kandrnálová M. 5P-03  
 Kantnerová K. 4P-05  
 Karásková A. 6L-01, 6P-01  
 Kašpárková V. 5P-01  
  
 Kaule P. 1P-07  
 Kepić D. 10P-08  
 Kepinska M. 3L-03  
 Khodadadi A. 2P-16  
 Kholová A. 3P-07  
 Khvalbota L. 3S-07  
 Kimmel R. 2L-07  
 Kinart Z. 4L-02  
 Kinnertová E. 8L-09  
 Kittel H. 12L-06  
 Kizek R. 3L-03, 3P-17, 3P-18, 10P-13  
 Klapetek J. 3P-16  
 Klement R. 8L-05  
 Klementová M. 1L-02  
 Klemeš J. 3L-11, 10L-04  
 Kleut D. 10P-08  
 Klíma J. 4L-06  
 Klouda J. 3P-19, 4M-05  
 Klushina D. 10P-02  
 Knapová T. 10L-02  
 Knedlík T. 3P-05  
 Knor M. 5L-08  
 Koláčková T. 7L-03  
 Koláčná L. 4P-04  
 Kolářová K. 10L-02  
 Kollarova K. 6P-07  
 Kolničenko D. 6P-05, 6P-06  
 Kolska Z. 9P-04, 10L-02  
 Koman M. 1P-03  
 Konheřt M. 4P-14  
 Konvalinka J. 3P-05  
 Konvičková Z. 10P-01  
 Košm M. 2P-04  
 Kosek V. PL-02  
 Kostelník A. 3P-01  
 Kostka L. 3P-05  
 Košmrlj J. 2L-07  
 Kotzianová A. 3L-11, 10L-04  
 Kovačević J. 5P-01  
 Kovalenko A. 10L-07  
 Kovářová L. 9L-02  
 Kozanecki M. 10P-10  
 Kozma E. 2L-10  
 Kožíšek J. 4P-15  
 Kožíšková J. 4P-15  
 Krajčovicova S. 2L-05  
 Krajčovič J. 10L-07  
 Král M. 3S-08  
 Král V. 3P-03, 3P-04  
 Králová P. 2L-03  
 Krátký M. 2P-08, 12L-02  
 Kratochvílová M. 5L-02  
 Kratošová G. 10P-01, 10P-02  
 Kraus T. 5L-07  
 Krčmář P. 10P-09  
 Kromka A. 10L-05  
 Kubiček V. 5L-04  
 Kučera J. 3P-15  
 Kuchár J. 1P-04, 1P-05  
 Kuchtanin V. 1P-06  
 Kulhánek J. 2P-11  
  
 Kulhánková H. 9L-03  
 Kuliček J. 10L-08  
 Kulpová K. 4P-11  
 Kumar A. 2P-13  
 Kumar D. 2P-14  
 Kumar Singh S. 2P-13, 2P-14  
 Kummerová M. 6P-02  
 Kupčík J. 1L-02  
 Kuřitka I. 10L-09, 10L-10, 10P-09  
 Květoň F. 3S-09, 4L-03  
 Kvítek L. 10L-11  
  
 Lacina K. 4P-14  
 Lakatoš B. 1P-04  
 Langmaier J. 4L-12  
 Lederer J. 13L-02  
 Ledinský M. 10L-05  
 Lemr K. PL-03  
 Lhoták P. 5L-01  
 Lhotka M. 3L-12  
 Lhotská I. 3P-07  
 Ligmajer F. 3P-09, 4L-07, 4P-07  
 Liska A. 4P-06  
 Liška A. 4L-08  
 Liskova D. 6P-07  
 Lízal T. 5P-02, 5P-05  
 Loghina L. 1L-01  
 Lochman L. 5L-03  
 Lorenc D. 4P-08, 4P-10, 4P-12  
 Lubal P. 5L-04, 5L-09  
 Ludvík J. 4L-08, 4P-03, 4P-04, 4P-05, 4P-06, 4P-13  
 Lukavský J. 9P-03  
 Lupinková S. 10L-02  
 Lyčka A. 2L-12, 2P-17  
 Lyutakov O. 3S-03  
  
