



# 72. SJEZD ČESKÝCH A SLOVENSKÝCH CHEMICKÝCH SPOLEČNOSTÍ

**PRAHA**

**6. – 9. září 2020**

Pořádající organizace:

**Česká společnost chemická z. s.  
Slovenská chemická spoločnosť  
Česká společnost průmyslové chemie**

Sborník příspěvků

## ORGANIZAČNÍ VÝBOR SJEZDU

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

## VĚDECKÝ VÝBOR SJEZDU

doc. Ing. Tomáš Navrátil, Ph.D. (předseda)  
prof. Ing. Vladimír Adamec, CSc.  
prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.  
prof. Ing. Filip Bureš, Ph.D.  
prof. RNDr. Hana Čtrnáctová, CSc.  
doc. RNDr. Miroslav Fojta, CSc.  
RNDr. Petr Holzhauser, Ph.D.  
prof. RNDr. Jan Hrbáč, Ph.D.  
doc. Ing. Ondřej Lebeda, Ph.D.  
doc. Ing. Jaromír Lederer, CSc.  
doc. RNDr. Jiří Mosinger, Ph.D.  
Ing. Ivan Souček, Ph.D.  
prof. Ing. Petra Šulcová, Ph.D.  
doc. MUDr. Sergej Zacharov, Ph.D.  
RNDr. Pavel Zachař, CSc.  
Mgr. Tomáš Zelenka, Ph.D.

## SEKCE SJEZDU A JEJICH GARANTI

- 1. Analytická chemie**  
prof. Ing. Tomáš Navrátil, Ph.D.
- 2. Anorganická a materiálová chemie**  
doc. RNDr. Jiří Mosinger, Ph.D.
- 3. Ekonomika a řízení chemického průmyslu**  
Ing. Ivan Souček, Ph.D.
- 4. Elektrochemie a další oblasti fyzikální chemie**  
prof. RNDr. Jan Hrbáč, Ph.D.
- 5. Chemické vzdělávání a historie chemie**  
prof. RNDr. Hana Čtrnáctová, CSc., RNDr. Pavel Zachař, CSc.
- 6. Chemie životního prostředí**  
prof. Ing. Vladimír Adamec, CSc.
- 7. Jaderná chemie**  
doc. Ing. Ondřej Lebeda, Ph.D.
- 8. Organické materiály**  
prof. Ing. Filip Bureš, Ph.D.
- 9. Polymery**  
prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.
- 10. Porézní materiály**  
Mgr. Tomáš Zelenka, Ph.D.
- 11. Průmyslová chemie**  
doc. Ing. Jaromír Lederer, CSc., Ing. Jaromír Lubojacký, MBA
- 12. Termická analýza**  
prof. Ing. Petra Šulcová, Ph.D.
- 13. Toxikologie a lékařská chemie**  
doc. MUDr. Sergej Zacharov, Ph.D.
- 14. Biochemie**  
doc. RNDr. Miroslav Fojta, Ph.D.
- 15. Aktuální strategie českého chemického průmyslu**  
Ing. Ladislav Novák, Ph.D.

Milé kolegyně a kolegové, vážení čtenáři,

doufám, že jste tento text dostali do ruky při registraci na již 72. sjezd chemiků (Sjezd) na Novotného lávce ve stověžaté matičce Praze a že si ho budeme moci přečíst společně, například u kávy v přestávkách mezi jednotlivými bloky jednání Sjezdu. Jak dobře víte, Předsednictvo Hlavního výboru ČSCH, spolu s organizačním a vědeckým výborem Sjezdu, se po dlouhém váhání v době vrcholící pandemie Covid19 na jaře letošního roku rozhodly jít do rizika a pokusit se 72. sjezd uspořádat (po čtyřech letech opět v Praze) i přes přetrvávající nejistotu, zda epidemiologická situace umožní pořádání akcí tohoto formátu a velikosti a zda budou mít čeští a slovenští chemici vůbec zájem a odvahu se na Sjezdu osobně setkat.

V době hromadného rušení všech národních i mezinárodních konferencí jsme se rozhodli pokusit se nabídnout českým a slovenským chemikům alespoň nějakou možnost osobního setkání „tváří v tvář“ a nikoli jen setkání „tváří v tvář“ přes monitor. A to i za cenu rizika, že se může stát, že se přihlásí tak málo účastníků, že budeme nuceni Sjezd z finančních důvodů na poslední chvíli zrušit, i toho, že nám v jeho uspořádání může na poslední chvíli zabránit nepříznivý vývoj epidemiologické situace.

V době, kdy píšete tyto řádky, cca čtyři týdny před termínem zahájení Sjezdu, sice stále není jisté, zda nám „Zlý skřet Koronavirus“<sup>1</sup> v jeho uspořádání nezabrání, jasná ale je velmi pozitivní odezva chemické veřejnosti na naši nabídku možnosti setkání. K dnešnímu dni je na Sjezd zaregistrováno více než 300 účastníků, jejichž příspěvky byly uspořádány do celkem 15 odborných sekcí. V nich je zařazeno 157 přednášek a pro plakátovou sekci v Národním technickém muzeu připraveno celkem 119 plakátových sdělení. Prostor pro mezioborové setkávání a inspiraci by mělo poskytnout sedm vyzvaných přednášek špičkových českých odborníků. Obohacením letošního Sjezdu by měla být hojná účast kolegů, kteří se místo sjezdů chemiků obvykle účastní spíše pravidelných, ale letos zrušených, Mezinárodní chemicko-technologické konference nebo Biochemického sjezdu. Konečná podoba společenského programu Sjezdu bude záviset na aktuální epidemiologické situaci.

Pro studentské účastníky byla jako obvykle připravena možnost přihlásit své práce do některé z řady soutěží – letos byla konkrétně vyhlášena Cena České společnosti chemické, IUPAC Poster Prize, Cena rektora Univerzity Pardubice pro nejlepší studentský poster a Cena rektora Univerzity Pardubice pro nejlepší poster studenta Univerzity Pardubice. V rámci Sjezdu proběhne také setkání mladých českých a slovenských chemiků, pořádané Sekcí mladých pod záštitou České společnosti chemické a Slovenské chemické společnosti.

Na organizaci Sjezdu se jako obvykle podílela, nebo na jeho organizaci přispěla, řada firem a institucí. Partneři Sjezdu, spolupořádaného ČSCH, Slovenskou chemickou spoločnosťou a Českou společností průmyslové chemie, jsou Rada vědeckých společností ČR, EuChemS – European Chemical Society, Chemistry Europe – European Chemical Societies Publishing, ČSVTS, ČVUT v Praze, Univerzita Pardubice, Univerzita Palackého v Olomouci a Vysoká škola chemicko-technologická v Praze. Jako vystavovatelé jsou k dnešnímu datu zaregistrováni Shimadzu, Optik Instruments, Metrohm, ANAMET, D-Ex, Nicolet, NETZSCH a P-Lab. Záštitu nad Sjezdem převzal rektor ČVUT v Praze, doc. RNDr. Vojtěch Petráček, CSc.

Končím tento úvodník tak, jak jsem jej začal – tedy naději, že se riziko vyplatí a rozhodnutí uspořádat náš tradiční Sjezd i v této nejisté době se ukáže jako správné. Doufám, že 72. sjezd se zapíše do dlouhé historie sjezdů chemiků jako sjezd úspěšný, i když pořádaný ve výjimečné době.

Jan John

## LITERATURA

1. <https://www.detskebasnicky.cz/zly-skret-koronavirus/>, staženo 7.8.2020.



## PL-01

## CHEMIE V NÁRODNÍ GALERII

## RADKA ŠEFCŮ

Národní galerie Praha, Staroměstské nám. 12, 110 15 Praha 1  
radka.sefcu@ngprague.cz

Exaktní chemická a fyzikální analýza začala být v Evropě využívána v průběhu restaurátorských postupů již v 19. století. Vědecký výzkum je fundamentální složkou celého procesu poznání materiálových a technologických aspektů výtvarných děl, jeho ochrany a restaurování. Hlavní zodpovědností vědce v oblasti ochrany uměleckých děl je poskytovat analytickou a technickou podporu pro zachování a restaurování kulturních objektů pomocí vědeckých analýz a technik, tzn. identifikace materiálů, vývoj a testování nových analytických technik a zařízení, konzervačních materiálů i studium degradačních procesů.

První analýzy pigmentů provedl londýnský lékař John Haslam v roce 1800 na vzorcích z nástěnných maleb z kaple sv. Štěpána ve Westminsteru<sup>1</sup>. Mnoho významných chemiků, fyziků, ale i lékařů jako byl Humphry Davy, Michael Faraday, Max Pettenkofer nebo Louis Pasteur řešilo otázky spjaté s identifikací a restaurováním uměleckých děl<sup>2</sup>. V roce 1888 vznikla první chemická laboratoř v Královském muzeu (Königliches Museum) v Berlíně, kterou řídil Friedrich Rathgen.

Po vzoru předních světových institucí byla v 60. letech 20. století zřízena chemicko-technologická laboratoř v Národní galerii Praha (NGP) a od té doby je již plně etablována v její struktuře. Chemicko-technologická laboratoř v NGP se jako jedna z mála laboratoř v České republice specializuje na průzkum výtvarných uměleckých děl. Vznik laboratoře je spjat se jménem Eugena Šimáčka, který se zasloužil o založení a svými návrhy významně ovlivnil současnou podobu laboratoře, která se od roku 1970 nachází v Anežském klášteře v Praze. Šimáčkem byly definovány základní úkoly pro nově vznikající chemickou laboratoř a nároky na odborného pracovníka (chemika), který měl mít dostatečnou odbornou kvalifikaci...“ a to zejména znalosti klasické i moderní analytické chemie, fyzikální chemie, anorganické a organické chemie, silikátových materiálů, textilní a makromolekulární chemie. Od počátku se analýzy v laboratoři soustředí na identifikaci materiálů a rovněž řeší otázky spjaté s pravostí uměleckých děl. Jindřich Tomek, Dorothea Pechová a Ivana Vernerová, působící v laboratoři od 70. do 90. let 20. století, při průzkumech zavádějí mikroskopické metody nebo prvkovou analýzu na spektrografu Q-24. Laboratoř byla plně výtěžena přírodovědnými průzkumy na nejvýznamnějších dílech ze sbírek NGP, např. Růžencová slavnost od Albrechta Dürera, Deska s českými zemskými patrony, Deska z Dubečka, Tympanon severního portálu kostela P. Marie před Týnem, obraz od El Greca, Mistra Třeboňského oltáře a jedním z nejvýznamnějších prací byl průzkum maleb Mistra Theodorika<sup>3</sup>.

Na počátku 20. století nastupuje další generace chemiků a do průzkumu začleňuje prvkovou analýzu na elektronovém mikroskopu, strukturní analýzu metodou Ramanovy a infračervené spektroskopie a v neposlední řadě i kompletní techniky pro neinvazivní průzkum uměleckých děl (obr. 1).



Obr. 1. Neinvazivní průzkum metodou Ramanovy a infračervené spektroskopie

V současnosti jsou v chemické laboratoři ročně prováděny stovky průzkumů výtvarných děl. Je zde uložen ojedinělý archiv vzorků malby, polychromie, pigmentů, pojiv, vzorků textilu, dřeva a polymerních látek, ale i laboratorních zpráv od prvních let fungování. V rámci výzkumných projektů se odborní pracovníci specializují na přírodovědné průzkumy, jejichž výsledky jsou implementovány do komplexních znalostí materiálové podstaty výtvarného díla a jsou východiskem k posouzení samotných výtvarných technik<sup>4</sup>.

V rámci přírodovědných průzkumů byla zkoumána např. díla Mistra Vyšebrodského oltáře, Mistra Michelské madony, Mistra Litoměřického oltáře, Rembrandtův obraz Učence (dříve Rabin), ale i obrazy Jakuba Schikanedera, Antonína Slavíčka, Františka Kupky, Josefa Čapka, Emila Filly díla francouzských impresionistů, či kinetické plastiky Zdeňka Pešánka, ze Sbírký asijského umění japonské dřevořezy Kacušiky Hokusaie, buddhistické plastiky, tibetské thangky či indické rágamálové album.

Laboratoř v NGP slouží jako odborné zázemí a garant pro všechny typy kulturních institucí, zejména sbírkotvorných, a rozvíjí mezioborovou spolupráci s historiky umění, restaurátory-konzervátory a dalšími specializovanými odborníky. Chemicko-technologická laboratoř se v současnosti svým vybavením a možnostmi řadí na světovou úroveň. Zároveň je naprosto unikátním pracovištěm – lídrem pro průzkum výtvarných materiálů a technologií v rámci ČR.

## LITERATURA

1. Rees-Jones S. G.: *Studies in Conservation* 35 (2) (1990).
2. Staniforth S.: *Historical Perspectives on Preventive Conservation*, Getty Conservation Institute, 2013.
3. Tomek J., Pechová D., Vernerová I.: *Technologia Artis* (1) (1990).
4. Dáňová H., Chlumská Š., Šefců R. (eds.): *Očím na odív. Výzdobné techniky v malířství a sochařství 14.–16. století*, Národní galerie Praha, 2017.

## PL-02 PEROVSKITE PHOTOVOLTAICS FROM THE VIEWPOINT OF ELECTROCHEMISTRY

LADISLAV KAVAN

*J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry, Czech Academy of Sciences, Dolejškova 3, CZ-18223 Prague 8  
kavan@jh-inst.cas.cz*

The perovskite solar cell (PSC) demonstrated unprecedented efficiency jump from 3.8% to near 25% during 2009–2020. The state-of-art PSCs exhibit now comparable efficiencies to those of the best solid state photovoltaics (Si, GaAs, CIGS, CdTe)<sup>1,2</sup>. This solar cell is sometimes called a ‘young sister’ of dye-sensitized solar cell (DSSC)<sup>3,4</sup> to highlight their common principles: The generic perovskite,  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  was actually disclosed for the first time in a liquid-junction photoelectrochemical device identical to a quantum-dot sensitized DSSC<sup>1,3,4</sup>. Yet, there were surprisingly few succeeding electrochemical studies of PSCs. This is obviously due to the instability of  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  and other used perovskites in almost all usual electrolyte solutions<sup>5</sup>. Hence, one of the key discoveries promoting the success of PSC was the replacement of liquid electrolyte solutions by solid hole-conducting media<sup>6</sup>.

Figure 1 shows the traditional n-i-p architecture of PSC. The hole-collecting terminal (e.g. Au) is interfaced to a hole-transporting medium (HTM), e.g. *spiro*-OMeTAD or  $\text{CuSCN}$ <sup>7</sup>. The core of negative electrode is a nm-thin electron-selective layer (ESL) usually made from  $\text{TiO}_2$  or  $\text{SnO}_2$  which is deposited on top of F-doped  $\text{SnO}_2$  (FTO) electrode serving as electron collector. Exactly the same concept is used in the photoanode of DSSC<sup>8</sup>. Hence, this electrode is a subject of systematic materials-screening and structural optimizations, in which electrochemistry plays an important role<sup>3,4,9</sup>.

ESL selectively transports electrons from the photoexcited perovskite to the back contact, but at the same time prevents recombination of these electrons with perovskite or hole conductor. Amorphous ALD-made  $\text{SnO}_2$  or  $\text{TiO}_2$  films are pinhole-free for thicknesses down to several nm, but amorphous and crystalline ALD  $\text{SnO}_2$  films substantially differ in their conduction band positions<sup>10</sup>. The mesoporous scaffold (if present) is composed of oxide semiconductors ( $\text{TiO}_2$  or  $\text{SnO}_2$ ) or insulators ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{ZrO}_2$ ). The vectorial charge-transfer over several interfaces in PSCs requires right alignment of conduction band minimum (CBM) and valence band maximum (VBM) of the relevant materials. The alignment of CBMs of perovskite/ESL is requested in addition to compact morphology of thin films. Both properties can be characterized electrochemically considering the relations of band energetics and electrochemical potentials in the absolute scale (0 V vs. SHE  $\approx -4.44$  eV vs. vacuum see Fig. 1).

The energy of CBM is usually measured by optical spectra (giving the band gap) and photoelectron spectra (XPS, UPS) providing VBM and work function. Electrochemical alternative is the measurement of the flatband potential, which yields primarily the Fermi level (work function) and CBM, too.

However, there is a considerable controversy between the electrochemical and vacuum (XPS, UPS) techniques

about the position of CBM in  $\text{TiO}_2$  (anatase, rutile, including the crystals with distinguished facets). To address this controversy, a refined electrochemical analysis was carried out employing single crystal  $\text{TiO}_2$  electrodes (anatase, rutile, brookite) together with vacuum and near-ambient pressure XPS studies and Kelvin probe measurements. This, together with theoretical (DFT) modelling points at the effect of interface influencing the CBM positions. Even the adsorption of monolayer of water causes the relevant shifts, and allows thus rationalization of the mentioned conflicts.

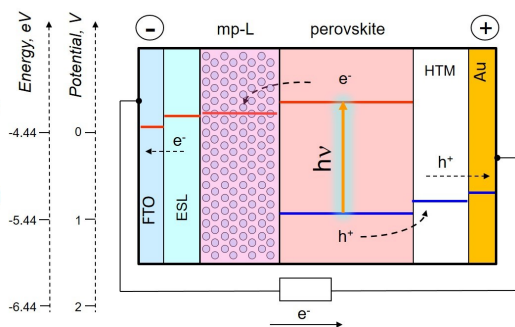


Fig. 1. Scheme of the of perovskite solar cell (mesoscopic n-i-p type). ESL = electron selective layer, mp-L = mesoporous layer infiltrated by perovskite, HTM = hole-transporting medium

*This work was supported by the Grant Agency of the Czech Republic (contract No. 18-08959S).*

## REFERENCES

- Jena A. K., Kulkarni A., Miyasaka T.: *Chem. Rev.* 119, 3036 (2019).
- Nayak P. K., Mahesh S., Snaith H. J., Cahen D.: *Nature Rev. Mater.* 4, 269 (2019).
- Kavan L.: *Curr. Opinion Electrochem.* 11, 122 (2018).
- Kavan L.: *Curr. Opinion Electrochem.* 2, 88 (2017).
- Samu G. F., Scheidt R. A., Kamat P. V., Janaky C.: *Chem. Mater.* 30, 561 (2018).
- Kim H. S., Lee C. R., Im J. H., Lee K., Moehl T., Marchioro A., Moon S. J., Humphry-Baker R., Yum J.-H., Moser J. E., Grätzel M., Park N. G.: *Sci. Rep.* 2, 591 (2012).
- Kavan L., Vlckova-Zivcova Z., Hubik P., Arora N., Dar M. I., Zakeeruddin S. M., Grätzel M.: *ACS Appl. Energy Mater.* 2, 4264 (2019).
- Kavan L., Vlckova-Zivcova Z., Zlamalova M., Zakeeruddin S. M., Grätzel M.: *J. Phys. Chem. C* 124, 6512 (2020).
- Kavan L.: *Catal. Today* 328, 50 (2019).
- Kavan L., Steier L., Grätzel M.: *J. Phys. Chem. C* 121, 342 (2017).

**PL-03**  
**ANALÝZA GLYKÁNŮV V DIAGNOSTICE**  
**RAKOVINY**

**JÁN TKÁČ, TOMÁŠ BERTÓK, EDUARD JANÉ,**  
**MICHAL HÍREŠ, LENKA LORENCOVÁ, VERONIKA**  
**GAJDOŠOVÁ, ANNA BLŠÁKOVÁ, FILIP KVĚTOŇ,**  
**ŠTEFÁNIA HRONČEKOVÁ**

*Chemický ústav, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta*  
*9, 845 38, Bratislava, Slovensko*  
*Jan.Tkac@savba.sk*

Analýza glykánov (komplexných sacharidov naviazaných na proteín alebo lipidy) je stále dôležitejšia pri diagnostike chorôb vrátane rôznych druhov rakoviny. Hlavným dôvodom tohto tvrdenia je skutočnosť, že genomické/proteomické profily nemožno použiť na úplné pochopenie mnohých patologických procesov. Glykány sú súčasťou 70 % všetkých intracelulárnych proteínov, pričom 80 % membránových proteínov je glykozylovaných, čo spôsobuje, že každá bunka v našom tele je glykozylovaná. Glykoproteíny možno teda veľmi účinne aplikovať ako biomarkery rozličných typov rakovín.

Glykány sú na informácie bohaté molekuly zúčastňujúce sa mnohých fyziologických a patologických procesov. V prezentácii budú uvedené základné charakteristiky glykánov a prečo ich je možné využiť na diagnostiku rakovinových ochorení. Predstavíme si v klinickej praxi používané biomarkery využívané na diagnostiku rôznych typov rakoviny, najmä však prostatický špecifický antigén (PSA), považovaný za najlepší diagnostický rakovinový biomarker. Tento biomarker však nie je na diagnostiku rakoviny prostaty veľmi vhodný, čo podčiarkuje aj skutočnosť, že objaviteľ tohto biomarkera tvrdí, že tento biomarker je vhodný na monitorovanie progresie ochorenia. Navyše ani regulačné úrady nemajú jasno v tom, či sa tento biomarker na diagnostiku rakoviny prostaty používať má a aká má byť „cut-off“ koncentrácia tohto biomarkera v krvi aby sa limitovali falošne negatívne alebo falošne pozitívne výsledky.

Analýza glykánov môže nielen spresniť diagnostiku rakoviny prostaty, ale je využiteľná pri prognóze pacientov s rakovinou prostaty, či na monitorovanie efektívnosti liečby týchto pacientov. Časť prednášky bude venovaná spôsobu akým sa validujú nové biomarkery a aké sú horúce trendy v diagnostike rôznych typov rakovín napr. analýzou exozómov.

*Tento príspevok vznikol s podporou projektu APVV (17-0300), s podporou projektov Ministerstva zdravotníctva SR (2018/23-SAV-1 a 2019/68-CHÚSAV-1) a s podporou ERC Proof of Concept grantu (825586).*

**PL-04**  
**FOREZNÍ ZKOUMÁNÍ TEXTÍLIÍ A VLÁKEN**

**IVANA TURKOVÁ\*, MAREK KOTRLÝ**

*Kriminalistický ústav PČR, Strojnická 27, pošt.schr. 62/KÚ,*  
*170 89 Praha 7*  
*ivana.turkova@pcr.cz, marek.kotrlý@pcr.cz*

Forezní vědy zahrnují i přírodovědné a chemické postupy představují soubor metod, které vedou k identifikacím osob či materiálů. Ve výsledku napomáhají při hledání důkazů v různých kauzách. Textilní vlákna byla pravděpodobně prvními mikrostopy, které byly využity jako důkaz v průběhu objasňování trestné činnosti. Z pohledu historie kriminalistiky se jedná o skupinu kriminalistických stop, jejichž význam byl akceptován již od konce 19. století.

Zkoumání fragmentů textilních materiálů a vláken ve forezní oblasti je poměrně náročnou disciplínou, která klade zejména vysoké nároky na odbornou erudici specialistů, kteří je provádějí. Kvalitní výkon znalecké činnosti tohoto druhu stop vyžaduje znalosti z textilní technologie i oděvnictví, v některých případech i trichologie, zvládnutí mikroskopických technik a dalších relevantních instrumentálních metod. Vedle těchto dovedností – musí znalec splňovat i další požadavky pro potřeby interpretace výsledků zkoumání. Musí disponovat hlubokými znalostmi o chování tohoto druhu stop a mít dostatečné povědomí o možnostech a úskalích jiných odvětví kriminalistického zkoumání. Je zjišťován nejen materiál textilních mikrofragmentů a vláken, ale významné je např. prokázání vzájemného transferu vláken z oděvu na oděv, a tím i prokázání přímého kontaktu pachatele s obětí, což hraje významnou roli při rekonstrukci průběhu a mechanismu trestných činů.

V současné době nepostačuje pouhá identifikace textilního materiálu či vláken, ale rozhodující mohou být i zvláštní markanty, např. odlišná morfologie, typ poškození vlákna či degradace, apod. Zkoumání pak vyžaduje i nasazení relativně finančně náročnějšího instrumentálního vybavení laboratoře (kvalitní optické polarizační a digitální mikroskopy, mikrospektrofotometry, infračervené a Ramanovy spektrometry, elektronové mikroskopy atd.).

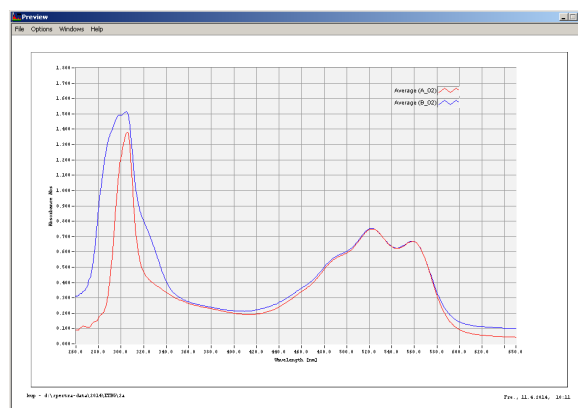


Schéma 1. Kvantitatívni měření barevnosti a komparace červených morfologicky shodných vláken polyesteru (mikroskop Zeiss, s modulem MPM 800s, software Spectra Vision)

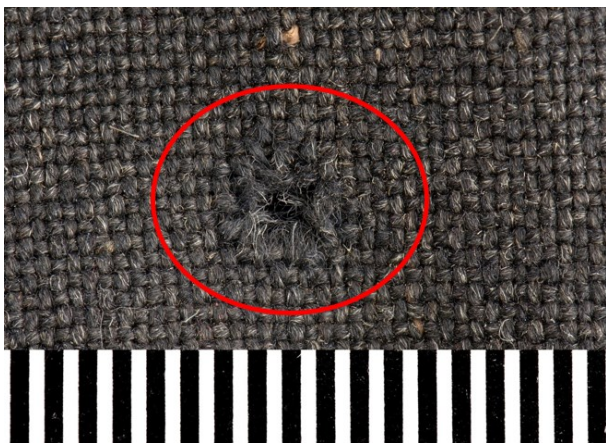


Foto 1. Textilie v případě „Cold case“ – detail porušení vláken

Ríká se, že spravedlnost je slepá.... Nicméně věda jde kupředu a se zaváděním nových či zdokonalených instrumentací a metod je možné se i po letech vracet zpět k dnes již tzv. „cold case“, a zkusit aplikovat poslední poznatky forenzní vědy na archivované stopy. Nad hledáním relevantních stop po střelbě na textilním materiálu v odloženém případě z 60.ých let 20. století, kdy zemřel kaplan V. K. údajně po zásahu bleskem při bouřce, se zamýšlí jedna z kazuistik.

Ze zajímavých studií byl na KÚ PČR proveden multidisciplinární průzkum tzv. „tsants“ ze sbírek Náprstkova muzea v Praze, který byl zaměřen na jejich technické provedení, biologickou charakteristiku a mikro analýzu užitých přírodních vláken provázků spojujících rty a kožní řezy v záhlaví tsants.

Různorodost forenzních kauz z oblasti textilií a vláken poskytuje znalci získávání neustále nových poznatků a vzhledů na některé nestandardní stopy. On-line konzultace problematik s dalšími evropskými forenzními pracovišti v rámci ENFSI (European Network of Forensic Science Institutes – organizace, která sdružuje evropské státní forenzní instituce nebo kriminalistické ústavy) pak nejen validují aplikace analytických postupů zejména při zkoumání stop z místa činu, ale v oblasti interpretací mohou v náročných kauzách přispět ke správným dedukcím.

*Rozvoj mikroanalytických technik byl na KÚ PČR podpořen projektem MVČR VI20172020050.*

#### LITERATURA

1. Kolář P., Turková I.: Textilní materiály. KÚ PČR, 7, 8 (2020).
2. Robertson J., Grieve M.: Forensic Examination of Fibres. Taylor&Francis, London, 304 (1999).
3. The Best Manual Practice. ENFSI ETHG (2016).

## PL-05 MŮJ ŽIVOT S CHEMICKOU TECHNOLOGIÍ

JOSEF PAŠEK

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze  
Alena.Krivska@vscht.cz

Za asi 60 let jsem v českých i zahraničních závodech realizoval asi 50 chemicko-technologických procesů. Realizace byla většinou doprovázena investiční činností. Celkovou roční produkci realizovaných procesů odhaduji na 1 mld Euro, tedy asi 25 mld Kč. Na vývoji procesů pracovalo pochopitelně mnoho lidí jak z VŠCHT Praha, tak z projekčních organizací a z výrobních závodů. Na tomto místě bych chtěl vzpomenout hlavní spolupracovníky VŠCHT Praha doc. Dvořáka, Ing. Volfa, Ing. Pexidra, Ing. Richtra, doc. Kondelíka, Ing. Jarkovského, Ing. Petřiska a doc. Fílu. Pracovníků z projekčních organizací a zejména z chemických závodů byly desítky. V následujících tabulkách uvedu přehled realizovaných procesů podle firem.

#### Česká republika

Firma	Rok	Proces	Kap. t/rok
BC-MCHZ Ostrava	1956	Odpařování cyklohexanolu	jen úprava
	1962	Cyklohexylamin 1	600
	1975	Cyklohexylamin 2	2000
	1990–dosud	Cyklohexylamin+ dicyklohexylamin 3	30 000
	1963	Anilin 1	500
	1968	Anilin 2	2000
	1975	Anilin 3	8000
	1985	Anilin 4	100 000
	2006	Anilin 5	170 000
	1966	Isopropylamin	3000
	1986	Ethylaniliny	600
	1990	Dimethylcyklohexylamin 1	3000
	2016	Dimethylcyklohexylamin 2	4000
	1995	Pentamethyldiethylentriamin	1000
	1995	2-Ethylhexylamin	1000
	1995	Butylamin	500
	1995	Benzylamin	800
	1995	Diethyloxalát	1000
	2019	Isodecyloxypropylamin	1. kam.
Unipetrol	2004	Naftalen z pyrolyzního oleje	12 000
Kaučuk Kralupy	2002	Rektifikační linka – kapalné kaučuky	
Diamo	2009	Likvidace podzemních roztoků po těžbě uranu	1. etapa
	2012	Likvidace podzemních roztoků po těžbě uranu	2. etapa
Spol-chemie Ústí	1970	Furfurylalkohol	300
	1972	Oktadecylamin	300
Temperatior	2016	Regenerace methanolu při výrobě bionafty	



**Slovenská republika**

Firma	Rok	Proces	Kapacita
Istrochem	1970	Antiozonant	500
Duslo	1980	Poloprovoz antiozonantů	
	1985	Difenylamin	12 000
	1985	4-Aminodifenylamin	14 000
	1985	2 typy antiozonantů	14 000
	1985	síran sodný	
	1985	Pd katalyzátor	
	1985	Dehydrogenace Methylisobutylkarbinolu	
Chemko Strážske	1995	Hydrogenace tetramethylpiperidonu	
	1995	Regenerace isopropylalkoholu	
	1998	Rekonstrukce rektifikace cyklohexanonu	
Petrochema Dubová	1995	Rekonstrukce dodecylbenzenu	

**Jiné**

Firma	Rok	Proces	Kapacita
Taminco, nyní Eastman Chemical závod Gent	2004	Univerzální rektifikační kolona	
	2006	Kontinuální výroba pyrolidonu	
	2005	Dimethylaminopropylamin	
	2008	Dimethylamid kyseliny dekanové	
	2007	Dimethylacetamid	
závod St. Gabriel,	2010	Dimethylaminopropylamin	
závod Pace, USA	2012	Hydrogenační domethylace – dimethyldodecylamin	
závod Leuna, SRN	2012	Hydrogenační rafinace destilačních zbytků MA	
	2013	Pokusná výroba methylformiátu	
Tosoh, Japonsko	2003– 2007	Anilin	300 000
Čína	1998	Kyselina chloroctová	10 000
Zavkom, Rusko	2015	Regenerace acetonu	
	2018	Koksárenský naftalen, Magnitogorsk	
Pigment, Rusko	2015	Úprava rektifikace methylanilinu	

Česká chemie nepatří k silným stránkám našeho průmyslu a tvůrčí práce v chemické technologii je relativně slabá. Většinu velkých procesů jsme dovezli jako know-how,

česká stopa v zahraničním chemickém průmyslu je téměř nezatelná. Např. z Japonska jsme dovezli několik procesů, do Japonska jsme však žádné know-how nedodali. Z naší dílny vyšlo několik procesů, které patří mezi několik největších na světě: Anilin, Cyklohexylamin a dicyklohexylamin a Dimethylaminopropylamin.

I když "výťažnost" našeho výzkumného úsilí je relativně vysoká, řadu procesů jsme pouze zpracovali laboratorně, některé z nich byly ověřeny i na poloprovozních jednotkách, nikdy však nebyly realizovány.

Na některé procesy si dovolíme nabídnout know-how, pochopitelně spolu s vlastníky procesů.

Proces	Průmyslový partner
Anilin	BC-MCHZ (Vanhua Group)
Cyklohexylamin a dicyklohexylamin	BC-MCHZ (Vanhua Group)
DABCO	BC-MCHZ (Vanhua Group)
Dimethylaminopropylamin	Eastman Chemical
Kyselina mravenčí	Eastman Chemical
2-Ethylhexyl nitrát	Synthesisia
Terc. butylamin přímou adicí	Duslo

Mohu nabídnout své velké zkušenosti v oblasti rektifikace.

**Co je know-how chemického výrobního procesu?**

V tomto směru jsou znalosti dosti slabé. Mnoho chemiků se domnívá, že stačí umět látku vyrobit, podle jiného je vše již popsáno v literatuře a výrobní jednotku si může každý sám realizovat. Proč potom naše podniky procesy nakupují od zahraničních firem, když je realizace tak snadná?

Know-how je souhrn velkého množství informací, které jsou nutné k realizaci výroby, přičemž nositel garantuje:

- zařízení podle know-how bude vyrábět zadané množství látky,
- garantovaná je měrná spotřeba surovin a energií,
- garantovaná je i kvalita produktu
- automatické řízení procesu na soudobé úrovni.
- např. nestačí umět nějak redukovat nitrobenzen na anilin vodíkem. Jen namátkou uvedu několik parametrů:
- výtěžek anilinu na NB musí být alespoň 99 %,
- pokud proces nevyužívá reakční teplo k výrobě páry, tak dnes nepřipadá v úvahu.

Dnes existuje 5 firemních know-how na výrobu anilinu jejichž ekonomika se příliš neliší, provozují se stále ještě starší procesy, které však již nikdo znovu nepostaví.

**Úspory energie v chemické výrobě**

Chemická výroba je velkým spotřebitelem energie, zejména tepla, a při realizaci výrobních procesů je možné mnoho tepla ušetřit. Ve zpracovatelské chemii se realizují především exotermní procesy a využití reakčního tepla nabízí mnoho možností úspor. Např. náš proces na výrobu anilinu produkuje v reaktoru páru o tlaku 20 bar, dnes připravujeme proces na hydrogenaci anilinu na cyklohexylamin, který je ve spotřebě tepla soběstačný.

V souvislosti s požadavky na úsporu tepla nabývá na důležitosti výměna tepla mezi technologickými proudy.

V odparkách se dnes uplatňuje princip tepelného čerpadla (rekompresie par). V České republice je uplatněn princip tepelného čerpadla i na 3 rektifikačních kolonách, jedna z nich byla dodána švýcarskou firmou Sulzer, dvě jsem navrhl já.

#### Kapacita procesu a jeho ekonomika

Před časem se prosazovaly tzv. mikroreaktory, velký počet malých paralelních reaktorů měl nahradit velkokapacitní linku. Dnes už se v souvislosti s mikroreaktory hovoří pouze o výrobě speciálních chemikálií vyráběných v relativně malém měřítku, avšak i zde nejsou nějakou specifikou, nýbrž jsou produktem optimálního řešení. Podle mého názoru existují jen optimální reaktory, nikoliv reaktory malé, velké nebo mikro.

V některých případech došel růst kapacit procesů do takové úrovně, kdy ekonomika narazila na náklady na dopravu surovin a produktů. U většiny procesů však výrobní kapacity stále rostou, protože s narůstající kapacitou se snižují výrobní náklady, umožňuje se lepší využití energie a vyplatí se opakované využití vedlejších produktů a náročnější čištění odpadů.

#### PL-06

#### TAK TROCHU JINÁ FOTOCHEMIE: OD UV K RENTGENOVÝM FOTONŮM

#### PETR SLAVÍČEK

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

Laditelné zdroje rentgenového záření jsou stále dostupnější: na světě je v současné době v provozu několik desítek synchrotronů, narůstá počet rentgenových laserů s volnými elektrony a objevují se také zařízení na laboratorní škále (HHG či rentgenové plasmové zdroje). Tyto nástroje jsou široce využívány fyziky i biologie, pro chemika působí možná poněkud exoticky. Věřím ale, že toto se v následujících letech bude měnit.

Ve své přednášce budu diskutovat nové příležitosti, které přináší laditelné zdroje rentgenového záření pro chemii. Zaměřím se na nové techniky k výzkumu molekul a materiálů, zejména ale budu mluvit o využití vysokoenergetických fotonů k definované transformaci materiálů, tj. budu se věnovat rentgenové fotochemii.

Součástí přednášky bude prezentace výsledků spolupráce naší laboratoře zaměřené na teoretické modelování s experimentálními týmy studujícími děje vyvolané vysokoenergetickými fotony v kapalinách. Pozornost bude věnována zejména novým typům mezimolekulových relaxačních dějů, zahrnující přenos náboje a přenos atomů, konkrétně popíši nové děje jako je Intermolecular Coulomb Decay (ICD), Electron Transfer Mediated Decay (ETMD) či Proton Transfer Mediated Decays (PTMD). Budu diskutovat využití těchto jevů jako základ nových typů spektroskopii.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR (projekt číslo 18-23756S).

#### LITERATURA

1. Thürmer S., Ončák, Ottosson N., Seidel R., Hergenahn U., Bradforth S. E., Slaviček P., Winter B.: *Nat. Chem.* 590, 5 (2013).
2. Slaviček P., Kryzhevoi N. V., Aziz E. F., Winter B.: *J. Phys. Chem. Lett.* 234, 7 (2016).
3. Richter C., Hollas D., Saak C. M., Förstel M., Miteva T., Mucke M., Björneholm O., Sisourat N., Slaviček P., Hergenahn U.: *Nat. Commun.* 4988, 9 (2018).
4. Pohl M. N., Aziz E. F., Cederbaum L. S., Muchová E., Slaviček P., Winter B., Kryzhevoi N. V.: *Nat. Chem.* 708, 9 (2017).
5. Pohl M. N., Muchová E., Seidel R., Ali H., Sršeň Š., Wilkinson I., Winter B., Slaviček P.: *Chem. Sci.* 548, 10 (2019).

#### PL-07

#### ELEKTROCHEMIE JAKO NÁSTROJ PRO ZKOUMÁNÍ METABOLICKÝCH PŘEMĚN XENOBIOTIK

#### JANA SKOPALOVÁ

Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta,  
Katedra analytické chemie, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc  
jana.skopalova@upol.cz

Metabolismus cizorodých látek (xenobiotik) pocházejících z nejrůznějších zdrojů, např. z potravy, industriálního znečištění či z léčiv, probíhá v živých organismech nejčastěji enzymatickou cestou. Podstatou první fáze řady metabolických přeměn jsou oxidačně-redukční reakce katalyzované hemovými enzymy cytochromu P450, které se nacházejí ve všech živých organismech od bakterií po člověka<sup>1</sup>.

Studium metabolických procesů je velmi důležité pro zjištění osudu xenobiotik v životním prostředí a zcela nezbytné při vývoji nových léčiv. Metody *in vitro* testování využívají složité biologické matrice obsahující enzymy cytochromu P450, od jaterních tkání až po izolované mikrozomy. Obecně platí, že čím komplexnější je modelový systém, tím lépe napodobuje metabolismus v podmínkách *in vivo*, avšak tím komplikovanější, časově a instrumentálně náročnější je analýza metabolických produktů<sup>2</sup>.

Elektrochemie nabízí jednoduchý, čistě instrumentální modelový systém pro studium redoxních reakcí. Je známo, že elektrochemické reakce často poskytují stejné metabolické produkty jako reakce enzymatické, i když jejich mechanismus bývá odlišný<sup>3</sup>. Rychlé elektrochemické metody umožňují zachytit i velmi reaktivní a nestabilní meziproducty, které není možné detekovat v jiných modelových systémech a jinými metodami, a tím napomocť k objasnění složitých metabolických procesů, včetně např. odhalení příčin toxicity některých léčiv. Známým příkladem je elektrochemické generování *N*-acetyl-*p*-benzochinoniminu, nestabilního a velmi reaktivního meziproductu oxidativního metabolismu paracetamolu, který se při nedostatku glutathionu jako přirozeného inaktivátoru kovalentně váže na proteiny a způsobuje poškození buněk a hepatotoxicitu paracetamolu<sup>4</sup>.

Cyklická voltametrie je elektrochemická metoda, která umožňuje sledovat rychlý přenos elektronu mezi elektrodou

a zkoumanou látkou (její oxidaci či redukci), a dokáže také odhalit komplexní chemické reakce, které často přenos elektronů následují. Může poskytnout informace o oxidačně redukčním chování vzniklých (mezi)produktů, avšak neumožňuje jejich přímou identifikaci. Pro tyto účely lze s výhodou využít spojení elektrochemie s hmotnostní spektrometrií (on-line EC-MS)<sup>5</sup>. Tato kombinace dovoluje přímé monitorování výchozí sloučeniny, nestabilních meziproductů a finálních produktů elektrochemických reakcí probíhajících nejčastěji v průtokovém elektrochemickém článku v závislosti na potenciálu pracovní elektrody. Tandemová hmotnostní spektrometrie navíc může poskytnout cenné informace o struktuře detekovaných látek a tím napomocť jejich identifikaci bez ztráty časového rozlišení.

Vzniká-li elektrochemickou reakcí a následnými chemickými procesy složitější směs produktů, je výhodné před hmotnostně spektrometrickou detekci zařadit ještě chromatografickou separaci jednotlivých složek<sup>6</sup>. Tato separace může nabídnout navíc informaci o polaritě elektrochemicky generovaných produktů a v neposlední řadě také umožnit jejich izolaci pro další testování jejich vlastností.

V některých případech, např. u látek obsahujících fenolový, anilinový či *o*-methylendioxybenzenový strukturální motiv, mohou reaktivní oxidační meziproducty podléhat následným reakcím za tvorby oligomerních produktů, které se adsorbují na povrch elektrody a jsou pak obtížně detekovatelné v roztoku. Tyto látky lze analyzovat hmotnostní spektrometrií po jejich tepelné desorpci přímo z elektrodového povrchu v iontovém zdroji a ionizaci v korónovém výboji<sup>7</sup>.

Na příkladech látek (Schéma 1) ze skupiny léčiv (fesoterodin, zopiklon), pesticidů (imidakloprid) a polutantů životního prostředí (bromované fenoly), lze ilustrovat výše zmíněné přístupy ke studiu redoxních vlastností a analýze produktů oxidačních a redukčních reakcí při elektrochemickém modelování metabolických přeměn xenobiotik.

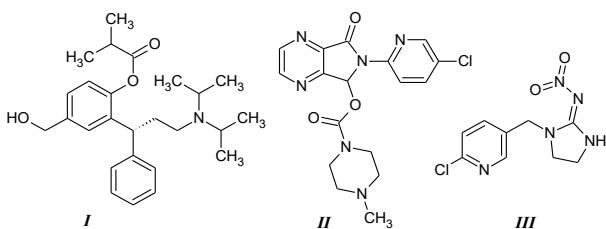


Schéma 1. Strukturální vzorce fesoterodinu (I), zopiklonu (II) a imidaklopridu (III)

Děkují všem spolupracovníkům, zejména doc. Petru Bartákovi, doc. Petru Bednářovi a doc. Petru Cankářovi, za spolupráci na výzkumu, jehož výsledky jsou v přednášce prezentovány. Tato práce vznikla za podpory grantů GA ČR 20-07350S a IGA\_PrF\_2020\_030.