 Macejková J. 9L-01  
 Machníková R. 2L-09  
 Machů M. 8L-07  
 Machyňáková A. 3P-07  
 Maier V. 3P-12  
 Májerková M. 3L-02  
 Majtnerová P. 6L-03  
 Maliarová M. 3L-08  
 Malinová L. 9L-01, 9L-05  
 Malovikova A. 6P-07  
 Malý D. 9L-03  
 Marek R. 5L-08, 5L-12  
 Markos A. 2L-01  
 Marković Z. 9P-02, 10P-07, 10P-08  
 Markovic Z. M. 10L-01  
 Maroszová J. 1P-03  
 Martín Miján P. 3L-04  
 Martinková M. 2P-01, 2P-03, 2P-05, 2P-07  
 Martinková P. 3P-01, 4M-04  
 Martynková G. S. 10P-02  
 Marvan P. 4M-06  
 Mašlík J. 10P-09

- Matějka P. 3S-08  
 Matejová S. 1P-02  
 Máteš E. 6L-04  
 Matysik F.-M. 4M-05  
 Mazúr M. 1P-02  
 Mejdrová I. 3S-10  
 Melníková E. 4L-03  
 Mickert M. J. 3S-02  
 Mičušík M. 9P-02, 10P-07, 10L-08  
 Michl M. 2L-02  
 Mikula M. 10L-08  
 Mikulášek P. 6L-02, 6P-04  
 Míkušová K. 2P-08  
 Milata V. PL-06  
 Miličević D. 2L-07  
 Mitríková T. 2P-03  
 Mlynář Z. 10L-04  
 Mocilac P. 5L-07  
 Modi K. 4P-06  
 Moncof J. 1L-03, 1P-02, 1P-03, 1P-06, 1P-08, 2P-04, 4P-17  
 Moravcová E. 9L-05  
 Motlochová M. 1L-02, 8L-06  
 Motornov V. 2L-01  
 Mudroňová D. 1P-04  
 Mucha M. 6P-05, 6P-06  
 Müllerová V. 4M-07  
 Munster L. 10L-10  
 Munzarová P. 5L-08  
 Muselík J. 9P-01  
 Musil J. 11L-07  
 Musil K. 3P-10  
  
 Natšínová M. 10P-01  
 Navrátil T. 4L-12  
 Navrátilová Z. 6P-05, 6P-06  
 Nazaruk E. 4L-11  
 Nečas M. 5L-02  
 Němec M. 3P-13, 3P-14, 3P-15  
 Nencka R. 2L-14, 3S-10  
 Nepraš M. 2L-02  
 Neshchadin D. 4P-16  
 Neubertová V. 10L-02  
 Nevoralová M. 11P-02  
 Nonappa 5L-12  
 Noskovičová E. 4P-10  
 Novák D. 3L-02, 4L-11, 4M-08  
 Novák V. 4L-05, 8L-07  
 Nováková V. 5L-03  
 Novotný J. 5L-08  
 Novotný L. 6L-01, 6P-01  
 Okorochenkova Ya. 2L-13  
 Omaníková L. 10P-05  
 Omastová M. 10L-06, 10L-08, 10P-06  
 Oravec M. 6P-02  
 Orendac M. 9P-04  
 Oriňak A. 3L-06, 4P-01, 4P-02  
 Oriňaková R. 3L-06, 4P-01, 4P-02  
 Orság P. 4M-02, 4M-03  
 Otyepka M. PL-04  
  
 Pakseresht S. 10P-02  
 Palatinus L. 1L-02  
 Pálka K. 1L-01  
 Panáček A. 9P-05, 10L-03, 10L-11  
 Panchal U. 4P-06  
 Pantůčková P. 3L-03, 3P-17, 3P-18  
 Parchovianský M. 8L-05  
 Parma P. 6P-03  
 Pařík P. 2L-04  
 Paulíková H. 1P-04  
 Pavílek B. 4P-15  
 Pavlík J. 1L-03  
 Pavlovič V. 10P-08  
 Pazdziora E. 10P-02, 10P-03, 10P-04  
 Pechancová R. 3L-09  
 Pěnkavová V. 11L-01, 11P-01  
 Pešová K. 6P-05, 6P-06  
 Petr J. 3L-09, 3L-10  
 Petruš O. 4P-02  
 Piechocka J. 3L-07  
 Pinkas J. 4P-13  
 Plavec R. 10P-05  
 Plízingrová E. 1L-02, 8L-06  
 Pliško A. 8L-05  
 Pluháček T. 3L-09, 3L-10  
 Podlesný J. 2P-15  
 Pohanka M. 3P-01  
 Pokorný M. 3L-11, 10L-04  
 Polák P. 4P-04  
 Porubský M. 2L-11, 2L-13  
 Pospíšil T. 5P-01  
 Postinikov P. 3S-03  
 Prášek T. 3P-13, 3P-14  
 Prekodravac J. 10P-07  
 Prnová A. 8L-05  
 Procházková S. 10L-06, 10P-06  
 Prucek R. 10L-11  
 Prucková Z. 5P-01, 5L-06, 5L-11  
 Puchoňová M. 1L-03, 1P-02, 1P-03, 1P-06  
 Pulkrabová J. PL-02  
  
 Rach V. 3P-04  
 Rais R. 2L-14  
 Randová K. 10P-05  
 Rapta P. 4L-09  
 Reguli J. 12L-01  
 Reichová V. 5L-09  
 Rendošová M. 1P-04  
 Reza Karimi A. 2P-16  
 Rezek B. 10L-05  
 Rezková H. 3P-08  
 Reznickova A. 9P-04  
 Rissanen K. 5L-12  
 Rojas C. 2L-14  
 Roman D. 2P-03  
 Roncak R. 2P-06  
 Rouchal M. 2P-09, 5L-06, 5L-11, 5P-04  
 Roušar T. 6L-03  
  
 Rueda D. 4L-04  
 Ruttkey-Nedecký B. 3L-03  
  
 Řeháčková L. 4L-05, 8L-07  
 Řezanka P. 3P-04  
 Řezníček T. 2P-17  
  
 Sabolová D. 1P-04  
 Sambaer W. 11L-04  
 Samořová E. 1P-05  
 Sarek J. 2L-05  
 Sedlařík V. 3P-06  
 Sevcik J. 10L-10  
 Shevtsova T. 7L-02  
 Schmallegger M. 4P-16  
 Schwarzová K. 3L-04, 3P-19  
 Schwarzová-Pecková K. 4M-01, 4M-05  
 Skácelová L. 3P-12  
 Skaličková S. 3L-03  
 Skládal P. 3S-02  
 Sklenářová H. 3P-06  
 Skoda D. 10L-10  
 Skopalová J. 4M-07  
 Skrbek K. 1P-09  
 Slavík P. 5L-01  
 Slepčíková P. 2P-10  
 Slezíaková K. 5P-05  
 Slovák V. 3L-12, 8L-06, 8L-08, 8L-09, 12L-07  
 Slusher B. 2L-14  
 Slušná L. 4P-09, 4P-10  
 Smetana B. 4L-05, 8L-07  
 Sochor J. 10P-13  
 Sojka M. 5L-02  
 Sokol J. 3L-08  
 Solich P. 3P-06  
 Soural M. 2L-05  
 Spišáková M. 2P-04  
 Spitalsky Z. 10P-07  
 Sriram D. 2P-13  
 Stankova J. 2L-05  
 Staňková M. 3L-03, 3P-17, 3P-18  
 Starý Z. 11L-02, 11P-02  
 Stavělková H. 3S-01, 7L-01  
 Stefan V. 3L-12  
 Stehlík Š. 10L-05  
 Steier P. 3P-14  
 Stejskalová K. 12L-04, 12P-01  
 Stolaříková J. 2P-08  
 Straková Fedorková A. 4L-04  
 Stříteský S. 10L-07  
 Suchomel P. 10L-11  
 Sumczynski D. 7L-03  
 Surmová H. 5P-04  
 Surovíková A. 10P-13  
 Světlík I. 3P-15  
 Svoboda J. 4P-13  
 Svobodová K. 6P-02  
 Sýkora D. 3P-03  
 Synytsya A. 7L-02  
 Sysel P. 9L-03