#### LITERATURA

1. Anzenbacher P., Anzenbacherová E.: Cell. Mol. Life Sci. 58, 737 (2001).
2. Lohmann W., Karst U.: Anal. Bioanal. Chem. 391, 79 (2008).

3. Johansson T., Weidolf L., Jurva U.: Rapid Commun. Mass Spectrom. 21, 2323 (2007).
4. James L. P., Mayeux P. R., Hinson J. A.: Drug Metab. Dispos. 31, 1499 (2003).
5. Volk K. J., Yost R. A., Brajter-Toth A.: Anal. Chem. 64, 21 A (1992).
6. Faber H., Vogel M., Karst U.: Anal. Chim. Acta 834, 9 (2014).
7. 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).

#### PL-08

#### RYDAVATELSKÁ ASOCIACE CHEMISTRY EUROPE

#### PAVEL DRAŠAR

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

Vydavatelská asociace Chemistry Europe (European Chemical Societies Publishing) byla založena v roce 1995 a je sdružením 16 chemických společností z 15 evropských zemí, které zastupují více než 75 000 chemiků. Vydává rodinu vysoce kvalitních vědeckých časopisů o chemii, které pokrývají velmi širokou škálu oborů.

Z iniciativy J. M. Lehna a H. tom Diecka a dalších v roce 1995 na bedrech Angewandte Chemie a péči fy Wiley-VCH začal vycházet nový časopis Chemistry, a European Journal. Během dalších 3 let se vydavatelská rodina rozšířila o dalších 5 chemických společností, které zrušily své národní časopisy. Začaly vycházet Eur. J. Org. Chem. a Eur. J. Anorg. Chem. Od roku 1999 do dnešního dne se rodina vydavatelů rozšířila na 16 chemických společností z 15 zemí.

Asociace vydává 16 velmi kvalitních „evropských“ časopisů, které v roce 2019 publikovaly 9800 článků, jež byly staženy v elektronické podobě 14-miliardkrát. V roce 2020 se časopisy asociace rozmnoží o další dva.

ČSCH, z titulu spoluvlastnictví časopisů CE a za podíl prací českých autorů v těchto časopisech, získává každoročně podíl na výsledku hospodaření asociace.

K ocenění autorů, poradců, hostujících editorů, recenzentů a také za služby členů jejich národním chemickým společnostem zřídila asociace program Chemistry Europe Fellowship. Bylo uděleno 72 těchto titulů, členům ČSCH z toho tři.

Zájemce nalezne více informací na webových stránkách [www.chemistry-europe.org](http://www.chemistry-europe.org).

Presentace je podpořena grantem Chemistry Europe.

## 1L-01

**SPOJENÍ KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZY S HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIÍ PRO ANALÝZU BIOLOGICKY AKTIVNÍCH LÁTEK**

**JAN PETR, DANIEL BARON, PETRA ŠVECOVÁ, ANDREA ŠEBESTOVÁ, JAN ROZSYPAL, SOODABEH HASSANPOUR, RADKA PECHANCOVÁ, TOMÁŠ PLUHÁČEK**

*Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc  
jan.petr@upol.cz*

Kapilární elektroforéza (CE) je známá a dobře etablovaná technika pro separaci, jak nízkomolekulárních látek jako jsou jednoduché např. anorganické ionty, tak vysokomolekulárních látek typu proteinů nebo fragmentů nukleových kyselin. CE je nejčastěji využívána s relativně levným UV detektorem, který ale stojí za vysokými limity detekce a problematickou identifikací látek, zejména v komplexních vzorcích jako je např. krev nebo moč.

Tyto nevýhody lze překonat použitím spojení CE s hmotnostní spektrometrií (MS) a to jak „organickou“ MS, nejčastěji v uspořádání s ionizací elektrosprejem (ESI), tak „anorganickou“ MS, ve spojení s hmotnostní spektrometrií s indukčně vázaným plazmatem (ICP-MS). Obě varianty (CE-ESI-MS a CE-ICP-MS) nabízí poměrně hodně možných a zajímavých řešení pro analýzu zejména biologicky aktivních látek v komplexních maticích. Nicméně v rámci tohoto příspěvku budou diskutována nejen zmíněná pozitiva, ale prostor bude rovněž věnován úskalím obou technik a jejich porovnání.

Možnosti obou technik pak budou ukázány na několika aktuálně řešených problémech, jako je např. analýza vybraných inhibitorů tyrosin kínáz pomocí CE-ESI-MS a možnosti jejího urychlení<sup>1</sup>, analýza histidinu a karnosinu v moči pomocí CE-ESI-MS, chirální separace oxaliplatinu pomocí CE-ICP-MS (cit.<sup>2</sup>), „sweeping“ prekoncentrace a stanovení nečistot oxaliplatinu pomocí CE-ICP-MS (cit.<sup>3</sup>) a v neposlední řadě i studium hydrolyzy hexachloroplatičitanu pomocí CE-ESI-MS a CE-ICP-MS.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 19-23033S a IGA PrF\_2020\_30.*

## LITERATURA

1. Kotková M., Petr J.: *J. Chromatogr. A*, zasláno.
2. Šebestová A., Baron D., Pechancová R., Pluháček T., Petr J.: *Talanta* 205, 120151 (2019).
3. Švecová P., Baron D., Pluháček T., Petr J.: *Anal. Chem.*, zasláno.

## 1L-02

**ANALYSIS AND CHARACTERIZATION OF ANTIMICROBIAL PEPTIDES BY CAPILLARY ELECTROMIGRATION METHODS**

**VÁCLAV KAŠIČKA, TEREZA TŮMOVÁ, LENKA MONINCOVÁ, VÁCLAV ČEŘOVSKÝ**

*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Czech Academy of Sciences, Flemingovo 2, 166 10 Prague 6  
kasicka@uochb.cas.cz*

High-performance capillary electromigration methods, zone electrophoresis (CZE) and isotachopheresis (CITP), have been employed for qualitative and quantitative analysis and physicochemical characterization of polycationic antimicrobial peptides (AMPs) isolated from the venom of two species of Hymenoptera insects<sup>1</sup>. These AMPs are composed of 10–20 amino acids (AAs) with 3 to 7 basic AAs (His, Lys, Arg).

Purity degree of synthetic AMPs was quantified by CZE in acidic background electrolytes (BGEs) using capillary coatings with cationic surfactants or polymers suppressing peptide sorption to the capillary wall.

Acid-base and electromigration properties of the AMPs were investigated by combination of CZE and CITP. First, the mixed acidity constants,  $pK_{a,mix}$ , and the actual ionic mobilities of the AMPs were estimated by nonlinear regression analysis of the pH dependence of their effective mobilities measured in series of BGEs within wide pH range (1.80–12.10), at constant ionic strength (25 mM) and temperature (25 °C). Then, the  $pK_{a,mix}$  values were recalculated to the thermodynamic  $pK_{a,s}$  using the Debye-Hückel equation for activity coefficients.

Effective charge of the AMPs was estimated by CITP. This approach is based on the linear dependence of the CITP zone length of the analyte on its effective charge and injected substance amount. Cationic CITP systems with leading electrolyte (LE) composed of 10 mM ammonium leading ion, 40 mM acetate counterion, pH 4.1, and terminating electrolyte containing 40 mM acetic acid, pH 3.2, provided sharp AMPs zones with good linearity and repeatability of their lengths. Ionic mobilities of AMPs were determined by CZE in the BGE of the same composition as the LE. Using this procedure, the effective charge numbers of the AMPs were found to be in the range 1.65–5.04, i.e. much less than the theoretical charge numbers (2.86–6.99) calculated from the  $pK_{a}$  values<sup>2,3</sup>.

*The work was supported by the GACR, grant no. 18-02597S, and by the CAS, project no. RVO 61388963.*

## REFERENCES

1. Nešuta O., Hexnerová R., Buděšínský M., Slaninová J., Bednářová L. et al.: *J. Nat. Prod.* 79, 1073 (2016).
2. Tůmová T., Monincová L., Čeřovský V., Kašička V.: *Electrophoresis* 37, 3186 (2016).
3. Tůmová T., Monincová L., Nešuta O., Čeřovský V., Kašička V.: *Electrophoresis* 38, 2018 (2017).

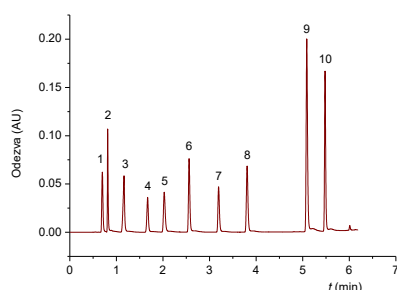


### 1L-03 VYUŽITÍ „MIX-MODE“ CHROMATOGRAFIE PRO SEPARACI PEPTIDŮ

ZUZANA KADLECOVÁ<sup>a</sup>, PETR KOZLÍK<sup>b</sup>, KVĚTA  
KALÍKOVÁ<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2, <sup>b</sup> Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2  
kalikova@natur.cuni.cz

Mix-mode chromatografie (MMC) představuje vhodnou techniku pro účinné separace strukturně odlišných sloučenin. Mix-mode stacionární fáze se vyznačují tím, že poskytují minimálně dva interakční mechanismy, které významně přispívají k retenci analytů<sup>1,2</sup>.



Obr. 1. Chromatogram separace dipeptidů. Kolona: Atlantis PREMIER BEH C18 AX (2,1 ×100mm, velikost částic 1,7 μm), 1) tyr-ala, 2) ala-tyr, 3) phe-ala, 4) ala-phe, 5) trp-ala, 6) ala-trp, 7) phe-tyr, 8) tyr-phe, 9) phe-trp, 10) trp-phe. MF: A:acetonitril, B: 5mM mravenčan amonný, pH 3,0 – gradientová eluce.

Tato práce je zaměřena na charakterizaci a porovnání retenčního a separačního potenciálu různých mix-mode kolon. Testované kolony obsahují sorbent, který kombinuje reverzní fázi (C18) s aniontově výměnnou skupinou, což umožňuje retenci nepolárních analytů i polárnějších kyselých látek. Chromatografické chování peptidů bylo testováno v mobilních fázích o různém pH a iontové síle. Ilustrativní chromatogram separace dipeptidů na mix-mode koloně je ukázán na obr. 1.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (číslo grantu:20-19655S).

#### LITERATURA

- Kadlecova Z., Kalikova K., Folprechtova D., Tesarova E., Gilar M.: J. Chromatogr. A 1625, 461301 (2020).
- Jandera P., Hájek T.: J. Sep. Sci. 218, 145 (2018).

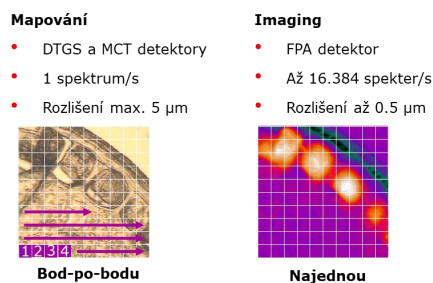
### 1L-04 NOVÉ TECHNOLOGIE V FTIR MIKROSKOPII A UKÁZKA JEJICH VYUŽITÍ PŘI ANALÝZE MIKROPLASTŮ

DAVID MATOUŠEK\*, JAN NEUMAN

Optik Instruments (Bruker), Purkyňova 649/127, 612 00 Brno  
david.matousek@brukeroptics.cz

FTIR mikroskopie je široce využívanou analytickou technikou v oblasti mikroanalýzy. Jde o kombinaci konvenční optické mikroskopie s FTIR spektrometrií – FTIR mikroskopy obvykle používají jeden společný objektiv pro viditelné záření (pro zvětšení pozorovaného objektu) a také pro infračervené záření (měření IČ spekter, získání chemické informace). Při současném zvětšení objektu je tedy možné naměřit infračervené spektrum z vybrané oblasti anebo provést tzv. chemické mapování větší plochy měřením bod-po-bodu. Typické maximální prostorové rozlišení FTIR mikroskopie, uváděné různými výrobci je v rozmezí 5–10 μm.

Unikátní technologií, která řádově vylepšuje prostorové rozlišení a také časovou náročnost chemického mapování je technologie FPA detektoru (focal-plane-array detektor). Jedná se o pole dílčích detektorových elementů v počtu až 128x128 ks. Každý dílčí element funguje nezávisle a po dopadu IČ svazku na pole detektorů je svazek rozdělen mezi tyto elementy. Oproti standardním jendoelementovým detektorům (MCT, DLaTGS, DTGS) není výstupem z jednoho měření jediné spektrum, ale až 16.384 spekter s prostorovým rozlišením až 0.5 μm. Při měření s FPA detektorem nehovoříme o FTIR mapování (bod-po-bodu), ale o imagingu (ukázka na obr. 1). Tato technika je výhodná při měření větších ploch FTIR a při potřebě vysokého prostorového rozlišení.



Obr. 1. Rozdíl mezi FTIR mapováním a FTIR imagingem

Mezi další technologie, které jsou dnes implementovány do moderní instrumentace patří termoelektricky (TE) chlazené MCT (Mercury-cadmium-telluride) detektory (bez nutnosti chlazení kapalným dusíkem) a také plně automatizované přístrojové komponenty jako je apertura, optická dráha přístrojem (transimse/reflexe), motorizovaný ATR krystal s tlakovým senzorem aj.

Tyto technologie přinášejí nová uplatnění FTIR mikroskopie v mnoha aplikacích – velkou perspektivu přinášejí např. v oblasti automatizované analýzy mikroplastů<sup>2</sup>, ale i v mnoha dalších aplikacích.

## LITERATURA

1. Levin I. W., Bhargava R.: Annual Review of Physical Chemistry 56, 429 (2005).
2. Primpke S., Lorenz C., Rascher-Friesenhausen R., Gerdt G.: Anal. Methods 9, 1499 (2017).

## 1L-05

## VPLYV ROZPUŠŤADLA NA NMR PARAMETRE OKTYL D-GLUKO- A D-GALAKTOPYRANOZIDOV

## NINA HABANOVA, RADEK POHL

Ústav organické chemie a biochemie Akademie věd České republiky, v. v. i., Flemingovo náměstí 542/2, 160 00 Praha 6  
nina.habanova@uochb.cas.cz

Sacharidy tvoria významnú skupinu biomolekul. Vďaka ich obrovskej štruktúrálnej rozmanitosti plnia v organizme množstvo rôznych funkcií od stavebnej funkcie až po zdroj energie. Ďalej sa zúčastňujú rady rôznych biologických procesov založených na špecifickom rozpoznávaní štruktúry sacharidu. Toto sa napríklad využíva v rozpoznávacom systéme sacharid-viažúcich proteínov, tzv. lektínov. Interakcia sa uplatňuje v procesoch embryonálneho vývoja, rastu, imunitnej odpovede a vývoja ochorenia<sup>1</sup>.

Pre správne porozumenie týchto funkcií je dôležité poznať konformáciu sacharidu. Metódou, ktorá významne prispieva k určeniu konformácie sacharidov je NMR spektroskopía. Vyznačuje sa možnosťou skúmania množstva parametrov citlivých práve na 3D štruktúru molekúl v roztoku.

Konformácia sacharidov je ovplyvnená mnohými faktormi, medzi ktoré patria van der Waalsove interakcie, elektrostatické interakcie, vodíkové mostíky a anomérny efekt. Najvýznamnejší vplyv majú intra- a intermolekulárne vodíkové mostíky, ktorých tvorba závisí na polarite rozpúšťadla.

V práci je predstavený vplyv rozpúšťadla na <sup>1</sup>H a <sup>13</sup>C NMR parametre (chemický posun, interakčná konštanta) oktyl D-glukopyranozidov a D-galaktopyranozidov. Amfifilný charakter týchto molekúl im zabezpečuje rozpustnosť v širokej škále rozpúšťadiel od nepolárnych po polárne aprotické a protické rozpúšťadlá. Štúdium konformácie pyranozidov je rozdelené na konformáciu pyranózového kruhu, hydroxymetylovej skupiny a aglykónu. Na polaritu rozpúšťadla je najcitlivejšia konformácia hydroxymetylovej skupiny s čím súvisia zmeny veľkosti interakčných konštánt <sup>3</sup>J<sub>H5,H6R</sub> a <sup>3</sup>J<sub>H5,H6S</sub>. Tieto interakčné konštanty nepriamo odrážajú populáciu rotamérov gg, gt a tg v roztoku<sup>2,3</sup>.

Experimentálne pozorovania sú doplnené výsledkami získanými metódami molekulového modelovania, konkrétne molekulovou dynamikou, DFT optimalizáciou a výpočtami NMR parametrov.

## LITERATÚRA

1. Ghazarian H., Idoni B., Oppenheimer S.: Acta Histochem. 113, 236 (2011).
2. Woods R.: Chem. Rev. 118, 8005 (2018).
3. Lonardi A., Oborský P., Hünenberger P.: Helv. Chim. Acta 100, e1600158 (2017).

## 1L-06

## ENZYMATICKÉ REAKCE VERSUS ELEKTROCHEMICKÁ TRANSFORMACE NAFTOYL INDOLOVÉHO DERIVÁTU

MICHAELA OBLUKOVÁ<sup>a,c</sup>, ROMANA SOKOLOVÁ<sup>a,d</sup>, ILARIA DEGANO<sup>b</sup>, RADOMÍR ČABALA<sup>c</sup>, BARBORA SZOTÁKOVÁ<sup>d</sup>, LENKA SKÁLOVÁ<sup>d</sup>

<sup>a</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Česká republika, <sup>b</sup> Universita v Pise, Katedra chemie a průmyslové chemie, Via Moruzzi 13, 56124 Pisa, Itálie, <sup>c</sup> Universita Karlova, 1. Lékařská fakulta, Kateřinská 1660/32, 12108 Praha 2, Česká republika, <sup>d</sup> Universita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Heyrovského 1203, 50005 Hradec Králové, Česká republika  
michaela.oblukova@jh-inst.cas.cz

V súčasnej dobe sa na drogovom trhu objavujú nové látky, ktoré jsou zneužívané pro svůj psychoaktivní efekt. Slouží jako alternativa klasických drog (heroin, kokain, extáze atd.), neboť nejsou uvedeny na seznamu zakázaných látek. Problém těchto látek spočívá v neúčinnosti současných metod toxikologického screeningu biologického materiálu z důvodu velkého množství jednotlivých derivátů<sup>1,2</sup>.

1-pentyl-3-(1-naftoyl)indol (dále jen "JWH-018") je sloučenina patřící do rozmanité skupiny syntetických kanabinoidů. Jde o skupinu nových syntetických drog s velmi různorodou strukturou, avšak jejich účinek je velmi podobný Δ9-tetrahydrokanabinolu, hlavní aktivní složce marihuany. K tomu, abychom mohli syntetické kanabinoidy detekovat v tělních tekutinách a tkáních, musíme znát jejich metabolismus, neboť jsou v lidském těle zcela metabolizovány<sup>3</sup>.

Pro zjištění reakčního mechanismu se s výhodou používají elektrochemické techniky kombinované s analytickými metodami. Jelikož se přenos elektronů podílí na metabolických drahách, bylo studováno elektrochemické chování JWH-018 s cílem identifikovat krátkodobě žijící meziproducty redoxních reakcí. Současně byla výše uvedená sloučenina inkubována s lidskými jaterními subcelulárními frakcemi (mikrosomy a cytosolem). Produkty získané elektrochemickými a biochemickými metodami byly identifikovány pomocí HPLC-MS/MS a slouží k identifikaci potenciálního metabolismu syntetického kanabinoиду.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 19-03160S.

## LITERATURA

1. Meyer M. R.: Arch. Toxicol. 90, 2421 (2016).
2. Wintermeyer A., Möller I., Thevis M. et al.: Anal. Bioanal. Chem. 398, 2141 (2010).
3. Grigoryev A., Melnik A., Savchuk S. et al.: J. Chromatogr. B Anal. Technol. Biomed. Life Sci. 879, 2519 (2011).

**1L-07****MONITORING BIOAKUMULACE RTUTI VE FELIS SILVESTRIS CATUS****LIBUŠE ARNOŠTOVÁ<sup>a</sup>, IVANA JANKOVSKÁ<sup>b</sup>,  
JUDITA ARNOŠTOVÁ<sup>a</sup>**<sup>a</sup> VŠCHT Praha, Technická 5, Praha 6, <sup>b</sup> ČZU, Kamýcká 129, Praha  
*libuse.arnostova@vscht.cz*

Zatížení životního prostředí rtutí je většinou monitorováno na základě sběru anorganických vzorků (půda, voda), rostlinstva nebo živočichů. V případě živočišných vzorků se jedná hlavně o vzorky masa a dalších tkání. Nejvyšší koncentrace se nacházejí ve vzorcích mořských ryb, kde, v závislosti na lokalitě, mohou být vyšší koncentrace tohoto kovu než v živočišných materiálech pocházejících ze souše, a to i v několika řádech. Rtuť se v mase mořských živočichů akumuluje a je známa celá řada masových otrav lidí, požívajících mořské ryby lovené v ústí velkých řek<sup>1</sup>.

Ve středoevropském prostoru je několik cest, kterými dochází ke kontaminaci životního prostředí rtutí. Jednou z nich jsou rezidua průmyslově vyráběných fungicidů a dalších agrochemikálií, které se používají v zemědělství. Tak se rtuť dostává do organismů polních hlodavců, kteří jsou následně konzumováni predátory, včetně kočky domácí.

Cílem naší práce bylo prozkoumat zastoupení rtuti v srsti kočky domácí, a to jak u zvířat, která konzumují volně žijící hlodavce, tak u zvířat chovaných striktně v uzavřeném prostředí. Zároveň jsme prověřili a modifikovali metodiku pro přípravu vzorku a měření rtuti v lidských vlasech a ověřili její použitelnost pro stanovení rtuti v srsti zvířat. Závěry, které z práce vyplynuly, otevírají nový pohled na domácí zvířata a jejich občasnou kořist, tj. volně žijící hlodavce, a to z hlediska jejich využití v monitoringu životního prostředí

**LITERATURA**

1. Glass.G. E.et al., v knize: *Mercury contaminated sites: characterization, risk assessment and remediation*, kap. 17, s. 467–485. Springer; New York 1999.

**1L-08****STANOVENIE OLOVA V PLACENTE VYUŽITÍM  
TECHNIKY DÁVKOVANIA JEMNEJ SUSPENZIE  
V KOMBINÁCIÍ S ATÓMOVOU ABSORPČNOU  
SPEKTROMETRIOU S ELEKTROTERMICKOU  
ATOMIZÁCIU****KATARÍNA KRIEGEROVÁ, JOZEF TUČEK, SIMONA  
PROCHÁZKOVÁ, RADOŠLAV HALKO***Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta,  
Katedra analytickej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6,  
842 15 Bratislava, Slovenská republika  
kriegerova2@uniba.sk*

V rámci chemickej analýzy sa stále väčšia pozornosť venuje vývoju tzv. „zelených“ analytických techník a metód, ktoré v čo najväčšej možnej miere redukujú alebo eliminujú ich negatívne vplyvy na životné prostredie a ľudské

zdravie. Všeobecne v zelenej analytickej chémii bolo zadaných dvanásť základných princípov<sup>1</sup>. V súčasnosti uvedené princípy spĺňa viacero analytických techník, a jednou z nich je aj technika dávkovania jemnej suspenzie (SS, Slurry Sampling).

Technika dávkovania jemnej suspenzie je založená na úprave tuhej vzorky na malé častice dispergované v kvapalnej fáze a jej následnom dávkovaní do vhodného analytického systému<sup>2</sup>. Často je využívaná na stopovú a ultrastopovú prvkovú analýzu v spojení s rôznymi technikami atómovej spektrometrie (AS), ako sú atómová absorpčná spektrometria s plameňovou atomizáciou (FAAS), atómová emisná spektrometria s indukčne viazanou plazmou (ICP-AES), hmotnostná spektrometria s indukčne viazanou plazmou (ICP-MS), atómová absorpčná spektrometria s elektrotermickou atomizáciou (ETAAS), a ďalšie<sup>3</sup>. Táto technika v porovnaní s klasickými mokkými technikami úpravy v AS, kde tuhé vzorky musia byť prevedené do roztoku, ponúka výhody spojené s redukciou počtu krokov úpravy vzoriek alebo ich úplnou elimináciou, skrátením času analýzy, zmenšením objemu použitých rozpúšťadiel, znížením alebo odstránením kontaminácie vzoriek, zlepšením presnosti merania, možnosťou kalibrácie pomocou roztokov štandardov a zlepšením citlivosti detekcie<sup>3</sup>. SS technika sa v kombinácii s technikami atómovej spektrometrie, a to najmä v kombinácii s ETAAS technikou ako koncovou detekčnou technikou používa na analýzu širokej škály vzoriek, medzi ktoré patria aj biologické vzorky. Príkladom aplikácie techniky SS v kombinácii s ETAAS ako koncovou detekčnou metódou je aj stanovenie olova v placente.

Ľudská placenta je komplexná biologická matrica obsahujúca rôzne chemické zlúčeniny, vrátane esenciálnych prvkov aj toxické kovy. Toxické látky sa do placenty dostávajú zo znečisteného prostredia, v ktorom ženy žijú. Toto prostredie môže u žien spôsobiť zmeny v mikroskopickej štruktúre placenty. Placenta je vlastne neúčinná prekážka, ktorá nie je schopná zabrániť prenosu nebezpečných ťažkých kovov, ako je ortuť, kadmium a olovo k plodu. Prítomnosť olova v placente predstavuje nebezpečenstvo pre nenarodené dieťa, keďže charakteristickým rysom ťažkých kovov je ich veľmi pomalé uvoľňovanie z tela<sup>4</sup>. Olovo a ďalšie neurotoxické kovy sa prenášajú jednoduchou difúziou z krvi matky cez syncytiotrofoblast do krvi plodu. Počas tehotenstva sa môže vyskytnúť hormonálna disharmónia, ktorá vedie k uvoľňovaniu olova z kostí a zubov ženy. Keďže vápnik je potrebný na vývoj kostry plodu, olovo uvoľňované spolu s vápnikom preniká do krvného obehu plodu. V dôsledku toho, že olovo je neurotoxický kov, môže vystavenie olovu počas prenatálneho a postnatálneho vývoja viesť k vážnemu neurokognitívnemu poškodeniu, a teda k rozvoju poruchy pozornosti s hyperaktivitou (ADHD) u vyvíjajúceho sa človeka<sup>5</sup>. Práve z tohto dôvodu je sledovanie hladiny olova v placente dôležité. Pre dojčatá, deti a ženy v plodnom veku je prípustná hladina olova v krvi 100 µg olova na 100 ml krvi<sup>5</sup>. Naša práca sa zaoberá stanovením olova v placente využitím SS techniky v kombinácii s ETAAS ako koncovou detekčnou technikou. Celkovo bolo analyzovaných 14 vzoriek placenty, odobraných ihneď po pôrode na Gynekologicko-pôrodnickom oddelení Fakultnej nemocnice s poliklinikou v Bratislave v priebehu roka 2019. Na vyhodnotenie hodnôt získaných zo série meraní bola použitá metóda prídavku štandardu, pretože

při použití metody kalibrace na vodné roztoky štandardov boli pozorované matricové efekty. K vzorkám placenty boli pridané prídavky 20, 30 a 50  $\mu\text{g l}^{-1}$  štandardu Pb. Výťažnosť stanovení Pb vo vzorkách s jednotlivými prídavkami štandardu Pb sa pohybovala od 90,3 % po 105,8 % (N=14). Priemerná hodnota relatívnej smerodajnej odchýlky (RSD) stanovenia Pb vo vzorkách ľudskej placenty bola pod 4 % (pre N = 6). Obsah Pb vo vzorkách placenty stanovený našou metódou sa pohyboval od 0,47  $\mu\text{g g}^{-1}$  po 1,20  $\mu\text{g g}^{-1}$ . Hodnoty RSD pre jednotlivé stanovenia sa pohybovali v rozmedzí 1,5–7,0 %. Získaná hodnota medze detekcie (LOD) pre Pb pri optimalizovaných podmienkach bola 0,17  $\mu\text{g g}^{-1}$  a hodnota medze stanovenia (LOQ) bola 0,56  $\mu\text{g g}^{-1}$ . Tieto limity boli vypočítané na základe 20 opakovaných meraní slepého pokusu. Na záver môžeme konštatovať, že naša metóda by sa mohla potenciálne použiť aj na analýzu iných biologických a/alebo environmentálnych vzoriek.

*Tato práce vznikla za podpory grantu vedeckej grantovej agentúry Ministerstva školstva Slovenskej republiky, VEGA č. 1/0678/19 a Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-17-0373.*

#### LITERATÚRA

1. Gałuszka A., Migaszewski Z., Namiesnik J.: Trends Anal. Chem. 50, 78 (2013).
2. Ferreira S. L. C., Miró M., Da Silva E. G. P., Matos G. D., Dos Reis P. S., Brandao G. C., Dos Santos W. N. L., Duarte A. T., Vale M. G. R., Araujo R. G. O.: Appl. Spectrosc. Rev. 45, 44 (2010).
3. Butcher J. D.: Appl. Spectrosc. Rev. 52, 755 (2017).
4. Al-Saleh I., Shinwari N., Mashhour A., Mohamed G.E., Rabah A.: Int. J. Hyg. Environ. Health. 214, 79 (2011).
5. Boskabadya M., Marefatib N., Farkhondehb T., Shakeric F., Mohammad A. F., Boskabadybd H.: Environ. International. 120, 404 (2018).

#### 1L-09

#### ELIMINAČNÍ PRINCIP V SPEKTRÁLNÍM EXPERIMENTU

#### LIBUŠE TRNKOVÁ

Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ústav chemie Kamenice 5, 625 00 Brno  
libuse@chemi.muni.cz

Eliminační princip je založen na skutečnosti, že určité části celkového experimentálního výsledku vykazují rozdílné závislosti na některém z nastavených experimentálních parametrů. Princip eliminace byl vyvinut a široce aplikován v elektrochemii (Elimination Polarography – EP a Elimination Voltammetry with Linear Scan – EVLS) za účelem studia elektrodových procesů a tvorby sofistikované platformy elektroanalytických přístupů<sup>1–13</sup>. Je třeba poznamenat, že zatímco voleným experimentálním parametrem v EP je čas a eliminační procedura využívá lineárních kombinací časových derivací a integrálů, v EVLS je měnicím se parametrem rychlost polarizace a eliminace spočívá v řešení eliminační funkce, vyjádřené jako lineární kombinace

celkových voltametrických proudů měřených při různých rychlostech polarizace. Koncept lineární kombinace dal podnět pro využití eliminačního principu i ve spektrálních experimentech.

Základní atributy eliminačního principu jsou zachovány i ve spektrálních aplikacích, tj.: (i) obecně lze eliminovat  $n$  různých částí experimentálního výsledku pomocí lineární kombinace  $n+1$  výsledků, (ii) jeden experimentální výsledek je volen jako referenční a ostatní záznamy registrované při změněném parametru jsou k němu vztaheny (normalizované hodnoty), (iii) podstatnou roli v eliminační proceduře hrají eliminační koeficienty nebo inkrement hodnot v příslušných lineárních kombinacích – funkcích a (iv) řešení funkcí přináší další, velmi důležité a často skryté informace.

Eliminační princip byl aplikován na spektrální systém, v němž je v rovnováze přítomen monomer a dimer. Na základě normalizovaných spekter měřených při třech různých koncentracích analytu, kde je koncentrační závislost absorbance nebo molární elipticity lineární (UV-Vis nebo CD spektra) byly teoreticky odvozeny vztahy pro výpočet dimerační konstanty. Navíc podíl inkrementů spekter s referenční, poloviční a dvojnásobnou koncentrací analytu daly možnost výpočtu podílu R (ratio), který by měl být v případě monomer-dimer rovnováhy na vlnové délce  $\lambda$  nezávislý. Jeho případná závislost na  $\lambda$  může být důkazem, že studovaný systém je komplikovanější a neodpovídá modelu, pro který byly teoretické vztahy odvozeny.

Teoretický aparát eliminační spektroskopie je nyní testován na známém kalibračním systému a předpokládáme jeho aplikaci na skupinu biologicky významných molekul, jako jsou puriny a pyrimidiny, popř. jejich vyšší struktury.

#### LITERATURA

1. Dracka O.: J. Electroanal. Chem. 402, 19 (1996).
2. Trnkova L., Dracka O.: J. Electroanal. Chem. 413, 123 (1996).
3. Trnkova L., Kizek R., Dracka O.: Electroanalysis 12, 905 (2000).
4. Trnkova L.: Chem. Listy 95, 518 (2001).
5. Sander S., Navratil T., Basova P., Novotny L.: Electroanalysis 14, 1133 (2002).
6. Trnkova L.: J. Electroanal. Chem. 582, 258 (2005).
7. Trnkova L. v knize: Utilizing of Bio-Electrochemical and Mathematical Methods in Biological Research. (eds. Kizek R., Adam V.) 1st edn, Application of Elimination Voltammetry with Linear Scan In Bioelectrochemistry, kap. 4, s. 51. Research Signpost, Kerala 2007.
8. Serrano N., Klosova K., Trnkova L.: Electroanalysis 22, 2071 (2010).
9. Trnkova L., Jelen F., Ozsoz M. v knize: Electrochemical DNA Biosensors (ed. Ozsoz M.) 1st edn, Electrochemical Transducer for Oligonucleotide Biosensor Based on the Elimination and Adsorptive Transfer Techniques, kap. 11, s. 355. Pan Stanford, 2012.
10. Pilarova I., Kejnovska I., Vorlickova M., Trnkova L.: Electroanalysis 26, 2118 (2014).
11. Triskova I., Trnkova L.: Chem. Listy 110, 222 (2016).
12. Trnkova L.: Chem. Listy 112, 802 (2018).
13. Skalova S., Langmaier J., Berek J., Vyskocil V., Navratil T.: Electrochim. Acta, 330 (2020).

### 1L-10 ELECTROANALYTICAL STUDY OF NITRO-FATTY ACIDS

**MARTINA ZATLOUKALOVA\***, JAN VACEK

Department of Medical Chemistry and Biochemistry,  
Faculty of Medicine and Dentistry, Palacky University,  
Hnevotinska 3, 775 15 Olomouc  
Martina.zatloukalova@seznam.cz

Nitro-fatty acids (NO<sub>2</sub>-FAs) are usually investigated for being reactive lipidic species produced during inflammatory and metabolic reactions. NO<sub>2</sub>-FAs are powerful biological electrophiles which can react with biological nucleophiles. Nitro-oleic acid (NO<sub>2</sub>-OA) and conjugated nitro-linoleic acid (NO<sub>2</sub>-cLA), have been demonstrated to have anti-inflammatory properties in a broad spectrum of pathologies<sup>1</sup>.

In this study, we focused on the evaluation of the redox properties of NO<sub>2</sub>-OA, NO<sub>2</sub>-cLA and nitro-linoleic acid (LNO<sub>2</sub>). The nitro group of NO<sub>2</sub>-FAs undergoes electrochemical reduction at a potential of around  $-0.8$  V (vs. Ag/AgCl) at pH 7.4 in an aqueous milieu<sup>2</sup>. Based on this reduction signal, the reactivity and stability of NO<sub>2</sub>-FAs can be monitored. EPR and fluorescence methods were used for the evaluation of NO<sup>•</sup> release.

As was mentioned above, these electrophilic species react with a variety of biological nucleophiles such as Cys, His and Lys amino acid residues in proteins through Michael's addition (Fig. 1). Constant-current chronopotentiometric stripping (CPS) analysis was utilized to evaluate the interaction of NO<sub>2</sub>-FAs with proteins. In a single CPS scan we can observe the reduction peak of NO<sub>2</sub>-FAs and also the peak H related to electrocatalytic process in which proton-donating amino acid residues of protein are involved. Interaction with proteins was monitored, based on the changes in the reduction peaks. In addition to the electrochemical approach, mass spectrometry (peptide mapping) and spectrophotometric methods were applied to evaluate the formation of Michael's adducts.

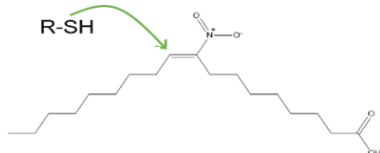


Fig. 1. Scheme of interaction of 9-nitro-oleic acid with –SH group of proteins

The authors wish to thank the Czech Science Foundation (GACR 19-21237Y), prof. B. Freeman (University of Pittsburgh, USA) and prof. M. Mojovic for EPR analysis.

#### REFERENCES

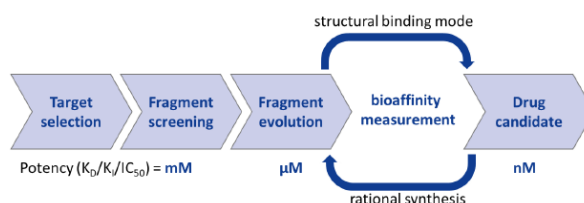
- Freeman A. B., Baker P. R. S., Schopfer F. J., Woodcock S. R., Napolitano A., d'Ischia M.: *J. Biol. Chem.* 283, 15515, (2008).
- Zatloukalova M., Mojovic M., Pavicevic A., Kabelac M., Freeman A. B., Pekarova M., Vacek J.: *Redox. Biol.* 24, 101213, (2019).

### 1L-11 VÝVOJ INHIBÍTOROV VÍRUSOVEJ METYLTRANSFERÁZY POMOCOU NMR

**MATÚŠ DREXLER**, VÁCLAV VEVERKA

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemingovo  
náměstí 542/2, 160 00 Praha  
matus.drexler@uochb.cas.cz

Neustále sme ohrozovaní vírusmi. Poznanie kľúčových metabolických ciest vírusovej aktivácie otvára nové cesty pre lieky nových generácií. Štruktúry molekúl s antivírusovou aktivitou môžu byť analyzované technikami založenými na testovaní knižnic malých fragmentov (obr. 1).



Obr. 1. Schéma použitia knižnice malých fragmentov pri vývoji liečiv nových generácií<sup>1</sup>

NMR je jedna z najbežnejšie používaných metód na hľadanie a analýzu vhodne interagujúcich molekúl. Kombinuje robustnosť, jednoduchosť a schopnosť analyzovať rôzne typy interakcií v prostredí blízkom *in vivo*. Často používanými experimentmi sú STD a 2D <sup>1</sup>H-<sup>15</sup>N HSQC, ktoré sa používajú na identifikáciu a charakterizáciu interakcií medzi fragmentmi a požadovaným proteínom. Spájaním alebo modifikovaním štruktúr vhodných fragmentov je možné získať nové molekuly s lepšími antivírusovými vlastnosťami, ktoré by mohli byť základom novej generácie antivirových liečiv<sup>2</sup>.

V tejto práci bola skúmaná interakcia medzi metyltransferázovou doménou proteínu (NS 5) z vírusu dengue a malými fragmentami. Z 1000 malých molekúl vykazovalo 96 molekúl STD NMR signál. Z nich 30 zvýšilo tepelnú stabilitu proteínu analyzovanú pomocou DSF. Ďalej bola zistená disociačná konštanta  $K_D$  a väzbové miesta pre jednotlivé molekuly (2D NMR titrácie). Taktiež bola úspešne priradená aminokyselinová sekvencia proteínu k jednotlivým signálom aminokyselín v NMR spektre. Tieto dáta boli následne využité na mapovanie interakcie molekúl na proteín.

Bola nájdená séria molekúl, ktorá môže byť ďalej použitá pri vývoji nových liečiv proti ochoreniu dengue. Proteínové NMR priradenie tohto proteínu môže byť ďalej použité na analýzy rôznych typov interakcií medzi týmto proteínom a ďalším partnerom/i.

Táto práca vznikla za podpory grantu spoločnosti GILEAD.

#### LITERATÚRA

- Vrzal L., v dizertácii: *Fragment-based drug discovery*, kap. 2, s. 8. VŠCHT, Praha 2019.
- Wu B., Zhang Z., Noberini R. et al.: *Chem Biol.* 20, 19 (2013).

**1L-12  
GLYCAN ANALYSIS OF THE SARS-COV-2 SPIKE  
GLYCOPROTEIN S1: LECTIN-BASED  
MICROARRAY AND MASS SPECTROMETRY  
APPROACHES**

**LUCIA PAŽITNÁ, ZUZANA PAKANOVÁ, PARAS  
KUNDALIA, KRISTÍNA KIANIČKOVÁ, MAREK  
NEMČOVIČ, PETER BARÁTH, JAROSLAV KATRLÍK**

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

A novel betacoronavirus named SARS-CoV-2 was identified as the causative agent of COVID-19, the disease affecting the lower respiratory tract manifesting as pneumonia in humans<sup>1</sup>. Coronavirus spike (S) glycoproteins promote entry into cells using ACE2 receptors and are the main target of antibodies, and vaccine development is focused to this principal as well. S glycoprotein comprises two functional subunits responsible for binding to the host cell receptor (S1 subunit) and fusion of the viral and cellular membranes (S2 subunit)<sup>2</sup>. S1 subunit is more exposed at the viral surface than S2 and is likely to be a subject of immune response.

Here we used two approaches, lectin-based microarray and mass spectrometry MALDI-TOF/TOF to reveal the glycan pattern on a recombinant SARS-CoV-2 spike glycoprotein S1 expressed in HEK293 mammalian cells. MALDI MS enabled detailed identification of presented N-glycan structures after their enzymatic release. Lectin-based microarray allowed determining the interactions of biologically accessible glycans with set of lectins, a special class of proteins selectively recognizing glycan structures, thus mapping the composition of glycan shell of S1 glycoprotein. The results obtained by both methods were in accordance. Our findings are in general in agreement as well with the data on glycan composition of SARS-CoV-2 S1 glycoprotein already reported<sup>3-7</sup>.

The glycomic studies are very important regarding both the understanding of SARS-CoV-2 acting and the development of efficient vaccine targeting the spike glycoprotein.

*Acknowledgment: APVV-17-0239, VEGA 2/0137/18, COST CA18132, H2020 ITN synBIOcarb, MZ SR 2019/7-CHÚSAV-4.*

**REFERENCES**

1. Sohrabi C. et al.: *Int. J. Surg.* 76, 71 (2020).
2. Walls A. C. et al.: *Cell* 181, 281.e6 (2020).
3. Watanabe Y. et al.: *Science*, in press (2020), doi: 10.1126/science.abb9983.
4. Zhang Y. et al.: *bioRxiv* preprint (2020), doi: 10.1101/2020.03.28.013276.
5. Watanabe Y. et al.: *Nat. Comm.*, 11, 2688 (2020).
6. Shajahan A. et al.: *Glycobiology*, in press (2020), doi: 10.1093/glycob/cwaa042.
7. Grant O. C. et al.: *bioRxiv* preprint (2020), doi: 10.1101/2020.04.07.030445.

**1L-13  
AFFINITY-BASED METHOD USING  
GLYCOPROTEIN MICROARRAY WITH LECTIN  
RECOGNITION FOR HIGH THROUGHPUT  
DETERMINATION OF GLYCOSYLATION IN  
CANCER**

**PARAS H. KUNDALIA, LUCIA PAŽITNÁ, KRISTÍNA  
KIANIČKOVÁ, JAROSLAV KATRLÍK**

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

Human body encounters various physiological and pathological states during the lifespan. Physiological changes for instance during various stages of growth, pregnancy, ageing along with environmental factors can amend the homeostasis of human body. Similarly, pathophysiology of complex human diseases like obesity, hypertension, diabetes, cancer and many other diseases is a consequence of combined effect of genetic and environmental factors. Genetics predominantly governs the propagation of genes to the next generation as well as the embryonic development. Contrastingly the impact of internal and external elements such as environment, diet, lifestyle and so on, on the overall homeostasis of the subject and its anomalies is reflected in terms of various means like excretion of metabolites, serum component markers and molecular markers. Structural alterations in glycan composition represent one such promising molecular marker depicting disease specific changes. Glycans are not directly encoded by a genetic code as in case of proteins, rather they are enzymatically assembled by biosynthetic pathways. Hence, any physiological or pathological factors affecting such enzymatic activities can alter the final structure of glycans. Consequently, the glycan structure mediated biological outcomes are influenced by glycan structure modulations.