- Szatmáry L. 1L-02  
Szocs V. 4P-09  
Szöcs V. 4P-08
- Šácha P. 3P-05  
Šála M. 2L-14  
Šalitroš I. 1P-08  
Šatínský D. 3P-07, 3S-04  
Šebest P. 3P-09  
Šebestová A. 3L-09, 3L-10  
Šedová P. 9L-02  
Šelešovská R. 3L-04, 3L-05, 4M-04  
Šenkárová L. 3P-02  
Šesták J. 8L-01  
Šestáková I. 4L-12  
Ševčík J. 10L-09  
Ševčíková R. 5L-04  
Šícha V. 1P-07, 3P-16  
Šilhár P. 9L-02  
Šimková L. 4P-13  
Šimková L. 4P-03  
Šimon P. 2P-11, 3P-05, 8L-02, 8L-03, 8L-04  
Šimunková M. 4P-17  
Šindelář V. 5L-05, 5P-02, 5P-03, 5P-05  
Široký M. 2P-02  
Šišoláková I. 3L-06, 4P-01  
Šlachtová V. 2P-12  
Šlang S. 1L-01  
Špaček J. 4L-10, 4M-09  
Špaková Raschmanová J. 2P-01  
Špánik I. 3S-07  
Špitálský Z. 9P-02  
Štenclová P. 10L-05  
Štěpánek F. PL-05  
Štofániková M. 6L-04  
Študentová S. 3L-12  
Šubr V. 3P-05  
Šubrt J. 1L-02, 8L-06  
Šulcová P. 8L-10  
Šuly P. 10P-09  
Švajdlenkova H. 9P-02  
Švajdová Z. 1P-08  
Švecová M. 1P-09  
Švecová P. 3L-10  
Švidrnoch M. 3P-12  
Švorčík V. 3S-03, 9P-04, 10L-02
- Švorec J. 1P-08
- Tarkowski P. 3S-01, 7L-01  
Tatar A. 3P-03, 5L-07  
Thomas A. 2L-14  
Tihon J. 11L-01, 11P-01  
Tkáč J. 3S-09, 4L-03  
Tobrman T. 4P-04  
Todorović Marković B. 9P-02, 10P-07, 10P-08  
Tomanová K. 10P-05  
Tomčíková K. 4L-03  
Tomé L. I. N. 4M-01  
Tomeček J. 5L-06  
Tomšíčková V. 9P-05  
Topinková Z. 3P-08  
Tóthová Z. 3P-17, 3P-18  
Trnková L. 4L-01, 4P-14  
Tříška J. 6P-02  
Turjan J. 9P-03  
Tvaroška I. 2L-06  
Tvrdonova M. 2P-06
- Uhlířová D. 3L-03, 3P-17, 3P-18, 10P-13  
Ulrichová J. 9P-05, 9P-06  
Urban M. 2L-05  
Urbánek P. 10L-09, 10L-10, 10P-09
- Vacek J. 3L-01, 3L-02, 4L-11  
Vágnerová H. 9L-02  
Vaisová J. 1P-03  
Vala M. 10L-07  
Valeš R. 3P-08  
Valigura D. 1L-03  
Valkenier H. 5P-05  
Valko M. 4P-17  
Valúchová J. 8L-05  
Vaněk J. 5L-04  
Vaňharová L. 7P-01  
Váňová P. 8L-07  
Varga J. 2L-04  
Varga M. 10L-05  
Vargová Z. 1P-04  
Vasiljevic B. 10P-07  
Vatehova Z. 6P-07  
Vavřiník A. 10P-13
- Vázquez J. 5L-05  
Végh D. 4P-15  
Velebný V. 3L-11, 10L-04  
Velič D. 4P-08, 4P-09, 4P-10, 4P-11, 4P-12  
Veteška P. 10P-05  
Věžník J. 4P-14  
Vidláková P. 3P-09  
Vícha J. 5L-06  
Vícha R. 2P-09, 5L-06, 5L-11, 5P-01, 5P-04  
Vilková M. 1P-04  
Vinšová J. 2P-08, 12L-02  
Viskupičová J. 3L-02  
Vlček M. 1L-01, 10P-11  
Vojteková T. 4P-12  
Votrová S. 2L-01  
Vranovičová B. 1P-01  
Vykydalová A. 8L-02, 8L-03, 8L-04
- Weidlich T. 13L-01  
Wein O. 11L-01  
Weinertová K. 9L-03  
Weiter M. 10L-07  
Wyszczelska-Rokiel M. 3L-07
- Yershova P. 3P-19
- Zalibera M. 4P-16  
Záruba K. 3P-03  
Zárybnická A. 3P-19  
Zatloukal F. 2P-09  
Zatloukal M. 11L-04, 11L-05, 11L-06, 11L-07, 11P-03  
Zatloukalová M. 3L-02, 4L-11  
Zawada Z. 5L-07  
Zbořil R. PL-04, 10L-11  
Zeleniakienė D. 10L-06, 10P-06  
Zelenka J. 2P-11, 10P-11  
Zelenka T. 3L-12  
Zezulka Š. 6P-02  
Zhang X. 3P-14  
Zimčík P. 5L-03  
Zlá S. 8L-07  
Zlámalová M. 12L-05
- Židek O. 3L-11, 10L-04

**Poznámky:**



# SHOW US WHAT YOU GOT!

**VYHRAJ  
100.000,- Kč**

**A VÝLET  
DO ŠVÝ-  
CARSKA!**



**Děláš výzkum v oblasti chemie?**

**ZÚČASTNI SE THE METROM YOUNG CHEMIST AWARD!**

- Přihlaš svoji vědeckou práci
- Soutěž s kolegy z celého světa
- Vyhraj finanční odměnu v hotovosti 100.000,- Kč a výlet do centrály firmy Metrohm ve Švýcarsku

**PŘIHLAŠ SE JIŽ DNES**

[www.youngchemistaward.metrohm.cz](http://www.youngchemistaward.metrohm.cz)

**75**  
YEARS

 **Metrohm**





**VYTRVÁME TAM KDE OSTATNÍ SELHÁVAJÍ**

VÝZVY JSOU NAŠÍ MOTIVACÍ.

INSPIRUJÍ NÁS POSOUVAT HRANICE

MOŽNÉHO. KAŽDÝ DEN.


Great people | Great instruments





# LINO<sup>®</sup>

# LINO Fatra podlaha s tradicí



LINO Fatra – elegantní na pohled,  
vynikající užité vlastnosti uvnitř.  
Homogenní podlahoviny  
Fatra LINO ELEKTROSTATIK  
a DYNAMIK najdou své uplatnění  
především v laboratořích  
a vývojových centrech.

Požadavků, které musí splňovat podlahovina do laboratoří, čekáren a nemocnic, je celá řada. Na všechny takové detailně myslela Fatra a.s. při tvorbě kolekce ELEKTROSTATIK/DYNAMIK a Novofloor Extra Statik SD. Její PVC podlahy vynikají svými elektrostatickými vodivými a antistatickými vlastnostmi a splňují vysoké nároky na odolnost, zátěž a opotřebení. Nechybí ani snadná údržba a moderní design. V laboratořích dokážou PVC podlahy LINO Fatra zamezit poškození při chemickém působení i vlivu kolečkových židlí.