Glycan and lectin arrays in combination with other analytical tools serve as excellent means for high throughput determination of the changes in the glycosylation pattern. This can further help to understand the implications of alterations in glycan structure during the pathophysiology of a particular disease and thereby help in early diagnosis of a disease. Here we tried to demonstrate one such approach to decipher changes in glycan composition in case of patients (n = 150) diagnosed with various cancers using glycoprotein arrays. This will further help to understand the alterations occurring in glycans due to various oncological onset and further propose a potential marker for early diagnosis.

*Acknowledgments: H2020 ITN synBIOcarb, APVV SK-SRB-18-0028.*

**REFERENCE**

1. Zhang L. (editor) et al.: *Progress in Molecular Biology and Translational Science*, Vol. 162, chapters 1–8, pp. 1–184. Academic Press, Cambridge 2019.

**1P-01  
VYUŽITÍ MIKROEXTRAKCE DO DUTÉHO VLÁKNA  
PRO VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ KYSELINY  
HOMOVANILOVÉ**

**VOJTĚCH HRDLIČKA<sup>a,b,\*</sup>, JIŘÍ BAREK<sup>b</sup>, TOMÁŠ  
NAVRÁTIL<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.,  
Dolejškova 2155/3, 182 23 Praha 8, <sup>b</sup> Univerzita Karlova,  
Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO  
laboratoř elektrochemie životního prostředí, Hlavova 2030/8,  
128 43 Praha 2  
vojtech.hrdlicka@jh-inst.cas.cz

Byla vyvinuta nová metoda pro stanovení klinického biomarkeru kyseliny homovanilové (HVA) s využitím mikroextrakce přes tekutou membránu ukotvenou ve stěně porézního polypropylenového dutého vlákna (HF-LPME) s následnou voltametrickou detekcí na borem dopované diamantové elektrodě (BDDE). Stanovení HVA je relevantní z hlediska diagnostiky, screeningu a monitorování průběhu léčby rozličných nemocí nervového systému včetně nádorových onemocnění neuroblastomu a feochromocytomu<sup>1</sup>.

Optimální podmínky pro HF-LPME HVA byly: 0,1 mol l<sup>-1</sup> NaOH donorový roztok, tektutá membrána tvořená butylbenzoátem, 0,1 mol l<sup>-1</sup> fosfátový pufr s iontovou silou upravenou NaCl na  $I = 0,55$  mol l<sup>-1</sup> a čas extrakce 30 min. pH akceptorového roztoku je kompromisem mezi výtěžkem HF-LPME a optimálními podmínkami pro voltametrickou detekci, aby bylo dosaženo co nejvyšší citlivosti a selektivity stanovení. Pro stanovení HVA v 10 µL extraktu byl použit miniaturizovaný 3elektrodový systém s katodicky předupravenou (-1,0 V/15 s) BDDE v obráceném uspořádání<sup>2</sup>.

Dosažené meze stanovitelnosti a detekce činí 1,2/0,4 µmol l<sup>-1</sup> s využitím HF-LPME a 2,4/0,8 µmol l<sup>-1</sup> bez extrakce. HF-LPME zde slouží zejména jako čistící procedura pro vzorky v komplikovaných maticích jako je lidská moč, kde jsou čistě elektrochemické techniky obtížně využitelné v oblastech kladných potenciálů z důvodu přítomnosti velkého množství elektrochemicky oxidovatelných interferentů, zejména kyseliny askorbové a močové<sup>3,4</sup>. Vyvinutá metoda byla verifikována na vzorku lidské moči, kterou poskytnul dospělý dobrovolník. S využitím metody standardního přídávku HVA činila nalezená koncentrace HVA v moči 13,50 ± 0,80 µmol l<sup>-1</sup>, RSD = 9,3 %.

Výhodami této metody jsou nízké meze detekce, možnost analýzy HVA v moči, nízké provozní náklady a minimální environmentální dopady.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 20-01589S.*

**LITERATURA**

1. Eisenhofer G., Kopin I. J., Goldstein D. S.: *Pharmacol. Rev.* 56, 331 (2004).
2. Hrdlicka V., Navratil T., Berek J.: *J. Electroanal. Chem.* 835, 130 (2019).
3. Makrlikova A.: *Chem. Listy* 112 (2018).
4. Baluchova S., Berek J., Tome L. I. N., Brett C. M. A., Schwarzova-Peckova K.: *J. Electroanal. Chem.* 821, 22 (2018).

**1P-02  
POKROČILÉ METÓDY NA DIAGNOSTIKOVANIE  
RAKOVINY PRSNÍKA POMOCOU  
GLYKOPROFILÁCIE PROTEÍNOV**

**VERONIKA PINKOVÁ GAJDOŠOVÁ, LENKA  
LORENCOVÁ, JÁN TKÁČ**

*Chemický ústav, Slovenská akadémia vied, Dúbravská  
cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovensko  
chemvega@savba.sk*

Karcinóm prsníka predstavuje 23% spomedzi všetkých prípadov rakoviny vo svete a spôsobuje druhý najvyšší počet úmrtí. Preto je obrovský dopyt po spoľahlivej a efektívnej diagnostike menej invazívnou cestou t.j. analýza biomarkerov vo vzorkách sér. Zamerali sme sa na výskum rakovinového antigénu (CA 15-3) a Mamaglobínu A ako biomarkerov tejto choroby.

Glykány (komplexné sacharidy kovalentne naviazané na proteíny), riadia a podporujú bunkové interakcie, interakcie hostiteľa a patogénu, bunkovú signalizáciu, progresiu ochorenia i tvorbu metastáz<sup>1</sup>. Zmeny v glykozylácii sú často charakteristické pre malígnu transformáciu a nádorovú progresiu<sup>2</sup>.

Povrchová plazmová rezonancia (SPR) je optická metóda, ktorá sa používa na detekciu interakcií medzi analytom a ligandom imobilizovaným na povrchu čipu<sup>3</sup>. Lektíny sú proteíny viažuce sacharidy, ktoré sú vysoko špecifické pre glykány.

V pilotných štúdiách sme skúmali interakcie medzi biomarkermi CA 15-3, Mamaglobínom A a rôznymi lektínmi pomocou SPR a microarray. Proteínová microarray patrí tiež medzi metódy umožňujúce štúdium interakcií molekúl na povrchu čipu. Pomocou vybraných biočipových techník a s využitím širokej škály lektínov sme určili glykozylačný profil potencionalných biomarkerov rakoviny prsníka – CA 15-3 a Mamaglobínu A.

*Tento príspevok je výsledkom realizácie projektu VEGA 2/0137/18 a 2/0090/16, a APVV 17-0300. Radi by sme poďakovali podpore z ERC Proof of Concept grant (No. 825586).*

**LITERATÚRA**

1. Dosekova E., Filip J., Bertok T., Both P., Kasak, P., Tkac J.: *Medicinal research reviews* 37, 514 (2017).
2. Clark B. Z., Onisko A., Assylbekova B., Li X., Bhargava R., Dabbs D. J.: *Modern pathology: an official journal of the United States and Canadian Academy of Pathology, Inc.* 32, 354 (2019).
3. Damborský P., Švitel J., Katrlík J.: *Optical biosensors. Essays Biochem.* 60, 91 (2016).

## 1P-03

**APLIKÁCIA NA LEKTÍNOCH ZALOŽENEJ MICROARRAY A MALDI-MS METÓDY PRI ANALÝZE GLYKOZYLÁCIE REKOMBINANTNÝCH MONOKLONÁLNYCH IGA PROTILÁTK**

**LUCIA PAŽITNÁ<sup>a</sup>, MAREK NEMČOVIČ<sup>a</sup>, ZUZANA PAKANOVÁ<sup>a</sup>, PETER BARÁTH<sup>a</sup>, TEIMUR ALIEV<sup>b</sup>, DMITRY DOLGIKH<sup>c,d</sup>, VICTORIA ARGENTOVA<sup>c</sup>, JAROSLAV KATRLÍK<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Chemický ústav, SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38, Bratislava, <sup>b</sup> Department of Chemical Enzymology, School of Chemistry, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia, <sup>c</sup> Department of Bioengineering, School of Biology, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia, <sup>d</sup> Shemyakin-Ovchinnikov Institute of Bioorganic Chemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia  
chemlpaz@savba.sk

Glykozylácia terapeutických proteínov je jednou z najčastejších a najdôležitejších posttranslačných modifikácií ovplyvňujúcou ich vlastnosti (rozpusťnosť, termostabilita, imunogenicita, účinnosť) a je tak dôležitým parametrom ovplyvňujúcim kvalitu a tým aj účinnosť terapeutických glykoproteínov<sup>1</sup>. Imunoglobulíny sú produkované špecifickým imunitným systémom za účelom identifikácie a neutralizovania cudzích antigénov a patogénov, ktorým je organizmus vystavený<sup>2</sup>. Terapeutické protilátky sú často produkované v cicavčích bunkách, vďaka ktorým sa dosahuje glykozylácia podobná ľudskej. Rekombinantné IgA zohrávajú dôležitú úlohu v boji proti mnohým vzdušným infekčným ochoreniam (chrípka, rota vírusy, osýpky) a sú prvou obrannou líniou pri imunologickej odpovedi. V práci bol sledovaný meniaci sa N-glykánový profil IgA protilátok, ktoré boli produkované v ovariálnych bunkách čínskeho škrečka za rôznych podmienok. Profil biologicky dostupných glykánov bol získaný pomocou na lektínoch založenej microarray metódy, pri ktorej boli vzorky rekombinantných IgA nanášané vo forme škvrn (nL objemy) na epoxidové microarray substráty, inkubované s biotinylovanými lektínmi rôznej špecificity, značené fluorescenčnou značkou konjugovanou so streptavidínom a merané fluorescenčným skenerom. Glykány prítomné vo vzorkách boli po ich odštiepení analyzované taktiež pomocou MALDI-MS a vybrané glykánové štruktúry boli ďalej analyzované MS-MS. Výsledky oboch metód medzi sebou korelovali a tieto metódy sa javia ako vhodné na sledovanie glykozylácie a jej zmien u IgA a iných terapeutických proteínov<sup>1</sup>.

Práca bola podporená grantami APVV SK-SRB-18-0028, APVV-17-0239, VEGA 2/0137/18, VEGA 2/0130/18, MZ SR 2019/7-CHÚSAV-4, COST CA16113 a COST CA18132.

## LITERATÚRA

1. Pažitná L. et al.: J. Biotechnol. 314-315, 34 (2020).
2. Zauner G. et al.: Mol. Cell. Proteomics. 12, 856 (2013).

## 1P-04

**MALDI-MS METHOD FOR DISCOVERY OF GLYCAN BIOMARKERS IN COLORECTAL CANCER**

**JUVISSAN AGUEDO\*, ZUZANA PAKANOVA, JAN TKAC**

*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences (ICSAS), Bratislava, Slovakia  
chemjmaa@savba.sk*

Colorectal cancer (CRC) is the third most common cancer detected in both men and women and the second most common cause of cancer deaths in the United States according to the World Health Organization<sup>1</sup>. Some studies have identified presence of aberrant glycans at early stages of CRC and changes in the glycosylation pathway are associated with the CRC progression<sup>2</sup>. To establish a glycosylation analysis is still challenging because of the low throughput, sample preparation is very laborious and time consuming, the system is very complex to operate and highly qualified analyst is needed to interpret the mass spectrometry (MS) spectra. Since glycans can be useful biomarkers for early detection of CRC is necessary to establish a glycosylation analysis. In our study we are aiming to identify potential glyco-biomarkers in model glycoproteins and serum samples using matrix-assisted laser desorption/ionization (MALDI) time-of-flight (TOF) MS. Experimental approach: The glycoprotein was treated with PNGase F to release glycans that were purified using PGC columns and sequently permethylated. Glycosylated structures were assigned using GlycoWorkbench. Additional MS/MS fragmentation was performed in order to know the structural analysis of N-glycans. Results and discussion: in alpha-fetoprotein, the degree of fucosylation was found to be 18.6%, while sialylated and branched glycans were 5.5% and 3.4%, respectively. The predominant glycoform was A2G2 (62.8%), followed by FA2G1 (7.4%) and FA2G2 (4.5%). The glycans identified in serum samples will be shown in detail in our poster. Furthermore, the masses of the main glycans were as expected. Conclusion: MALDI-MS analysis allowed to identify and quantify the glycans present in model glycoproteins, aberrant glycans such as sialylated, fucosylated, and branched glycans can be used as promising biomarkers for early diagnostic of CRC.

*The authors would like to acknowledge for the financial support from the Innovative Training Network (no 813120) and from the Ministry of Health of the Slovak Republic under the project registration number 2019/7-CHÚSAV-4.*

## REFERENCES

1. Caso R., Fabrizio A., Sosin M.: Annals of Translational Medicine 8, 164 (2020).
2. de Freitas Junior J. C. M., Morgado-Díaz J. A.: Oncotarget 7, 19395 (2016).



## 1P-05

## PRÍPRAVA GLYKÁNOVÝCH POVRCHOV A ICH APLIKÁCIE V BIOSENZOROCH

**ANNA BLŠÁKOVÁ, FILIP KVĚTOŇ, LENKA LORENCOVÁ, JÁN TKÁČ**

*Chemický ústav, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovensko  
anna.blsakova@gmail.com*

Glykány patria k základným molekulám bunky. Glykozylácia je postranslačná enzymatická modifikácia proteínov a lipidov. Poruchy v procese glykozylácie napovedajú o patologickom stave v bunke. Jednou z najznámejších porúch glykozylácie je porucha v skladaní enzýmu T-syntázy, spôsobená disfunkciou molekulárneho chaperónu *COSMC*. Prítomnosť aberantných glykánov (GalNAc<sub>1</sub>-O-Ser / Thr – Tn antigén, Neu5Ac<sub>2</sub>-6GalNAc<sub>1</sub>-O-Ser/Thr – sialyl-Tn antigén, Gal $\beta$ 1-3GalNAc<sub>1</sub>-O-Ser/Thr – T antigen) je dokázaná u mnohých druhov rakoviny (prostata, žalúdok, hrubé črevo, pľúca, pažerák...) a spája sa so zlou prognózou pacienta<sup>1,2</sup>. Pomocou detekcie autoprotilátok, vytvorených imunitným systémom voči aberantným glykánom, ktoré sa vyskytujú v organizme už pred prejavom prvých príznakov ochorenia, je možné predpovedať rozvoj ochorenia.

Monitorovali sme elektrochemické správanie sa rôzne ošetrených povrchov cyklickou voltampérometriou (CV) pri rôznych podmienkach. Diferenčná pulzná voltampérometria (DPV) bola použitá na skúmanie interakcií medzi aberantným glykánom a protilátkou, resp. lektínom. Podľa definície IUPAC je biosenzor analytické zariadenie, ktoré je schopné poskytovať špecifickú kvantitatívnu alebo semikvantitatívnu analytickú informáciu. Biosenzor obsahuje citlivý prvok biologického pôvodu (bioelement) alebo od biológie odvodenú zložku (receptor), ktorý je buď súčasťou alebo sa nachádza v úzkom kontakte s fyzikálno-chemickým prevodníkom<sup>3</sup>. Vyvinutý biosenzor detegoval analyty s vysokou selektivitou a citlivosťou až na atomolárnu úroveň. V závere sme študovali interakcie a kinetiku glykán-proteínovej interakcie pomocou povrchovej plazmónovej rezonancie (SPR). SPR nám ponúka rôzne kinetické konštanty – disociačnú konštantu komplexu a navyše kinetické konštanty jeho tvorby a rozkladu.

*Autori ďakujú za finančnú podporu z projektu APVV 17-0300.*

## LITERATÚRA

1. Ju T., et al.: *Cancer Res.* 68, 1636 (2008).
2. Cadena A. P., Cushman T. R., Welsh J. W.: *Int. Rev. Cell. Mol. Biol.* 343, 111 (2019).
3. Květoň F. et al.: *Sensors* 19, 5409 (2019).

## 1P-06

## GLYKOMICKÁ ANALÝZA VZORIEK SÉR DETÍ S OCHORENÍM ADHD LEKTÍNOVOU MICROARRAY METÓDOU A HMOTNOSTNOU SPEKTROMETRIOU

**KRISTÍNA KIANIČKOVÁ<sup>a</sup>, LUCIA PAŽITNÁ<sup>a</sup>, PARAS KUNDALIA<sup>a</sup>, ZUZANA PAKANOVÁ<sup>a</sup>, MAREK NEMČOVIČ<sup>a</sup>, PETER BARÁTH<sup>a</sup>, EVA KATRLÍKOVÁ<sup>b</sup>, JÁN ŠUBA<sup>b</sup>, JANA TREBATICKÁ<sup>b</sup>, SEONGHUN KIM<sup>c</sup>, JAROSLAV KATRLÍK<sup>a</sup>**

*<sup>a</sup> Chemický ústav, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovensko, <sup>b</sup> Klinika detskej psychiatrie LFUK a NÚDCH, Limbová 1, 831 01 Bratislava, Slovensko, <sup>c</sup> Jeonbuk Branch Institute, KRIBB, Jeongeup, Korea  
chemkian@savba.sk*

Porucha aktivity a pozornosti (ADHD) je neurovývojové ochorenie, ktoré sa u pacientov prejavuje znakmi, medzi ktoré možno zaradiť nepozornosť, impulzivitu a hyperaktivitu<sup>1</sup>. Glykozylačné zmeny sú spojené s nástupom a vývojom mnohých ochorení a ich sledovanie je významné aj z hľadiska vývoja nových prístupov pre výskum a diagnostiku neurovývojových ochorení. Zamerali sme sa na glykomickú analýzu vzoriek pacientov s ochorením ADHD. Porovnávali sme glykánový profil vzoriek sér pacientov s ADHD ( $n = 10$ ) a kontrolnej skupiny ( $n = 10$ ). Po predúprave sér pomocou deplečného kitu sme získali 2 typy vzoriek: depletované séra (bez IgG a albumínu) a frakciu IgG a albumínu. Tretím typom vzorky bolo celé sérum. Lektíny sú skupinou proteínov, ktoré špecificky viažu určité glykány. Tento typ biorozpoznávania sme využili pri analýze patientskych vzoriek sér microarray metódou založenou na lektínoch. Nanesením vzoriek sme pripravili glykoproteínový microarray biočip, inkubovali ho so sadou biotinylovaných lektínov a následne s fluorescenčnou značkou konjugovanou so streptavidínom<sup>2</sup>. Hmotnostná spektrometria (MS) je štandardná metóda využívaná pri glykomických analýzach. Vzorky, ktoré sme pred samotným MS meraním upravili podľa príslušného protokolu<sup>3</sup>, sme analyzovali metódou MALDI-TOF MS. Závěry získané z analýz oboma metódami sú navzájom v súlade, zhodujú sa aj so závermi práce venujúcej sa podobnému výskumu<sup>4</sup>. Glykomická analýza je nádejným prístupom, ktorý môže významne napomôcť pri výskume, zlepšovaní diagnostiky a aj terapii tohto ochorenia a microarray metóda navyše umožňuje high-throughput screening potenciálnych biomarkerov.

*Prácu podporili: APVV SK-KR-18-0004, APVV-17-0239, APVV-17-0300, VEGA 2/0137/18, COST CA16113, COST CA18132, H2020 ITN synBIOcarb, MZ SR 2019/7-CHÚSAV-4.*

## LITERATÚRA

1. Huang C. L. C. et al.: *Psychiatry Res.* 284, 112792 (2020).
2. Patwa T. et al.: *Mass Spectrom. Rev.* 29, 830 (2010).
3. Pažitná L. et al.: *J. Biotechnol.* 314-315, 34 (2020).
4. Pivac N. et al.: *Mol. Cell. Proteom.* 10, M110-00420 (2011).

## 1P-07

## MODIFIKOVANÉ GLYKÁNOVÉ POVRCHY A ICH VYUŽITIE

FILIP KVĚTOŇ\*, ANNA BLŠÁKOVÁ, JÁN TKÁČ

Chemický ústav, Slovenská akadémia vied, Dúbravská  
cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovensko  
chemfilo@savba.sk

Sacharidy reprezentujú jednu zo štyroch základných tried biomolekúl. Neoplastická transformácia ľudských buniek je spojená s mnohými genetickými a epigenetickými zmenami. Množstvo glykánov na bunkových povrchoch často využívame ako referenčné hodnoty pre zistenie informácií o biologickom stave<sup>1</sup>. Počas progresie rakoviny sa zistilo, že rôzne tumor asociované sacharidové antigény sprostredkávajú kľúčové kroky v patofyziologických procesoch. Štúdium aberantnej glykozylácie môže viesť k riešeniu viacerých dlhodobých problémov vo výskume rakoviny a využívanie glykokojugátov má nezastupiteľnú úlohu v diagnostike<sup>2</sup>. Už po mnoho rokov je rakovina jedným z najčastejších ochorení vedúcich k úmrtosti. Prítomnosť Tn antigénu (GalNAc $\alpha$ 1-O-Ser/Thr) bola pozorovaná vo viac ako 80 % rozličných rakovín<sup>3</sup>. S ohľadom na jeho skorú produkciu v transformovaných bunkách, môžeme o ňom uvažovať ako o potenciálnom biomarkeri a eventúálnom analytickom nástroji. Najnaliehavejším aspektom, je zlepšenie nástrojov včasnej diagnostiky. Detekcia počiatočných štádií nádoru umožňuje podať vhodnú a personalizovanú liečbu skôr.

V práci sme sa venovali tvorbe, charakterizácii a porovnaniu biosenzorov na diagnostiku tumor-asociovej protilátky GOD3-2C4 na zlatom a uhlíkom modifikovanom povrchu. Štúdiá porovnáva rôzne metódy prípravy, úpravy povrchov a analytické vlastnosti biosenzorov. Najdôležitejším výsledkom pri modifikácii povrchov je zistenie, že najlepším spôsobom, ako využívať malý glykán na detekciu tumor asociovej protilátky, je imobilizácia molekuly na vrstve HSA. Glykánový biosenzor založený na 3D kompozícii ponúkol oveľa lepšiu analytickú výkonnosť ako senzor bez použitia HSA, či už z pohľadu citlivosti (aM koncentrácie analytu), lineárneho rozsahu, medze detekcie, priemernej relatívnej chyby a kinetiky interakcií. Dosiahnuté výsledky boli získané a overené viacerými nezávislými metódami. Pri oboch typoch povrchov boli dosiahnuté zhodné výsledky, ktoré vykazovali vyšší stupeň korelácie. V práci sú porovnávané výhody a nevýhody jednotlivých typov povrchov.

Výsledky tohoto výskumu boli dosiahnuté vďaka finančnej podpore z grantu APVV 17-0300.

## LITERATÚRA

1. Paleček E., Tkáč J., Bartošík M., Bertók T., Ostatná V., Paleček J.: Chem. Rev. 115 (2015).
2. Květoň F., Blšáková A., Hushégyi A., Damborský P., Blixt O., Jansson B., Tkáč J.: Langmuir 33, 11 (2017).
3. Ju T., Otto V. I., Cummings R. D.: Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 50, 8 (2011).

## 1P-08

## ULTRACITLIVÉ STANOVENÍ NEČISTOT OXALIPLATINY POMOCÍ „SWEEPING“ MEKC-ICP-MS

DANIEL BARON, PETRA ŠVECOVÁ, RADKA PECHANCOVÁ, TOMÁŠ PLUHÁČEK, JAN PETR

Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta,  
Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46  
Olomouc  
BaronDaniel@email.cz

Oxaliplatin je léčivo, používané nejčastěji k léčbě kolorektálního karcinomu. Další uplatnění nalézá také při léčbě rakoviny plic, vaječníků nebo non-Hodgkinova lymfomu<sup>1</sup>. Protože je doprovázena svými nečistotami, jež se v přípravku objevují v malém množství a jejichž vliv není pořádně prozkoumán, je důležité mít techniku, která umožní stanovení takových sloučenin ve standardu daného léčiva nebo například v tělních tekutinách.

Díky svým výhodám (vysoká účinnost, nízká spotřeba vzorku a reagensii nebo rychlost analýz) se kapilární elektroforéza (CE) v módu micelární elektrokinetické chromatografie (MEKC) jeví jako vhodná k těmto účelům. Elegantním řešením jejich nedostatků (zejména nízké detekční limity u nejčastěji používaných DAD detektorů), může být pak využití on-line prekoncentračních technik nebo použití jiného detektoru, popř. kombinace těchto přístupů.

V této práci jsme se tedy zaměřili na vývoj rychlé a citlivé metody pro separaci a kvantifikaci některých nečistot přirozeně se vyskytujících v tomto léčivě (nečistoty B a C)<sup>2</sup>. Toho bylo docíleno zkombinováním online prekoncentrační metody – „sweeping“ a spojením s ICP-MS pomocí námi vyvinutého interface. Za optimálních podmínek (dávkování 90 s tlakem 50 mbar a použití 25 mM H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>/NaOH pH 2,15 + 175 mM SDS jako základního elektrolytu) bylo při sledování izotopu <sup>195</sup>Pt dosaženo detekčních limitů v řádu jednotek ppb (viz tabulka I).

Tabulka I

	Nečistota B	Nečistota C	Oxaliplatin
LOD sweeping CE-ICP-MS (μg l <sup>-1</sup> )	4	1	3
LOD CE-DAD (μg l <sup>-1</sup> )	13 917	1 655	6 258

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 19-23033S a IGA\_PrF\_2020\_030.

## LITERATURA

1. Šebestová A., Baron D., Pechancová R., Pluháček T., Petr J.: Talanta 205, 120151 (2019).
2. European Pharmacopoeia 7.0, pp. 2635–2638.

## 1P-09

**ELEKTROCHEMICKÁ CHARAKTERIZACE INTERAKCE MEZI OLIGONUKLEOTIDY SPECIFICKÝMI PRO DNA VIRU AFRICKÉHO MORU PRASAT A CdTe KVANTOVÝMI TEČKAMI****DOMINIK BANÁŠ<sup>a,b,d</sup>, STEFANO SALMISTRARO<sup>a,c</sup>, MIROSLAVA KRZYŽÁNKOVÁ<sup>d</sup>, BOŽENA HOSNEDLOVÁ<sup>d</sup>, RENÉ KIZEK<sup>a,d,e,\*</sup>**

<sup>a</sup> Oddělení výzkumu a vývoje, Prevention Medicals s.r.o., Studentská 812/6, 625 00 Brno, Česko, <sup>b</sup> Ústav biochemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kamenice 753/5, 625 00 Brno, Česko, <sup>c</sup> University of Bologna, Via Tolara di Sopra, 50–40064 – Ozzano dell'Emilia – Bologna, Itálie, <sup>d</sup> Výzkumný ústav veterinárního lékařství, Hudcova 296/70, 621 00 Brno, Česko, <sup>e</sup> Ústav humánní farmakologie a toxikologie, Farmaceutická fakulta, MU, Palackého tř. 1946/1, 612 42 Brno, Česko  
kizek@sci.muni.cz

Virus Afrického moru prasat (ASF), způsobuje velmi závažné onemocnění, které se projevuje až 100 % smrtelností. ASF napadá divoká i domácí prasata. Jelikož proti tomuto onemocnění neexistuje vakcína, hledají se cesty rychlé a senzitivní detekce tohoto viru v různých biologických matricích. Cílem práce bylo navrhnout biosenzor založený na oligonukleotidových (ODN) sondách pro virus ASF značených CdTe kvantovými tečkami (CdTe QDs).

V práci byla studována interakce mezi ASF ODN (KING F a KING R), ASF PCR produktem a CdTe QDs. Byly získány závislosti na koncentraci ODN ( $y = -1,91 + 40,54 x$ ) pro KING F; ( $y = -2,32 + 132,06x$ ) pro KING R a ( $y = -4,79 + 7,13x$ ) pro ASF PCR produkt. Pro verifikaci časově závislé akumulace, byly ODN KING F a KING R akumulovány na elektrodu ( $t_A$  0 až 480 s). Pro interakční experiment byly zvoleny koncentrace ASF ODN pro KING F  $1 \mu\text{g ml}^{-1}$  a pro KING R  $0,3 \mu\text{g ml}^{-1}$ . V rámci interakčního experimentu byla realizovaná série opakovaných měření ( $n = 10$ ). ASF ODN modifikovaná elektroda byla následně studována v přítomnosti CdTe QDs ( $t_A$  2 min). Byla vypočítána senzitivita molekul jako míra vyvolání signálu vzhledem ke koncentraci ASF ODN. Nejlepší senzitivita byla vypočtena pro ASF PCR fragment (50 nA/amol molekul/min), následně King R (25 nA/amol molekul/min) a KING F (14 nA/amol molekul/min). Při analýze ASF ODN bez kvantových teček ( $t_A$  3 min) byly hodnoty proudu stanoveny na  $33 \pm 8$  nA pro KING F a  $22 \pm 3$  nA pro KING R. Následně při interakci ODN a CdTe QDs ( $t_A$  2 min) byly signály pro ASF ODN stanovené na KING F/ CdTe QDs  $15 \pm 8$  nA a KING R/ CdTe QDs  $16 \pm 5$  nA. Bylo statisticky prokázáno, že snížení signálu ASF ODN KING F a KING R je způsobeno vazbou CdTe QDs ( $P = 0,00001$  pro KING F a  $P = 0,0066$  pro KING R). Získané poznatky lze využít pro návrh nového biosenzoru pro detekci ASF.

*Tato studie byla podpořena Evropským programem Erasmus+, projektem AMOR\_QK1920113 a za laskavého přispění společnosti Metrohm Česká republika.*

## 1P-10

**ENANTIOSEPARACE NOVÝCH PSYCHOAKTIVNÍCH LÁTEK V SUPERKRITICKÉ FLUIDNÍ CHROMATOGRAFII****DENISA FOLPRECHTOVÁ<sup>a</sup>, MARTIN G. SCHMID<sup>b</sup>, EVA TESAŘOVÁ<sup>a</sup>, DANIEL W. ARMSTRONG<sup>c</sup>, KVĚTA KALÍKOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 8, 128 43 Praha 2, Česká republika, <sup>b</sup> Institut für Pharmazeutische Wissenschaften, Naturwissenschaftliche Fakultät, Karl-Franzens-Universität Graz, Graz, Österreich, <sup>c</sup> Department of Chemistry and Biochemistry, University of Texas at Arlington, Arlington, TX 76019, USA  
folpred@natur.cuni.cz

Nové psychoaktivní látky (NPS) do značné míry změnily drogovou scénu po celém světě. V posledních letech se zvyšuje počet tzv. „designer drugs“, které jsou dostupné na trhu. Jedná se o látky, které jsou syntetizovány jako deriváty již existujících nelegálních látek za účelem obcházení zákona<sup>1</sup>. V mnoha případech se jedná o látky chirální, a proto se účinky a vlastnosti jednotlivých enantiomerů mohou lišit.

Cílem této práce bylo vyvinout a optimalizovat rychlou metodu pro enantioseparaci 42 strukturálně odlišných NPS (deriváty pyrovaleronů, benzofuranů, fenidinů/fenidátů a benzamidů) použitím vankomycinu jako chirálního selektoru v superkritické fluidní chromatografii (SFC). Kolona VancoShell s povrchově porézními (core-shell) částicemi (2,7  $\mu\text{m}$ ) byla použita jako chirální stacionární fáze na základě předchozí práce<sup>2</sup>. Byl studován vliv složení mobilních fází (různé kosolventy jako methanol, ethanol a aditiva jako kyselina trifluoroctová, kyselina octová, triethylamin, diethylamin, isopropylamin aj.), vliv průtoku, teploty nebo zpětného tlaku na retenci, enantioselektivitu a rozlišení studovaných analytů. Pro získání lepších výsledků byly zapojeny dvě VancoShell kolony do série. V tomto systému bylo možné separovat 98 % testovaných NPS, z toho více než polovinu na základní linii.

Ze získaných výsledků vyplývá, že VancoShell kolony jsou vhodným nástrojem pro enantioseparaci širokého spektra NPS v SFC.

*Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (číslo grantu: 20-19655S).*

## LITERATURA

1. European Drug Report (2019).
2. Folprechtová D., Kozlov O., Armstrong D. W., Schmid M. G., Kalíková K., Tesařová E.: J. Chromatogr. A 1612, 460687 (2020).

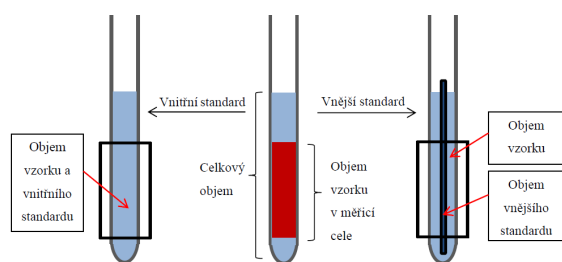
### 1P-11 STANOVENÍ HLAVNÍCH SLOŽEK VE VZORCÍCH OMAMNÝCH A PSYCHOTROPNÍCH LÁTEK POMOCÍ NMR SPEKTROSKOPIE

BARBORA MUŽÍKOVÁ

*Laboratoř forenzní analýzy biologicky aktivních látek, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6 - Dejvice  
barbora.muzikova@vscht.cz*

Omamně a psychotropní látky (OPL) jsou kategorie látek mající vliv na lidskou psychiku. Do této skupiny se řadí i nelegální drogy, na kterých může vzniknout závislost. Z této kategorie se dále vyčleňují nové psychoaktivní látky (NPS), které mají napodobovat účinky klasických drog, například heroínu, kokainu nebo pervitinu. Vynikají svou nebezpečností zejména z důvodu nedostatku informací o jejich strukturách a účincích a také lákavé ceny a nezkušenosti uživatelů s tímto typem látek. Do této skupiny se řadí zejména syntetické kanabinoidy, syntetické katinony a v poslední době také opioidy.

Cílem práce je vyvinout metodu pro kvantifikaci majoritních složek ve směsích omamných a psychotropních látek pomocí NMR spektroskopie. Problematika je řešena zejména z hlediska použití a uspořádání standardu pro kvantifikaci. Jsou zde využity dvě uspořádání standardu, a to vnitřní a vnější (obr. 1). Jako standard byla využita kyselina fumarová ve vysoké čistotě.



Obr. 1.

Metody s vnitřním a vnějším standardem byly validovány pro dvousložkové směsi syntetických katinonů a srovnány co se týče přesnosti a správnosti. Metoda s vnějším standardem (kyselina fumarová v kapiláře) byla následně použita pro stanovení hlavní složky ve čtyřech vzorcích omamných a psychotropních látek.

*Tato práce vznikla za podpory MV ČR (VI20172020056) a MŠMT ČR (LO1611).*

#### LITERATURA

- Claridge T. D. W.: *High-resolution NMR Techniques in Organic Chemistry*, 3rd. Elsevier, 2016.
- Bharti S. K., Roy R.: *Trac-Trends Anal. Chem.* 35, 5 (2012).
- Henderson T. J.: *Anal. Chem.* 74, 191 (2002).
- European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction: *Evropská zpráva o drogách*, 2019.

- Rundlof T., Mathiasson M., Bekiroglu S., Hakkarainen B., Bowden T., Arvidsson T.: *J. Pharm. Biomed. Anal.* 52, 645 (2010).

### 1P-12 USING OF SILVER SOLID AMALGAM ELECTRODES FOR DETERMINATION OF HEAVY METAL POISONING ANTIDOTE 2,3-DIMERCAPTO-1- PROPANESULFONIC ACID

MARTA CHOÍŇSKA<sup>a,b,\*</sup>, VOJTĚCH HRDLIČKA<sup>a,b</sup>,  
BEATRIZ RUIZ REDONDO<sup>b,c</sup>, JIŘÍ BAREK<sup>b</sup>,  
TOMÁŠ NAVRÁTIL<sup>a</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>Charles University, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Hlavova 2030/8, 128 43, Prague 2, Czech Republic, <sup>c</sup>University of Valladolid, Plaza de Santa Cruz, 8, 47002 Valladolid, Spain  
marta.choinska@gmail.com*

The aim of this research was development of a new voltammetric method for determination of 2,3-dimercapto-1-propane-sulfonic acid (DMPS) and study of DMPS complexing behavior towards lead ions. Direct current voltammetry (DCV), differential pulse cathodic stripping voltammetry (DPCSV), differential pulse anodic stripping voltammetry (DPASV), and elimination voltammetry with linear scan (EVLS) at a polished (p-AgSAE) and at a mercury meniscus modified silver solid amalgam electrode (m-AgSAE) were used in this research.

DMPS is a double-thiol synthetic antidote, used for treatment of poisoning by heavy metals (e.g., lead, mercury) (ref. 1–4), due to its strong complexing properties, high water solubility, and negligible side effects<sup>2,5</sup>.

Voltammetry was chosen due to its high sensitivity and selectivity, speed, low costs, and ability to provide information about mechanism of complexation and electrode process<sup>6</sup>. Solid amalgam electrodes (SAEs) were chosen because of their ability to form chemisorbed complexes with DMPS for the use of DPCSV<sup>7,8</sup>.

DCV and EVLS confirmed oxidative chemisorption of DMPS to the electrode surface in a coupled proton/electron transfer. In the solution, DMPS forms complexes with Pb<sup>2+</sup> ions.

Complexing behavior of DMPS was studied by voltammetric titrations. Three separate DPCSV reduction peaks were registered, corresponding to transmetalation of the Hg(DMPS) with the Pb<sup>2+</sup> to form a Pb-DMPS complex, of free lead ions and Pb(DMPS).

Validation of the developed method in model samples of drug Dimaval and human urine confirmed its usability for clinical purposes. Moreover, the obtained LODs (0.1 μmol L<sup>-1</sup> at m-AgSAE and 0.3 μmol L<sup>-1</sup> at p-AgSAE, respectively)<sup>9</sup> were two orders of magnitude lower than those in the previously reported voltammetric method<sup>10</sup>.

*Research was carried out within the framework of Specific University Research (SVV260560). The authors thank the Czech Science Foundation (GACR project No. 20-01589S).*

## REFERENCES

1. Aposhian H. V.: *Annu. Rev. Pharmacol.* 23, 193 (1983).
2. Bjorklund G., Crisponi G., Nurchi V. M., Cappai R., Djordjevic A. B., Aaseth J.: *Molecules* 24 (2019).
3. Donner A., Hruby K.: *Acta Med. Aust.* 14, 10 (1987).
4. Donner A., Hruby K., Pirich K., Kahls P., Schwarzacher K., Meisinger V.: *Vet. Hum. Toxicol.* 29, 37 (1987).
5. Blanusa M., Varnai V. M., Piasek M., Kostial K.: *Curr. Med. Chem.* 12, 2771 (2005).
6. Berek J., Moreira J. C., Zima J.: *Sensors-Basel* 5, 148 (2005).
7. Danhel A., Berek J.: *Curr. Org. Chem.* 15, 2957 (2011).
8. Fadrna R.: *Anal. Lett.* 37, 3255 (2004).
9. Hrdlička V., Choinška M., Redondo B. R., Berek J., Navrátil T.: *Electrochim. Acta*, in press.
10. Ziyatdinova G. K., Grigor'eva L. V., Budnikov G. K.: *J Anal Chem+* 64, 185 (2009).

## 1P-13

POROVNÁNÍ STACIONÁRNÍCH FÁZÍ S RŮZNÝM  
TYPEM ČÁSTIC A LIGANDU V HPLC

ZUZANA KADLECOVÁ<sup>a</sup>, MARTIN GILAR<sup>b</sup>, EVA  
TESAŘOVÁ<sup>a</sup>, KVĚTA KALÍKOVÁ<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2, Česká republika, <sup>b</sup> Waters Corporation, 34 Maple Street, Milford, MA 01757, USA  
kadleczu@natur.cuni.cz

S rostoucí komplexností vzorků se zvyšuje poptávka i nabídka nových stacionárních fází určených pro HPLC. Retenci a separaci látek ovlivňuje hned několik faktorů, například druh nosiče, typ částic a ligandu nebo velikost pórů<sup>1</sup>. Pro výběr vhodné stacionární fáze k danému účelu je nutné porozumět retenčnímu/interakčnímu mechanismu. Existuje řada více či méně detailních přístupů, které nám poskytují informace o základním chování různých analytů v chromatografických systémech<sup>2</sup>.

V tomto příspěvku je detailně studován vliv ligandu a typu částic na retenci a symetrii vybraných biologicky aktivních látek. Bylo testováno osm stacionárních fází lišících se „endkapingem“, typem částic (HSS – „high strength silica“, BEH – „bridged ethylene hybrid“, CSH – „charged surface hybrid“) a typem ligandu (oktadecyl, fenyl-hexyl, pentafluoro-fenyl).

Waltersův test byl použit pro základní popis hydrofobicity a silanolové aktivity testovaných stacionárních fází. Permanentně nabitě látky byly využity k popisu možných elektrostatických interakcí, které se uplatňují v závislosti na „endkapingu“ a typu částic. Bylo ověřeno, že CSH částice nesou při nízkých hodnotách pH kladný náboj, který způsobí zvýšenou retenci záporně nabitých látek. Naopak při vyšších hodnotách pH (pH 8,0) se na kolonách, které nejsou „endkapané“ projevuje interakce kladně nabitých látek se záporně nabitými disociovanými silanolovými skupinami. Rozdíly v retenci a symetrii piků byly popsány za využití strukturálně odlišných sloučenin: neutrálních flavonů, kyselých profenů, bazických kationů a zwitterionických dipeptidů.

*Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (číslo grantu:20-19655S).*

## LITERATURA

1. Gritti F., McDonald T., Gilar M.: *J. Chromatogr. A.* 1420 (2015).
2. Claessens H. A., Straten M. A., Cramers C. A., Jezierska M., Buszewski B.: *J. Chromatogr. A.* 826 (1998).

## 1P-14

APLIKÁCIE POKROČILÝCH 2D  
NANOMATERIÁLŮ "MXÉNOV" AKO  
PERSPEKTÍVNYCH PLATFORMIEM PRI NÁVRHU  
(BIO)SENZOROV

LENKA LORENCOVÁ<sup>aa</sup>, VERONIKA GAJDOŠOVÁ<sup>a</sup>,  
PETER KASÁK<sup>b</sup>, JÁN TKÁČ<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Chemický ústav Slovenskej akadémie vied, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovensko, <sup>b</sup> Centrum pre pokročilé materiály, Univerzita v Katere, P.O. Box 2713, Dauhá Katar, Východná Ázia

Lenka.Lorencova@savba.sk

Vývoj (bio)senzorov na báze funkcionalizovaných povrchových nanoštruktúr v kombinácii s elektrochemickými metódami nám umožňuje dosiahnuť nízke medze detekcie (LOD) a vysokú špecifickosť. Z tohto hľadiska sa veľmi perspektívny javí 2D nanomateriál zo skupiny "MXénov", ktoré sa stali predmetom záujmu vďaka ich špecifickým vlastnostiam a komplexnej vrstevnatej štruktúre poskytujúcej množstvo alternatív v zložení a následne uplatnenie pre rozličné aplikácie. V pilotnej štúdiu sme preverovali schopnosť  $Ti_3C_2T_x$  MXénu (T: =O, -OH, -F) elektrochemicky detegovať významné analyty ( $O_2$ ,  $H_2O_2$  a NADH), pričom  $Ti_3C_2T_x$  ukázal pozoruhodnú elektrokatalytickú aktivitu pri redukcii  $H_2O_2$  s LOD na úrovni nM. V snahe zlepšiť jeho stabilitu a redoxné správanie sme MXén následne modifikovali s nanočasticami platiny. Elektrokatalyticky aktívny senzor na báze nanokompozitu  $Ti_3C_2T_x/Pt$  dokázal detegovať okrem  $H_2O_2$  i malé organické molekuly (acetaminofén, dopamín, kyselina askorbová, kyselina močová) na nanomolárnej úrovni<sup>1</sup>. Ďalšou elektrochemickou štúdiou sme potvrdili výrazný rozdiel v hustote záporného náboja na povrchu "MXénu" a takiež v elektrokatalytickej aktivite v závislosti od leptanta (HF, LiF/HCl) použitého pri príprave "MXénov"<sup>2</sup>. V nasledujúcich rokoch očakávame exponenciálny nárast v počte afinitných biosenzorov na báze "MXénu"<sup>1</sup>, pričom je potrebné myslieť na vhodné stratégie pre modifikáciu rozhraní "MXénu" a následnú imobilizáciu cieľových biomolekúl. Takto upravený "MXénový" povrch bude perspektívne využitý pri vývoji biosenzorov a v glykoproteomike.