## PVC S ELEKTRICKÝMI VLASTNOSTMI

Podlahoviny ELEKTROSTATIK a DYNAMIK najdou své uplatnění v místech s nebezpečím výbuchu, laboratořích či ve zdravotnictví, nebo naopak v prostorách s požadavkem na antistatické provedení podlah, např. v počítačových sálech, v místech pro výrobu elektroniky, v oblasti komunikací atd.

## Výhody produktu

- Atraktivní vzhled
- Vysoká odolnost k opotřebení
- Vysoká chemická odolnost povrchu
- Vhodnost pro podlahové vytápění
- Dobrý teplotní vjem
- Snadná údržba
- Odolnost proti oděru
- Pokládání na pružný podklad
- Vzájemná kombinovatelnost dezénů
- Ekonomická výhodnost
- Antialergické prostředí
- Certifikovaná kvalita garance až 10 let



**Fatra, a.s.**  
třída Tomáše Bati 1541  
763 61 Napajedla  
Czech Republic



tel.: + 420 577 501 111  
e-mail: miroslav.obdrzalek@fatra.cz



[www.fatra.cz](http://www.fatra.cz)  
[www.fatrafloor.cz](http://www.fatrafloor.cz)



INSTITUT  
PRO TESTOVÁNÍ  
A CERTIFIKACI, a.s.

# LABORATOŘ ANALYTICKÉ CHEMIE

**NABÍZÍ SLUŽBY:**

## MATERIÁLOVÉ ANALÝZY

- kvalitativní analýzy (charakterizace složení, základní aditivace) polymerních materiálů za použití nejmodernějších chromatografických metod GC-MS, LC-MS, LS MS/MS, GC-TCD, GC-FID
- kvantitativní stanovení prvků metodami ICP
- mikroanalýza elektronovou rastrovací mikroskopií (EDS detektor)
- spektrální analýza XRF, FTIR, UV-US

## HODNOCENÍ OBALŮ

- zkoušení obalových materiálů dle zákona č. 477/2001 Sb. a Směrnice Evropského Parlamentu a Rady 94/62/EC, článek 11
- hodnocení obalů určených pro kontakt s potravinami
- hodnocení obalů pro léčiva dle požadavků Českého a Evropského lékopisu (European Pharmacopoeia)

## HODNOCENÍ VÝROBKŮ A MATERIÁLŮ VE STYKU S PITNOU VODOU A POTRAVINAMI

## DEFEKTOSKOPIE

- analýzy defektů v materiálech pomocí kombinace různých analytických metod (spektrálních i chromatografických)

## HODNOCENÍ VÝROBKŮ PRO DĚTI DO 3 LET

- zkoušení výrobků pro děti do 3 let dle Vyhlášky MZ ČR 38/2001
- zkoušení hraček podle požadavků Směrnice 2009/48/EC

## REACH

- stanovení obsahu vybraných nebezpečných látek

## ROHS

- zkoušení nebezpeč. látek v elektrických, elektronických výrobcích

## SENZORICKÉ ZKOUŠKY

- senzorické hodnocení výrobků určených pro kontakt s potravinami a vodou
- stanovení stupně a povahy pachu dle požadavků norem automobilových koncernů

## EMISNÍ ZKOUŠKY (emisní charakteristiky materiálů)

- stanovení emise formaldehydu a dalších aldehydů a ketonů v různých materiálech zejména dle požadavků automobilových koncernů
- stanovení volných monomerů a rozpouštědel v polymerních materiálech: např. 1,3 – butadien, styren, tetrahydrofuran, akrylonitril ...
- fogging, senzorické zkoušky, emise organického uhlíku