*Autori ďakujú za finančnú podporu z projektov APVV 17-0300, z projektov MZ SR 2018/23-SAV-1 a 2019/68-CHÚSAV-1; IRCC-2020-004 (Grant Univerzity v Katere, za tvrdenia uvedené v tomto dokumente zodpovedajú výlučne autori).*

## LITERATÚRA

1. Lorencova L., Gajdosova V., Hroncekova S., Bertok T., Blahutova J., Vikartovska A., Parrakova L., Gemeiner P., Kasak P., Tkac J.: *Electroanalysis* 31, 1833 (2019).
2. Gajdosova V., Lorencova L., Prochazka M., Omastova M., Micusik M., Prochazkova S., Kveton F., Jerigova M., Velic D., Kasak P., Tkac J.: *Microchimica Acta* 187, 52 (2019).

## 1P-15

## INVERZNÍ FLUORESCENČNÍ KORELAČNÍ SPEKTROSKOPIE

**VERONIKA RICHTEROVÁ\***, FILIP MRAVEC,  
MILOSLAV PEKAR

*Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova  
464/118, 612 00 Brno  
xrichterovav@fch.vut.cz*

Fluorescenční korelační spektroskopie (FCS) je hojně využívanou metodou ve studiu koloidních systémů. Pokud je metodou FCS studován systém, který nevykazuje fluorescenci a nemůže být označen pomocí fluorescenční sondy (např. pokud dochází k exkluzi fluorescenční sondy buněčnou membránou), pak existuje alternativní metoda FCS – inverzní fluorescenční korelační spektroskopie (iFCS), kde dochází ke sledování fluorescenčního signálu média, které obklopuje analyzovanou částice. Tuto metodu poprvé popsal Wennmalm<sup>1</sup> a spol., který se svým týmem používal v iFCS experimentech fluorescenční sondu Alexa 488. Mnohem levnější a dostupnější alternativou je použití fluoresceinu. Aby mohla být metoda iFCS úspěšně aplikována, je potřeba stanovit vhodnou koncentraci fluorescenční sondy tak, aby byla vnímána jako fluorescenční médium obklopující analyzovanou látku. U klasické FCS se používají koncentrace v řádu  $10^{-9}$  M, pro inverzní FCS byly stanoveny koncentrace v řádu  $10^{-6}$  M a v experimentech byla používána koncentrace 400  $\mu$ M. Aplikovatelnost metody iFCS byla vyzkoušena na několika modelových systémech – polystyrenových nanočásticích a liposomech. Polystyrenové částice o průměru 100 nm metodou iFCS stanovit nelze, data nevykazují žádnou korelaci a proto je metoda aplikovatelná na částice větší. Na polystyrenové částice o průměru 500 nm lze metodu iFCS aplikovat. U lecithinových liposomů s velikostí v rozmezí 100–300 nm byla metoda iFCS taktéž úspěšně aplikována. I přes různá omezení (koncentrace a velikost částic) má metoda iFCS potenciál při studiu různých biochemicky zaměřených systémů.

## LITERATURA

1. Wennmalm S. et al.: *Analytical Chemistry* 81, 9209 (2009).

## 1P-16

## DETERMINATION OF BINDING CONSTANTS OF CYCLODEXTRIN COMPLEXES WITH METAL POLYPYRIDYL SPECIES BY AFFINITY CE USING THEIR IONIC STRENGTH CORRECTED AND UNCORRECTED ACTUAL MOBILITIES

**PETRA SÁZELOVÁ<sup>a</sup>**, DUŠAN KOVAL<sup>a</sup>, LUKÁŠ SEVERA<sup>a</sup>, FILIP TEPLÝ<sup>a</sup>, GYULA VIGH<sup>b</sup>, VÁCLAV KAŠIČKA<sup>a</sup>

*<sup>a</sup>Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the CAS, Flemingovo nám. 2, 166 10 Prague 6, Czech Republic, <sup>b</sup>Texas A&M University, College Station, TX 77842, USA  
sazelova@uochb.cas.cz*

The apparent binding constants and limiting mobilities of the multiply charged complexes of the  $\Delta$ - and  $\Lambda$ -enantiomers of  $[\text{Ru}(\text{bpy})_3]^{2+}$ ,  $[\text{Ru}(\text{phen})_3]^{2+}$  and  $[\text{Fe}(\text{phen})_3]^{2+}$  associates<sup>1</sup> with 2,3-diacetylated-6-sulfated-( $\alpha,\beta,\gamma$ )-cyclodextrins (CDs) were determined by affinity capillary electrophoresis (ACE)<sup>2</sup>.

Two limiting models were tested for the ionic strength correction of the actual mobilities based on an empirical relation for the ionic strength correction of multivalent ionic species<sup>3</sup>. In model 1, the nominal values of the charge numbers ( $z_{S,\text{nom}}$ ) and analytical concentrations ( $c_{S,\text{nom}}$ ) of the above CD selectors in the background electrolytes (BGEs) were applied for calculation of the BGE ionic strength, as usually. In model 2, the CD selectors were considered as singly charged species ( $z_S = -1$ ) with  $|z_{S,\text{nom}}|$ -times higher concentrations in the BGE than their analytical concentrations ( $c_S = |z_{S,\text{nom}}| \times c_{S,\text{nom}}$ ) in the calculation of the BGE ionic strength. In all three cases – with uncorrected actual mobilities as well as with actual mobilities corrected according to the two limiting models – the measured effective mobilities of the above enantiomers fit well the theoretical curves of their mobility dependences on the CD selectors concentrations in the BGE, with high average coefficients of determination ( $R^2 = 0.9890\text{--}0.9995$ ).

The best physico-chemically meaningful values of the apparent binding constants and the limiting mobilities of the enantiomer-CDs complexes with low RSDs were obtained using the actual mobilities of the species involved corrected according to model 2.

*The work was supported by the GA CR (grant no. 18-02597S) and by the CAS (project RVO no. 61388963).*

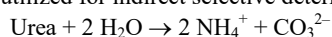
## REFERENCES

1. Teplý F.: *Collect. Czech. Chem. Commun.* 76, 859 (2011).
2. Sázelová P., Koval D., Severa L., Teplý F., Kašička V.: *Electrophoresis* 38, 1913 (2017).
3. Friedl W., Reijenga J. C., Kenndler E.: *J. Chromatogr. A* 709, 163 (1995).

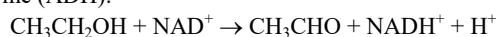
**1P-17****ETHANOL BIOSENSOR BASED ON Eu(III) TERNARY COMPLEX****FILIP SMRČKA, PŘEMYSL LUBAL**

*Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5, 625 00 Brno  
filip.smrcka@gmail.com*

The 1,4,7,10-tetraazacyclododecane-1,4,7-triacetic acid (H<sub>3</sub>DO3A) as heptadentate ligand forms a stable complex with Ln(III) aqua ions<sup>1</sup>. The ternary [Ln(DO3A)L] complex exhibits a high luminescence due to antenna effect leading to sensitization of Ln(III) luminescence by a fluorophore (*e.g.* L = picolinic/isoquinolic acid) via efficient energy transfer from ligand to Ln(III) ion. The utilization of ternary Eu(III) and Tb(III) complexes as selective dual luminescence or electrochemical sensors for that determination of bicarbonate using substitution reaction was reported<sup>1,2</sup>. Recently, this idea was utilized for indirect selective determination of urea<sup>3</sup>:



catalyzed by urease enzyme which activity can be also estimated. Analogously, this approach was applied for a selective luminescence determination of ethanol using oxidation of NAD<sup>+</sup> catalyzed by alcohol dehydrogenase enzyme (ADH):



*This study was supported by the Ministry of Education of the Czech Republic (LTC20044) and Masaryk University (MUNI/A/1424/2019).*

## REFERENCES

1. Vaněk J., Lubal P., Hermann P., Anzenbacher P., Jr.: *J. Fluorescence* 23, 57 (2013).
2. Vaněk J., Smrčka F., Lubal P., Trísková I., Trnková L.: *Monatsh. Chem.* 147, 925 (2016).
3. Smrčka F., Lubal P., Šídlo M.: *Monatsh. Chem.* 148, 1945 (2017).

**1P-18****PARTIAL FILLING AFFINITY CAPILLARY ELECTROPHORESIS APPLIED TO THE STUDY OF NONCOVALENT INTERACTIONS OF HUMAN INSULIN WITH BIOLOGICALLY RELEVANT LIGANDS****VERONIKA ŠOLÍNOVÁ, LENKA ŽÁKOVÁ, JIŘÍ JIRÁČEK, VÁCLAV KAŠIČKA**

*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the CAS, Flemingovo n. 542/2, 166 10 Prague 6  
solinova@uochb.cas.cz*

A new method, pressure assisted partial filling affinity capillary electrophoresis (PF-ACE), has been developed to study noncovalent interactions of the hexamer of human insulin (HI) with biologically relevant ligands, such as cationic phenolic and amino acid neurotransmitters (serotonin, dopamine, nor-epinephrine, epinephrine, and Arg) or anionic

ligands (phenol, L-DOPA, and Trp) in alkaline aqueous solutions. HI is one of the key protein hormones controlling metabolism, growth, and ageing<sup>1</sup>. Its malfunction causes diabetes, cancer and Alzheimer's disease. HI is a 51-amino acid protein consisting of two disulfide-linked chains. Phenolic neurotransmitters were found to be present in insulin secretory granules in pancreatic β-cells; it was proposed that their binding can induce different oligomeric states and conformations of HI. Arg can be abundant in secretory granules as a product of proinsulin processing; it is known as an effective inducer of HI secretion.

The apparent binding constants, *K<sub>b</sub>*, of the HI-ligand complexes were determined from the dependence of the effective migration time changes of the above ligands on the variable zone lengths of HI dissolved in the background electrolyte (BGE) and hydrodynamically introduced into the fused silica capillary close to the UV detector. The strong cationic electroosmotic flow in alkaline BGEs, pH 8.1 or 8.5, had to be reduced by hydrodynamic counter flow induced by external pressure at the outlet capillary end to avoid expulsion of HI zone out of the capillary and to allow HI interaction with both cationic and anionic ligands inside the capillary<sup>2</sup>. The HI interactions with the above ligands were found to be moderately strong, with *K<sub>b</sub>* values in the range 385–1314 L/mol. From the above eight ligands, phenol and Trp were the strongest binders of HI whereas the strongly basic amino acid Arg formed with HI the weakest complex.

*The work was supported by the CSF, project no. 18-02597S, and the CAS, research project RVO 61388963.*

## REFERENCES

1. Cohen P.: *Nature Reviews Molecular Cell Biology* 7, 867 (2006).
2. Šolínová V., Žáková L., Jiráček J., Kašička V.: *Anal. Chim. Acta* 1052, 170 (2019).

**1P-19****DETERMINATION OF BINDING CONSTANTS OF 5-PHENYLAZOPYRIMIDINES WITH β-CYCLODEXTRIN BY AFFINITY CAPILLARY ELECTROPHORESIS****SILLE ŠTĚPÁNOVÁ, ELIŠKA PROCHÁZKOVÁ, LUCIE ČECHOVÁ, ZLATKO JANEBA, VÁCLAV KAŠIČKA**

*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Czech Academy of Sciences, Flemingovo 2, 166 10 Prague 6  
sille.stepanova@uochb.cas.cz*

Non-covalent molecular interactions play important role in all living systems being essential to many chemical or biochemical processes. For characterization of these interactions, among other methods, also various modes of affinity capillary electrophoresis (ACE) have been employed. In this study, strength of non-covalent interactions of two 5-phenylazopyrimidines<sup>1</sup> (see Fig. 1), with β-cyclodextrin (β-CD) were estimated by mobility shift ACE (ms-ACE)<sup>2</sup>.

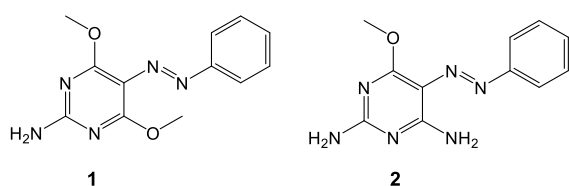


Fig. 1. Structures of 5-phenylazopyrimidines

During ms-ACE measurements, 5-phenylazopyrimidines were dissolved in background electrolyte (BGE) free of  $\beta$ -CD, and injected as analytes.  $\beta$ -CD at various concentrations (0–15 mM) was added to the BGE (18.5/42 mM Tris/ $\text{H}_3\text{PO}_4$ , pH 2.3). For 5-phenylazopyrimidines complexes with  $\beta$ -CD, 1:1 stoichiometry ratio was assumed. From the measured migration times, the effective mobilities of analytes were calculated and plotted against  $\beta$ -CD concentration in the BGE. For calculation of the apparent binding constant, a non-linear regression analysis was applied.

The apparent binding constants of complexes of compounds **1** and **2** with  $\beta$ -CD were estimated to be  $22.9 \pm 2.9$  L/mol and  $98.9 \pm 3.6$  L/mol, respectively.

This work was supported by the GACR, grant no. 18-02597S, and by the CAS, project no. RVO 61388963.

## REFERENCES

1. Procházková E., Čechová, L., Kind J., Janeba Z., Thiele Z. M., Dračínský, M.: Chem. Eur. J. 24, 492 (2018).
2. Štěpánová S., Procházková E., Čechová L., Žurek J., Janeba Z., Dračínský M., Kašička V.: J. Chromatogr. A 1570, 164 (2018).

## 1P-20

SYNTÉZA A CHARAKTERIZACE  
MAGNETICKÝCH „CORE-SHELL“ NANOČÁSTIC  
S KARBOXYLOVÝMI SKUPINAMI NA POVRCHU

PETRA ŠVECOVÁ<sup>a</sup>, JEAN-MICHEL SIAUGUE<sup>b</sup>, JAN PETR<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká republika, <sup>b</sup> Physicochimie des Electrolytes et Nanosystèmes interfaciaux, Sorbonne Université, 4 place Jussieu, 75005 Paris, France  
svceva.petra@post.cz

Magnetické nanočástice  $\gamma$ - $\text{Fe}_2\text{O}_3$  jsou po vhodné úpravě jejich povrchu používány v MRI zobrazování a jako transportéry léčiv<sup>1</sup>. Pro tyto biologické aplikace je potřeba, aby měly nanočástice vysoké hodnoty magnetizace a velikost menší než 100 nm s úzkou distribucí velikosti k zajištění uniformních fyzikálně-chemických vlastností.

V naší práci jsme úspěšně nasyntetizovali čtyři populace karboxylovaných nanočástic s různou hustotou karboxylových skupin na jejich povrchu. Prvním krokem při syntéze karboxylovaných magnetických nanočástic oxidu železa je syntéza ferrofluidu koprecipitací  $\text{Fe}^{2+}$  a  $\text{Fe}^{3+}$  iontů za alkalických podmínek<sup>2</sup> a jeho stabilizace citrátem sodným. Tyto nanočástice jsou dále zapouzdřeny v obalu z  $\text{SiO}_2$  a tento

obal je funkcionalizován amino a PEG skupinami dvoukrokovou syntézou pomocí TEOS, PEOS a APTES<sup>3</sup>. V posledním kroku je provedena konverze amino skupin na karboxy skupiny reakcí s anhydridem kyseliny jantarové.

Tyto nanočástice jsme následně charakterizovali pomocí transmisní elektronové mikroskopie (TEM), která je vhodná pro určení velikosti, dynamického rozptylu světla (DLS), který se využívá pro určení difúzních koeficientů a polydisperzity. V poslední době se také rozšířilo použití kapilární elektroforézy (CE) pro určení distribuce velikosti nanočástic a určení hustoty povrchového náboje, a proto jsme ji také využili a výsledky porovnali.

Tato práce vznikla za podpory grantu IGA\_PrF\_2020\_030 a Nadačního fondu Univerzity Palackého v Olomouci.

## LITERATURA

1. Laurencin M., Cam N., Georgelin T., Clément O., Autret G., Siaugue J.-M., Ménager Ch.: Adv. Healthcare Mater. 2, 1209 (2013).
2. Massart. R.: IEEE Trans. Magn. 17, 1247 (1981).
3. Maurice V., Georgelin T., Siaugue J.-M., Cabuil V.: J. Magn. Magn. Mater. 321, 1408 (2009).

## 1P-21

CHIRÁLNÍ SEPARACE ENANTIOMERŮ  
TAMSULOSINU POMOCÍ CE-ESI-MS

ANDREA ŠEBESTOVÁ, JAN PETR

Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc  
andrea.sebestova@upol.cz

Tamsulosin je chirální léčivo, které se používá při léčbě benigní prostatické hyperplazie. Existuje ve dvou enantiomerních formách, ale pouze (*R*)-isomer vykazuje významný farmakologický efekt.<sup>1</sup> Proto je žádoucí mít metody pro chirální separaci enantiomerů tamsulosinu, které jsou dostatečně selektivní a citlivé, ale zároveň umožňují identifikovat enantiomery v komplexních vzorcích. Kapilární elektroforéza (CE) patří mezi techniky, které jsou velmi využívány pro chirální separace. Navíc metoda separace enantiomerů tamsulosinu pomocí CE s UV detekcí byla na našem pracovišti již vyvinuta<sup>1,2</sup>.

Cílem této práce bylo vyvinout metodu pro separaci enantiomerů tamsulosinu za použití spojení CE s hmotnostní spektrometrií s ionizací elektrospřejem (ESI-MS). Toto spojení vyžaduje oproti standardnímu uspořádání CE s UV detektorem použití těkavých elektrolytů a zároveň nutnost „programování“ migrace chirálního selektoru tak, aby se nedostal do elektrospřeje, čímž by potlačil ionizaci analytů. V rámci této práce byl optimalizován elektrolyt na 200 mM kyselinu octovou pH 4,0 s přidavkem 3 g l<sup>-1</sup> sulfatovaného- $\beta$ -cyklodextrinu (S- $\beta$ -CD) jako chirálního selektoru. Elektrolyt se S- $\beta$ -CD byl umístěn pouze do kapiláry. Díky tomu migroval S- $\beta$ -CD proti tamsulosinu a od ESI-MS, došlo k chirálnímu rozlišení, ale S- $\beta$ -CD nezpůsobil problémy s ionizací tamsulosinu v elektrospřeji. Dále byly optimalizovány i další podmínky stanovení pomocí CE-ESI-



MS jako je např. sprejovací napětí, tlak a teplota nebulizačního plynu, složení a průtok pomocné kapaliny.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 19-23033S.*

#### LITERATURA

1. Maier V., Horáková J., Petr J., Tesařová E., Coufal P., Ševčík J.: *J. Pharm. Biomed. Anal.* 39, 691 (2005).
2. Petr J., Maier V., Horáková J., Ševčík J.: *Electrophoresis* 27, 4735 (2006).

#### 1P-22

### STANOVENÍ CHOLESTEROLU V MLÉČNÝCH VÝROBCÍCH S VYUŽITÍM ELEKTROCHEMICKÝCH A SPEKTROFOTOMETRICKÝCH METOD

**LENKA BENEŠOVÁ<sup>a</sup>, EVA BLÁHOVÁ<sup>a</sup>, JAN KLOUDA<sup>a</sup>, KAREL NESMĚRÁK<sup>a</sup>, JANA SKOPALOVÁ<sup>b</sup>, KAROLINA SCHWARZOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Hlavova 8, 128 43 Praha 2,* <sup>b</sup> *Univerzita Palackého v Olomouci, Katedra analytické chemie, 17. listopadu 2, 771 46 Olomouc*  
benesole@natur.cuni.cz

Cholesterol je přítomný ve všech buněčných membránách a je důležitým prekurzorem v syntéze dalších steroidních látek, např. žlučových kyselin, steroidních hormonů a vitamínů. Nejběžněji používanou metodou pro stanovení cholesterolu je HPLC s tandemovou MS detekcí<sup>1</sup> či enzymatické metody<sup>2</sup>. Možnosti neenzymatického elektrochemického stanovení cholesterolu jsou značně omezeny kvůli přítomnosti jediné dvojné vazby ve steroidním skeletu (review<sup>3</sup>). Možnosti přímé elektrochemické detekce cholesterolu v matricích mléka a lidském séru jsou blíže popsány v práci<sup>4</sup>, kde byl používán modifikovaný povrch pracovní uhlíkové elektrody.

V této práci jsme se zabývali extrakcí cholesterolu z mléčných matric a jejím následným elektrochemickým a spektrofotometrickým stanovením. Vlastní extrakce spočívala v saponifikaci mléčného vzorku pomocí 0,4 M hydroxidu draselného v ethanolu při 50 °C po dobu 30 minut. K vychladlému saponifikátu byla přidána deionizovaná voda a následně byl dvakrát extrahován *n*-hexanem<sup>5</sup>. Extrakt byl odfoukán dusíkem a rozpuštěn v daném elektrolytu či mobilní fázi a zanalyzován danou instrumentální metodou. Pro voltametrické stanovení byla použita borem dopovaná diamantová elektroda a kyselina chloristá v acetonitrilu jako základní elektrolyt a byl vyhodnocován oxidační pík při +1,6 V (vs. Ag/AgNO<sub>3</sub> v acetonitrilu). Pro spektrofotometrii byla použita modifikovaná Abell-Kendallová metoda, tj. detekce při 620 nm po vzniku barevného produktu ve směsi kyseliny octové, sírové a acetanhydridu<sup>6</sup>.

*Tato práce vznikla za podpory grantu Grantové agentury České republiky (projekt GAČR 19-11268S) a Specifického univerzitního výzkumu (SVV 260560).*

#### LITERATURA

1. Baila-Rueda L., Cenarro A., Cofan M., Orera I., Barcelo-Batllo S., Pocovi M., Ros E., Civeira F., Nerin C., Domeno C.: *Anal. Methods* 5, 2249 (2013).
2. Liu X., Nan Z., Qiu Y., Zheng L., Lu X.: *Electrochim. Acta* 90, 203 (2013).
3. Klouda J., Berek J., Nesmerak K., Schwarzova-Peckova K.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 47, 384 (2017).
4. Derina K., Korotkova E., Taishibekova Y., Salkeeva L., Kratochvil B., Berek J.: *Anal. Bioanal. Chem.* 410, 5085 (2018).
5. Albuquerque T. G., Oliveira M., Sanches-Silva A., Costa H. S.: *Food Chemistry* 193, 18 (2016).
6. Abell L. L., Levy B. B., Brodie B. B., Kendall F. E.: *J. Biol. Chem.* 195, 357 (1952).

#### 1P-23

### STANOVENÍ ROZDĚLOVACÍCH KOEFICIENTŮ V SYSTÉMU LIPOSOM-VODA

**RADEK JERGA, VERONIKA MÜLLEROVÁ, VERONIKA TALAŠKOVÁ, PETR BARTÁK, JANA SKOPALOVÁ**

*Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc*  
jana.skopalova@upol.cz

Hodnocení lipofility léčiv a dalších biologicky významných látek má zásadní význam pro posouzení jejich biodostupnosti, terapeutického účinku, toxicity, metabolismu a bioakumulace. Jedním z nejpoužívanějších parametrů charakterizujících lipofilitu látek je rozdělovací koeficient. Z různých modelových systémů pro určování rozdělovacích koeficientů se jako vhodný ukázal systém fosfolipidový liposom/voda, který velmi dobře napodobuje přirozené prostředí buněčných membrán.

Pro stanovení rozdělovacích koeficientů v systému liposom/voda byla vyvinuta jednoduchá metoda založená na rovnovážné dialýze<sup>1</sup>. Modifikovaná metoda využívá jednoduchou dvoudílnou nádobku s prostory oddělenými filtrační membránou, která umožňuje volnou difuzi nízkomolekulární látky, zatímco velké liposomální struktury nemohou procházet póry membrány a zůstávají odděleny v jednom prostoru od čistého vodného roztoku v prostoru druhém. Po ustavení rovnováhy je pak koncentrace látky ve vodném roztoku úměrná koncentraci její volné (v liposomech nevázané) frakce v liposomálním roztoku a lze ji použít ke stanovení rozdělovacího koeficientu v systému liposom/voda.

Metoda byla testována na fenolických látkách přírodního původu – eugenolu, thymolu a karvakrolu, které vykazují antibakteriální a antioxidační účinky využitelné zejm. ve farmacii a potravinářství. Vodný roztok liposomů byl připraven z asolektinu, přírodní směsi fosfolipidů izolovaných ze sójových bobů. Po optimalizaci metody byly koncentrace studovaných látek ve vodných roztocích stanoveny třemi nezávislými analytickými metodami (plynovou chromatografií s hmotnostně spektrometrickou detekcí, vysokoúčinnou kapalinovou chromatografií s UV detekcí a diferenční pulzní voltametrií). Hodnoty rozdělovacích koeficientů nalezené třemi technikami se pohybují v intervalu

174–890 ( $\log K = 2,24\text{--}2,95$ ) a dobře korespondují s hodnotami uvedenými v literatuře<sup>2</sup>.

*Tato práce vznikla za podpory grantů GA ČR 20-07350S a IGA\_PrF\_2020\_030.*

#### LITERATURA

1. Van Balen G. P., Martinet C. A. M., Caron G., Bouchard G., Reist M., Carrupt P. M., Fruttero R., Gasco A., Testa B.: *Med. Res. Rev.* 24, (2004) 299.
2. Reiner G. N., Labuckas D. O., García D. A.: *J. Pharm. Biomed. Anal.* 49, (2009) 686.

#### 1P-24

### STUDIUM FALZIFIKÁTŮ ANABOLICKÝCH ANDROGENNÍCH STEROIDŮ V OLEJOVÉ MATRICI METODOU GC-MS

ŠIMON ADAMEC

*Laboratoř forenzní analýzy biologicky aktivních látek, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6  
simon.adamec@vscht.cz*

Falzifikáty anabolických androgenních steroidů představují nemalé riziko v rámci padělání léčiv. Anabolické androgenní steroidy jsou primárně užívány pro nárůst svalové hmoty či zvýšení fyzické síly. Tyto efekty jsou doprovázeny negativními účinky a riziko jejich projevu se zvyšuje s nadměrným příjmem těchto látek. Proto jsou falzifikáty, které jsou lecky k nerozeznání od originálního přípravku, tolik nebezpečné, jelikož jejich deklarované složení uvedené na obalu není v mnoha případech pravdivé.

Hlavním cílem práce je vyvinout optimalizovanou metodu pro analýzu anabolických androgenních steroidů v olejové matrici pomocí metody GC-MS a za použití této metody následně identifikovat a kvantifikovat látky v reálných vzorcích, které byly zabaveny Policií České republiky. Analýze byly podrobeny vybrané reprezentativní vzorky, které byly všechny na základě výsledků označeny za falzifikáty.

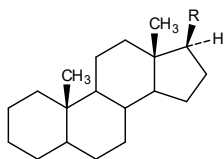


Schéma 1 Tetracyklický strukturální základ steroidů

*Tato práce vznikla za podpory projektu MV ČR č. V120152020048.*

#### LITERATURA

1. Bailey L. C., Medwick T., Dong Y.: *Steroid Analysis*. In *Encyclopedia of Analytical Chemistry*, John Wiley & Sons, Ltd.: Rutgers University, Piscataway, USA, 2006.
2. Kasal A., Budesinsky M., Griffiths W.: *Spectroscopic Methods of Steroid Analysis*. 2010; pp 27–161.
3. Geyer H., Marek-Engelke U., Reinhart U., Thevis M.,

Schanzer W.: The analysis of nutritional supplements for anabolic androgenic steroids. In: *Recent advances in doping analysis. Proceedings of the 18th Cologne Workshop on Dope Analysis, Sport und Buch Strauss*. 2000; 8: 23–32.

4. Neves D. B. d. J., Caldas E. D.: *Forensic Science International* 275, 272 (2017).

#### 1P-25

### VÝVOJ METODY PREPARATIVNÍ ENANTIOSEPARACE SYNTETICKÝCH KATHINONŮ

TEREZA MAŘÍKOVÁ

*Laboratoř forenzní analýzy biologicky aktivních látek, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6  
marikovt@vscht.cz*

Nové psychoaktivní látky (new psychoactive substances – NPS) jsou rostlinné nebo syntetické substance, které se vyznačují nejčastěji stimulačním či halucinogenním účinkem. Tyto sloučeniny jsou zpravidla odvozeny od známých a již zakázaných látek (kokain, methamfetamin atd.). Jednou z nejrozšířenější a v několika zemích EU dokonce nejužívanější skupinou NPS jsou syntetické deriváty kathinonu. Jeden z enantiomerů kathinonu, (S)-kathinon, je alkaloid přirozeně se vyskytující v mladých listech rostliny Katy jedlé (*Catha edulis*). Jeho syntetické analogy využívají podobnosti struktury a biologických účinků s amfetaminem, avšak jsou zpravidla vyráběny v racemické formě. Vzhledem k tomu, že enantiomery mohou mít na živý organismus výrazně odlišné účinky, a to i účinky vedlejší, je důležité otestovat jednotlivé enantiomery *in vivo*.

Cílem práce bylo nalezení účinné metody chirální separace tří derivátů kathinonu, a to metylonu, butylonu a pentylonu, které se samostatně nebo ve směsích běžně vyskytují na evropské drogové scéně. Po optimalizaci podmínek enantioseparace zvolených drog v analytickém módu na polysacharidové chirální koloně, byla metoda převedena do preparativního módu. Za optimalizovaných podmínek preparativní enantioseparace byly získány enantiomery všech cílových látek, které budou dále studovány na spolupracujících pracovištích.

*Tato práce vznikla za podpory MV ČR (grant č. MV0/V120172020056) a Grantové agentury ČR (grant č. 16-17689Y).*

#### LITERATURA

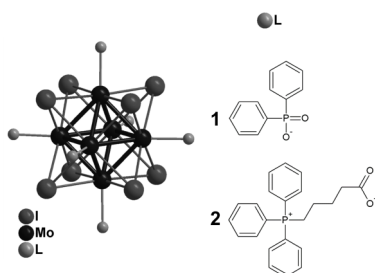
1. Kuchař M.: *Nové psychoaktivní látky*. Klinická adiktologie, 1. vyd., str. 86, Chapter Kathinony. Grada Publishing, a.s., Praha 2015.
2. Zhang T. et al.: *J. Chromatogr. A* 1075, 65 (2005).

## 2L-01 MOLYBDENOVÉ KLASTROVÉ KOMPLEXY: FOTOFYZIKÁLNÍ VLASTNOSTI A NOVÉ APLIKACE

**KAMIL LANG, KAPLAN KIRAKCI**

Ústav anorganické chemie AV ČR, v. v. i., 250 68 Husinec-Řež  
lang@iic.cas.cz

Oktaedrické molybdenové klastry ( $\text{Mo}_6$ ) jsou nanometrové agregáty šesti  $\text{Mo(II)}$  atomů, které jsou stabilizovány osmi pevně vázanými vnitřními ligandy, obvykle atomy halogenů, a šesti labilním anorganickými/organickými ligandy (L) (obr. 1). Tyto komplexy po excitaci světlem nebo rentgenovým zářením tvoří dlouhožijící tripletové stavy, které relaxují červenou-NIR luminiscenci s vysokými kvantovými výtěžky. Tato luminiscence se účinně zhasí kyslíkem za vzniku singletového kyslíku  $\text{O}_2(^1\text{D}_g)$  ve vysokých výtěžcích. Na rozdíl od běžně používaných fotosensitizerů (porfyriny, ftalocyaniny, etc.),  $\text{Mo}_6$  zůstávají účinnými producenty  $\text{O}_2(^1\text{D}_g)$  i v jejich agregované formě. Díky této vlastnosti a variabilitě ligandů L lze využít  $\text{Mo}_6$  v biologických aplikacích, jak v jejich molekulární formě, tak ve formě nanomateriálů.



Obr. 1. Typická struktura  $\text{Mo}_6$  komplexů: černě jsou vyznačeny atomy Mo, vnitřní ligandy – atomy I, L jsou vnější ligandy

Prokázali jsme, že  $\text{Mo}_6$  fotosensitizerů lze využít ve fotodynamické terapii (PDT)<sup>1</sup> nebo při fotoinaktivaci rezistentních bakterií<sup>2</sup>. Také jsme jako první využili tyto klastry jako radiosensitizerů v PDT indukované rentgenovým zářením<sup>3</sup>. Rentgenové záření má oproti světlu výhodu v tom, že proniká takřka bez omezení do tkání a tak dosáhne i do míst, která jsou nepřístupná světlu. Foto/radioluminiscence těchto klastrů má také potenciál pro diagnostické účely.

Přednáška je zaměřena na vysvětlení cílené přípravy  $\text{Mo}_6$ , jejich využití v PDT a jako radiosensitizerů, které snižují radiační dávky potřebné k likvidaci tumorových buněk.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR č. 18-05076S.

### LITERATURA

1. Kirakci K., Zelenka J., Křížová I., Ruml T., Lang K.: Inorg. Chem. (2020), v tisku.
2. Kirakci K., Zelenka J., Rumlová M., Cvačka J., Ruml T., Lang K.: Biomater. Sci. 7, 1386 (2019).
3. Kirakci K., Zelenka J., Rumlová M., Martinčík J., Nikl M., Ruml T., Lang K.: J. Mater. Chem. B 6, 4301 (2018).

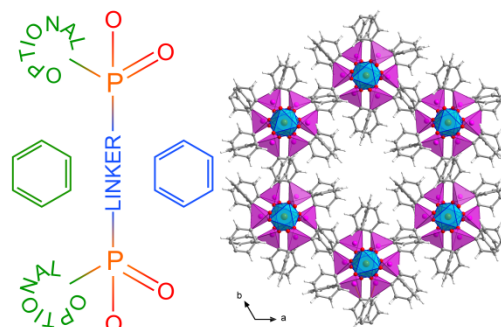
## 2L-02 METAL-ORGANICKÉ SÍTĚ VZNIKLÉ Z FOSFINÁTOVÝCH LIGANDŮ

**JAN DEMEL<sup>a</sup>, JAN HYNEK<sup>a</sup>, SOŇA ONDRUŠOVÁ<sup>a,b</sup>,  
PETR BRÁZDA<sup>c</sup>, JAN ROHLÍČEK<sup>c</sup>, KAMIL LANG<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav anorganické chemie AV ČR, v. v. i., Husinec-Řež č.p. 1001, 250 68 Řež, <sup>b</sup> Přírodovědecká fakulta University Karlovy, Hlavova 8, 128 43 Praha, <sup>c</sup> Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Cukrovarnická 10/122, 182 21 Praha  
Demel@iic.cas.cz

Metal-organické sítě (MOFy, z anglického Metal-organic frameworks) jsou porézní koordinační polymery skládající se z anorganických uzlových bodů, které jsou vzájemně propojeny organickými polytopickými ligandy. Tyto ligandy jsou nejčastěji karboxylové kyseliny, nebo N-donující ligandy. V posledních letech se však stále častěji také studují MOFy vzniklé pomocí jiných koordinačních skupin, např. fosfonátů ( $\text{RPO}_3^{2-}$ ).

V tomto příspěvku budou MOFy vzniklé pomocí fosfinátové koordinační skupiny ( $\text{R}^1\text{R}^2\text{POO}^-$ ) a trojmočného kovu, nejčastěji Fe(III) a Al(III). Tyto MOFy obsahují hexagonálně uspořádané lineární póry. Průměr póru závisí na použitém ligandu od ca. 4 do 18 Å. Díky silné koordinační vazbě mezi fosfinátovým ligandem a trojmočným kovem jsou tyto MOFy stabilní v běžných rozpouštědlech včetně vody a to i za zvýšené teploty.



Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR č. 20-04408S.

### LITERATURA

1. Hynek J., Brázda P., Rohlíček J., Londesborough M. G. S., Demel J.: Angew. Chem., Int. Ed. 57, 5016 (2018).
2. Bůžek D., Ondrušová S., Hynek J., Kovář P., Lang K., Rohlíček J., Demel J.: Inorg. Chem. 59, 5538 (2020).

## 2L-03

## STABILITA ZIRKONIČITÉ METAL-ORGANICKÉ SÍTĚ UiO-66 V PUFRECH

DANIEL BŮŽEK<sup>a,b</sup>, SLAVOMÍR ADAMEC<sup>a</sup>, KAMIL LANG<sup>b</sup>, JAN DEMEL<sup>b</sup><sup>a</sup> Fakulta životního prostředí, Univerzita J. E. Purkyně, Králova Výchova 3132/7, 400 96 Ústí nad Labem, <sup>b</sup> Ústav anorganické chemie AV ČR, v. v. i., Husinec-Řež č.p. 1001, 250 68

daniel.buzek@ujep.cz

Metal-organické sítě (MOFy, z anglického Metal-organic frameworks) jsou porézní krystalické struktury skládající se z anorganických uzlů (klastřů), které jsou vzájemně propojeny organickými linkery, nejčastěji polytypickými karboxylovými kyselinami. V současné době existuje nepřeberné množství kombinací vedoucí k rozmanitým strukturám a vlastnostem. Díky tomu MOFy mají velice slibný aplikační potenciál. Limitujícím faktorem při aplikaci MOFů je jejich nízká chemická stabilita. MOFy, které mají dle literatury vysokou stabilitu, jsou na bázi zirkoničitych klastřů, tj. MOFy skládající se z  $[Zr_6O_4(OH)_4]^{12+}$  klastřů. Typickým příkladem je UiO-66, v jehož struktuře jsou klastry propojeny tereftalovou kyselinou.

Díky popisované vysoké stabilitě a řadě výhodných vlastností se UiO-66 stal jedním z nejstudovanějších MOFů. Nicméně aplikace UiO-66 často vyžaduje přítomnost vodného prostředí, kde je pH upravováno pufrů. Chování UiO-66 v takovém prostředí není doposud dostatečně popsáno a popis jeho stability se často omezuje jen na post-expozičním měření technikami, jako jsou prášková rentgenová difrakce (XRD), adsorpce dusíku a elektronová mikroskopie. Jak jsme prokázali v naší předchozí práci<sup>1</sup>, tyto metody neposkytují úplné informace o jemných změnách ve struktuře UiO-66 a zaznamenávají pouze jeho úplný rozklad. Proto jsou tyto metody nevhodné pro studium stability MOFů.

Príspevek je zaměřen na popis stability UiO-66 v běžně používaných pufrách v kombinaci s MOFy, tj. 2-amino-2-(hydroxymethyl)-1,3-propandiol (TRIS), *N*-2-hydroxyethyl-piperazin-*N'*-2-ethansulfonová kyselina (HEPES), fosfátový pufr (PB), *N*-ethylmorpholin (NEM) a jejich solné verze. Chemická stabilita byla studována analýzou uvolněného tereftalátového linkeru do roztoku metodou kapalinové chromatografie a výsledná pevná fáze byla pro porovnání charakterizována standardními technikami (XRD, adsorpce dusíku, skenovací elektronová mikroskopie). Bylo prokázáno, že všechny pufrů jsou pro UiO-66 škodlivé a zejména přítomnost PB, NEM a silně koncentrovaného TRIS vede k úplnému rozpadu struktury. Testované pufrů, i přes jejich časté používání při aplikacích UiO-66 jsou tedy naprosto nevhodnými médii.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR č. 20-04408S.

## LITERATURA

1. Bůžek D., Demel J., Lang K.: Inorg Chem. 57, 14290 (2018).

## 2L-04

## KONFOKÁLNA RAMANOVA MIKROSKOPIA BIOKONJUGOVANÉHO GRAFÉN-OXIDOVÉHO NOSIČA V BUNKÁCH

NIKOLA BUGÁROVÁ<sup>\*a</sup>, ADRIANA ANNUŠOVÁ<sup>b</sup>, MICHAL BODÍK<sup>b</sup>, PETER ŠIFFALOVIC<sup>b</sup>, MARTINA LABUDOVIČ<sup>c</sup>, IVANA KAJANOVÁ<sup>c</sup>, MIRIAM ZAŤOVIČOVÁ<sup>c</sup>, SILVIA PASTOREKOVÁ<sup>c</sup>, MÁRIA OMASTOVÁ<sup>a</sup><sup>a</sup> Ústav polymérov, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovensko, <sup>b</sup> Fyzikálny ústav, Dúbravská cesta 9, 845 11 Bratislava, Slovensko, <sup>c</sup> Virologický ústav, Dúbravská cesta 9, 845 05 Bratislava, Slovensko  
nikola.bugarova@savba.sk

Molekulárne cieleňá liečba rakoviny je komplementárny prístup ku konvenčnej, menej selektívnej chemoterapii. Rôzne molekulárne charakteristiky rakovinových buniek umožňujú pripraviť nanomateriály na mieru, čím môžu poskytnúť cieleňú diagnostiku a liečbu rakoviny. Dvojrozmerné materiály, ako je grafén oxid (GO), umožňujú umiestnenie značiek na ich povrchu. Transmembránový proteín karbonická anhydráza IX (CA IX) je jednou z molekúl selektívne exprimovaných nádorovými bunkami, ktoré je možné využiť pri cieleňej liečbe rakoviny. Demonstrujeme biokonjugáciu GO s biotinylovanou protilátkou M75 vysoko selektívnu voči CA IX. Na základe modelového systému sa hodnotila väzba medzi biokonjugovaným GO-M75 a psími obličkovými bunkami Madin-Darby Canine Kidney (MDCK). Fluorescenčne aktivované triedenie buniek (FACS) dokázalo vyšší príjem GO-M75 v prípade MDCK buniek ektopicky exprimujúcich proteín CA IX na ich povrchu v porovnaní s kontrolnou bunkovou líniou MDCK. Aby sa lokalizovala biomodifikovaná platforma GO v jednej bunke, použila sa konfokálna Ramanová mikroskopia (CRM) bez značenia (label-free), ktorá ponúka príležitosť skúmať bunky *in vitro*<sup>1,2</sup>. Pozorovanie *in vitro* lokalizácie funkcionalizovaných nanoplatformiem GO v bunkách pomocou CRM sa uskutočňovalo vo vodnom prostredí v živých bunkách<sup>3</sup>. Tým sa črtá nový prístup, ktorý využíva biotinylovanú protilátku M75, špecifickú pre transmembránový proteín karbonickú anhydrázu CA IX, na funkcionalizáciu nanoplatformy GO pomocou komplexu avidín-biotín. Viacúrovňové merania jednotlivých buniek vedlo k 3D lokalizácii nanoplatformy GO.

Zvýšená afinita pripravených molekulárnych komplexov GO-M75 potvrdzuje použitie dvojrozmerných materiálov pre budúce stratégie cieleňej liečby rakoviny.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou pre výskum a vývojna na základe zmluvy č. APVV-14-0120 a projektom VEGA 02/0010/18.

## LITERATÚRA

1. Durrant B., Trappett M., Shipp D., Notinger I.: Curr. Opin. Chem. Biol. 51 (2019).
2. Baena J. R., Lendl B.: Curr. Opin. Chem. Biol. 8 (2004).
3. Sohová M. E., Bodík M., Šiffalovic P., Bugarova N., Zaťovičová M., Hianik T., Omastová M., Majkova E.: Analyst. 143 (2018).