## **PŘÍSTROJOVÉ VYBAVENÍ:**

- ✓ plynová chromatografie s detekcí FID s MS a MS/MS detekcí a MS, kapalinová chromatografie s TCD UV-VIS, fluorescenční, RI, vodivostní a MS detekcí
- ✓ spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem, s optickou detekcí (ICP-OES) a hmotnostní detekcí (ICP-MS)
- ✓ rentgenová fluorescenční spektrometrie
- ✓ infračervená spektroskopie a infračervená mikroskopie
- ✓ UV-VIS spektroskopie
- ✓ gravimetrie, odměrná analýza
- ✓ mikroskopie, obrazová analýza

**WWW.ITCZLIN.CZ**

**☎ 577 601 238**

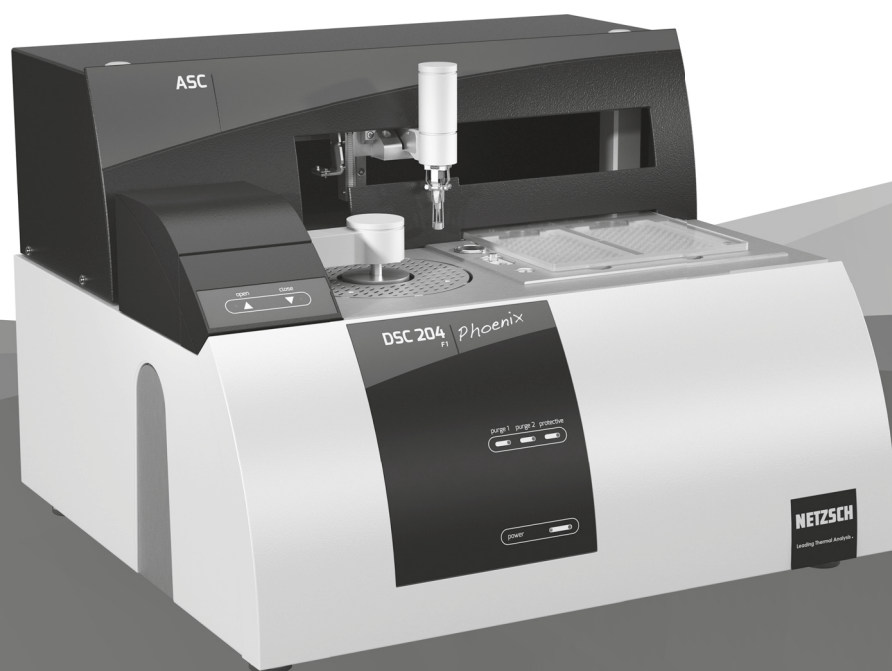




# Hmota o sobě prozradí hodně

Řešení firmy NETZSCH Vám pomůže naučit se jejímu jazyku

Společnost NETZSCH je po celém světě uznávána jako technický lídr v tepelné charakterizaci materiálu. Více než 50 let zkušeností, aplikační zázemí, široký sortiment přístrojů, pokrývající rozsah teplot  $-260\text{ }^{\circ}\text{C}$  až  $2800\text{ }^{\circ}\text{C}$ , který je stále vyvíjen a zdokonalován, a komplexní nabídka služeb zajišťují, že naše řešení nejen splní vaše požadavky, ale předčí veškerá vaše očekávání.



## NETZSCH

NETZSCH Česká republika s.r.o.  
Ringhofferova 115/1  
155 21 Praha 5  
Česká republika  
Tel.: +420 234 252 277  
[www.netzsch.com](http://www.netzsch.com)



# pragolab



[www.pragolab.cz](http://www.pragolab.cz)



**OBSAH**

Úvodník	326
Plenární přednášky	327
Sekce 1 – přednášky	332
Sekce 1 – postery	334
Sekce 2 – přednášky	339
Sekce 2 – postery	347
Sekce 3 – přednášky	358
Sekce 3 – Cena Shimadzu	364
Sekce 3 – postery	369
Sekce 4 – přednášky	379
Sekce 4 – Cena Metrohm	385
Sekce 4 – postery	390
Sekce 5 – přednášky	399
Sekce 5 – postery	406
Sekce 6 – přednášky	409
Sekce 6 – postery	412
Sekce 7 – přednášky	416
Sekce 7 – postery	418
Sekce 8 – přednášky	419
Sekce 9 – přednášky	425
Sekce 9 – postery	429
Sekce 10 – přednášky	433
Sekce 10 – postery	441
Sekce 11 – přednášky	448
Sekce 11 – postery	452
Sekce 12 – přednášky	454
Sekce 12 – postery	458
Sekce 13 – přednášky	459
Seznam příspěvků	461
Autorský rejstřík	474