**2L-05  
VRSTEVNATÉ NANOMATERIÁLY PRO (FOTO)-  
ELEKTROKATALÝZU ROZKLADU VODY – TEORIE  
A EXPERIMENT**

**DAVID SEDMIDUBSKÝ, ZDENĚK SOFER**

*Ústav anorganické chemie, Vysoká škola chemicko-  
technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6  
sedmidub@vscht.cz*

Hledání nových ekologických zdrojů energie a způsobů její transformace a ukládání představuje jednu z hlavních výzev současného výzkumu. Vedle akumulace elektrické energie v bateriích je přechod na vodíkovou energetiku založenou na kombinaci (foto)elektrochemického rozkladu vody a výroby elektřiny ve vodíkových palivových článcích nadále vitální možností budoucího vývoje. Hlavním problémem je přitom náhrada platiny jako katalyzátoru při obou elektrochemických procesech:  $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$ .

Intenzivní výzkum vrstevnatých nanomateriálů jako je modifikovaný grafen, dichalkogenidy přechodných kovů, chalkogenidy *p*-prvků či pniktogeny prokázal jejich význačné elektrokatalytické a fotokatalytické vlastnosti. Pro redukci vodíku (HER) je klíčová efektivní interakce s povrchem materiálu, příhodná poloha Fermiho meze a dostatečná elektrická vodivost. V případě  $\text{MoS}_2/\text{WS}_2$ , které tyto předpoklady velmi dobře splňují, je vyšší elektrické vodivosti dosaženo na bočních hranách nanodestiček díky populaci příměsových stavů na Fermiho mezi<sup>1</sup> nebo transformaci z polovodivé modifikace 2H do kovové formy 1T<sup>2</sup>, k níž dochází při dopování elektrony. Vysoký elektrokatalytický efekt byl rovněž pozorován u  $\text{ReS}_2$ <sup>3</sup> nebo u heterostruktur grafenu a  $\text{MoS}_2/\text{WS}_2$ . Oproti tomu u samotného grafenu bylo prokázáno, že jeho katalytický účinek jednoznačně souvisí s příměsemi kovů zavedenými do struktury při přípravě<sup>4</sup>.

Fotokatalytický rozklad vody nabízí elegantní způsob přímé konverze světelné energie na chemickou, avšak hlavním limitujícím faktorem je zde fixní energie zakázaného pásu pro daný typ materiálu umožňující využít jen malou část slunečního spektra. Nanostrukturování vrstevnatých materiálů nabízí efektivní způsob ladění šířky zakázaného pásu. Jak bylo nedávno ukázáno na příkladech  $\text{GaSe}$ <sup>5</sup> a  $\text{GeSe}$ , závisí velikost energie zakázaného pásu na počtu vrstev a jejich exfoliaci tak lze získat fotokatalytický nanomateriál pokrývající širokou oblast spektra a v určitém rozsahu *pH* katalyzující jak redukci vody na vodík tak i oxidaci na kyslík.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 20-16124J.*

**LITERATURA**

1. Tan S. M. a kol.: Chem. Eur. J. 21, 7170 (2015).
2. Chia X. a kol.: Chem. Eur. J. 20, 17426 (2014).
3. Wang L.: Elchem. Comm. 63, 39 (2016).
4. Mazánek V. a kol.: ACS Nano 13, 1574 (2019).
5. Zappia M. I. a kol.: Adv. Func. Mater. 30, 1909572 (2020).

**2L-06  
ZVÝŠENÁ ROZPUSTNOST NANOČÁSTIC OXIDŮ  
KOVŮ VE VODĚ**

**JINDŘICH LEITNER<sup>a</sup>, DAVID SEDMIDUBSKÝ<sup>b</sup>,  
ONDŘEJ JANKOVSKÝ<sup>b</sup>**

*<sup>a</sup> Ústav inženýrství pevných látek, <sup>b</sup> Ústav anorganické chemie,  
VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha-Dejvice  
leitnerj@vscht.cz*

Vliv velikosti částic na jejich fyzikální a chemické vlastnosti je znám již téměř 150 let. Tento jev souvisí s podstatným nárůstem měrného povrchu částic s jejich klesajícím objemem, přičemž povrch spojený s nezanedbatelnou povrchovou energií vede k nižší stabilitě těchto částic. Zvýšení rozpustnosti (nano)částic přináší řadu pozitivních efektů (např. zvýšení dostupnosti málo rozpustných farmaceuticky účinných látek z léčiv), ale i negativních (např. zvýšení toxicity řady kovů a jejich oxidů pro rostliny i živočichy), a proto je předmětem značného zájmu, a to jak po stránce experimentální, tak teoretické. Nejjednodušší přístup k predikci zvýšené rozpustnosti představuje Ostwaldova-Freundlichova rovnice (OFR), která predikuje exponenciální růst rozpustnosti s klesajícím poloměrem částice. Jistým problémem při použití OFR je skutečnost, že zvýšenou rozpustnost zcela řeší na úkor snížení termodynamické stability pevné látky a nebere na zřetel odezvu roztoku. Sofistikovanější přístup vychází z výpočtu rovnovážného složení nasyceného danou pevnou látkou, jejíž chemický potenciál je doplněn o povrchový příspěvek<sup>1</sup>.

V této práci je termodynamicky modelována zvýšená rozpustnost nanočástic  $\text{ZnO}$ ,  $\text{CuO}$  a  $\text{SnO}_2$  ve vodě a vodných roztocích. Pro výpočet rovnovážného složení nasycených vodných roztoků byl použit program CHEMEQ<sup>2</sup> využívající nestechiometrický algoritmus spočívající v minimalizaci celkové Gibbsovy energie systému. Aktivitní koeficienty složek vodných roztoků byly vyjádřeny pomocí Daviesovy rovnice. V rovnováze byla rovněž uvažována plynná fáze s fixovaným parciálním tlakem kyslíku  $p(\text{O}_2)/p^\circ = 0,21$  a oxidu uhličitého  $p(\text{CO}_2)/p^\circ = 4 \cdot 10^{-4}$  (standardní tlak  $p^\circ = 100$  kPa). Částice byly uvažovány jako sférické a dále ve tvaru válců s poměrem výška/poloměr podstavy = 2 a 20. Vypočtené výsledky ukazují největší zvýšení rozpustnosti pro nanočástice  $\text{SnO}_2$  a největší rozdíly mezi výsledky OFR a CHEMEQ pro nanočástice  $\text{CuO}$ .

*Tato práce vznikla za finanční podpory GAČR v rámci projektu č. 20-03253S.*

**LITERATURA**

1. Leitner J., Sedmidubský D.: World J. Chem. Educ. 5, 206 (2017).
2. Voňka P., Leitner J.: Calphad 19, 25 (1995).

**2L-07**  
**SPATIALLY RESOLVED MAGNETIC DISORDER**  
**IN NANOPARTICLES****DOMINIKA ZÁKUTNÁ<sup>a</sup>, DIRK HONECKER<sup>b</sup>,**  
**SABRINA DISCH<sup>c</sup>**

<sup>a</sup> Charles University, Hlavova 2030/8, 128 40 Prague, Czech Republic, <sup>b</sup> University of Luxembourg, 162A Avenue de la Faïencerie, L-1511 Luxembourg, Luxembourg, <sup>c</sup> Universität zu Köln, Greinstraße 4-6, 50939 Köln, Germany  
zakutnad@natur.cuni.cz

Magnetic nanoparticles have peculiar magnetic properties that make them relevant for data storage, electronic and mechanical engineering, and biomedical applications. Specifically, the magnetic properties in nanomaterials are strongly impacted by disorder effects, which has a strong impact on their magnetization properties. It has been recently shown that the heating performance of magnetic nanoparticles is crucially affected by disorder effects<sup>1-3</sup>. However, despite the great technological relevance and fundamental importance, it is challenging to isolate surface-related effects from the effective magnetic features of the bulk. Fundamentally, these issues demand to reveal the three-dimensional magnetic configuration and the nanoscale distribution of spin disorder within magnetic nanoparticles.

Polarized small-angle neutron scattering (SANS) is a key technique allowing us to investigate the nanoparticle magnetization with great detail<sup>4</sup>. Within this contribution, I will give an overview of our recent studies on the intraparticle spatial magnetization distribution in ferrite nanospheres with sub-Å resolution<sup>5</sup>. I will show that we revealed a significant field-dependence of the integral nanoparticle moment, which is in contrast with the classical, static picture of a collinearly magnetized nanoparticle core with a structurally disordered shell accompanied by magnetically disordered surface spins. Moreover, we demonstrate how magnetic order can overcome structural disorder. Using polarized SANS we quantitatively extract the spin disorder energy and the spatially resolved surface anisotropy within the nanoparticles. Finally, we clarify the internal nanoparticle spin structure, which gives us indirect insight into the structural defect density and distribution in magnetic nanoparticles.

*We gratefully acknowledge the financial support provided by JCNS to perform the neutron scattering measurements at the Heinz Maier-Leibnitz Zentrum (MLZ), Garching, Germany, and the provision of beamtime at the instrument D33 at the Institut Laue-Langevin, Grenoble, France. This research was supported by DFG (DI 1788/2-1).*

## REFERENCES

1. Bender P. et al.: J. Phys. Chem. C 122, 3068 (2018).
2. Lak A. et al.: Nano Lett. 18, 6856 (2018).
3. Lappas A. et al.: Phys. Rev. X 9, 041044 (2019).
4. Mühlbauer S. et al.: Rev. Mod. Phys. 91, 015004 (2019).
5. Zákutná D., et al.: Phys. Rev. X. Accepted (2020).

**2L-08**  
*Účast zrušena*

## 2L-09

POLYAZAMAKROCYKLY S FOSFOROVÝMI  
PENDANTNÍMI RAMENY JAKO LIGANDY PRO  
DVOJMOCNOU MĚĎ

PETR HERMANN

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta,  
Universita Karlova, Hlavova 2030, 128 43 Praha 2  
petrh@natur.cuni.cz

V humánní medicíně jsou používána radiofarmaka založená na radioizotopech kovových prvků, které musí být vázány v komplexech majících vysokou stabilitu v tělních tekutinách a předem určenou farmakokinetiku. Stabilita *in vivo* je především dána kinetickou inertností komplexů. Radioizotopy kovů musí být vázány velice rychle a za mírných podmínek, což je spojeno s vysokou rychlostí komplexace daného kovového iontu a s vysokou termodynamickou selektivitou pro daný iont. Nejběžnějšími ligandy jsou polyazamakrocykly s koordinujícími se pendantními rameny.

Měď má několik radioizotopů, které jsou vhodné pro použití v medicíně jak pro zobrazování, tak pro terapii. Pro zobrazování pomocí pozitronové emisní tomografie (PET) je nejzajímavějším izotopem  $^{64}\text{Cu}$  ( $t_{1/2}$  12,8 h,  $b^-$  (19%) –  $E_{\max}$  657 keV), pro terapii je velice vhodný izotop  $^{67}\text{Cu}$  ( $t_{1/2}$  2,6 d,  $b^-$  (100%) –  $E_{\max}$  575 keV). Oba radioizotopy tvoří tzv. „theranostic pair“. Zájem o tyto radioizotopy významně vzrostl poté, co se nedávno  $^{67}\text{Cu}$  stala komerčně dostupnou za přijatelnou cenu. Chelátory pro radioizotopy mědi jsou hledány už dlouho<sup>1</sup>. Ukázalo se, že „standardní“ makrocyclické ligandy, jako je např. DOTA a její deriváty (Schéma 1), neposkytují komplexy žádaných vlastností. Teprve v posledních letech bylo navrženo několik vhodných ligandů. Mezi ně lze zařadit polyazamakrocykly s fosforovými nebo fosfinovými skupinami v pendantních ramenech.

V tomto příspěvku budou srovnány vlastnosti komplexů Cu(II) acetátových makrocyclicků (DOTA, NOTA<sup>2</sup>; Schéma 1) s vlastnostmi komplexů makrocyclicků s fosforovými pendanty. Bude ukázáno, že chování ligandů s kyselými fosforovými skupinami se navíc dá ladit pomocí substituentů na atomu fosforu (např. pro  $\text{Me}_3\text{te1p}^{\text{R}}$ , Schéma 1)<sup>3</sup>. Struktury komplexů fosforových makrocyclicků se celkově podobají strukturám komplexů mateřských acetátových derivátů, ale komplexy se vzájemně liší chováním v roztoku. Aminové skupiny fosfonových ligandů jsou poměrně bazické, a proto jsou jejich komplexy termodynamicky velice stabilní. Stabilita komplexů fosfinových a acetátových ligandů jsou podobné. Ligandy odvozené od cyklamu vykazují vysokou termodynamickou selektivitu pro Cu(II).

Komplexy makrocyclicků vznikají dvoustupňovým mechanismem. Nejprve vzniká tzv. komplex „out-of-cage“, ve kterém jsou na ion kovu koordinována pouze pendantní ramena. Následuje rychlost určující krok, ve kterém jsou odstraněny protony vázané na aminech cyklu, a ion kovu se váže do kavity makrocyclicku. Kyselé fosforové skupiny jsou schopné tvořit stabilní komplexy už v kyselých roztocích, a proto dobře stabilizují komplexy „out-of-cage“. Jsou také schopné, lépe než acetáty, vytvářet vodíkové vazby. Napomáhají tedy velice dobře transferu protonů z kavity makrocyclicku do okolní vody. Přítomnost fosfonových či

bis(fosfinových) skupin proto výrazně urychluje komplexaci Cu(II)<sup>3–5</sup>. Ač kinetická inertnost komplexů podstatně závisí na struktuře ligandů, mohou být komplexy některých ligandů (např. cb-te2ppi, Schéma 1) extrémně kineticky inertní<sup>5</sup>.

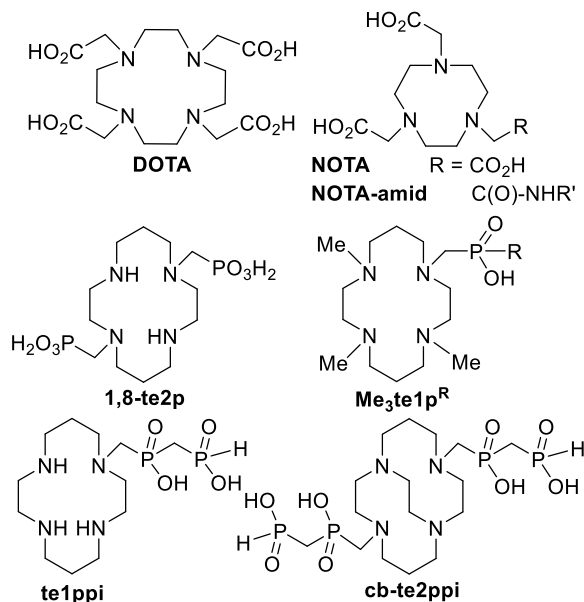


Schéma 1. Makrocyclické ligandy pro Cu(II) zmíněné v článku

Výsledky uvedené výše (mM koncentrace Cu(II)) dobře korelují s radiochemickými daty pro beznosičovou  $^{64}\text{Cu}$  a vybrané ligandy. Ukázalo se, že značení s  $^{64}\text{Cu}$  je velice účinné a rychlé, dokonce i při pokojové teplotě<sup>4,6</sup>. Cyklamové deriváty (např. 1,8-te2p, te1ppi nebo cb-te2ppi; Schéma 1) patří mezi nejlepší, dosud publikované, chelátory pro radioizotopy mědi.

Tento výzkum je dlouhodobě podporován GAČR, MŠMT a GAUK, v současné době jde o grant GAČR 19-17380S.

## LITERATURA

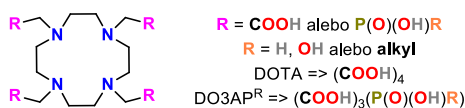
1. Boros E., Packard A. B.: Chem. Rev. 119, 870 (2019).
2. Kubíček V., Böhmová Z., Ševčíková R. et al.: Inorg. Chem. 57, 3061 (2018).
3. Paúrová M., David T., Císařová I. et al.: New J. Chem. 42, 11908 (2018).
4. David T., Kubíček V., Gutten O. et al.: Inorg. Chem. 54, 11751 (2015).
5. Pazderová L., David T., Hlinová V. et al.: Inorg. Chem. 59, 8432 (2020).
6. David T., Hlinová V., Kubíček V. et al.: J. Med. Chem. 61, 8774 (2018).

## 2L-10 SYNTÉZA MAKROCYKLICKÝCH DERIVÁTŮ AMINOFOSFOROVÝCH KYSELÍN PRE KOORDINÁCIU $\text{Ln}^{3+}$ IÓNŮV

**PETER URBANOVSKÝ, PETR HERMANN**

Katedra Anorganické chemie, Univerzita Karlova, Hlavova  
8/2030, 128 43 Praha 2  
urbanop@natur.cuni.cz

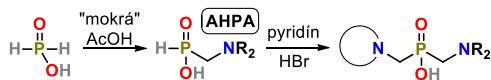
Polyazamacrocyklické chelátory sú využívané v mnohých odboroch akými sú napr. diagnostická medicína, rádiofarmaká, metalurgia<sup>1</sup>. Ligand DOTA a jeho deriváty s fosforovými pendantnými ramenami (obr. 1) sú známymi chelatanmi  $\text{Ln}^{3+}$  a  $\text{Gd}^{3+}$  komplexy (kontrastné látky pre magnetickú tomografiu) ligandov DO3AP<sup>R</sup> majú vlastnosti blízke optimálnym<sup>2</sup>.



Obrázok 1.

Vlastnosti komplexov derivátov cyklénu s protonizovateľnou pendantnou aminofosfinovou skupinou sú závislé na pH<sup>3</sup>. Syntéza týchto ligandov (ako i syntézy ich prekurzorov) nie sú používané, pretože samotné reakcie poskytujú často ťažko čistiteľné zmesi. Preto boli syntézy týchto látok bližšie skúmané.

Prekurzormi týchto ligandov bývajú klasicky amino-*H*-fosfinové kyseliny (AHPA), ktorých príprava prebieha za tepla v silno kyslom prostredí (60–100 °C, vodná 1:1 HCl) a vedie k zmesi produktov. Za použitia „mokrej“ AcOH a mierne zvýšenej teploty (40 °C), AHPA vznikajú čisto (obr. 2), vo vysokých konverziách a ich čistenie je jednoduché. Reakcia poskytuje AHPA s bázičnými aminmi ( $\text{p}K_{\text{A}} > \sim 7-8$ ),  $(\text{CH}_2\text{O})_n$  / elektrónovo bohatými aldehydmi a vodnou  $\text{H}_3\text{PO}_2$ . Jej mechanizmus bol skúmaný v AcOH-*d*<sub>4</sub> a hlavnými intermediátmi reakcie sú *N*-acetoxymethyl aminy<sup>4</sup>.



Obrázok 2.

AHPA boli ďalej použité do Kabachnik–Fields reakcie s macrocyklickými derivátmi. Optimálne podmienky boli získané za použitia suchého pyridínu a jeho hydrobromidu ako zdroju silnej kyseliny pre kyslú katalýzu reakcie (obr. 2). Boli pozorované vysoké konverzie na chránené ligandy a celkové výťažky konečných ligandov boli vyššie než uvedené v literatúre. Mechanizmus reakcie bol skúmaný v pyridíne-*d*<sub>5</sub>. Výsledky potvrdili prítomnosť imíniového kationu ako kľúčového intermediátu.

Kombináciou oboch skúmaných reakcií je možná príprava mnohých, doposiaľ nedostupných, aminofosforových derivátov cyklénu vo vysokých výťažkoch, ktorých komplexy

môžu byť použité ako nové pH-responzívne látky vďaka (de) protonizácii pendantnej amino skupiny.

Táto práca vznikla za podpory grantu GA ČR 19-17380S.

## LITERATURA

- Lindoy L. F., v knize: *Macrocyclic Chemistry: Current Trends and Future Perspectives*, kap. 4, s. 53. Springer, Netherlands 2005.
- Wahsner J., Gale E. M., Rodríguez-Rodríguez A., Caravan P.: *Chem. Rev.* 119, 957 (2018).
- Urbanovský P., Kotek J., Carniato F., Botta M., Hermann P.: *Inorg. Chem.* 58, 5196 (2019).
- Urbanovský P., Kotek J., Císařová I., Hermann P.: *RSC Adv.* 10, 21329 (2020).

## 2L-11 CYKLAMOVÉ CHELÁTORY S FOSFOROVÝMI PENDANTMI PRE KOMPLEXÁCIU RÁDIOIZOTOPOV MEDI

**LUCIA PAZDEROVÁ<sup>a</sup>, JAN KOTEK<sup>a</sup>, PŘEMYSL  
LUBAL<sup>b</sup>, VOJTĚCH KUBÍČEK<sup>a</sup>, PETR HERMANN<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8, 128 00 Praha 2, <sup>b</sup> Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova Univerzita, Brno  
lucia.pazderova@gmail.com

S cieľom vytvoriť nové účinné nosiče rádioizotopov medi pre Pozitronovú Emisnú Tomografiu, boli pripravené a študované cross-bridged deriváty cyklámu nesúce dve fosfonátové (**I**), bis(fosfinátové) (**II**) alebo fosfinátové (**III**) pendantné ramená a nepremostený cyklamový derivát s jedným pripojeným monofosfinát-bis(fosfonátovým) (**IV**) pendantom (Schéma 1). Ich termodynamické a kinetické vlastnosti boli študované prostredníctvom potenciometrickej titrácie a UV-Vis spektroskopie. Štúdium acidobazických vlastností ligandov ukázalo na vysokú bazicitu macrocyklu skúmaných ligandov ( $\text{p}K_{\text{I}} > 14$ ). Štúdium termodynamickej stability ich med'natých komplexov odhalilo, že sa jedná o vysoko stabilné látky s hodnotami konštanty stability  $\log K$  v rozmedzí 20–26. U cross-bridged derivátov **I** a **II** je kinetika tvorby komplexov veľmi rýchla. Pri pH  $\sim 6$  je kvantitatívna formácia dosiahnutá už v priebehu 1 s. Všetky testované látky sa vyznačujú veľmi vysokou kinetickou inertnosťou. Polčas disociácie med'natých komplexov premostených macrocyklov **I** a **III** v 1 M  $\text{HClO}_4$  a pri teplote 90 °C je 120 h a 111 h. U cyklamového derivátu **IV** sa študovala afinita ku kostnému tkanivu, v rámci novej cieľovej terapie. Modelové testy na hydroxyapatíte odhalili vysokú afinitu a rýchlu sorpciu. Uvedené zistenia naznačujú, že skúmané ligandy sú sľubnými nosičmi rádioizotopov medi pre ďalší výskum smerom ku klinickej aplikácii.



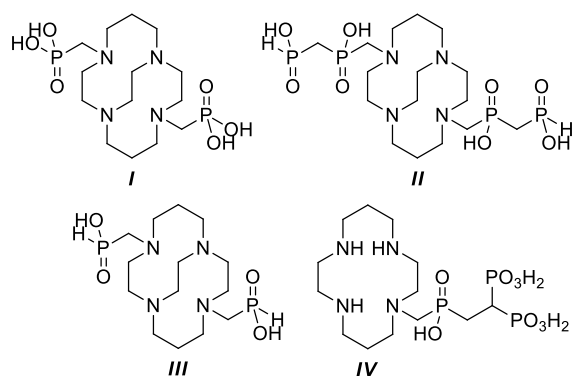


Schéma 1. Študované ligandy

Tato práce vznikla za podpory grantů GAČR 19-17380S a MU MUNI/A/1424/2019.

## 2L-12 PARAMAGNETICKÉ KOMPLEXY MAKROCYKLICKÝCH LIGANDŮ JAKO KONTRASTNÍ LÁTKY PRO $^{19}\text{F}$ MRI

FILIP KOUČKÝ

Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Hlavova 8,  
128 43 Praha 2  
kouckyf@natur.cuni.cz

Zobrazování pomocí magnetické resonance (MRI – magnetic resonance imaging) je v dnešní době hojně využívaná diagnostická metoda, která je alternativou k zobrazovacím metodám založených na ionizujícím záření – SPECT (single photon emission computed tomography), PET (positron emission tomography) a CT (computed tomography). MRI je založeno na principu nukleární magnetické resonance (NMR), která využívá záření v oblasti radiofrekvenčních vln. Při běžném MRI vyšetření se měří signál vody ( $^1\text{H}$  NMR), který je v těle cca 70 %.

Dalším velice citlivým NMR aktivním jádrem je  $^{19}\text{F}$ . Fluor nemá v lidské měkké tkáni přirozené pozadí a díky tomu se  $^{19}\text{F}$  MRI také nazývá *hotspot imaging*. Pro alokaci signálu je však nutné změřit i  $^1\text{H}$  MRI. *Hotspot imaging* je ideální pro tzv. *cell tracking*. Pokud jsme schopni označit buňky kontrastní látkou (CA – contrast agent) s  $^{19}\text{F}$  atomy a poté je vpravit do organismu, tak jediným signálem, který pomocí  $^{19}\text{F}$  MRI vidíme, je signál námi označených buňek.

Pro získání lepšího poměru signálu k šumu je zapotřebí měřit větší koncentraci CA, nebo během měření nakumulovat více scanů. V takovém případě se ale může vyšetření velice prodloužit. Délka pulsní sekvence je závislá na charakteristických veličinách, kterými jsou  $T_1$  a  $T_2$  relaxační časy ( $T_2 < T_1$ ). Pro zkrácení relaxačních časů se využívají paramagnetické ionty kovů ze skupiny lanthanoidů<sup>1,2</sup> a z *d*-bloku<sup>3</sup>. Tyto kovy jsou většinou značně toxické, proto je nutné je zakomplexovat do vhodných ligandů. Z hlediska kinetické a termodynamické inertnosti se nejlépe osvědčily ligandy odvozené od polyazamakrocyklů, jako jsou cyklen (1,4,7,10-tetraazacyklododekan)<sup>1,2</sup>, cyklam (1,4,8,11-tetraazacyklotetradekan)<sup>3</sup> a tacn (1,4,7-triazacyklononan).

Tato práce vznikla za podpory grantu COST Action CA15209.

## LITERATURA

1. Herynek V., Martinisková M., Bobrova Y., et al.: Magn. Reson. Mater. Phys. 32, 115 (2019).
2. Schmid F., Höltke C., Parker D., et al.: Magn. Reson. Med. 69, 1056 (2013).
3. Blahut J., Hermann P., Gálisová A., et al.: Dalton Trans. 45, 474 (2016).

## 2L-13 KOMPLEXY IÓNŮ KOVŮ NA BÁZE STRIEBRA A ZINKU A ICH BIOLOGICKÉ APLIKACE

ZUZANA VARGOVÁ<sup>a</sup>, MICHAELA RENDOŠOVÁ<sup>a</sup>,  
MIROSLAV ALMAŠI<sup>a</sup>, GABRIELA KUZDEROVÁ<sup>a</sup>,  
RÓBERT GYEPES<sup>b</sup>, DANICA SABOLOVÁ<sup>c</sup>, PETRA  
OLEJNÍKOVÁ<sup>d</sup>

<sup>a</sup> Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta UPJŠ, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovensko, <sup>b</sup> Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta UK, Hlavova 2030, 128 00 Praha, Česko, <sup>c</sup> Katedra biochemie, Přírodovědecká fakulta UPJŠ, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovensko, <sup>d</sup> Katedra biochemie a mikrobiologie, STU, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovensko  
zuzana.vargova@upjs.sk

Původem množství civilizačních onemocnění sú mikroorganizmy rôznych druhov, či už bakteriálneho alebo vírusového typu (*S. aureus*, *G. E. coli*, *R. oryzae*, *A. alternata* a pod.). Ľudstvo v úsilí tieto ochorenia eliminovať nachádzalo a nachádza riešenia v produkcii liečiv, ktoré patologický účinok mikroorganizmov potláča. Za posledných 50 až 80 rokov bolo na trh uvedených množstvo antibiotík na báze sulfonamidov, penicilínu, cefalosporinů a aminoglykozidů ako aj antifungálnych prípravkov na báze polyénů a azolů<sup>1</sup>. Mnohé sú produkované mikroorganizmami (napr. penicilín, polyény) a mnohé sú syntetizované (napr. sulfoamidy, azoly). Jedným z vážnych problémů súčasnosti je nadmerné užívanie antibakteriálnych a antifungálnych liečiv, čo vedie prirodzene k rezistencii bakteriálnych a vírusových organizmov voči týmto liečivám.

Jedným z možných riešení, ktoré sa ponúka je použitie “staronových” prístupů s využitím kombinácie biologicky aktívneho ligandu a antimikrobiálneho kovu ( $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Ag}^+$ ) s cieľom získať širokospektrálne a multifunkčné liečivo<sup>2</sup>. Na základe toho bolo v posledných rokoch publikovaných množstvo prác, ktoré sa venujú príprave a antimikrobiálnemu účinku komplexů striebra a zinku na báze karboxylátů, aminorů, karbénů prípadne sulfoamidů<sup>3</sup>.

Prezentácia bude zameraná na výsledky získané štúdiom komplexů striebra a zinku s rôznymi N-, O-donorovými ligandami so zameraním na ich prípravu, charakterizáciu, stabilitu, selektivitu a molekulové rozpoznávanie.

Autori ďakujú za finančnú podporu tejto práce Slovenským grantovým agentúram VEGA 1/0016/18, KEGA 008UPJŠ-4/2018, Univerzite Pavla Jozefa Šafárika (VVGs-2020-1408).

## LITERATÚRA

1. Thompson G. R., Cadena J., Patterson T. F.: *Clin. Chest Med.* 30, 203 (2009).
2. Greenwood D.: *Antimicrobial Chemotherapy*. Oxford University Press, Oxford 2000.
3. Almáši M., Vargová Z., Sabolová D., Kudláčová J., Hudecová D., Kuchár J., Očenášová L., Györyová K.: *J. Coord. Chem.* 68, 4423 (2015).

## 2L-14

**STRUKTURNÍ A MAGNETICKÉ VLASTNOSTI  
KOORDINAČNÍCH SLOUČENIN Fe(II)/Co(II)  
S 1,3,4-THIADIAZOLY**

**PAVEL ZOUFALÝ<sup>a</sup>, JÁN MONCOL<sup>b</sup>, RADOVAN  
HERCHEL<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Katedra anorganické chemie, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká republika, <sup>b</sup> Oddelenie anorganickej chémie, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko pavel.zoufaly@upol.cz

Magnetismus koordinačních sloučenin zaujímá významné postavení v koordinační chemii. Především jednomolekulový magnetismus (SMM) nebo látky vykazující spinové křížení (SCO) jsou předmětem zájmu poměrně dlouhou dobu<sup>1,2</sup>. Potenciální aplikace zahrnují například senzory, záznamová zařízení s velkou kapacitou<sup>3</sup>. Naše pracoviště se v minulosti zabývalo koordinačními sloučeninami Fe(II)/Co(II) obsahujícími 4-amino-3,5-di-2-pyridyl-4H-1,2,4-triazol nebo 2-(furan-2-yl)-5-(pyridin-2-yl)-1,3,4-oxadiazol, které vykazovaly tepelně indukovaný SCO nebo polem indukované vlastnosti SMM<sup>4,5</sup>. V literatuře lze nalézt analogické, ale málo studované heterocyklické sloučeniny 1,3,4-thiadiazoly, které vykazují teplotní SCO a také se staly předmětem studia změny spinového stavu působením světla (LIESST)<sup>6</sup>. Proto jsme se rozhodli modifikovat pětičlenný heterocyklus a připravit asymetricky 2,5-disubstituovaný-1,3,4-thiadiazol, koordinační sloučeniny obecného vzorce  $[M(L)_2(NCS)_2]$  (M = Fe(II) nebo Co(II); L = 2-aryl-5-pyridin-2-yl-1,3,4-thiadiazol) a zkoumat jejich magnetické vlastnosti.

Tato práce vznikla za podpory IGA\_PrF\_2020\_016.

## LITERATURA

1. Gütllich P., Goodwin H. A. (Eds.): *Spin Crossover in Transition Metal Compounds I-III, Topics in Current Chemistry*, Vols. 233–235, Springer, Berlin, Heidelberg (2004).
2. Shao D., Wang X.: *Chin. J. Chem.* 38, 1005 (2020).
3. Létard J. F., Guionneau P., Goux-Capes L.: *Towards Spin Crossover Applications*. In: *Spin Crossover in Transition Metal Compounds III. Topics in Current Chemistry*, vol 235. Springer, Berlin, Heidelberg (2004).
4. Herchel R., Trávníček Z., Zbořil R.: *Inorg. Chem.* 50, 12390 (2011).
5. Zoufalý P., Čížmár E., Kuchár J., Herchel R.: *Molecules* 25, 277 (2020).
6. Klingele J., Kaase D., Schmucker M., Lan Y., Chastanet G., Létard J.: *Inorg. Chem.* 52, 6000 (2013).

## 2L-15

**MAGNETIC BISTABILITY IN COBALT(II)  
AND IRON(II) COMPLEXES**

**IVAN ŠALITROŠ**

*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Bratislava SK-81237, Slovakia  
ivan.salitros@stuba.sk*

Iron and cobalt transition metal complexes present exciting classes of coordination compounds which quite often exhibit magnetic bistability based either on the spin crossover (SCO) effect or on the single molecule magnetism (SMM)<sup>1–3</sup>. Both phenomena exhibit reversible switching among the corresponding magnetic states, which can be controlled at the molecular level using the miscellaneous external triggers (i.e.  $\Delta T$ ,  $\Delta p$ , B or hv). With respect to this, such switches are excellent candidates for the data recording and for the utilization of high-density memory devices (Fig. 1).

Herein we present several families of coordination compounds in which the structural investigation and magnetic studies have been performed. Careful molecular design and goal-directed synthesis of bidentate or tridentate aromatic N-donor ligands allowed preparation of ferrous complexes showing thermal and photoinduced SCO between low-spin (S=0, diamagnetic) and high-spin (S=2, paramagnetic) spin states<sup>4</sup>. On the other hand, the slow magnetic relaxation of magnetization indicating the presence of field induced SMM behavior has been detected in the next family of Co(II) complexes with tridentate aromatic N-donor ligands<sup>5</sup>.

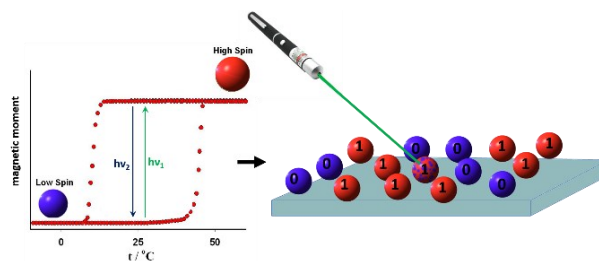


Fig. 1. Schematic view of data recording based on the photoactive SCO molecules<sup>2,3</sup>

Grant agencies (APVV-18-0197, APVV-18-0016, APVV-19-0087 and VEGA 1/0125/18) are acknowledged for the financial support.

## REFERENCES

1. Šalitraš I., Madhu N. T., Boča R., Pavlík J., Ruben M.: *Monatsh. Chem.* 140, 695 (2009).
2. Brachňaková B., Šalitraš I.: *Chem. Pap.* 72, 773 (2018).
3. Šalitraš I., Pavlík J.: (2017) Light-induced excited spin state trapping. In: Wang Z. (eds) *Encyclopedia of physical organic chemistry*. Wiley, Online ISBN: 9781118468586.
4. Šalitraš I., Herchel R., Fuhr O., Gonzales-Prieto R., Ruben M.: *Inorg. Chem.* 58, 4310 (2019).

5. Brachňaková B., Matejová S., Moncol J., Herchel R., Pavlik J., Moreno-Pineda E., Ruben M., Šalitroš I.: Dalton Trans. 49, 1249 (2020).

## 2L-16

### MOLECULAR MAGNETISM OF NEW COORDINATION COMPOUNDS WITH PYRIDYL-BENZIMIDAZOLE LIGANDS

**BARBORA BRACHŇAKOVÁ, IVAN ŠALITROŠ, JÁN MONCOL, JOZEF KOŽÍSEK**

Faculty of chemical and food technology, Department of Inorganic Chemistry, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, SK-81237 Bratislava, Slovakia  
barbora.brachnakova@stuba.sk

Our study is focused on the preparation of complexes with different central atoms (specifically iron(II) and cobalt (II) atoms) surrounded by the structurally modified pyridyl-benzimidazole units and their influence on the magnetic behavior of complexes. In this context, iron(II) complexes can exhibit *Spin Crossover*<sup>1</sup> phenomenon and the cobalt(II) complexes are potential *Single-Ion Magnets*<sup>2</sup>. The spin crossover behavior results from the transition between the low spin (LS) and high spin (HS) electron configuration that can be modified by external stimuli such as variation of temperature, pressure, magnetic or electric field and light irradiation<sup>3</sup>. On the other hand, the molecular-based magnetism in single-ion magnets is based on the existence of two different projections of magnetization (so called *M+* and *M-* projections) at zero magnetic field. The origin of such magnetic bistability is believed to be based on the large magnetic anisotropy and high energetic barrier of spin reversal<sup>4</sup>.

The desired magnetic bistability can be achieved by the rational design of coordination compounds. Pyridyl-benzimidazole derivatives were prepared by substitution of the secondary amine of imidazole part with bulky aromatic substituents and in combination with appropriate metal salts were formed neutral complexes. X-ray analysis revealed a distorted octahedron geometry as for iron center as well as for cobalt center. The direct-current magnetic measurements of magnetic susceptibility for mononuclear complexes [Fe(L1)<sub>3</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> and [Fe(L1)<sub>3</sub>](BF<sub>4</sub>)<sub>2</sub> (L1= 1-(4-*tert*-butylbenzyl)-2-pyridine-2-yl-1*H*-benzimidazol) revealed gradual and incomplete spin crossover with transition temperature around and above room temperature, respectively. The pentacoordinated complexes [Co(L2)(NCS)<sub>2</sub>], [Co(L2)Cl<sub>2</sub>] and [Co(L2)Br<sub>2</sub>] (L2= 2,6-bis(1-(3,5-di-*tert*-butylbenzyl)-1*H*-benzimidazol-2-yl)pyridine) show the paramagnetic behaviour and the cobalt centre of such systems exhibits a slow magnetic relaxation as proven by the AC susceptibility measurements. The frequency dependence of the maxima at the out-of-phase component of the magnetic susceptibility confirms a field-induced single-ion magnetism<sup>5</sup>.

This work was supported by the Slovak grant agencies APVV-18-0197, APVV-18-0016, APVV-19-0087 and VEGA 1/0125/18. Barbora Brachňaková acknowledges The National Scholarship Programme of the Slovak Republic for the

Support of Mobility of Students, PhD Students, University Teachers and Researchers and Tatra Bank Scholarship.

## REFERENCES

- Gütlich P., Gaspar A. B., Garcia Y.: Beilstein J. Org. Chem. 9, 342 (2013).
- Craig G. A., Murrie M.: Chem Soc. Rev. 44, 2135 (2015).
- Real J. A., Gaspar A. B., Munoz M. C.: Dalton Trans. 12, 2062 (2005).
- Christou G., Gatteschi D., Hendrickson D. N., Sessoli R.: MRS Bulletin. 25, 66 (2000).
- Brachňaková B., Matejová S., Moncol J., Herchel R., Pavlik J., Moreno-Pineda E., Ruben M., Šalitroš I.: Dalton Trans. 49, 1249 (2020).

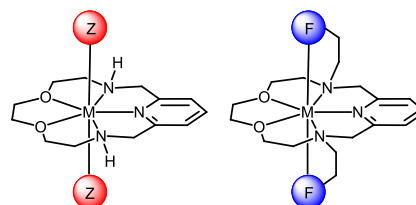
## 2L-17

### JEDNOMOLEKULOVÉ MAGNETY ZALOŽENÉ NA KOMPLEXECH PŘECHODNÝCH KOVŮ S KOORDINAČNÍM ČÍSLEM 7

**BOHUSLAV DRAHOŠ\*, RADOVAN HERCHEL, PETER ANTAL**

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

Makrocyclický ligand **15-pyN<sub>3</sub>O<sub>2</sub>** (3,12,18-triaaza-6,9-dioxabicyklo[12.3.1]oktadeca-1(18),14,16-trien, obr. 1 vlevo) byl použit pro přípravu komplexů s Mn(II), Fe(II)/(III), Co(II) a Ni(II), ve kterých bylo potvrzeno méně běžné koordinační číslo 7 s pentagonálně bipyramidálním tvarem koordinační sféry<sup>1-4</sup>. Pro komplexy Fe(II), Co(II) a Ni(II) byla nalezena velká míra magnetické anizotropie, která je klíčem pro to, aby se látka mohla chovat jako tzv. jednomolekulový magnet, který vykazuje pomalou relaxaci magnetizace čistě molekulového původu. Tyto látky mohou v budoucnu nalézt uplatnění v podobě vysokokapacitních paměťových nosičů nebo ve spintronice. Navíc bylo prokázáno, že je v případě pentagonálně bipyramidálních komplexů Fe(II), Co(II) a Ni(II) s makrocyclickým ligandem **15-pyN<sub>3</sub>O<sub>2</sub>** možné magnetickou anizotropii ladit/zvyšovat pomocí výměny jednovazných axiálních koligandů (obr. 1 vlevo, Z = např. Cl<sup>-</sup>, Br<sup>-</sup>, I<sup>-</sup>, NCS<sup>-</sup>, N<sub>3</sub><sup>-</sup>, CN<sup>-</sup>, CH<sub>3</sub>CN atd.)<sup>2</sup> nebo modifikací **15-pyN<sub>3</sub>O<sub>2</sub>** dvěma pendantními rameny, která obsahují



Obr. 1. Schematické znázornění koordinačního módu připravovaných ligandů, vlevo pentadentátního ligandu **15-pyN<sub>3</sub>O<sub>2</sub>**, vpravo jeho heptadentátních derivátů (Z = monodentátní axiální koligand, F = koordinující se funkční skupina s různými donorakceptorovými vlastnostmi)

funkční skupiny s různými donor-akceptorovými vlastnostmi (obr. 1 vpravo, F = karboxylát<sup>3</sup>, pyridin<sup>1</sup>, benzimidazol<sup>4</sup>). V rámci tohoto výzkumu bylo připraveno několik typů jednomolekulových magnetů.

## LITERATURA

1. Antal P., Drahoš B., Herchel R., Trávníček Z.: *Inorg. Chem* 55, 5957 (2016).
2. Drahoš B., Herchel R., Trávníček Z.: *Inorg. Chem* 56, 5076 (2017).
3. Antal P., Drahoš B., Herchel R., Trávníček Z.: *Eur. J. Inorg. Chem.* 4286 (2018).
4. Drahoš B., Císařová I., Laguta O., Santana V. T., Neugebauer P., Herchel R.: *Dalton Trans.* 49, 4425 (2020).

## 2L-18 FERROUS COMPLEXES WITH PHOTOACTIVE PYRIDIL-BENZIMIDAZOLE LIGANDS

**ALEXANDRA ŠAGÁTOVÁ<sup>a</sup>, JAKUB ORVOŠ<sup>b</sup>, IVAN ŠALITROŠ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Department of Inorganic Chemistry, <sup>b</sup> Department of Organic Chemistry, Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia  
sagatova.alexandra@gmail.com

Octahedral ferrous complexes can reach two different spin configurations of central atom's valence electrons (diamagnetic low spin (LS) and paramagnetic high spin (HS) state). In ferrous ion coordinated with *N*-donor ligands, there is a possibility to switch electrons between  $t_{2g}$  and  $e_g$  energy levels by external stimuli. Reversible electron spin state transition known as spin crossover (SCO) effect can be achieved for example with temperature<sup>1</sup> or light<sup>2-4</sup>. Photoinduced regulation of magnetic bistability is accessible by two different mechanism. The LIESST and reverse-LIESST (Light Induced Electron Spin State Trapping) effects is the first possible alternative. While irradiating sample at cryogenic temperature, electrons are excited to the metastable state and can be relaxed by spin-orbital mechanism to quintet (HS) or singlet (LS) state, respectively<sup>2,3</sup>. The second alternative of photoinduced SCO phenomenon is LD-LISC (Ligand Driven – Light Induced Spin Change) effect. Isomerization of photoactive ligand entities caused by radiation with certain wavelength (UV or VIS) is the reason for ligand-field change, which induces spin state transition<sup>4</sup>. These effects can belong to one of the most interesting regions of molecular magnetism.