**CONTENTS**

Editorial	326
Plenary Lectures	327
Section 1 – Lectures	332
Section 1 – Posters	334
Section 2 – Lectures	339
Section 2 – Posters	347
Section 3 – Lectures	358
Section 3 – Shimadzu Prize	364
Section 3 – Posters	369
Section 4 – Lectures	379
Section 4 – Metrohm Prize	385
Section 4 – Posters	390
Section 5 – Lectures	399
Section 5 – Posters	406
Section 6 – Lectures	409
Section 6 – Posters	412
Section 7 – Lectures	416
Section 7 – Posters	418
Section 8 – Lectures	419
Section 9 – Lectures	425
Section 9 – Posters	429
Section 10 – Lectures	433
Section 10 – Posters	441
Section 11 – Lectures	448
Section 11 – Posters	452
Section 12 – Lectures	454
Section 12 – Posters	458
Section 13 – Lectures	459
Contents	461
Author's Index	474

**CZECH CHEMICAL SOCIETY SYMPOSIUM SERIES • ročník/volume 16 (2018), čís./no. 5 • ISSN 2336-7202 (Print), ISSN 2336-7210 (On-line) • ISSN 2336-7229 (CD-ROM) • evidenční číslo MK ČR E 21999 • Vydává Česká společnost chemická jako časopis Asociace českých chemických společností ve spolupráci s VŠCHT Praha, s ČSPCH a ÚOCHB AV ČR za finanční podpory Rady vědeckých společností ČR, Akademie věd ČR, Nadace Český literární fond a kolektivních členů ČSCH • IČO 444715 • Published by the Czech Chemical Society • VEDOUcí REDAKTOR/EDITOR-IN-CHIEF: B. Kratochvíl • REDAKTORŮ/ EDITORS: J. Barek, Z. Bělohav, E. Benešová, P. Drašar, P. Holý, P. Chuchvalec, Z. Kolská, J. Masák, J. Podešva, V. Vyskočil; Webové stránky: P. Zámotný • TECHNICKÁ REDAKTORKA/EDITORIAL ASSISTANT: R. Rápková • Redakce čísla (ISSUE EDITOR) S. Kafka, M. Rouchal, V. Slovák, R. Vícha • ADRESA PRO ZASÍLÁNÍ PŘÍSPĚVKŮ/MANUSCRIPTS IN CZECH, SLOVAK OR ENGLISH CAN BE SENT TO: Chemické listy, Novotného lávka 5, 116 68 Praha 1; tel./phone +420 221 082 370, +420 222 220 184, e-mail: chem.listy@csvts.cz • PLNÁ VERZE NA INTERNETU/FULL VERSION ON URL: <http://www.ccsss.cz> • TISK: Garamon s.r.o., Wonkova 432, 500 02 Hradec Králové • SAZBA, ZLOM: ČSCH, Chemické listy • Copyright © 2018 Czech Chemical Society Symposium Series/Česká společnost chemická • Cena výtisku 180 Kč • This journal has been registered with the Copyright Clearance Center, 2322 Rosewood Drive, Danvers, MA 01923, USA, where the consent and conditions can be obtained for copying the articles for personal or internal use • Pokyny pro autory najdete na <http://www.ccsss.cz>, zkratky časopisů podle Chemical Abstract Service Source Index (viz <http://cassi.cas.org/search.jsp>) • Molekulární námět na obálce: Vladimír Palivec • Dáno do tisku 17.8.2018.**