Presented study is focused on the solid state magnetic investigation of coordination compounds  $[\text{Fe}(\text{L}1)_3](\text{BF}_4)_2$  (**1**),  $[\text{Fe}(\text{L}1)_3](\text{ClO}_4)_2$  (**2**) and  $[\text{Fe}(\text{L}1)_3](\text{CF}_3\text{SO}_3)_2$  (**3**), where L1 (2-{4-[trans-phenyldiazényl]pyridine-2-yl}-1*H*-benzimidazole) contains photoactive entity. Temperature- and photoinduced SCO effect (LIESST) were measured in  $\chi T$  vs. *T* form by MPMS SQUID XL7 magnetometer. At 400 K, all of samples achieved nearly completed thermal SCO with gradual magnetic curve, however no magnetic hysteresis was observed. LIESST effect was induced in all coordination

compounds at 5 K by green light (532 nm).

*This project was supported by financial support from following projects: VEGA 1/0125/18, APVV-19-0087, APVV-18-0016 and APVV-18-0197.*

## REFERENCES

1. Sorai M., Seki S.: *J. Phys. Chem. Solids* 35, 4 (1974).
2. Decurtins S., Gütllich P., Köhler C. P., Spiering H.: *Chem. Phys. Lett.* 105, 1 (1984).
3. Hauser A.: *Top. Curr. Chem.* 234 (2004).
4. Boillot M.-L., Zarembowitch J., Sour A.: *Top. Curr. Chem.* 234 (2004).

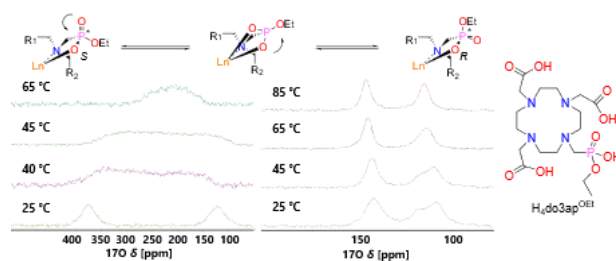
## 2L-19 ROTÁCIA FOSFONÁTOVEJ SKUPINY V KOMPLEXOCH Ln(III) S MAKROCYKlickÝMI LIGANDAMI SLEDOVANÁ METÓDOU <sup>17</sup>O NMR

**ADAM SVÍTOK<sup>a</sup>, ZDENĚK TOŠNER<sup>b</sup>, JAN BLAHUT<sup>b</sup>,  
PETR HERMANN<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Katedra anorganické chemie, <sup>b</sup> Laboratoř NMR, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2  
svitoka@natur.cuni.cz

Komplexy Ln(III) a monofosfonátových analogův ligandu H<sub>4</sub>do3ap sú použiteľné ako kontrastné látky v MRI či ako lumiscenčné sondy. Vlastnosti týchto komplexov, ktoré sú dôležité pre uvedené aplikácie, závisia na dynamickej výmene medzi ich izomérmí v roztoku. Nedávno bol metódou DFT predpovedaný nový mechanizmus výmeny izomérov týchto komplexov rotáciou fosfonátovej skupiny<sup>1</sup>. Táto rotácia vymieňa koordinovaný a nekoordinovaný atóm kyslíka fosfonátovej skupiny cez intermediát s chelatujúcou fosfonátovou skupinou (obr. 1, hore). Avšak, rotácia dosiaľ nebola experimentálne potvrdená.

Z tohto dôvodu sme sledovali roztokovú dynamiku komplexov Ln(III) a modelového ligandu H<sub>4</sub>do3ap<sup>OEI</sup> (obr. 1, vpravo) s fosfonátovou skupinou obohatenou o izotop <sup>17</sup>O. Analyzovali sme závislosť spektier <sup>17</sup>O NMR na teplote pre komplexy rôznych Ln(III) a sledovali sme roztokovú dynamiku komplexu Eu(III) metódou <sup>1</sup>H-EXSY. Takto boli určené aktivačné parametre všetkých procesov vedúcich



Obr. 1. Rotácia fosfonátovej skupiny (hore) a spektrá <sup>17</sup>O NMR  $[\text{Ce}(\text{H}_2\text{O})(\text{do}3\text{ap}^{\text{OEI}})]^-$  (vľavo; koalescencia potvrdzujúca výmenu) a  $[\text{Lu}(\text{do}3\text{ap}^{\text{OEI}})]^-$  (v strede; bez koalescencie). Štruktúrny vzorec ligandu H<sub>4</sub>do3ap<sup>OEI</sup> je uvedený vpravo

k výměně izomérů. Výsledky potvrdili výmenu izomérů rotacíou fosfonátové skupiny. Zjistili sme, že aktivačná energia tohto procesu sa zvyšuje so zmešujúcim sa polomerom Ln(III), (obr. 1). Navyše sme zjistili, že k tomuto procesu dochádza iba u izomérů určitéj geometrie.

*Táto práca vznikla za podpory grantu MŠMT ČR (LTC 17067) v rámci projektu COST CA15209 (EURELAX).*

#### LITERATÚRA

1. Blahut J., Hermann P., Tošner Z., Platas-Iglesias C.: Phys. Chem. Chem. Phys. 19, 39 (2017).

#### 2L-20

Účast zrušena

#### 2L-21

#### FUNKČNÍ FERROCENOVÉ LIGANDY

#### PETR ŠTĚPNIČKA

*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta  
Univerzity Karlovy, Hlavova 2030, 128 40 Praha  
petr.stepnicka@natur.cuni.cz*

Ferrocenové fosfiny jsou běžnými ligandy v koordinační chemii i součástí standardních sad podpůrných ligandů využívaných pro vývoj a studium katalyzovaných dějů. Mezi nechirálními ferrocenovým fosfiny stále dominuje 1,1'-bis (difenylofosfino)ferrocen, který je běžně označován zkratkou dppf (Schéma 1)<sup>1</sup>. Tento redoxně aktivní ligand je proslulý nejen svou rozsáhlou koordinační chemií, ale i širokou praktickou využitelností v homogenní katalýze. Nepřekvapí proto, že jeho struktura byla mnohokrát modifikována za účelem úpravy jeho vlastností. Kromě triviálních (i když mnohdy účinných) úprav zahrnujících náhradu substituentů na atomu fosforu byla molekula dppf modifikována i razantněji nahrazením jedné fosfinové skupiny jiným funkčním substituentem. Tento směr jsme zvolili i v našem výzkumu a získali tak sadu ferrocenových fosfinových ligandů, jejichž další funkční skupiny. Recentními příklady těchto sloučenin jsou fosfiny nesoucí skupiny aminové, nitrilové, isonitrilové, amidové nebo guanidinové (viz příklady ve Schématu 1). Tyto látky vykazují zajímavou reaktivitu, která plyne z přítomnosti modifikující skupiny, a v důsledku i neobvyklé koordinační a katalytické chování, které bude zmíněno i v tomto sdělení<sup>2-8</sup>.

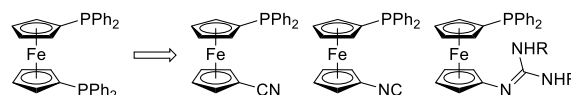


Schéma 1. Dppf a jeho vybrané funkční deriváty

*Prezentované výsledky byly získány s podporou grantu Grantové agentury České republiky (projekt 19-09334S).*

#### LITERATURA

1. *Ferrocenes: Ligands, Materials and Biomolecules*, Štěpnička, P. Ed.; John Wiley & Sons, Chichester, 2008.
2. Škoch K., Císařová I., Štěpnička P.: Chem. Eur. J. 21, 15998 (2015).
3. Škoch K., Císařová I., Schulz J., Siemeling U., Štěpnička, P.: Dalton Trans. 46, 10339 (2017).
4. Škoch K., Císařová I., Štěpnička, P.: Chem. Eur. J. 24, 13788 (2018).
5. Škoch K., Císařová I., Uhlík F., Štěpnička P.: Dalton Trans. 47, 16082 (2018).
6. Škoch K., Schulz J., Císařová I., Štěpnička P.: Organometallics 38, 3060 (2018).
7. Škoch K., Vosáhlo P., Císařová I., Štěpnička P.: Dalton



Trans. 49, 1011 (2020).

8. Bárta O., Gyepes R., Císařová I., Alemayehu A., Štěpnička, P.: Dalton Trans. 49, 4225 (2020).

## 2L-22

### IZOLOVATELNÉ PRIMÁRNÍ FOSFINOCHALKOGENIDY

**FILIP HORKÝ, JIŘÍ SCHULZ, IVANA CÍSAŘOVÁ, PETR ŠTĚPNIČKA\***

*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Hlavova 2030/8, 128 00 Praha 2 horkyf@natur.cuni.cz*

Fosfinochalkogenidy tvoří širokou skupinu známých látek, jejímž nejpočetnějším členem jsou bezpochyby fosfinoxidy. Terciální fosfinoxidy **I** představují v koordinačních studiích oblíbené tvrdé zásady s četnými aplikacemi nejen v homogenní katalýze. Sekundární fosfinoxidy **II** lze díky keto-enol tautomerii řadit jak mezi zásady tvrdé, tak i měkké.

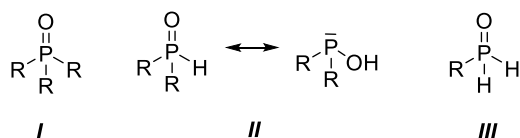


Schéma 1. Základní rozdělení fosfinoxidů

Primární fosfinoxidy **III**, na rozdíl od svých protějšků, získaly nevalnou reputaci vysoce reaktivních látek s nízkou termální stabilitou, tendencí k spontánní oxidaci a disproportionaci. Kvůli jejich obtížné izolaci, primární fosfinoxidy představují v současnosti velmi málo prozkoumanou třídu látek<sup>1</sup>. To platí o to více pro jejich těžší analogy, tedy fosfinsulfidy a selenidy<sup>2</sup>.

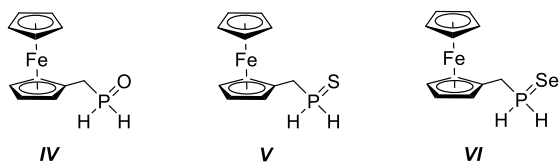


Schéma 2. Studované primární chalkogenidy

Tato práce představuje syntézu izolovatelných primárních fosfinochalkogenidů **IV**, **V** a **VI**. U těchto látek byla studována jejich stabilita, koordinační vlastnosti a reaktivita.

*Tato práce vznikla za podpory Grantové Agentury Univerzity Karlovy (projekt č. 920119).*

## LITERATURA

1. Bucker A. S., Epstein M.: Tetrahedron 18, 1221 (1962).
2. Uhlig F., Herrmann E., Schädler D., Ohms G., Besser S., Herbst-Irmer R.: Z. F. Anorg. Allg. Chem. 619, 1962 (1993).

## 2L-23

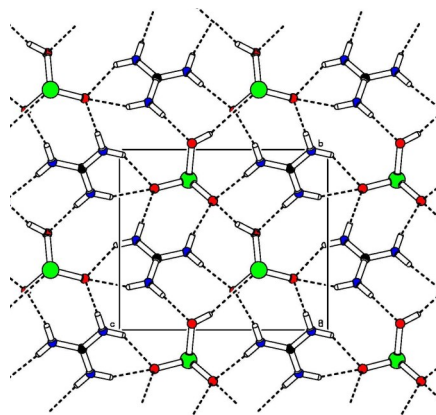
### NOVÉ MATERIÁLY S NELINEÁRNÍMI OPTICKÝMI VLASTNOSTMI – ANORGANICKÉ SOLI GUANIDINU

**IVAN NĚMEC<sup>a</sup>, IRENA MATULKOVÁ<sup>a</sup>, IVANA CÍSAŘOVÁ<sup>a</sup>, PETR NĚMEC<sup>b</sup>**

*<sup>a</sup> Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, katedra anorganické chemie, 128 43 Hlavova 8, Praha 2, <sup>b</sup> Univerzita Karlova v Praze, Matematicko-fyzikální fakulta, katedra chemické fyziky a optiky, Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2 ivan.nemec@natur.cuni.cz*

V oblasti nelineární optiky (NLO) jsou velmi atraktivní hybridní materiály vycházející z vhodných organických molekul jako nositelů NLO vlastností. Jedním z dlouhodobě studovaných, ale stále překvapujících chemických individuů, je kation guanidinia. Tento planární ion s vysokým stupněm delokalizace p elektronů (tzv. „Y-aromatický“ systém) představuje ideální stavební jednotku s trigonální symetrií pro krystalové inženýrství nových molekulových krystalů pro nelineární optiku.

Tyto nové materiály profitují z existence vodíkových vazeb jakožto řídicí interakce při sebeuspořádání do krystalových struktur. Vodíkové vazby propojující kationty guanidinia s vhodně zvolenými kokrystalizačními anionty (viz obr. 1) mají nejen zásadní strukturální roli, ale pozitivně ovlivňují i pozorované NLO efekty 2. a 3. řádu.



Obr. 1. Systém vodíkových vazeb v krystalu hydrogenseleničitanu guanidinia

V tomto příspěvku budou prezentovány reprezentativní příklady aktuálně studovaných – především anorganických – solí guanidinia. V centru pozornosti budou nejen jejich krystalografické aspekty a vibrační spektra, ale také fázová stabilita a pozorované NLO vlastnosti.

*Tato práce vznikla za podpory Centra pro cílenou syntézu a aplikace perspektivních materiálů (CUCAM) CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000417.*

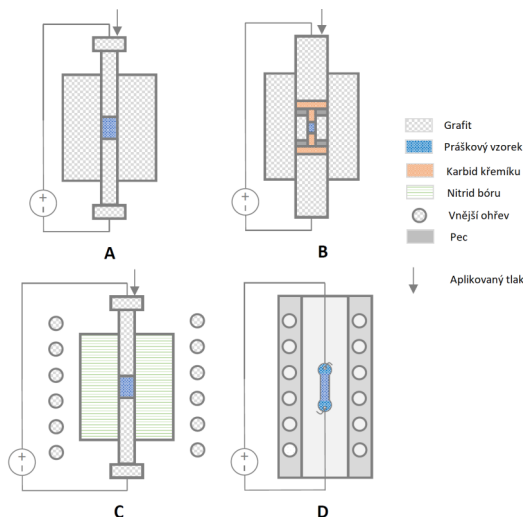
## 2L-24

## PŘÍPRAVA A SLINOVÁNÍ MATERIÁLŮ ZA ASISTENCE ELEKTRICKÉHO POLE

VÁCLAV TYRPEKL\*, TADEÁŠ WANGLE, ADAM ALEMAEHU, MATEJ NIŽNANSKÝ

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8, Praha 2, 128 00, vaclav.tyrpekl@natur.cuni.cz

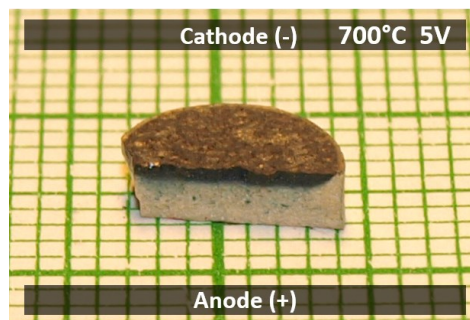
Slinování kovových a keramických materiálů patří k nejstarším lidským technologiím, které jsou využívány do dnešní doby. Klasické slinování představuje v podstatě jednoduché tepelné cykly, přičemž modernější varianty využívají také aplikaci vnějšího tlaku tlak. V posledních letech dochází k velkému rozvoji metod, které při slinování využívají elektrické pole/proudu (z angl. „Field Assisted Sintering Techniques“ – FAST)<sup>1</sup>. Do této skupiny patří několik variant, které vyšly z různých spíše technologických variant (Schéma 1). Nejstarší a nejrozšířenější je „Spark Plasma Sintering“ – SPS, používající grafitové zápustky, pístky a ohřev pomocí nízkého napětí a vysokých proudů. Existuje vysokotlaká verze této metody díky použití odolnějších pístků z karbidu křemíku. V roce 2010 publikovala skupina prof. Raje z CU, Boulder práci, ve které prokázali efekt vysokého elektrického pole na rychlost a účinnost slinování  $Zr(Y)O_2$  (cit.<sup>2</sup>). Tato publikace odstartovala rozvoj vysoko-voltové varianty FAST, které se obecně říká „Flash Sintering“ – FS. Nově také existuje kombinace využívající vysokého napětí FS a konfigurace SPS, které se říká „Flash Spark Plasma Sintering“ – FSPS.



Obr. 1. Vyobrazení současných variací technik pro slinování za asistence elektrického pole/proudu. A) Klasická Spark Plasma Sintering; B) Vysokotlaká Spark Plasma Sintering; C) Flash Spark Plasma Sintering; D) Flash Sintering bez vnějšího tlaku

Naše skupina se dlouhodobě zabývá metodami FAST a jejími vlivy na strukturu, složení a morfologii finálních preparátů (na příkladech žáruvzdorných oxidů  $HfO_2$ ,  $UO_2$ ,  $ThO_2$ ).

$CeO_2$  je zajímavý žáruvzdorný oxid, vodič kyslíkových aniontů, který je, ale vzhledem k možnosti ceru měnit oxidační číslo, problematický při slinování v SPS. Studovali jsme podmínky procesu FSPS (obr. 1, varianta C) Gd-dopovaného  $CeO_2$ , při kterých dochází ke tvorbám asymetrických mikrostruktur vlivem elektrického pole, migrace kyslíku a změny oxidačního stavu ceru<sup>3</sup>. Fotografie takového kompaktu můžete nalézt na obr. 2.



Obr. 2. Fotografie kompaktu  $Ce_{0.9}Gd_{0.1}O_{2-x}$  pomocí metody FSPS při 700 °C a 5V aplikovaných na grafitové pístky

Přednáška shrne dosavadní trendy v FAST vědní oblasti, její výhody i nevýhody a příklady na výše zmíněných oxidech.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 20-20936Y.

## LITERATURA

1. Munir Z. A. et al.: J. Amer. Ceram. Soc. 94, 1 (2011).
2. Cologne M. et al.: J. Amer. Ceram. Soc. 93, 3556 (2010).
3. Tyrpekl V., Cologne M.: v knize *Spark Plasma Sintering, 1st Edition, Current Status, New Developments and Challenges*, kap. 11, s. 257, Elsevier 2019.

## 2L-25

CRYSTAL GROWTH IN  $(GeSe_2)_x(Sb_2Se_3)_{1-x}$  MATERIALS

DIEGO VALDÉS, SIMONA MARTINKOVÁ, JIŘÍ MÁLEK, JAROSLAV BARTÁK

Faculty of chemical technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, st38633@student.upce.cz

For many decades chalcogenide glassy materials have been used for the fabrication of different technological applications. For example in optoelectronics<sup>1,2</sup>, photonics<sup>3</sup>, phase changing materials intended for data storage (CD, DVD), etc. Due to this fact is important to properly study and characterize different phenomena, which may occur during the manipulation and fabrication of these materials. One of these phenomena is the crystallization. The crystallization is a process conformed by two processes. The first process is called nucleation. Nucleation is the formation of precursors that can grow during the second process, which is called crystal growth.

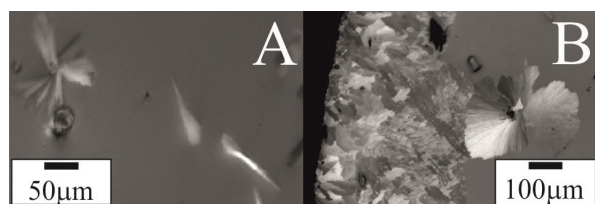


Fig. 1. Crystals at the surface (A) and in the volume (B) of  $(\text{GeSe}_2)_{0.5}(\text{Sb}_2\text{Se}_3)_{0.5}$  samples

The crystal growth is described by some crystal growth models, which expresses the crystal growth rate  $u(T)$  by the equation:  $u(T) = u_{\text{kin}}(T) \cdot F(T)$ . According to this equation the crystal growth is dependent on a kinetic factor ( $u_{\text{kin}}(T)$ ) and on a thermodynamic factor ( $F(T)$ ). The kinetic factor represents the transport of structural units from the amorphous phase to the place, where the crystals grow. On the other hand the thermodynamic factor answers the the thermodynamic barrier that should be overpassed in order to enable the crystal growth<sup>4</sup>.

The aim of this work to study the velocity and analyze the mechanism of the crystal growth in  $(\text{GeSe}_2)_x(\text{Sb}_2\text{Se}_3)_{1-x}$  ( $x=0.4, 0.5$ ) materials. The crystal growth was studied at the surface and in the volume of bulk samples.

*This work has been supported by the grants no. LM2018103 (MŠMT-CZ) and no. SGS\_2020\_008 (University of Pardubice).*

#### REFERENCES

1. Fritzsche H.: Physical Review B 52,15854 (1995).
2. Parnell H., Furniss D., Tang Z., Neate N. C., Benson T. M., Seddon A. B.: Journal of the american ceramic society 101, 208 (2018).
3. Frumar M., Vlček M., Černošek Z., Polak Z., Wagner T.: Journal of Non-Crystalline Solids 213, 215 (1997).
4. Nascimento M. L. F., Dutra Zanotto E.: The Journal of chemical physics 133, 174701 (2010).

#### 2L-26

### 3D ELEKTRODY NA BÁZE NIKLU PRE ZERO-GAP ALKALICKÚ ELEKTROLÝZU VODY

**JANA ZÁCHENSKÁ, TATIANA GALICOVÁ, JÁN LOKAJ, MATILDA ZEMANOVÁ**

*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Oddelenie anorganickej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko  
jana.zachenska@stuba.sk*

Alkalická elektrolyza vody sa javí ako vhodná metóda na výrobu vodíka. Ak sa na tento proces využije energia z obnoviteľných zdrojov, mohol by takto vyrobený vodík predstavovať zelenú formu energie<sup>1</sup>. Problémom alkalickej elektrolyzy vody je jej nízka účinnosť, ktorá sa dá zvýšiť používaním katalyzátorov. Najlepším katalyzátorom je platina, avšak nevýhodou je jej vysoká cena. Vhodnú alternatívu by mohli predstavovať katalyzátory na báze niklu<sup>2</sup>. Výskumy sa zameriavajú na pridanie ďalšieho prvku

a zväčšenie povrchu elektród, čo by mohlo zlepšiť účinnosť týchto katalyzátorov<sup>3</sup>.

Cieľom projektu bolo nájsť optimálne parametre prípravy dvojzložkových a trojzložkových katódových katalyzátorov a rovnako skúmanie ich katalytických vlastností. Ako substrát sa používala 3D niklová pena, na ktorú sa pomocou jednosmerného a impulzového pokovovania nanášali povlaky Ni-W, Ni-Fe a NiFeW. Optimálne parametre pokovovania sa hľadali pomocou trojfaktorového stredového rotačného plánu. Vlastnosti pripravených elektród sa skúmali pomocou SEM, XRD a EDX metódy. Katalytické vlastnosti sa skúmali v zero-gap elektrolyzéri pre alkalickú elektrolyzu vody, kde pripravené vzorky na niklovej pene plnili funkciu katódy.

Zistilo sa, že použitím impulzového pokovovania a pridaním ďalšieho prvku sa vylúčia členitejšie povlaky, čím sa dosiahne väčšia aktívna plocha elektród. Z porovnania dvojzložkových katalyzátorov možno povedať, že katalyzátory Ni-Fe mali lepšie katalytické vlastnosti ako Ni-W.

*Táto práca vznikla s podporou projektu VEGA 1/0792/17*

#### LITERATÚRA

1. Nikolaidis P., Poullikkas A.: J. Renew. Sustain. Ener. 67, 597 (2017).
2. Nikolic V., Maslovara S., et al.: Appl. Catal. B. 179, 88 (2015).
3. Khan M. A., Zhao H., Zou W., Chen Z., Cao W., Fang J., Xu J., Zhang L., Zhang J.: Electrochemical Energy Reviews 1, 483 (2018).



**2P-01**  
**KOORDINAČNÍ VARIABILITA DONOROVĚ**  
**NESYMETRICKÝCH FOSFINO FERROCENOVÝCH**  
**GUANIDINŮ**

**ONDŘEJ BÁRTA, IVANA CÍSAŘOVÁ, PETR**  
**ŠTĚPNIČKA\***

*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta*  
*Univerzity Karlovy, Hlavova 2030/8, 128 00 Praha 2*  
*bartao@natur.cuni.cz*

Hybridní P,N-ligandy kombinující ve své struktuře měkkou fosfinovou skupinu a tvrdší dusíkatý donor patří mezi ligandy široce uplatňované v katalýze<sup>1</sup>. Tento typ donorů zaujímá významnou roli také v chemii 1,2-disubstituovaných derivátů ferrocenu<sup>2</sup>. Naproti tomu dusíkaté 1,1'-disubstituované ferrocenové fosfiny, v nichž by byl donorový atom dusíku vázán přímo na ferrocenový skelet, byly dosud značně opomíjeny, o to více pak jejich koordinační chemie.

Se záměrem rozšířit tuto skupinu koordinačně flexibilních hybridních ligandů byla z výchozího aminu Ph<sub>2</sub>PfcNH<sub>2</sub> (fc = ferrocen-1,1'-diyl) připravena série fosfinoferrocenových guanidinů **I**, které jsou prvními N,N',N''-trisubstituovanými fosfinoguanidiny, které byly doposud izolovány (Schéma 1)<sup>3</sup>. Pozornost byla posléze věnována koordinačnímu chování těchto ligandů vůči palladnatým prekurzorům, přičemž se ukázalo, že koordinační preference jsou do značné míry ovlivněny acidobazickým chováním guanidinové skupiny. Připraveny a strukturně charakterizovány tak byly komplexy s neutrální, protonovanou i deprotonovanou guanidinovou skupinou, z nichž některé lze popsat jako nezvyklé (chelátová koordinace za účasti dativní vazby Fe-Pd) až unikátní (první popsaný fosfinoguanidinátový palladnatý komplex).

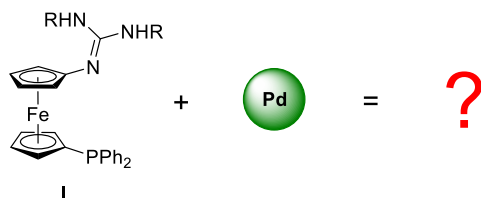


Schéma 1.

*Tato práce vznikla za podpory grantů GA UK č. 130317 a GA ČR č. 19-09334S.*

**LITERATURA**

- Carroll M. P., Guiry P. J.: *Chem. Soc. Rev.* **43**, 819 (2014).
- Štepanova V. A., Smoliokova I. P.: *Curr. Org. Chem.* **16**, 2893 (2012).
- Bárta O., Gyepes R., Císařová I., Alemayehu A., Štěpnička P.: *Dalton Trans.* **49**, 4225 (2020).

**2P-02**  
**KINETIC STUDY OF CU(II) COMPLEXES OF MONO-**  
**AND BIS-TETRAAZAMACROCYCLIC LIGANDS**

**ELLEN STEHLÍKOVÁ<sup>a</sup>, PŘEMYSL LUBAL<sup>a</sup>,**  
**JANA HODAČOVÁ<sup>b</sup>**

*<sup>a</sup> Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5, 625 00 Brno, <sup>b</sup> Department of Organic Chemistry, University of Chemistry and Technology, 166 28 Prague*  
*lubal@chemi.muni.cz*

Polyaza-macrocyclic ligands have been recently used to bind some radioisotopes for application in medicinal chemistry (<sup>60-64,67</sup>Cu, <sup>66-68</sup>Ga, <sup>86,90</sup>Y, <sup>111</sup>In)<sup>1</sup>. These metal complexes have to exhibit high thermodynamic stability and kinetic inertness for possible *in vivo* use for medical purposes<sup>1</sup>. Several copper(II) and zinc(II) complexes of bis-polyaza-macrocyclic ligands catalyse some hydrolysis-like chemical reactions and therefore they can be used as model systems mimicking enzymes activity<sup>2</sup>.

The thermodynamic studies of Cu(II) complexation by both ligands show that these complexes are stable<sup>3-5</sup> due to fact that copper(II) ion is fully coordinated by all four nitrogen donor atoms<sup>3-5</sup>. In this work, the formation of the copper(II) complexes of both ligands was studied as function of pH and possible reaction mechanism is proposed. The study of acid-assisted dissociation of both copper(II) complexes does not differ within experimental error. The results for both formation and dissociation of Cu(II) complexes indicate that there is no cooperative effect for binucleating ligand.

*This study was supported by the Ministry of Education of the Czech Republic (LTC20044) and Masaryk University (MUNI/A/1424/2019).*

**REFERENCES**

- Wadas T. J., Wong E. H., Weisman G. R., Anderson C. J.: *Chem. Rev.* **110**, 2858 (2010).
- Bím D., Svobodová E., Eigner V., Rulíšek L., Hodačová J.: *Chem. Eur. J.* **22**, 10426 (2016).
- Chadim M., Diaz P., Garcia-España E., Hodačová J., Junk P. C., Latorre J., Llinares J. M., Soriano C., Závada J.: *New J. Chem.* **27**, 1132 (2003).
- Chadim M., Diaz P., Garcia-España E., Hodačová J., Latorre J., Liu-Gonzalez M., Luis S. V., Llinares J. M., Závada J.: *Inorg. Chem.* **44**, 7503 (2005).
- Verdejo B., Basalotte M. G., Ferrer A., Máñez M. A., Hernández J. C., Chadim M., Hodačová J., Llinares J. M., Serrano C., Garcia-España E.: *Eur. J. Inorg. Chem.* **1497** (2008).

**2P-03**  
**STRUCTURAL AND SPECTRAL PROPERTIES**  
**OF BENZOATOCOPPER(II) COMPLEXES**  
**WITH POTENTIAL BIOACTIVITY**

**MIROSLAVA PUCHOŇOVÁ, FLÓRA JOZEFÍKOVÁ,**  
**JÁN MONCOL**

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

Knowledge of relationship between structure, synthesis and composition is necessary for the subsequent study of biological properties. 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 which can improve the final properties of the complex<sup>1</sup>. Therefore we focused on preparation and spectral properties of the Cu(II) complexes with bioactive ligands like 4-pyridylmethanol (4-PM) in presence of 2-Xbenzoato anions.

Synthesis led to formation of blue crystals with formula [Cu(Xbenzoato)<sub>2</sub>(4PM)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)] where X= nitro for **I**, X=chloro for **II**, X= bromo for **III**, X=iodo for **IV**. The central atom is pentacoordinated by two oxygen atoms of monodentately bonded benzoato anions and two nitrogen atoms of terminal 4PM ligand. The molecular structures of [Cu(Xbz)<sub>2</sub>(4-PM)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>1</sub>] built up 2D supramolecular framework in crystal structure<sup>2,3</sup>. Prepared complexes were characterized by spectral methods, elemental and X-ray analysis. These compounds are potential candidates for study of SOD mimetic activity as well as the interaction with DNA.

*This work was supported by the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic APVV-18-0016 a VEGA 1/0639/18.*

REFERENCES

- Wehbe M., Leung A. W. Y., Abrams M. J., Orvig Ch., Bally M. B.: Dalton Trans. 46, 10758 (2017).
- Moncol J., Maroszová J., Koman M., Melnik M., Valko M., Mazúr M., Tadeusz L.: J. Coord. Chem. 61, 3740 (2008).
- Maroszová J., Moncol J., Padělková Z., Sillanpää R., Lis T., Koman M.: Cent. Eur. J. Chem. 9(3), 453 (2011).

**2P-04**  
**KOORDINAČNÍ VLASTNOSTI MONOAMIDŮ**  
**LIGANDU NOTA**

**JAN KUBINEC<sup>a</sup>, VOJTĚCH KUBÍČEK<sup>a</sup>, PŘEMYSL**  
**LUBAL<sup>b</sup>, VIKTORIE REICOVÁ<sup>b</sup>, FILIP KOUČKÝ<sup>a</sup>,**  
**PETR HERMANN<sup>a</sup>**

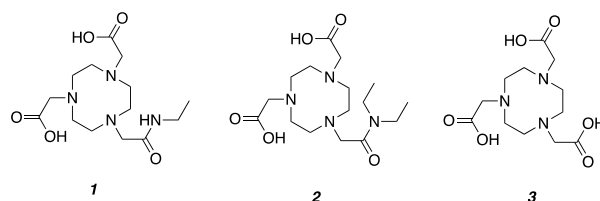
<sup>a</sup> Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8, Praha, <sup>b</sup> Central European Institute of Technology (CEITEC) Masarykova Univerzita, Kamenice 5, 625 00 Brno, Czech Republic  
 kubinecj@natur.cuni.cz

Pozitronová emisní tomografie (PET) je zobrazovací metoda, která využívá  $\beta^+$  záření pocházející z radiofarmaka.

Nově vyvíjené kontrastní látky používají emitory  $\beta^+$ , kterými mohou být izotopy kovů ze 4. periody (např. <sup>64</sup>Cu nebo <sup>68</sup>Ga). Tyto radioizotopy jsou využívány ve formě iontů, které nelze použít jako „volné“ aquakomplexy, ale vázané ve stabilních komplexech. Tato radiofarmaka jsou směřována do cílové tkáně pomocí „targeting“ vektorů. Tyto vektory bývají k ligandu připojeny pomocí amidické vazby. Tyto ligandy jsou běžně používány, aniž by byly prozkoumány chemické vlastnosti jejich komplexů.

Byly připraveny dva modelové amidy makrocyclu NOTA **3** obsahující mono- **1** a di- **2** (obr. 1) substituovanou amidickou vazbu. Acidobazické a koordinační vlastnosti sloučenin byly zkoumány potenciometrickými titracemi s vybranými ionty kovů. Výsledky ukazují, že zavedením amidického pendantu do molekuly klesne bazicita ligandů vůči ligandu NOTA<sup>1</sup>, a proto se sníží konstanty stability komplexů o několik řádů vůči komplexům ligandu NOTA<sup>1</sup>. Stop-flow UV-Vis spektroskopii byla zkoumána kinetika formace a disociace komplexů Cu<sup>2+</sup> obou modelových ligandů. Kysele katalyzovaná dekomplexace (3M HClO<sub>4</sub>) probíhá u komplexů obou ligandů pomaleji než u komplexů ligandu NOTA<sup>1</sup>. Byly zkoumány koordinační vlastnosti ligandů vůči Ga<sup>3+</sup> pomocí <sup>71</sup>Ga spektroskopie NMR. V bazickém prostředí byla pozorována hydrolyza amidické vazby Ga<sup>3+</sup> komplexu ligandu **2** a nepřímou prokázána změna koordinace v Ga<sup>3+</sup> komplexu **1** z N<sub>3</sub>O<sub>3</sub> na N<sub>4</sub>O<sub>2</sub> koordinaci amidického atomu dusíku po jeho deprotonaci.

Komplexy amidických derivátů ligandu NOTA **3** vykazují nižší stabilitu než komplexy ligandu NOTA **3**<sup>1</sup> a jsou kineticky inertnější. Po koordinaci Ga<sup>3+</sup> se amidická vazba komplexu **2** snadno hydrolyzuje.



Obr. 1. Struktury ligandu NOTA **3** a zkoumaných ligandů

*Tato práce vznikla za podpory grantu INTER-COST LTC20044 (CA18202 – NECTAR).*

LITERATURA

- Kubíček V., Böhmová Z., Ševčíková R., Vaněk J., Lubal P., Poláková Z., Michalíková R., Kotek J., Hermann P.: Inorg. Chem. 57, 3061 (2018).

**2P-05****PRÍPRAVA A SPEKTRÁLNE VLASTNOSTI  
KOMPLEXOV NIKLU S *o*-FENYLÉNDIACETÁTO  
LIGANDOM. KRYŠTÁLOVÁ ŠTRUKTÚRA  
KYSELINY *o*-FENYLÉNDIOCTOVEJ****LENKA KREŠÁKOVÁ, JURAJ ČERNÁK, JURAJ  
KUCHÁR**

Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Ústav chemických vied,  
Katedra anorganickej chemie, Moyzesova 11, 041 54 Košice,  
Slovensko  
lenka.kresakova@student.upjs.sk

Koordináčne polyméry na báze prechodného kovu a organických látok ako ligandov vykazujú pozoruhodné vlastnosti v oblasti magnetizmu, pričom ich výskum je motivovaný ich potenciálnym využitím vo forme viacúčelových funkčných materiálov<sup>1</sup>. Pri cielenej príprave týchto koordináčnych polymérov sa musia zohľadňovať koordináčne okolie kovového iónu, jeho tvar, ako aj funkcionálna, flexibilita a ďalšie vlastnosti použitých organických ligandov<sup>2</sup>. Naša pozornosť bola venovaná ligandu na báze dikarboxylátovej kyseliny, kyseliny 1,2-fenyléndioctovej (*H<sub>2</sub>oPDA*). Táto po čiastočnej alebo úplnej deprotonizácii vykazuje veľkú variabilitu väzbových možností<sup>3</sup>. V rámci syntetických experimentov zo sústav Ni : bpy : *H<sub>2</sub>oPDA* (bpy = 2,2'-bipyridín) boli v závislosti od molárných pomerov reaktantov pripravené komplexy [Ni(*oPDA*)]·2H<sub>2</sub>O, [Ni(*bpy*)(*oPDA*)]·2H<sub>2</sub>O, [Ni(*bpy*)<sub>2</sub>(*oPDA*)]·4H<sub>2</sub>O a [Ni(*bipy*)<sub>3</sub>(*oPDA*)]·4H<sub>2</sub>O·EtOH, ktoré boli charakterizované chemickými a spektroskopickými metódami. Zároveň bola pripravená *H<sub>2</sub>oPDA* vo forme monokryštálov. Výsledky štruktúrnej analýzy ukázali, že *H<sub>2</sub>oPDA* má kryštálovú štruktúru tvorenú supramolekulárnymi dimermi viazanými vodíkovými väzbami typu O-H...O. Pre konformáciu voľnej kyseliny je typické cis usporiadanie karboxyláto skupín voči rovine aromatického kruhu.

Táto práca vznikla za podpory grantov APVV-18-0016. VEGA 1/0063/17a VVGS-PF-2020-1425.

**LITERATÚRA**

1. Kitaura R., Seki K., Akiyama G., Kitagawa S.: *Angew. Chem., Int. Ed.* 42(4), 428 (2003).
2. Ye B.-H., Tong M.-L., Chen X.-M.: *Coord. Chem. Rev.* 249, 545 (2005).
3. Lin Z., Hu K., Jin S., Ding A. et al.: *J. Mol. Struct.* 1146, 577 (2017).

**2P-06****NOVEL COMPLEXES BASED ON COPPER(II) AND  
MANGANESE(II) WITH TRANS-1,8-CYCLAM  
DERIVATIVES FOR THE STUDY OF THE  
MAGNETOCALORIC EFFECT****JURAJ KUCHÁR<sup>a</sup>, ERIKA SAMOĽOVÁ<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Department of Inorganic Chemistry, Institute of Chemistry,  
Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Moyzesova 11,  
041 54 Košice, Slovak Republic, <sup>b</sup> Institute of Physics,  
Academy of Sciences of the Czech Rep., Cukrovarnická 10,  
162 53 Praha, Czech Republic  
juraj.kuchar@upjs.sk

Magneto-thermal effects have recently become relevant not only for solving fundamental problems in solid-state physics, but also for possible technological applications (e.g. in magnetic refrigerators)<sup>1</sup>. It was predicted in late 80.'s by Kahn that systems based on one dimensional bimetallic chains with alternating Cu(II) and Mn(II) atoms can show ferrimagnetic behavior<sup>2</sup> and it was also found that one-dimensional ferrimagnets under external magnetic field can pass to spin-liquid state, which can be technologically attractive<sup>3,4</sup>.

Our research is focused on the preparation of low dimensional heterobimetallic compounds using macrocyclic ligands based on 1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane (cyclam) in the copper(II) coordination sphere with Mn(II) containing anions. The copper(II) complexes with such ligands exhibit appreciable kinetic and thermodynamic stability that makes them convenient for the preparation of bimetallic complexes. The compounds can be regarded as chain-like alternating-spin systems and the ground state of ferrimagnetic chains is of ferromagnetic nature. However, excitations are of AFM type<sup>5</sup> leading to the formation of magnetization plateaus and a large change of the magnetic entropy at the field-induced quantum-critical points<sup>9</sup>. Therefore such compounds can be interesting for the study of magnetic phenomena associated with magnetocaloric effect.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency (contract No. APVV-18-0016) and Scientific Grant Agency of Ministry of Education, Science, Research and Sport of the Slovak Republic (contract No. VEGA 1/0063/17).

**REFERENCES**

1. Tishin A. M., Spichkin Y. I.: *The Magnetocaloric Effect and its Applications*. Boca Raton: CRC Press 2016.
2. Kahn O., Pei Y., Verdaguer M., Renard J. P., Sletten J.: *J. Am. Chem. Soc.* 110, 782 (1988).
3. Konieczny P., Pełka R., Czernia D., Podgajny R.: *Inorg. Chem.* 56, 11971 (2017).
4. Strečka J., Verkholyak T.: *J. Low. Temp. Phys.* 187, 712 (2017).
5. Yamamoto S., Fukui T.: *Phys. Rev. B* 57, R14008 (1998).

## 2P-07

## REDOX-ACTIVE COMPLEXES OF CYCLAM LIGANDS WITH FIRST-ROW TRANSITION METAL IONS

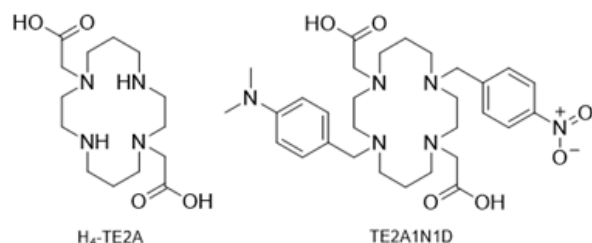
MILAN MAĐAR<sup>a</sup>, VOJTĚCH KUBÍČEK<sup>a</sup>, ALAN LIŠKA<sup>b</sup>, JAN KOTEK<sup>a</sup>, JIŘÍ LUDVÍK<sup>b</sup>, PETR HERMANN<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Charles University, Faculty of Science, Department of Inorganic Chemistry, Hlavova 2030, Prague 2, <sup>b</sup> Czech Academy of Sciences, J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry, Dolejškova 2155/3, 182 23 Prague 8  
madarmi@natur.cuni.cz

Complexes of macrocyclic ligands are often endowed with high thermodynamic stability and kinetic inertness. It significantly reduces the risk of metal ion release caused by transchelation or transmetalation and makes macrocyclic ligands suitable carriers of metal ions in various practical applications such as MRI contrast agents, radiomedical tracers, metal ion sensors or scavengers etc.

The complexes with redox-active metal ions are perspective as building units in molecular electronics. The first-row transition metal ions are interesting for industrial applications due to the low price and good availability. The macrocyclic ligand of the first choice for complexation of these metal ions is cyclam (1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane). Stabilities of the complexes are improved and their properties are modified by introduction of additional pendant arms capable of coordination. These arms are mostly based on acetate, phosphonate, phenolate or pyridine groups. The typical example is diacetate cyclam derivative H<sub>2</sub>TE2A (Figure 1). As the key properties for electrochemical applications are geometries and redox potentials of the complexes, we report here a structural and electrochemical study of cyclam-based complexes.

To further investigate electrochemical effect of the metal ions on the surrounding structures, we have decorated the complexes with organic redox-active nitrobenzyl and dimethylaminobenzyl groups (Figure 1) and measured the changes of their electrochemical potential as function of the complexed metal ion. This approach could open new strategy to study electrochemical properties of the complexes with respect to the application as building units in the molecular electronic devices.

Fig. 1. Structure of H<sub>2</sub>TE2A and its redox-active derivative

## 2P-08

## MULTIFUNKČNÍ FOTOAKTIVNÍ NANOVLÁKENNÉ MEMBRÁNY

PETR HENKE<sup>a</sup>, JIŘÍ DOLANSKÝ<sup>a,b</sup>, PAVEL KUBÁT<sup>b</sup>, JIŘÍ MOSINGER<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Hlavova 2030, 128 43 Praha 2, <sup>b</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského Akademie věd České republiky, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, <sup>c</sup> Ústav anorganické chemie Akademie věd České republiky, v.v.i., Řež 1001, 250 68 Řež  
henke@natur.cuni.cz

Elektrostaticky zvlákněné polystyrenové nanovlákněné membrány s enkapsulovaným nebo externě vázaným fotosensitizerem efektivně generují singletový kyslík při ozařování viditelným světlem a mají antibakteriální účinky<sup>1</sup>.

V této práci představujeme funkcionalizaci povrchu těchto nanovláken umožňující externí vázání biologicky aktivních látek pomocí vazby biotin-streptavidin<sup>2</sup>. Konjugát streptavidinu a křemové peroxidázy byl použit jako modelová sloučenina biologicky aktivní látky jako fotosensitizer byl použit tetrakationtový 5,10,15,20-tetrakis(*N*-ethylpyridinium-4-yl)porfyrin.

Tyto membrány byly charakterizovány pomocí elektronové mikroskopie, ustálené a časově rozlišené absorpční a fluorescenční spektroskopie. Schopnost oxidace externího substrátu byla ověřena pomocí jodidového činidla. Enzymová aktivita byla ověřena pomocí scopolinového testu a vůči modelovým polutantům. Antibakteriální vlastnosti byly porovnány na modelovém organismu *Escherichia coli*.

Navázaná peroxidáza si zachovala enzymovou aktivitu i po ozařování v přítomnosti navázaného fotosensitizeru. Nicméně, zároveň byly pozorovány změny v kinetice zhášení tripletových stavů fotosensitizeru způsobené omezením transportu kyslíku po navázání peroxidázy. Proto byly připraveny dvojvrstvé membrány. Takto připravené membrány fotogenerují singletový kyslík a mají antibakteriální vlastnosti při ozaření viditelným světlem a zároveň si zachovávají enzymatickou aktivitu.

Tato práce byla podporována Grantovou agenturou České Republiky (Grant 19-09721S) a OP VVV Charles University Centre of Advanced Materials, CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000417.

## LITERATURA

- Henke P., Kozak H., Artemenko A., Kubát P., Forstová J., Mosinger J.: ACS Appl. Mater. Interfaces 6, 15 (2014).
- Henke P., Kubát P., Mosinger J.: ACS Appl. Mater. Interfaces 12, 15 (2020).

**2P-09****BIOLOGICAL ACTIVITY OF NOVEL Cu(II)-FENAMATE COMPLEXES WITH NICOTINAMIDE – INTERACTION WITH DNA AND BSA****FLÓRA JOZEFÍKOVÁ<sup>a,b,\*</sup>, GEORGE PSOMAS<sup>b</sup>, JÁN MONCOL<sup>a</sup>**<sup>a</sup> Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia,<sup>b</sup> Department of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemistry, Aristotle University of Thessaloniki, 541 24 Thessaloniki, Greece

flora.jozefik@gmail.com

Reactions of non-steroidal anti-inflammatory drugs tolfenamic (Htolf), meclufenamic (Hmeclf), mefenamic (Hmef) acids with nicotinamide (vitamine B<sub>3</sub>, nia) and copper (II) acetate resulted in formation of nine novel isostructural copper(II) complexes: [Cu(mecf)<sub>2</sub>(nia)<sub>2</sub>(EtOH)] (1), [Cu(mecf)<sub>2</sub>(nia)<sub>2</sub>(MeOH)] (2), [Cu(mecf)<sub>2</sub>(nia)<sub>2</sub>(ACN)] (3), [Cu(tolf)<sub>2</sub>(nia)<sub>2</sub>(EtOH)] (4), [Cu(tolf)<sub>2</sub>(nia)<sub>2</sub>(MeOH)] (5), [Cu(tolf)<sub>2</sub>(nia)<sub>2</sub>(ACN)] (6), [Cu(mef)<sub>2</sub>(nia)<sub>2</sub>(EtOH)] (7), [Cu(mef)<sub>2</sub>(nia)<sub>2</sub>(MeOH)] (8), [Cu(mef)<sub>2</sub>(nia)<sub>2</sub>(ACN)] (9), (EtOH = ethanol, MeOH = methanol, ACN = acetonitrile). The structures of the complexes were determined by single-crystal X-ray analyses. The complexes may exhibit good binding affinity to bovine serum albumin with high binding constant values. UV-Vis spectroscopic study of the interaction of the compounds with calf-thymus (CT) DNA showed the ability of the complexes to bind to CT DNA. Competitive studies with ethidium bromide (EB) indicated that the coordination compounds can displace the typical intercalator EB from the EB-DNA conjugate indicating intercalation as a possible mode of the interaction with CT DNA, which was indicated by DNA-viscosity measurements as well.

This work was supported by Grant agencies of the Slovak Republic APVV-18-0016 a VEGA 1/0639/18.

**2P-10****BISFOSFINÁTY DVOJMOCNÝCH KOVŮ****MATOUŠ KLODA<sup>a</sup>, ANDREA POLÍVKOVÁ<sup>a</sup>, ELIŠKA SKOŘEPOVÁ<sup>b</sup>, JAN DEMEL<sup>a</sup>, KAMIL LANG<sup>a</sup>**<sup>a</sup> Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i. Husinec-Řež č.p. 1001, 250 68, <sup>b</sup> Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i. Cukrovarnická 10/112, 162 00 Praha 6  
kloda@iic.cas.cz

Tato práce navazuje na dosavadní výzkum koordinačních polymerů založených na bisfosfinátových ligandech. Jsou známy porézní koordinační polymery kombinující železité kationty a fenylen-1,4-bis(R-fosfinové) kyseliny<sup>1</sup>, kde R je methyl (I) nebo fenyl (II). Dále jsou známy analogické polymery využívající hlinité kationty. S využitím měďnatých iontů byly připraveny porézní koordinační polymery na bázi kyseliny methylenbis(fenylfosfinové) a bipyridinových koligandů<sup>2</sup>.

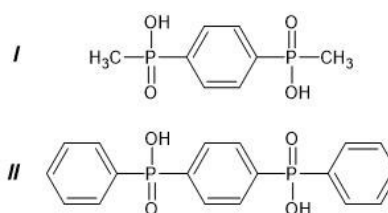


Schéma 1. Příklady bisfosfinátových ligandů

Cílem této práce je příprava nových koordinačních polymerů založených na dvojmocných kovech a fosfinátových ligandech, případně doplněných o dusíkaté koligandy jako je 1,4-diazabicyclo[2.2.2]oktan a 4,4'-bipyridin. Byla připravena řada nových sloučenin zahrnující koordinační polymery a iontové bisfosfináty.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR č. 20-04408S.

**LITERATURA**

1. Hynek J., Brázda P., Rohlíček J., Londesborough M. G. S., Demel J.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 13057, 5016 (2018).
2. Bataille T., Costantino F., Lorenzo-Luis P., Midollini S., Orlandini A.: *Inorg. Chim. Acta* 361, 9 (2008).

**2P-11****SYNTHESIS, VIBRATIONAL SPECTROSCOPIC AND CRYSTALLOGRAPHIC STUDY OF N-GUANIDYL-FORMAMIDE SALTS AS POTENTIAL NONLINEAR OPTICAL MATERIALS****SOŇA KOHÚTEKOVÁ, IVANA CÍSAŘOVÁ, IVAN NĚMEC**Charles University, Faculty of Science, Department of Inorganic Chemistry, Hlavova 8, 128 43 Praha 2  
kohuteks@natur.cuni.cz

The current interest focused on nonlinear optical (NLO) materials is above all motivated by their various technical applications. The examples of wide range of usage include generation of new laser lines – e.g. second harmonic generation (SHG), stimulated Raman scattering (SRS), etc. – or applications in the field of optical communication<sup>1</sup>.

Novadays crystal-engineering approaches are utilised for the preparation of materials with the desired symmetry. The carriers of NLO properties in the promising type of molecular crystals are organic cations with highly delocalised  $\pi$ -electron systems. These molecules are usually simple planar molecules exhibiting so called “Y-aromaticity”. However, high values of their dipole moments usually lead to formation of unwanted centrosymmetric pairs. Therefore, inorganic acids, which can be inter-connected by hydrogen bonds (mostly N-H...N, N-H...O or O-H...O types) with the cations, are used as crystallisation partners<sup>2</sup>.

Synthesis and study of compounds based on N-guanidyl-formamide are described in this poster. Prepared materials were characterised mainly by the means of vibrational spectroscopy and X-ray diffraction. Quantum-chemical calculations were used for a prediction of NLO potential as well as for interpretation of recorded vibrational spectra.

Lastly, measurements of SHG efficiency of powder samples with non-centrosymmetric crystal structures were performed.

Financial support from the CUCAM Centre of Excellence (OP VVV “Excellent Research Teams” project No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000417) and Charles University Research Centre program No. UNCE/SCI/014 is gratefully acknowledged.

#### REFERENCES

- Träger F. (ed.): *Springer Handbook of Lasers and Optics*. Springer, Berlin 2007.
- Matulková I., Němec I., Němec P.: *Československý časopis pro fyziku* 61(2), 76 (2011).

#### 2P-12

### KOORDINAČNÉ ZLÚČENINY NIKLU(II) S VYBRANÝMI LIGANDMI NA BÁZE DERIVÁTOV PYRIDÍNU

SLAVOMÍRA ŠTERBINSKÁ<sup>a</sup>, JURAJ ČERNÁK<sup>a</sup>, JURAJ KUCHAR<sup>a</sup>, MARIIA HOLUB<sup>b</sup>, ERIK ČIŽMÁR<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Ústav chemických vied, Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice, <sup>b</sup> Ústav fyzikálnych vied, Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Park Angelinum 9, 041 54 Košice, Slovensko  
slavomira.sterbinska@student.upjs.sk

V rámci prípravy nových magneticky aktívnych látok na báze niklu<sup>1</sup> s 2-(aminometyl)pyridínom (2ampy) a 2-(aminometyl)pyridínom (2aepy) bolo pripravených 7 koordinačných zlúčenín: [Ni(2ampy)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]Cl<sub>2</sub> (1), [Ni(2ampy)<sub>2</sub>(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] (2), [Ni(2ampy)<sub>3</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> (3)<sup>2</sup>, [Ni(2aepy)<sub>2</sub>Cl(H<sub>2</sub>O)]Cl·H<sub>2</sub>O (4), [Ni(2aepy)<sub>2</sub>(NO<sub>3</sub>)]NO<sub>3</sub> (5), [Ni<sub>4</sub>(CO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(2aepy)<sub>2</sub>](ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> (6) a [Ni(2aepy)(2ampy)Cl(H<sub>2</sub>O)] Cl·H<sub>2</sub>O (7), pričom látky 4, 5 a 7 sú nové. Zlúčeniny 1, 3-7 majú iónovú štruktúru zloženú z komplexného kationu a jednoduchého aniónu (Cl<sup>-</sup> (1,4,7), NO<sub>3</sub><sup>-</sup> (5), ClO<sub>4</sub><sup>-</sup> (3,6)), pričom látky 4 a 7 obsahujú aj solvatujúcu molekulu vody. Komplexný kation pozostáva z centrálného atómu Ni(II), na ktorý sa chelátovo viažu N,N'-donorové ligandy (2ampy (1,3), 2aepy (4-6), resp. 2ampy + 2aepy (7)). Primárna koordinačná sféra je ďalej doplnená u látky 1 akva ligandom, v prípade látok 4 a 7 akva a chlorido ligandom, v látke 5 hlavnú koordinačnú sféru dopĺňa chelátový nitráto ligand a u látky 6 je to karbonáto ligand. Koordinačná zlúčenina 2 má molekulovú štruktúru, v ktorej sa na centrálny atóm Ni(II) chelátovo viažu 2 ligandy 2ampy a 2 koncové nitráto ligandy. Zlúčenina 7 je svojho druhu výnimočná, nakoľko obsahuje doposiaľ nepublikovanú kombináciu ligandov 2ampy a 2aepy. Štúdium magnetických vlastností analogických látok 4 a 5 poukázalo na významné rozdiely ich vlastností. Zatiaľ čo sa látka 4 správa ako anizotropný S = 1 antiferomagnetický spinový reťazec s pomerom jednoiónovej anizotropie a výmennej interakcie D/J = 1,14, v prípade látky 5 dochádza ku zmene anizotropie na typ ľahká os a k potlačeniu výmennej interakcie<sup>3</sup>.

Práca bola finančne podporená grantmi APVV-18-0016, VEGA (1/0063/17) a VVGS-PF-2020-1425.

#### LITERATÚRA

- Černák J., Hegedüs M., Váhovská L., Kuchár J., Šoltésová D., Čižmár E., Feher A., Falvello L. R.: *Sol. State Sci.* 77, 27 (2018).
- Bruda S., Turnbull M. M., Landee C. P., Xu Q.: *Inorg. Chim. Acta* 259, 298 (2006).
- Šterbinská S., Holub M., Kuchár J., Čižmár E., Černák J.: *Polyhedron* 187, 114654 (2020).

#### 2P-13

### FERROCENOVÉ FOSFINOSULFONÁTY S METHYLENOVÝMI SPOJKAMI

MARTIN ZÁBRANSKÝ, IVANA CÍSAŘOVÁ, PETR ŠTĚPNIČKA\*

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

Fosfinosulfonové kyseliny jsou důležité a široce využívané ligandy pro katalýzu organických reakcí komplexů přechodných kovů ve vodných prostředích<sup>1</sup>. Před časem se nám podařilo připravit triethylamonnou sůl fosfinosulfonové kyseliny H1. Dále byly připraveny palladnaté a rhodné komplexy fosfinosulfonátového aniontu odvozeného od této kyseliny, ve kterých ligand I<sup>-</sup> vystupoval jako chelatující P,O-donor nebo jako monodentátní P-donor s nekoordinovanou sulfonátovou skupinou<sup>2,4</sup>. Vybrané palladnaté komplexy tohoto hybridního fosfinosulfonátového ligandu byly použity při katalýze reakce arylboronových kyselin s benzoylchloridy za vzniku příslušných benzofenonů ve dvofázové vodné reakční směsi<sup>2</sup>.

Za účelem posouzení vlivu unikátních sterických vlastností ferrocenového jádra na koordinační preference fosfinosulfonátového ligandu I<sup>-</sup> jsme se rozhodli připravit soli dalších fosfinosulfonových kyselin H2 a H3. Reakcemi těchto solí s vybranými palladnatými prekurzory budou připraveny komplexy ligandů 2<sup>-</sup> a 3<sup>-</sup>, analogické sloučeninám I<sup>-</sup>.

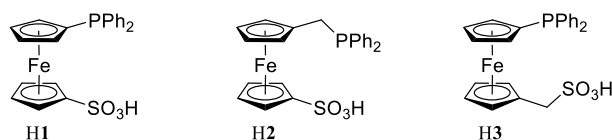


Schéma 1. Ferrocenové fosfinosulfonové kyseliny H1, H2 a H3

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (projekt č. 15-11571S) a Grantové agentury Univerzity Karlovy (projekt č. 8415).

#### LITERATURA

- Stelzer O., Rossenbach S., Hoff D., Schreuder-Goedheijt M., Kamer P. C. J., Reek J. N. H., van Leeuwen P. W. N. M. v knize: *Multiphase Homogeneous Catalysis*, kap. 2.2.3.2.1, s. 66, WILEY-VCH, Weinheim 2005.
- Zábranský M., Císařová I., Štěpnička P.: *Organometallics* 37, 1615 (2018).
- Zábranský M., Císařová I., Trzeciak A. M., Alsalahi W., Štěpnička P.: *Organometallics* 38, 479 (2019).
- Zábranský M., Oberhauser W., Manca G., Císařová I., Štěpnička P.: *Organometallics* 38, 1534 (2019).

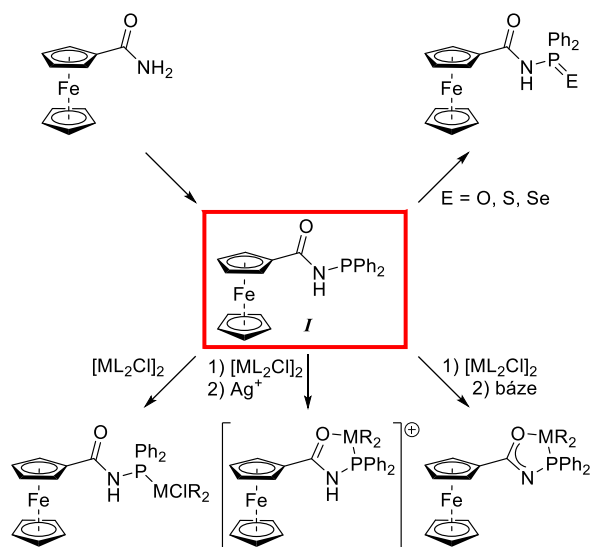
## 2P-14 SYNTÉZA A KOORDINAČNÍ VLASTNOSTI FERROCENOVÉHO *N*-FOSFINOAMIDU

MICHAL NAVRÁTIL, IVANA CÍSAŘOVÁ, ADAM  
ALEMAYEHU, KAREL ŠKOCHEK, PETR ŠTĚPNIČKA\*

Katedra anorganické chemie Přírodovědecké fakulty  
Univerzity Karlovy, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2  
stepnic@natur.cuni.cz

*N*-(difenyfosfino)ferrocenkarboxamid (**I**) je zástupce nepočtené skupiny *N*-fosfinoamidových ligandů. Byl připraven z ferrocenkarboxamidu dvěma různými postupy, přičemž vedlejším produktem syntézy byl také příslušný fosfinoxid. Řada chalkogenidů byla navíc doplněna o fosfinsulfid a fosfinselenid.

Ligand **I** tvořil s prekurzory lehkých platinových kovů tři typy koordinačních sloučenin. Reakcí ligandu s prekurzory vznikaly komplexy, ve kterých se **I** koordinuje jako *P*-monodentátní ligand. Následnou reakcí se stříbrnou solí, nebo bází vznikaly kationtové, nebo neutrální *P,O*-cheláty. Takto bylo připraveno celkem dvanáct palladnatých, rhoditých a ruthenatých komplexů. Všechny připravené sloučeniny byly charakterizovány NMR a IR spektroskopii, hmotnostní spektrometrií, a cyklickou voltametrií. Ve všech případech byla určena také krystalová struktura.



Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 19-09334S.

### LITERATURA

- Navrátil M., Císařová I., Alemayehu A., Škoch K., Štěpnička P.: ChemPlusChem 1325 (2020).

## 2P-15 ISOKYANOFERROCEN A JEHO KARBENOVÉ KOMPLEXY

PETR VOSÁHLA, MICHAL FRANC, IVANA  
CÍSAŘOVÁ, PETR ŠTĚPNIČKA\*

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta  
Univerzity Karlovy, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2  
vosahlop@natur.cuni.cz

Karbeny dnes patří k snad nejintenzivněji studované třídě ligandů, která se vyznačuje velkou variabilitou způsobů přípravy a rozsahem sterických i donor-akceptorových vlastností. Tyto charakteristiky jsou velmi důležité pro volbu správných podpůrných ligandů pro reakce katalyzované přechodnými kovy. Jedním ze způsobů jejich přípravy je inserce isonitrilu do vazby uhlík-kov v organokovových sloučeninách nebo adice nukleofilu na koordinovaný isonitril<sup>1,2</sup>.

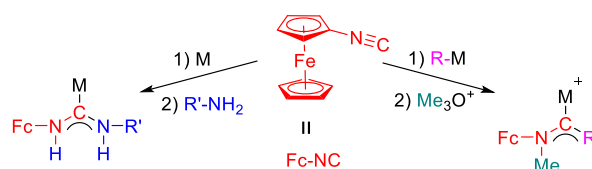


Schéma 1. Reakční schéma přípravy acyklických diaminokarbenů (vlevo) a karbenů Fisherova typu (vpravo) z isokyanoferrocenu

Tento příspěvek popisuje první přípravu karbenů z isokyanoferrocenu, jenž vnáší do výsledného ligandu redoxně aktivní skupinu s jedinečnými stereoelektronickými vlastnostmi. Je zde popsána příprava dusíkatých acyklických karbenů (NAC, schéma 1 – vlevo) reakcí isokyanoferrocenu nejprve s kovovým prekurzorem a následně s aminem. Dále byly připraveny karbeny Fisherova typu (schéma 1 – vpravo), insercí isonitrilu do vazby uhlík-kov v organokovovém prekurzoru za vzniku imidoylového komplexu. Vzniklý imidoylový komplex byl methylací převeden na karbenový komplex.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury Univerzity Karlovy (číslo grantu: 222120).

### LITERATURA

- Boyarskiy V. P., Bokach N. A., Luzyanin K. V., Kukushkin V. Y.: Chem. Rev. 115, 2698 (2015).
- Michelin R. A., Pombeiro A. J. L., Guedes da Silva M. F. C.: Coord. Chem. Rev. 218, 75 (2001).

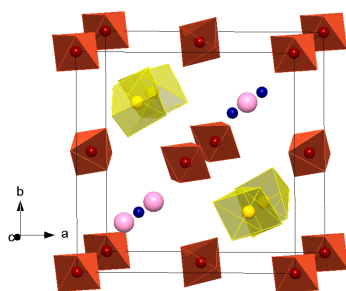
## 2P-16

**Cd-Fe KOMPLEXY S DIETYLÉNTRIAMÍNOM AKO PREKURZORY NA PŘÍPRAVU OXIDOV**

**MIROSLAVA MATIKOVÁ MALAROVÁ<sup>a</sup>, MAREK MATIK<sup>b</sup>, JAROSLAV BRIANČIN<sup>b</sup>, JURAJ KUCHÁR<sup>a</sup>, JURAJ ČERNÁK<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Department of Inorganic Chemistry, Institute of Chemistry, P. J. Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 041 54 Košice, <sup>b</sup> Institute of Geotechnics of SAS, Watsonova 45, 04001 Košice, Slovakia  
miroslava.matikova.malarova@upjs.sk

Termický rozklad heterobimetalických koordinačních zlúčenín je jednou z metód prípravy spinelových feritov v podobe nanočastic<sup>1-3</sup>. V rámci štúdia vhodných prekursorov na prípravu CdFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> sme pripravili dve nové koordinačné zlúčeniny [Cd(dien)<sub>2</sub>]<sub>3</sub>[Fe(CN)<sub>6</sub>]<sub>2</sub>×3H<sub>2</sub>O (**1**) (dien = bis(2-aminoetylamin)) a (NH<sub>4</sub>)[Bu<sub>4</sub>N][Cd(dien)<sub>2</sub>]<sub>2</sub>[Fe(CN)<sub>6</sub>]<sub>2</sub> (**2**). Iónové kryštálové štruktúry oboch zlúčenín obsahujú komplexné kationy [Cd(dien)<sub>2</sub>]<sup>2+</sup> a [Fe(CN)<sub>6</sub>]<sup>3-</sup> v pomeroch Cd:Fe 2:3 (**1**) a 1:1 v (**2**); v kryštálovej štruktúre **2** záporný náboj aniónov vyrovnávajú aj amónne a [Bu<sub>4</sub>N]<sup>+</sup> kationy. Študovali sa termické vlastnosti oboch komplexov v oxidačnej atmosfére (vzduch) za dynamických podmienok. Tuhé reziduá boli charakterizované práškovou difrakciou aj metódou EDX.



Obr. 1. Kryštálová štruktúra komplexu (NH<sub>4</sub>)[Bu<sub>4</sub>N][Cd(dien)<sub>2</sub>]<sub>2</sub>[Fe(CN)<sub>6</sub>]<sub>2</sub>. [Bu<sub>4</sub>N]<sup>+</sup> kation je reprezentovaný iba atómom dusíka (ružová farba) a NH<sub>4</sub><sup>+</sup> kation (modrá farba)

Táto práca vznikla za podpory grantov APVV-18-0016 a VEGA 1/0063/17.

## LITERATÚRA

1. Yang J. M., Tsuo W. J., Yen F. S.: J. Sol. St. Chem. 145, 50 (1999).
2. Nedkov I., Merodiiska T., Milenova L., Koutzarova T. J.: J. Magn. Mater. 211, 296 (2000).
3. Hyeon T., Lee S. S., Park J., Chung Y., Na H. B.: J. Am. Chem. Soc. 123, 12798 (2011).

## 2P-17

**FOSFINÁTOVÉ METALOORGANICKÉ SÍTĚ: PŘÍPRAVA, CHARAKTERIZACE A SORPCE BISFENOLU A**

**DANIEL BŮŽEK<sup>a</sup>, SOŇA ONDRUŠOVÁ<sup>a,b</sup>, JAN HYNEK<sup>a</sup>, PETR KOVÁŘ<sup>c</sup>, KAMIL LANG<sup>a</sup>, JAN ROHLÍČEK<sup>d</sup>, JAN DEMEL<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Hlavova 8, 128 00 Praha 2, <sup>b</sup> Ústav anorganické chemie AV ČR, v. v. i., Husinec-Řež 1001, 250 68 Řež, <sup>c</sup> Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy, Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2, <sup>d</sup> Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i., Cukrovarnická 10/122, 182 21 Praha 8  
ondrusova@iic.cas.cz

Metaloorganické sítě (MOFy) jsou porézní koordinační polymery založené na kovových centrech a organických ligandech (linkerech). Jako kovová centra slouží kovové nebo oxometalické klastry, jako linkery vícevázné ligandy s definovanou geometrií, což umožňuje strukturální flexibilitu MOFů. Díky svému značnému povrchu jsou využívány pro separaci a skladování plynů, k transportu látek, jako senzory plynů a katalyzátory. Nevýhodou MOFů je však jejich nepříliš velká stabilita především ve vodě.

V naší laboratoři byl jako první připraven MOF založený na ligandu odvozeném od fosfinové kyseliny (1,4-bis(methylfosfinová) kyselina)<sup>1</sup>. Tento linker se váže na kovové centrum Fe(III) výrazně pevněji než analogický běžně používaný karboxylový ligand. Byly připraveny i isostrukturální MOFy obsahující delší ligand nebo ligandy s arylou skupinou místo methylu<sup>2</sup>. Obdobné MOFy byly připraveny i s Al(III). Velikost pórů těchto MOFů byla laděna v závislosti na délce použitého linkeru, zaplněnost a vlastnosti pórů byly upravovány skupinou na atomu fosforu. Všechny připravené MOFy jsou stabilní při dispergaci ve vodě a většina si zachovává strukturu i při 100 °C ve vodě bez ztráty struktury, což je potvrzeno sorpčním a práškovým XRD měřením.

Díky velikosti, hydrofobicitě a laditelnosti obsažených pórů byly u Al-MOFů testovány sorpční vlastnosti emergentních polutantů. Jako vzorový polutant byl zvolen bisfenol-A, který se používá k výrobě plastů, ze kterých se může uvolňovat. Všechny testované MOFy sorbují ve vodě bisfenol A a dosahují vyšší sorpční kapacity než většina dosud testovaných MOFů.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR č. 20-04408S.

## LITERATURA

1. Hynek J., Brázda P., Rohlíček J., Londesborough M. G. S., Demel J.: Angew. Chem., Int. Ed. 57, 5016 (2018).
2. Bůžek D., Ondrušová S., Hynek J., Kovář P., Lang K., Rohlíček J., Demel J.: Inorg. Chem. 59, 5538 (2020).



## 2P-18

## TWO NOVEL IRON(III) COMPLEXES: ON THE QUEST TO UNDERSTAND THE GOVERNING FACTORS OF SPIN CROSSOVER

JÁN PAVLIK<sup>a</sup>, IVAN NEMEC<sup>b,c</sup>, IVAN ŠALITROŠ<sup>a,b,c</sup>

<sup>a</sup> Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava, Slovakia, <sup>b</sup> Central European Institute of Technology, Brno University of Technology, 612 00 Brno, Czech Republic, <sup>c</sup> Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, 771 46 Olomouc, Czech Republic  
jan.pavlik@stuba.sk

Two heteronuclear compounds (**I** and **II**) containing three ferric centers linked in facial-like mode with the magnetically silent hexacyanidocobaltate(III) anion were prepared and studied<sup>1</sup>. Both compounds are tetranuclear complexes with molecular formulas of  $[\{\text{Fe}(\text{L}1)\text{NC}\}_3\text{Co}(\text{CN})_3] \cdot 2\text{CH}_3\text{OH} \cdot 2.5\text{CH}_3\text{CN}$  (**I**) and  $[\{\text{Fe}(\text{L}2)\text{NC}\}_3\text{Co}(\text{CN})_3] \cdot 2\text{H}_2\text{O} \cdot 1\text{CH}_3\text{OH}$  (**II**) where  $\text{L}1^{2-}$  and  $\text{L}2^{2-}$  are pentadentate Schiff base anions. While compound **II** with a symmetric ligand prepared from salicylaldehyde shows high-spin state properties, compound **I** containing the asymmetric ligand with naphthalene units is either low-spin in its solvated form or shows a gradual but hysteretic spin crossover event when desolvated.

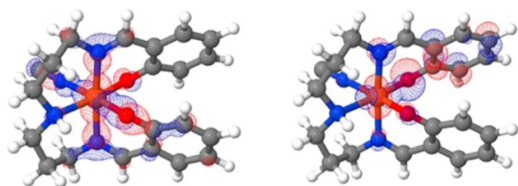


Fig. 1. Bonding active orbitals Nr. 106 and 107 at one of Fe(III) centres in **II**

A detailed ab-initio analysis shows that the geometry of ligand  $\text{L}2^{2-}$  supports delocalization of frontier orbitals and can well accommodate unpaired electrons (Fig. 1). Such delocalization is not observed in the case of **I**. In consequence, the molecular design of **II** stabilizes high spin electronic configuration and suppresses spin crossover effect.

This work was supported by Slovak grant agencies (APVV-18-0197, APVV-18-0016, and VEGA 1/0125/18), the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic under Project CEITEC 2020 (LQ1601) and the HPC center at the STU in Bratislava [SIVVP project 26230120002, funded by the European region development funds (ERDF)].

## REFERENCE

- Pavlik J., Masárová P., Nemeč I., Fuhr O., Ruben M., Šalitroš I.: Inorg. Chem. 59, 2747 (2020).

## 2P-19

## MISCELLANEOUS MAGNETIC PROPERTIES IN IRON(III) COMPLEXES WITH HEXADENTATE SCHIFF BASE LIGANDS

LUKÁŠ POGÁNY<sup>a,\*</sup>, JÁN PAVLIK<sup>a</sup>, MILAN MAZÚR<sup>b</sup>, JÁN MONCOL<sup>a</sup>, IVAN ŠALITROŠ<sup>a,c</sup>

<sup>a</sup> Department of Inorganic Chemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 81237, Bratislava, Slovakia, <sup>b</sup> Department of Physical Chemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 81237, Bratislava, Slovakia, <sup>c</sup> Central European Institute of Technology, Brno University of Technology, Purkynova 123, 612 00 Brno, Czech Republic  
lukas.pogany@stuba.sk

Reaction of 2-hydroxybenzophenone derivatives with *N,N'*-bis(2-aminoethyl)-ethane-1,2-diamine (2,2,2-tet) or *N,N'*-bis(3-aminopropyl)ethane-1,2-diamine (3,2,3-tet) led to the formation of hexadentate Schiff base ligands  $\text{H}_2\text{L}_n$ . Coordination of *in-situ* prepared ligands  $\text{H}_2\text{L}_n$  to iron(III) central atoms afforded eight new iron(III) complexes **1-8** with the general formulae  $[\text{Fe}(\text{L}_n)]\text{X} \cdot m\text{CH}_3\text{CN}$  (where  $\text{L}_n$  is dianion of hexadentate Schiff base ligand, X is azide, selenocyanate, thiocyanate or tetraphenylborate counteranions, and  $m = 0-2$ ). The crystal structures of all complexes have been determined by X-ray diffraction. Presence of *cis*- $\text{O}_2/\text{fac}$ - $\text{N}_3$  or *trans*- $\text{O}_2/\text{mer}$ - $\text{N}_3$  configurations were found in case of complexes with 2,2,2-tet and 3,2,3-tet amine, respectively and configuration is thus dependent on aliphatic part of ligand.

Investigation of magnetic properties revealed either spin crossover behaviour accompanied with thermal hysteresis (complex **1**, **2**, width of hysteresis loop ca. 20 K), pure low-spin state behaviour (complexes **3-7**) as well as ambiguous intermediate spin state properties (complex **8**). Results of magnetic investigation were confirmed by EPR studies either at 100 K and 300 K (low spin compounds) or at several temperatures (SCO compounds and ambiguous intermediate spin state compound).

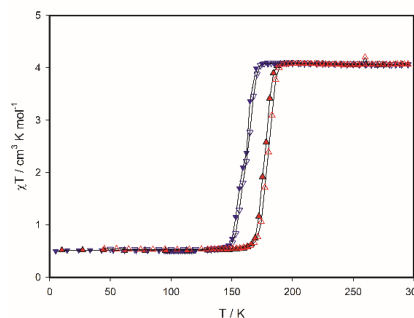


Fig. 1. Spin crossover with ca 20 K hysteresis in complex **1**

Grant Agencies (Slovakia: APVV-18-0016, VEGA 1/0125/18) are acknowledged for financial support.

**2P-20****INSTABLE VATERITE MICROPARTICLES – THE EFFECT OF TEMPERATURE ON PARTICLES SIZE AND SHAPE****ŠÁRKA SOVOVÁ, BOGDAN V. PARAKHONSKIY, MILOSLAV PEKAR, ANDRE SKIRTACH***Faculty of Chemistry, Brno University of Technology,  
Purkynova 464/118, 612 00 Brno  
xcssovova@fch.vut.cz*

There are three different anhydrous polymorphs of calcium carbonate ( $\text{CaCO}_3$ ) – calcite, vaterite and aragonite. Although vaterite is the least thermodynamically stable polymorph, it attracts the most attention in various topics – drug delivery, tissue engineering or personal care application<sup>1</sup>. Due to vaterite higher solubility in water than calcite and aragonite, vaterite crystallizes into calcite in water solution<sup>2</sup>.

The knowledge of the conditions for controlled synthesis of vaterite microparticles plays the crucial role for further application. In this work, precipitation of sodium carbonate and calcium chloride solutions was used to synthesize  $\text{CaCO}_3$  microparticles. Special reactor with precise control of the temperature (thermal bath) and rotation speed (mechanical stirrer) was used. The effect of temperature and time on formation dynamic of  $\text{CaCO}_3$  microparticles was investigated by the scanning electron microscopy (particles size and shape). Fourier transformed infrared spectroscopy and X-ray powder diffraction were used to resolve vaterite to calcite ratio.

The results show that both factors – reaction time and temperature – affect particle shape and size significantly and obtained particles are in the range from  $3.5 \pm 0.8 \mu\text{m}$  to  $19.8 \pm 5.8 \mu\text{m}$ . For lower temperature, spherical shape was obtained, cauliflower and croissant shape for higher temperature and cubic shape for the highest temperature. Moreover, longer reaction time promotes crystallization of vaterite to calcite.

These type of particles could be used in pharmaceutical area such as drug delivery system.

## REFERENCES

1. Svenskaya Y. I. et al.: *Crystal Growth & Design* 18, 331 (2018).
2. Trushina D. et al.: *Materials Science and Engineering C* 45, 644 (2014).

**2P-21**

Účast zrušena

**2P-22****VPLYV TVARU SUBSTRÁTU PRE ZERO-GAP  
ALKALICKÚ ELEKTROLÝZU VODY****MAROŠ ÁBEL, JANA ZÁCHENSKÁ, MATILDA  
ZEMANOVA**

*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU  
v Bratislave, Oddelenie anorganickej technológie,  
Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko  
jana.zachenska@stuba.sk*

Výroba vodíka priťahuje pozornosť ako tzv. zelená forma energie<sup>1</sup>. Vodík je možno vyrobiť viacerými spôsobmi, jedným z nich je alkalická elektrolýza vody. „Zero-gap“ usporiadanie alkalickéj elektrolýzy vody umožňuje použitie nižšej koncentrácie KOH a nižšej teploty ako v priemyselnych jednotkách. Dôvodom je používanie anión selektívnej membrány<sup>2</sup>. Katalyzátory v tomto usporiadaní, jednak ich zloženie a tvar, priťahujú pozornosť na štúdium účinnosti alkalickéj elektrolýzy.

Pripravili sa povlaky na báze Ni za rôznych podmienok elektrochemického pokovovania ako možné katódové katalyzátory alkalickéj elektrolýzy vody<sup>3</sup>. Na nami zostrojenom „zero-gap“ elektrolýzéri pre alkalickú elektrolýzu vody sa povlaky nanosené na rôzne tvarovaných substrátoch (ťahokov, Ni pena) overili meraním záťažových kriviek. Merania prebiehali pri dvoch rôznych prietokoch 5 ml min<sup>-1</sup> a pre prietok 10 ml min<sup>-1</sup>. V rámci meraní sa skúmal vplyv tvaru substrátu na priebeh elektrolýzy.

Po rozbere nameraných údajov sa prišlo k nasledovným záverom. Vplyv substrátu na priebeh elektrolýzy takmer jednoznačne potvrdil lepšie vlastnosti a vyššie dosahované prúdové hustoty pre povlaky nanosené na Ni pene. Daný fakt je zapríčinený veľkým špecifickým povrchom v porovnaní s ťahokovom.

*Táto práca vznikla s podporou projektu VEGA 1/0792/17.*

**LITERATÚRA**

1. Cleveland C. J.: *Concise Encyclopaedia of the History of Energy*. Academic Press 2009
2. Hnát J.: *Alkalická elektrolýza vody. Disertační práce*, VŠCHT Praha 2015.
3. Metikos-Hukovic M., Grubac Z., Radic C. N. et al.: *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical* 249, 172 (2006).

## 3L-01

## VÝVOJ CHEMICKÉHO PRŮMYSLU V ČR A EU

IVAN SOUČEK, MIROSLAV ŠPAČEK

VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice,  
Vysoká škola ekonomická v Praze, nám. W. Churchilla 1938/4  
130 67 Praha 3 – Žižkov

Výsledky chemického průmyslu jako jednoho z nejvýznamnějšího odvětví v ČR v roce 2019 byly nepochybně ovlivněny vývojem domácí i zahraniční ekonomiky, který oproti roku 2018 přinesl pokračující stagnaci růstu tržeb a zaměstnanosti v odvětví „velké chemie“ (Nace 20, 21, 22). Výsledky chemického průmyslu v roce 2019 lze stručně shrnout takto:

- v odvětví CZ Nace 20 – chemický průmysl a CZ Nace 22 – gumárenský a plastikářský průmysl tržby stagnovaly na úrovni předcházejícího roku díky dalšímu zpomalení růstu v některých navazujících odvětvích, včetně automobilového průmyslu, zatímco v CZ Nace 21 – farmaceutický průmysl došlo k významnému nárůstu tržeb o 15,5 %.
- v porovnání s rokem 2018 prakticky nedošlo k zásadní změně v počtu pracovníků ve sledovaných agregacích odvětví chemického průmyslu: nárůst pracovníků v chemickém a farmaceutickém průmyslu byl kompenzován úbytkem v odvětví plastikářského a gumárenského průmyslu;
- vývoz z odvětví chemie vzrostl proti roku 2018 o 25,4 mld. Kč na 467 mld. Kč, zatímco dovoz se zvýšil o 19,7 mld. Kč na 612,8 mld. Kč. Díky tomuto vývoji vysoké záporné saldo chemie meziročně pokleslo na minus 145,8 mld. Kč. Podíl vývozu na celkových tržbách odvětví „velké chemie“ – vývozní výkonnost v roce 2019 dosáhla 78,4 %, přičemž celková domácí spotřeba chemické produkce (tuzemská výroba = vývoz + dovoz) nadále stagnovala ve výši 741 mld. Kč;
- oproti roku 2018 se nadále nepříznivě vyvíjel finanční ukazatel účetní přidaná hodnota v Nace 20 – chemický průmysl, jehož hodnota ve velké chemii meziročně klesla o dalších 2,1 %. Tento pokles byl kompenzován ve zbývajících dvou odvětvích CZ Nace 21 a 22 tak, že celkový ukazatel za „velkou chemii“ vzrostl o 4,1 % (oproti celkovému nárůstu tohoto ukazatele v celém zpracovatelském průmyslu ve výši 3 %);
- Varující vývoj však zaznamenává pokračující vývoj produktivity práce, za celé odvětví nárůst o 1,1 % z tržeb a 4,2 % z přidané hodnoty (pokles je však zaznamenán v CZ Nace 20 – chemický průmysl a to -1,4 %, resp. -3,1 %), a to při pokračujícím růstu mezd 4,8 % (v CZ NACE 20 +5,3 % !);
- Investice v celé „velké chemii“ poklesly v roce 2019 oproti předchozímu roku o celých 20 mld. Kč! Investice v CZ Nace 20 stagnovaly (kolem 12,5 mld. Kč), zatímco pokles je zaznamenán ve zbývajících 2 Nace a může být zásadním pro dosahování tržeb a rozvoj v těchto odvětvích v dalších letech.

Tabulka I

Přehled vybraných hospodářských ukazatelů chemického průmyslu (NACE 20+21+22) v ČR za rok 2019

Ukazatel	2019
Tržby z průmyslové činnosti (mld. Kč b.c.)	595,8
Vývoz (CZ - CPA) (mld. Kč b.c.)	467,0
Dovoz (CZ - CPA) (mld. Kč b.c.)	612,8
Počet pracovníků (průměr) (osob)	129 685
Měsíční mzda (průměr) (Kč)	35 915
Tržby v b.c. na 1 pracovníka za měsíc (tis. Kč)	383
Přidaná hodnota na 1 prac. za měsíc (b.c.) (tis. Kč)	98
Hmotné investice (mld. Kč b.c.)	30,7
Přidaná hodnota (mld. Kč b.c.)	152,5

V roce 2018 podle odhadu Cefic dosáhly tržby chemického průmyslu ve světě (bez farmacie) 3 347 mld. EUR, což představuje nárůst proti roku 2017 o 2,5 % z 3 266 mld. EUR. Evropský chemický průmysl, tj. EU-28 a zbytek Evropy, nadále patří s celkovými tržbami 694 mld. EUR (samotná EU-28: 565 mld. EUR) k lídrům, když na světových tržbách se v hodnotovém vyjádření podíl 20,7 %.

Analýza ukazuje, že země BRICS (Rusko, Brazílie, Indie a Čína) se na světových tržbách podílely v roce 2018 celkem 42,8 %. Tento podíl vzrostl na téměř tři čtvrtiny, pokud připočteme země EU-28, zbytek Evropy a USA. Zbývající čtvrtina globální tržeb chemického průmyslu připadla na rozvíjející se země v Asii včetně Středního východu.

Protože však světová konkurence je stále silnější, region EU-28 ztratil svou dřívější vedoucí pozici ve prospěch Číny (její tržby v roce 2018 dosáhly 1 198 mld. EUR).

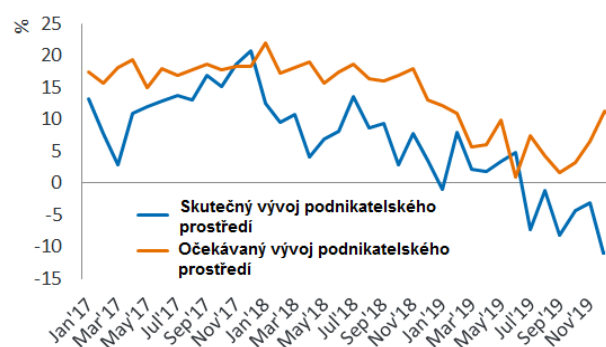


Schéma 1. Vývoj podnikatelského prostředí v chemickém průmyslu EU

Vývoj chemického průmyslu v ČR odpovídá vývoji v EU. Pokles výkonnosti koncem roku 2019 byl ještě umocněn koronavirovou krizí první poloviny 2020.

## LITERATURA

1. Statistické ukazatele ČR za rok 2019, ČSÚ, 2020

**3L-02****ANALÝZA VYBRANÝCH EKONOMICKÝCH EFEKTŮ SUBSTITUCE PRÁCE TECHNIKOU V PODNÍCÍCH CHEMIE V ÉRE NÁSTUPU INOVACÍ 4.0****JIRÍ KLEČKA\*, DAGMAR ČÁMSKÁ***VŠCHT Praha, Technická 5, Praha 6, 166 28  
jiri.klecka@vscht.cz, dagmar.camska@email.cz*

Příspěvek je věnován zjištění směru, velikosti a vlivu substituce lidské práce stálými aktivy v éře nástupu inovací průmyslu 4.0. Analyzovány jsou podniky chemických oborů v ČR (CZ-NACE 20, 21 a 22) za roky 2015 a 2018, které měly právní formu obchodní společnosti, tržby z prodeje produkce, zboží a služeb nad 10 mil. Kč ročně a jejichž data byla pro sledované roky k dispozici ve firemní databázi Albertina.

V příspěvku jsou užity ukazatele  $S$  a  $R$ .

Ukazatel  $S$  – **substituce osobní nákladovosti** **odpisovou nákladovostí:**

$$S = \left( \frac{ODPN_1}{T_1} - \frac{ON_1}{T_1} \right) - \left( \frac{ODPN_0}{T_0} - \frac{ON_0}{T_0} \right) \quad (1)$$

kde  $ODPN$  – odpisové náklady (tj. trvalé úpravy úpravy hodnot stálých aktiv) (v Kč),  $ON$  – osobní náklady (v Kč),  $T$  – tržby z prodeje produkce, zboží a služeb (v Kč), 0 – základní období (rok 2015), 1 – běžné období (rok 2018)

Ukazatel  $R$  – **dílčí absolutní změna rentability tržeb** **vlivem substituce:**

$$R = (-1) \times \left( \frac{ODPN_1 + ON_1}{T_1} - \frac{ODPN_0 + ON_0}{T_0} \right) \quad (2)$$

Příspěvek předkládá a porovnává zjištěné hodnoty ukazatelů  $S$  a  $R$  i zjištěné souvislosti mezi směry a velikostmi sledovaných substitucí na straně jedné a směry a velikostmi jejich vlivů na podnikovou rentabilitu na straně druhé.

**LITERATURA**

1. Barreto L., Amaral A., Pereira T.: *Procedia Manufacturing 13* (2017).
2. Čámská D., Klečka J.: *LogForum 16*, 2 (2019).
3. Dalenogare L. S., Benitez G. B., Ayala N. F., Frank A. G.: *International Journal of Production Economics 204* (2018).
4. Rotman D.: *Technology Review 116*, 4 (2013).

**3L-03****INDIKÁTORY KONKURENCESCHOPNOSTI V CHEMICKÉM PRŮMYSLU****DANA STRACHOTOVÁ***VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6  
daana.strachotova@vscht.cz*

Jaký bude v současné době vývoj českého hospodářství? Jaké bude postavení chemického průmyslu? Je možné hledat analogie v poslední hospodářské krizi?

Poslední finanční a hospodářská krize na konci prvního desetiletí 21. století vedla k poklesu produktivity. V ČR pak bylo na řadě ukazatelů zřejmě pomalejší zotavení z této krize

oproti jiným státům EU, a to samozřejmě znamenalo i pomalejší růst produktivity. Nicméně v dobách mimo recesi měla česká ekonomika tendenci růstu produktivity systematicky vyšší než např. růst mzdové úrovně. Čímž se snižovaly jednotkové náklady práce a zvyšovala nákladová konkurenceschopnost. Přizpůsobování mezd probíhalo ve druhém desetiletí pomalu, proto byla jednotková cena práce ovlivňována především dobrými externími ekonomickými podmínkami v Evropě.

Pro budoucí vývoj HDP je důležité udržet, jak růst produktivity, tak jednotkové ceny práce. Z přehledu struktury české ekonomiky je zřejmé, že zpracovatelský průmysl se v ČR podílí na HDP nejvyšší měrou. V rámci zpracovatelského průmyslu vévodí v pořadí podílů na HDP výroba motorových vozidel. Ovšem i sekce, které lze zahrnout pod chemický průmysl, zde mají svoji důležitou roli.

Výsledky chemického průmyslu ČR v posledních letech (měřeno indikátory jako ziskovost, případně přidaná hodnota) zaznamenaly růst. Ale už např. při srovnání s evropským regionem, kde vývoj podobných hodnot dosahoval dvojciferného růstu, lze výsledky chemického průmyslu považovat spíše za „křehké“. Evropský vývoj chemického průmyslu byl dán především mohutným tempem rozvoje v petrochemické oblasti. A to bylo podmíněno velkým rozdílem ceny základních ropných derivátů a konečných výrobků. Ceny konečných produktů jsou podmíněny tržními podmínkami a lokální úrovní nabídky/poptávky. Tyto podmínky a úroveň nabídky/poptávky závisí v relativně malé národní ekonomice na jednotlivých klíčových hráčích. Proto je důležité sledovat tyto trendy nejen na evropské a národní úrovni, ale je důležité analogicky sledovat také vývoj v jednotlivých průmyslových oblastech.

Tento příspěvek bude zaměřen na důležité indikátory hospodářského rozvoje (přidaná hodnota, produktivita) v chemickém průmyslu ve srovnání s ostatními průmyslovými odvětvími, které se významně podílí na HDP ČR.

**LITERATURA**

1. Cefic – European Chemistry Industry Council. Dostupné online [www.cefic.org](http://www.cefic.org) (2019).
2. Čapek P., Veselý M., Hejtmánek V.: *Chem. Eng. Sci. 118*, 192 (2017).
3. Česká národní banka (ČNB), Dostupné online [www.cnb.cz](http://www.cnb.cz), (2017).
4. ČSÚ, Český statistický úřad. Dostupné online [www.csu.cz](http://www.csu.cz), (2020).
5. Kurzy.cz, HDP, vývoj hdp v ČR. Dostupné online <http://www.kurzy.cz/makroekonomika/hdp/>, (2019, 2020).
6. Ročenka chemického průmyslu v ČR za rok 2018.
7. Eurostat, Dostupné online <http://ec.europa.eu/eurostat/>, (2020).

### 3L-04 DŮVODY K SERUITIZACI V CHEMICKÉM PRŮMYSLU

**VLADIMÍRA VLČKOVÁ, LUCIE PODŠKUBKOVÁ**

Univerzita Pardubice, FCHT, KEMCH, Studentská 95,  
532 10 Pardubice  
vladimira.vlckova@upce.cz

Výrobní podniky na B2B trhu čím dál více propojují své výrobní činnosti s poskytováním služeb zákazníkům. Tento proces pokročilého rozvíjení doprovodných služeb je nazýván „servitizace“. V současné době je spojován se změnou strategického zaměření podniků<sup>1</sup>.

Mezi okolnosti, které vedou výrobní podniky k servitizaci patří komoditizace, nasycení trhu, zrychlování inovačního cyklu výrobků, tlak konkurence, globalizace, nové technologie a environmentální okolnosti. Kryvinská rozlišuje externí důvody (posun z produktů, výstupů, transakcí k řešení, výsledkům, vztahům) a interní (finanční a strategické) důvody, které vedou výrobní podniky k posunu ke službám<sup>2</sup>. Oblast služeb je navíc ziskovější než oblast výrobků a poskytuje více příležitostí k růstu. V chemickém průmyslu je důraz kladen zejména na pomoc zákazníkům efektivněji využít chemikálie a snížit chemický odpad tak, aby se o něj nemuseli starat a nést za něj zodpovědnost<sup>3</sup>. Podniky a procesy jednotlivých odvětví jsou odlišné a proto se v nich liší také důvody vedoucí k servitizaci.

V roce 2020 byl realizován kvalitativní výzkum zaměřený na úroveň servitizace ve vybraném podniku chemického průmyslu. Posun k servitizaci je zde ovlivněn obecnými trendy projevujícími se např. snahou podniku k přechodu od prodeje výrobků na provádění aplikace u zákazníka, budováním partnerství prostřednictvím služeb, posunem od prodeje výrobků k poskytování celkového řešení pro zákazníky. Byly zde identifikovány následující důvody přechodu podniku ke službám: zajištění si vyšších prodejů, dosažení většího zisku, zvyšování loajality zákazníků, zvyšování nároků na služby ze strany zákazníků, zvyšování bezpečnosti při aplikaci jejich výrobků.

*Tato práce a výzkum vznikly za podpory grantu Fakulty chemicko-technologické, Univerzity Pardubice, SGS-2020-003.*

#### LITERATURA

1. Pistoni A., Songini L., v knize: *Servitization strategy and managerial control*, kap. 1.4, str. 16. Emerald Publishing Limited, UK 2018.
2. Kryvinská N., Kaczor S., Strauss C., Greguš M.: *Servitization Strategies and Product-Service-Systems*. v: 10th World Congress on Services, Alaska, USA 2014.
3. Kaningnant T., Suthiwartnarueput K., Pornchaiwiseskul P.: *Servitization framework for product transition in chemical distribution*. V: 5th International Conference on Business and Industrial Research, ICBIR, Bangkok 2018.

### 3L-05 NÁVRH DISTRIBUČNÍHO SYSTÉMU PNEUMATIK

**MAREK BOTEK, IVAN GROS, STANISLAVA  
GROSOVÁ, OLGA KUTNOHROSKÁ, DANA  
STRACHOTOVÁ, JAN RANČÁK**

VŠCHT, Ústav ekonomiky a managementu, Technická 5,  
166 28 Praha 6  
grosovas@vscht.cz

Návrh distribučního systému představuje jedno ze strategických rozhodnutí firmy vzhledem k jeho vlivu na úroveň služeb zákazníkům a distribuční náklady<sup>2,3</sup>. Stať je orientována na problematiku návrhu distribučního systému pro specifickou komoditu, kterou jsou zemědělské pláště. Firma dodává produkty formou přímé i nepřímé distribuce cca 3700 zákazníkům ve sto zemích. Nejvíce zákazníků je v západní Evropě, východní Evropě a Americe. Tak rozsáhlou distribuční oblast je možné zabezpečit vhodnou strukturou systému. Optimální rozmístění a lokalizace distribučních center výrazně ovlivňuje distribuční náklady také proto, že zemědělské pláště jsou velmi rozměrné a obtížně manipulovatelné.

Případová studie pracuje se skutečnými údaji v modelovaném období<sup>1</sup>. Hlavní problémy, které motivovaly zpracování uvedené studie spočívaly v už uvedeném specifickém tvaru výrobků, postupném růstu nákladů způsobeném neoptimalizovanou distribuční sítí, citelně chybějícím centrálním skladu, problémy s tím souvisejícím využitím výrobních kapacit a lisovacích forem a vysokém stavu zásob v existujících skladech.

Prvotním problémem byla geografická lokalizace zákazníků v distribuční oblasti, kterou bylo pro ilustraci postupu Německo, Rakousko a Švýcarsko. S využitím dostupných údajů o prodejkách a využitím software na geokódování se podařilo zvládnout první a zásadní krok studie. V grafickém vyjádření jsou jednotlivá centra spotřeby označena kružnicemi, jejichž velikost znázorňuje další nutnou informaci o velikosti prodejků. Lokalizace všech zákazníků byla rozšířena o klasickou ABC analýzu zákazníků podle velikosti ročních prodejů. Ze zákazníků byli vyloučeni ti, u kterých je výhodná přímá distribuce.

V dalším kroku bylo podrobeno analýze umístění současných skladů. Už pouhé vizuální srovnání lokalit některých distribučních skladů s lokalitami center spotřeby ukázalo na možnosti zlepšení struktury celého systému. Součástí optimalizace jsou i místa, pět výrobních závodů, z nichž jsou zákazníci a sklady zásobovány požadovaným sortimentem.

Studie obsahuje celkem 8 možných variant distribučních systémů přímou distribucí počínaje, přes využití jednoho centrálního skladu a regionálních optimalizovaných nebo současných, po více centrálních skladů v jednotlivých zemích, nebo umístěných bez uvažování hranic, které byly srovnávány se současným stavem<sup>4</sup>. Kritériem byl zejména počet ujetých tunokilometrů a počet km, který urazí jeden kg výrobku. Vzhledem k problémům spojeným s využitím přepravních prostor kamionů byl použit i ukazatel m<sup>3</sup>.km.

Z celkových výsledků modelů vyplývá, že nejvýhodnější by byla přímá distribuce pro všechny zákazníky, jelikož modely nepočítají s fixními distribučními

náklady. Tato varianta je ovšem téměř neproveditelná. Další možnou variantou je přemístění nynějších skladů na lokality, které jsou dopočítány lokalizací s počtem skladů větších než 1. Jeden z těchto modelů nepočítá s hranicemi řešených zemí a úplným volným obchodem, který může vést k hranicím některých zemí. Zajímavé varianty by mohly být ty, které využívají centrálního skladu. U nich však může docházet k problémům hodnocení variant popisovaných u modelu přímé distribuce. Posledním řešením, které je výhodnější než model současného stavu, je model využívající optimálně umístěných skladů v jednotlivých zemích. Studie vzhledem k její rozsáhlosti byla omezena jen na přepravní náklady. V dalších krocích by bylo třeba zvažovat vliv variant na pořizovací náklady, náklady na přemísťování skladů do jiných lokalit, náklady na udržování zásob, které rostou s počtem skladů aj.

#### LITERATURA

- Hanta V., Gros I.: *Řešení problému lokalizace a alokace logistických objektů pomocí programového systému Matlab*. Konference MATLAB (2003).
- Klose A., Drexler A.: *European Journal of Operational Research* 162 (2005).
- ReVelle C. S., Eiselt H. A.: *European Journal of Operational Research* 165 (2005).
- Makovec P.: *Návrh distribučního systému firmy*. Diplomová práce, VŠCHT 2014.
- Gros I. a kol.: *Velká kniha logistiky*. Vydavatelství VŠCHT, Praha 2016.

#### 3L-06

#### PREDIKCE SKLADBY MOTOROVÝCH PALIV V ČR V ROCE 2030

MILAN POSPÍŠIL\*, VOJTĚCH MÁČA, IVAN SOUČEK

VŠCHT Praha, Technická 5, Praha 6 – Dejvice, 166 28  
Univerzita Karlova, Centrum pro otázky životního prostředí,  
J. Martího 2/407, Praha 6, 162 00  
Ivan.Soucek@vscht.cz

S využitím lineárního bilančního modelu TRANSPLEX byl proveden základní propočtení základních scénářů možného vývoje veřejné, individuální, osobní a nákladní silniční a železniční dopravy v ČR po roce 2030, který primárně reflektuje:

- očekávaný vývoj přepravních výkonů v r. 2030 vytvořený MD ČR, který je součástí „Vnitrostátního plánu České republiky v oblasti energetiky a klimatu“;
- zajištění potřebných přepravních výkonů s počty dopravních prostředků v souladu s NAP Čistá mobilita, využívajících elektrickou energii, CNG, LNG, LPG a vodík,
- závazek ČR vůči EU pro splnění limitů náhrady OZE ve výši min. 14 % a se současným respektováním všech ostatních dílčích kritérií v souladu se směrnicí RED II (OZE 1.G max. 7 %e.o., OZE RED II IX/A min. 3,5 % e.o., OZE RED II IX/B max. 3,4 %e.o.; vše včetně multiplikátorů),
- předpoklad, že úspora GHG z dopravy v ČR bude vyšší než 6 %,

5. na trhu v ČR prodej následujících pohonných hmot:

- B0, B7 (6,8% obj.FAME), B100,
- E0, E10 (5 % obj. ETBE + 7,8% obj.EtOH; 3,6 % hm. O), BA98/100 (22% obj.ETBE; 3,5 % hm. O),
- LPG, CNG, LNG,
- H2, EL. ENERGIE.

S použitím minimálního a maximálního počtu vozidel dle NAP Čistá mobilita byly vypracovány následující 4 hraniční scénáře:

Scénář S1 – zajištění přepravních výkonů s maximální spotřebou el. energie a vodíku (elektrický pohon) a současně i s maximální spotřebou plyných paliv (CNG, LNG, LPG).

Scénář S2 – zajištění přepravních výkonů s maximální spotřebou el. energie a vodíku (elektrický pohon).

Scénář S3 – zajištění přepravních výkonů s maximální spotřebou plyných paliv (CNG, LNG, LPG).

Scénář S4 – zajištění přepravních výkonů s maximální spotřebou kapalných paliv (BA, NM).

Pro každý scénář byl dopočten počet vozidel na kapalně pohonné hmoty tak, aby byly zajištěny požadované přepravní výkony.

Výše uvedené hraniční scénáře S1 až S4 jsou doplněny dalšími 2 scénáři:

Scénář SO – výpočet reflektující známý stav přepravních výkonů, spotřeby pohonných hmot, biosložek a počty provozovaných dopravních prostředků v r. 2019

Scénář SX – výpočet na základě parametrů – výstupů z optimalizačního výpočtu modelu TIMES pro r. 2030.

#### Tabulka I

Množství základních složek pohonných hmot na bázi OZE potřebné pro zajištění nárůstu OZE

Složka OZE	Nárůst OZE +1 % e.o. (kt)
B100	80
HVO	65
LPG HVO	60
EtOH 2.G	105
NM F-T	30
bioCNG	40 (mil. m3)
UCOME	75
HVO UCO	30
LPG HVO UCO	30
NM – PYROPLAST	65
H2 100% OZE	20

Pro zajištění požadavků EU k úspoře GHG, resp. požadovaného podílu obnovitelných složek v motorových palivech je nezbytná realizace klíčových opatření vyplývajících z proveditelnosti jednotlivých scénářů, resp. jejich kombinace.

Tato práce vznikla za podpory projektu TA ČR v rámci programu Beta TITSMZP713: *Optimální využití obnovitelných zdrojů energie v dopravě*



## LITERATURA

1. White C. M., Steeper R. R., Lutz A. E.: International journal of hydrogen energy 31, 1292 (2006).
2. Národní akční plán čisté mobility, MPO ČR, [www.mpo.cz/cz/prumysl/zpracovatelsky-prumysl/automobilovy-prumysl/narodni-akcni-plan-ciste-mobility-167456/](http://www.mpo.cz/cz/prumysl/zpracovatelsky-prumysl/automobilovy-prumysl/narodni-akcni-plan-ciste-mobility-167456/), (2015).
3. Národní akční plán ČR pro energii z obnovitelných zdrojů, MPO ČR, [www.mpo.cz/assets/dokumenty/54909/62718/](http://www.mpo.cz/assets/dokumenty/54909/62718/), (2015).

## 3L-07

**PROBLEMATIKA INTERNACIONALIZACE  
LIDSKÝCH ZDROJŮ VE VĚDĚ A VÝZKUMU  
Z POHLEDU EVROPSKÉ A ZAHRANIČNÍ  
LEGISLATIVY**

**ANNA MITTNEROVÁ\*, ALENA TŘÍŠKOVÁ, IRENA  
MOUDRA, ANNA KERNOVÁ**

*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5,  
166 28 Praha 6  
anna.mittnerova@vscht.cz*

Internacionalizace pracovních týmů, zejména ve výzkumu a vývoji vede k lepším výsledkům, je proto nutným předpokladem konkurenceschopnosti v mezinárodním srovnání. Mezinárodní spolupráce výzkumníků je v Česku podporována řadou dotačních programů ať již přímo z Bruselu z rámcového programu Horizon 2020 a jeho součástí Akce Marie Skłodowka Curie či z ESIF, Operačního programu pro výzkum, vývoj a vzdělávání (OP VVV), případně v rámci programů národních poskytovatelů podpory výzkumu a vývoje. Vysoké školy se do programů mobility aktivně zapojují, podporují tak profesní růst svých výzkumných pracovníků zejména na počátku jejich kariérní dráhy, což se odráží v posílení kapacit lidských zdrojů a vyšším zapojení do mezinárodních výzkumných konsorcií. Internacionalizace probíhá formou mezinárodních mobility výzkumníků mezi Českou republikou a členskými státy EU ale i dalšími zeměmi světa. Čeští výzkumníci vyjíždějí na pracovní cesty či delší, pobyty do zahraničí, naopak zahraniční výzkumníci po prokázání svých kvalit prostřednictvím projektu mohou přijet a pracovat na vědeckém tématu v české výzkumné organizaci.

Z hlediska mezinárodního i tuzemského legislativního rámce se mobility výzkumných pracovníků zásadně liší od mobility studentů. Všichni, mobilitu realizující výzkumníci, mezi něž patří i studenti DSP zaměstnaní na výzkumných projektech, jsou považováni za zaměstnance, neboť za svůj výkon práce dostávají odměnu ve formě mzdy. V důsledku toho se jejich činnost řídí zákony v oblasti pracovního práva, spadají do systému sociálního zabezpečení a zdravotního pojištění a jejich příjmy podléhají dani z příjmu fyzických osob. Tyto zákonné povinnosti se aplikují nejen na národní úrovni, ale i v zemích EU/EHP a Švýcarsku a ve většině třetích zemí světa. Mobility mezi členskými zeměmi EU se díky volnému pobytu osob a služeb nijak neomezují, ovšem mobility mezi ČR a třetími zeměmi světa podléhají zákonům upravujícím pravidla pro vstup cizinců na území daného státu.

V praxi to probíhá tak, že při každé mobilitě, to je buď

vyjíždějícího výzkumníka do zahraničí na pobyty od 1 dne do 2 roků, anebo při příjezdu zahraničního výzkumníka do české výzkumné organizace musí vysílající či hostitelská organizace dodržet řadu interních předpisů a řídit se řadou zákonných ustanovení, z nichž ty nejdůležitější jsou:

- Pravidla grantu, ze kterého je mobilita financována,
- interní předpisy a Kolektivní smlouva zaměstnavatele,
- Zákon o zaměstnanosti, Zákoník práce, část VII – Cestovní náhrady při pracovní cestě,
- Zákon o veřejném zdravotním pojištění, Zákon o pojistném na sociální zabezpečení,
- Evropské Nařízení (ES) č. 883/2004 o koordinaci systémů sociálního zabezpečení, bilaterální smlouvy o sociálním zabezpečení mezi ČR a třetími zeměmi světa,
- Zákon o dani z příjmu, bilaterální smlouvy o zamezení dvojího zdanění mezi ČR a dalšími zeměmi,
- Zákon o pobytu cizinců na území České republiky,
- Směrnice Rady 2005/71/ES o zvláštním postupu pro přijímání státních příslušníků třetích zemí pro účely vědeckého výzkumu,
- Zákon o veřejných výzkumných institucích, část VIII, podmínky pro přijímání výzkumných pracovníků ze třetích zemí.

Porušením jakéhokoliv zákonného ustanovení se vysílající či hostitelská organizace vystavuje sankcím. Dalším leckdy limitujícím faktorem mobilit jsou zákonné lhůty vyřizování právních úkonů, jako příklad je vyřízení povolení k vstupu na území ČR občana ze třetí země, které trvá 60 dnů od podání žádosti na zastupitelském úřadě ČR v cizině. Ač je po zemích EU/EHP a Švýcarska povoleno volný pohyb občanů a služeb, málokdo si uvědomuje, že je nutno při mobilitách, i krátkodobých, dodržet podmínky koordinačních nařízení v oblasti sociálního zabezpečení. Jde zejména o vyřízení potvrzení A1 prokazujícího příslušnost k systému sociálního zabezpečení pouze jedné členské země a s tím související další opatření. U delších mobilit je nutno počítat s tím, že s výzkumným pracovníkem vyjíždí/přijíždí i jeho rodinní příslušníci, o které se musí hostitelská organizace též postarat.

Z výše uvedených skutečností vyplývá, že o mobilitu výzkumníků se musí starat proškolení administrativní experti s širokým záběrem znalostí, od cizineckého práva, přes personalistiku a daně z příjmu fyzických osob a s dobrou znalostí angličtiny.

Výzkumníci z VŠCHT Praha hojně vyjíždějí na zahraniční pracovní cesty a pracovní stáže, rovněž tak škola hostí nemalý počet zahraničních výzkumníků, je proto nutno tuto problematiku řešit systémovým opatřením.

Řešitelský tým pod vedením A. Mittnerové získal od MŠMT grant na vytvoření „Průvodce administrativou pro internacionální pracovníky v akademickém prostředí“, jehož cílem je zpracování potřebných informací, v angličtině a češtině, formou webových stránek a příručky pro hostitele, zahraniční výzkumníky a jejich rodinné příslušníky a pro administrativní pracovníky VŠ. Využije tak znalostí z již předchozích zapojení do obdobných projektů a z vlastních zkušeností.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR programu program Interexcellence/ Inter Inform LT120003.*



## LITERATURA

1. Daněk M., Vyškovská M., Fojtíková J. T.: *Zaměstnávání cizinců na území České republiky*. ANAG 2018.
2. <https://www.zakonyprolidi.cz/>
3. <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/CS/ALL/?uri=CELEX%3A32009R0987>

## 3L-08

**KOMPETENCE PRACOVNÍKŮ V BIO-BASED EKONOMICE****MAREK BOTEK**

*Ústav ekonomiky a managementu, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6  
botekm@vscht.cz*

Bioekonomika je založená na využívání obnovitelných přírodních zdrojů a bioprocusů<sup>1,2</sup>. Podle některých autorů spočívá primárně v pěstování zemědělských surovin pro průmyslové využití<sup>2</sup>, další do bioekonomiky zařazují i produkci biologicky degradovatelných plastů a léčiv či využívání bioprocusů při průmyslové výrobě (zejm. produkce bioplynu).

V nejbližší době se očekává výrazný nárůst podílu bioekonomiky v globální ekonomice<sup>1</sup>, a to zejména v souvislosti s jejím akcentem na udržitelný rozvoj a ve spolupráci s cirkulární ekonomikou, protože v bioekonomice materiály do jisté míry cirkulují<sup>3</sup>. Další důvod pro propojení je skutečnost, že bioekonomika není vždy udržitelná<sup>4</sup>.

Pro úspěch s přechodem na biohospodářství je potřebné se více zaměřit na ekonomickou proveditelnost<sup>5</sup>. Zaměstnanci v tomto oboru tak potřebují kompetence nejenom pro schopnost využívat nové technologie pro produkci, ale také pro jejich ekonomicky efektivní uplatnění<sup>6</sup> a pro spolupráci s kolegy a stakeholdery.

Vzhledem k významu intelektuálního kapitálu v současnosti, by znalostní báze pro bioekonomiku měla přijít ze strany univerzit<sup>7</sup>. Tento příspěvek se zaměřuje na dílčí výsledky evropského projektu BioComp, v jehož rámci se jak identifikují nejdůležitější kompetence pro pracovníky v biohospodářství, tak připravují výukové materiály pro jejich získání. Na projektu spolupracují jak vysoké školy, tak i vzdělávací instituce z 8 členských zemí EU.

## LITERATURA

1. Bugge M., Hansen T., Klitkou A.: *Sustainability* 8, 1 (2016).
2. Hájek M.: *Odpad. Forum* 10 (2018).
3. Vanhamaki S. et al.: *Inf. J. Sus. Dev. Plann.* 14, 1 (2019).
4. Aguilar A., Wohlgemuth R., Twardowski T.: *New Biotechnology* 40, 181 (2018).
5. Chesbrough H., Rosenbloom R. S.: *Ind. Corp. Chang.* 11, 529 (2002).
6. Reim W., Parida V., Sjođin D. R.: *Sustainability* 11 (9), (2019).
7. Tiron-Tudor A., Nistor C. S., Stefanescu C. A.: *Amfiteatru Economic* 20, 599 (2018).

## 3L-09

**THE CHEMMULTIMODAL PROJECT AS A TOOL TO MAKE MULTIMODAL TRANSPORT PLANNING IN THE CHEMICAL INDUSTRY MORE EFFICIENT****JAN CHOCHOLÁČ<sup>a</sup>, JAROSLAVA HYRŠLOVÁ<sup>b</sup>, LADISLAV ŠPAČEK<sup>c</sup>, VÁCLAV ŽIVEC<sup>d</sup>**

*<sup>a</sup> University of Pardubice, Faculty of Transport Engineering, Studentska 95, 532 10 Pardubice 2, <sup>b</sup> University of Pardubice, Faculty of Transport Engineering, Studentska 95, 532 10 Pardubice 2, <sup>c</sup> Association of Chemical Industry of the Czech Republic, Rubeska 393/7, 190 00 Praha 9, <sup>d</sup> Association of Chemical Industry of the Czech Republic, Rubeska 393/7, 190 00 Praha 9  
jan.chocholac@upce.cz*

The ChemMultimodal project is the follow up project of the ChemLog project, realised within the years 2008–2012, and the ChemLog-T&T project, realised within the years 2012–2014. The ChemMultimodal project was launched on 1 June 2016 and was completed on 31 May 2019.

The project reflects the importance of chemical industry in Central Europe sector with the annual turnover of almost 117 milliards of Euros, with more than 340 000 employees. The chemical companies represent important part of the logistic chains, regarding their responsibility for transport of 8% of the total freight transport. The project focuses on the continental transport of chemical goods and products, incl. short sea transportshipping. It also follows the presumption, that the problem of the overseas transport utilising the big ISO freight containers is adequately solved now.

One of the ChemMultimodal project outputs is development of a „Toolbox“, comprising the following elements: “Consulting service“, “Planning guidelines“, “Intermodal links platform“ and “CO<sub>2</sub> calculator“. The project developed other outputs: “Pilot Projects“, “Kick-off workshops“, “Mid-term workshops“, “Regional strategies“ and “Action plans“.

As most useful evaluated element of the toolbox, the “Consulting Concept“ was used as a guide for the collaboration between the project staff and the participating companies.

The tool was considered as very helpful in supporting the facilitator to work with chemical companies and logistic operators and to deepen the collaboration between them during bilateral meetings.

The main function of the “Planning Guidelines“ during the pilot phase was to ensure that the right questions were asked when potentials for multimodal transport were investigated.

The IT visualization tool “Intermodal Links Planner“ (Fig. 1) helped chemical companies to get a first overview of possibilities to shift transport volumes on specific routes by checking if the connections exist and which operators run the routes. This tool was assessed by the companies as a good possibility to receive general information about existing terminals and specialized logistic service providers, frequency of departure, arranged pick-up and delivery transports to/from different terminals on the selected routes.

## HAMBURG - TRIESTE




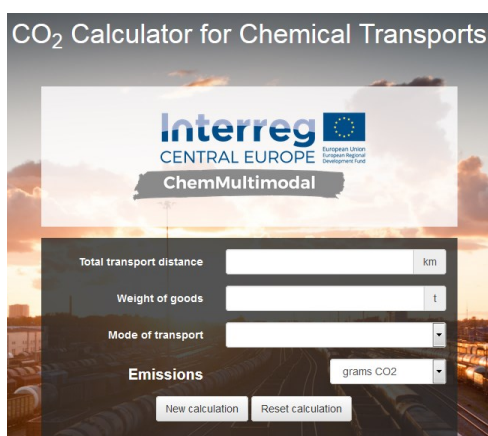
Route	Transport time (days)	Frequency (per week)	Number of transshipments	Modality
Hamburg - München - Trieste	3	5	1	
Hamburg - Köln - Trieste	3	5	1	
Hamburg - Salzburg - Koper	3	3	1	

Fig. 1. Intermodal Links Planner

The tool “CO<sub>2</sub> Calculator” (Fig. 2) was successfully used to demonstrate the environmental benefits of multimodal transport. With the help of the “CO<sub>2</sub> Calculator”, companies were able to estimate transport related CO<sub>2</sub> emissions for every tested route. This element was evaluated as self-explanatory and very easy to handle. Unfortunately, for most companies transport related CO<sub>2</sub> emissions were of minor interest in choosing the transport mode due to missing market demand. But it may play an important role for marketing CSR purposes. In cases, where the measurement becomes necessary, the tool provides data in a very transparent and clear manner.

Fig. 2. CO<sub>2</sub> Calculator

In recent years changing market conditions did not only force producing companies to restructure their strategic orientation. Also specialized logistic service providers were – and are still required – to focus their attention towards innovative solutions regarding the transport chain design. This topic also tackles (multimodal) transport planning, transport planning systems and related activities. As the future of the transport market will confront respective actors with several challenging factors, those companies need to broaden their perspectives and embark on a change process. Increasing transport volumes, shortage of truck drivers, bottlenecks on motorways but also capacity shortages of terminals are only some of the challenges, which will force companies to restructure their current transport strategies.

*This paper is published within the solution of project “Interreg Central Europe ChemMultimodal – CE36” in cooperation with Association of Chemical Industry of the Czech Republic.*

## REFERENCES

1. Chocholáč J. et al.: *Multimodální doprava*. Univerzita Pardubice, Svaz chemického průmyslu České republiky, Zváz chemického a farmaceutického priemyslu Slovenskej republiky, Pardubice 2019.
2. <https://www.interreg-central.eu/Content.Node/ChemMultimodal.html>, staženo 6. 6. 2020.
3. <https://ifs150.mb.uni-magdeburg.de/chemmultimodal/>, staženo 14. 6. 2020.
4. <https://intermodallinks.com/Planner>, staženo 12. 6. 2020.

### 3P-01 PRŮMYSL 4.0 V PODNICÍCH CHEMICKÉHO PRŮMYSLU

**JAN VÁVRA, OSKAR BAKEŠ**

Univerzita Pardubice, FCHT, KEMCH, Studentská 95, 532 10  
Pardubice  
jan.vavra@upce.cz

V současnosti zažívají všechna průmyslová odvětví globální změny. Rapidní technologický pokrok mění podobu celé společnosti a chemický průmysl není v tomto směru výjimkou; moderní technologie již ovlivňují podobu práce i v českých chemických podnicích. Průmyslové technologie fyzického, virtuálního nebo kombinovaného charakteru začínají pronikat i do investičně a technologicky specifického odvětví chemie ve snaze zvýšit efektivitu podniku ve všech oblastech a tím si udržet konkurenceschopnost.

Průmysl 4.0 je pojem zahrnující širokou škálu prvků, které mají charakter fyzický, kybernetický, informační a zahrnují i lidský faktor, mezi nimiž dominují prvky digitalizace, automatizace, autonomních systémů, internet of things, cloud computing, big data, seberegulačních systémů nebo virtuální či rozšířené reality. Tyto prvky spolu vytváří složité a vzájemně propojené systémy, které lépe naplňují cíle všech zainteresovaných stran (vlastníků podniku, zaměstnanců, zákazníků apod.)<sup>1</sup>.

V roce 2020 byl realizován kvalitativní výzkum stavu implementace konceptu Průmyslu 4.0 v českých chemických podnicích. Ve čtyřech významných chemických podnicích byly šetřeny okolnosti úrovně povědomí o prvcích Průmyslu 4.0, problematiku a míru zavedení do podnikové praxe, jakož i dopady, které tato transformace v podniku vyvolala a do budoucna i vyvolá.

Výzkum byl proveden v době pandemie nemoci COVID-19, což paradoxně s problematikou automatizace úzce souvisí, v situaci nouzového stavu podnikům nejvíce pomohly moderní komunikační technologie, které usnadnily práci na dálku. Respondenti se shodli, že v podnicích budou implementací prvků Průmysl 4.0 zasazeny oblasti procesního managementu, údržby, logistiky, kybernetické bezpečnosti a oblast vzdělávání zaměstnanců i struktura pracovních pozic. Implementace prvků je ztížena nejistotou návratnosti investic, nedostatečným zázemím IT i nedostatkem kapitálu, proto proces transformace probíhá pozvolna a pouze v dílčích podnikových procesech.

*Tato práce a výzkum vznikl za podpory grantu Research in Selected Areas of Environmental Engineering and Modern Value Management Procedures – Student Grant Competition UPa.*

#### LITERATURA

1. Mařík V., v knize: *Průmysl 4.0: výzva pro Českou republiku*, kap. 2, s. 26. Praha: Management Press 2002.

### 3P-02 ORGANIZAČNÍ ZAJIŠTĚNÍ ŘÍZENÍ VÝVOJOVÝCH PROJEKTŮ V CHEMICKÉM PODNIKU

**JANA KOŠŤÁLOVÁ, ONDŘEJ TÁBORSKÝ**

Univerzita Pardubice, FCHT, KEMCH, Studentská 95, 532 10  
Pardubice  
jana.kostalova@upce.cz

Dnes spolu se zrychlujícím se tempem technologického vývoje nabývá na důležitosti schopnost řídit vývojové aktivity a následně zavádět výstupy vývoje do praxe. Problematika řízení vývojových projektů je samostatnou oblastí projektového řízení, která je již řadu let předmětem výzkumu a vytváření metodik, které by zohlednily specifčnost tohoto typu projektů.

V teorii projektového řízení se odlišný přístup k vývojovým projektům vztahuje k roku 2000, ke vzniku agilního řízení. Následně se promítl do standardů projektového řízení (IPMA, PMI, PRINCE2). Vedle specifických postupů vhodných pro řízení vývojových projektů jsou navrhována i organizační opatření, která zlepšují podmínky v prostředí, ve kterém jsou vývojové projekty realizovány<sup>1</sup>. V neposlední řadě je řízení vývojových projektů velmi úzce provázáno se strategickým přístupem k řízení organizací. Zavádění strategie se zpravidla transformuje do skupiny programů a projektů, sdružených do portfolia. Tedy řízení vývojových projektů je ovlivněno na nejvyšší úrovni postupy řízení portfolia projektů, jejichž úkolem je naplnit stanovenou strategii<sup>2</sup>.

Výzkum zaměřený na analýzu postupů v praxi a návrh doporučení pro řízení vývojových projektů byl uskutečněn v roce 2020 v podniku chemického průmyslu se zaměřením na stavební chemii. Na základě analýzy situace v oblasti řízení výzkumných projektů v konkrétním podniku byl zpracován návrh doporučených opatření k zlepšení postupů v této oblasti. V rámci analýzy byla potvrzena nutnost zaměřit se na organizační opatření: aktivní podporu vzniku námětů, jejich vyhodnocování z technického, ekonomického a organizačního hlediska, vytváření aktivního portfolia vývojových projektů, jeho průběžný monitoring a konečné vyhodnocení, např. i s pomocí sw nástrojů, standardizace postupů v rámci vývojových projektů pomocí vnitřní metodiky vycházející ze standardů projektového řízení, využívání postupů agilního projektového řízení, vzdělávání pracovníků zapojených do projektů a vytvoření projektové kancelář.

*Tato práce a výzkum vznikl za podpory grantu Research in Selected Areas of Environmental Engineering and Modern Value Management Procedures – Student Grant Competition UPa.*

#### LITERATURA

1. Křivánek M.: *Dynamické vedení a řízení projektů: systémovým myšlením k úspěšným projektům*. Grada, Praha 2019.
2. Dvořák D., Mareček M.: *Project Portfolio Management*. Computer Press, Brno 2017.

**3P-03****IDEÁLNÍ CHLÉB Z POHLEDU ČESKÝCH  
A NĚMECKÝCH SPOTŘEBITELŮ****OLGA KUTNOHORSKÁ**

*Ústav ekonomiky a managementu, Vysoká škola chemicko-  
technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6  
kutnohoo@vscht.cz*

Chléb je odnepaměti důležitou součástí lidského jídelníčku, v různých částech světa můžeme ochutnat nespočet jeho variant. Ty se svým složením, tvarem i formou přípravy liší podle preferencí dané kultury, neboť každý člověk je predisponován k určitému spotřebnímu chování<sup>1</sup>. Predispozice se postupně utvářejí v průběhu lidského života, obecně je lze kategorizovat do několika homogenních skupin<sup>2,3</sup>. Hlubší poznání charakteristik spotřebního chování spojeného s vybraným produktem umožňuje výrobcům lépe reagovat na změny v trendech chování a preferencích spotřebitelů<sup>3,4</sup>.

Prezentovaný výzkum se zaměřuje na identifikaci významných atributů<sup>5</sup>, na základě kterých hodnotí chléb a rozhodují se o koupi čeští a němečtí spotřebitelé. Nejdříve byly vytipované<sup>6</sup> atributy validovány samostatně pro každý trh a následně byla stanovena jejich významnost pomocí kvantitativního výzkumu. Do výzkumu bylo zahrnuto celkem 774 respondentů, z toho 221 z Česka a 553 z Německa.

Výsledky naznačují, že i v oblastech geograficky blízkých a s podobným spotřebním chováním existují určité rozdíly mezi požadavky spotřebitelů na ideální chléb, přičemž tyto rozdíly nesouvisejí výlučně s osobními charakteristikami spotřebitele, ale lze nalézt silné spojení mezi preferencemi spotřebitele a jeho původem.

**LITERATURA**

1. Koudelka J.: *Spotřební chování*. Oeconomia, Praha 2010.
2. Zamazalová M. et al.: *Marketing*. 2. vyd. C. H. Beck, Praha 2010.
3. Kotler P., Keller K. L.: *Marketing Management*. 14. vyd. Grada, Praha 2013.
4. Tahal R. et al.: *Marketingový výzkum*. 1. vyd. Grada, Praha 2017.
5. Kozel R. et al.: *Moderní metody a techniky marketingového výzkumu*. 1. vyd. Grada, Praha 2011.
6. Stávková J. et al.: Factors influencing consumer behaviour when buying food. *Agri. Ec.* 53, 276 (2007).

#### 4L-01 SINGLETOVÉ ŠTĚPENÍ (SINGLET FISSION) A ELEKTROCHEMIE

**JIRÍ LUDVÍK**

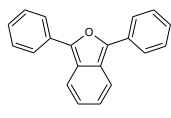
Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AVČR, v.v.i.,  
Odd. Molekulární elektrochemie a katalýzy, Dolejškova 3,  
182 23 Praha 8  
jiri.ludvik@jh-inst.cas.cz

Singletové štěpení (singlet fission – SF) je fotofyzikální proces kdy organický chromofor excitovaný jedním fotonem předá část své energie sousední molekule chromoforu, která je v základním stavu za vzniku dvou tripletů<sup>1,2</sup>. Po separaci náboje by tak z jednoho fotonu vznikly teoreticky dva elektrony, čímž by se zvýšila účinnost solárních baterií. Ačkoli dosud takové solární články ještě nebyly uvedeny do praxe, princip je už známý a syntetický, fotofyzikální, elektrochemický a výpočetní výzkum již probíhá.

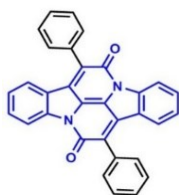
Při singletovém štěpení jde o výměnu elektronů mezi dvěma těsně sousedícími molekulami chromoforu, při které nedochází ke změně spinu – jde tedy o dovolený přechod. Nejdůležitější požadavek limitující značně výběr chromoforu je, aby tento proces byl iso- nebo lépe exoenergetický, tedy aby singletová excitační energie byla alespoň nepatrně větší než dvojnásobek tripletové energie. Typ molekul, které toto kritérium mohou splňovat, jsou tzv. biradikáloidy<sup>3</sup>.

Kromě zmíněných energetických požadavků je velmi důležité uspořádání molekul v krystalové mřížce a jejich redox vlastnosti. Proto molekulární elektrochemie je důležitá při výzkumu těchto chromoforů.

Mezi "slibné" molekuly, které jsou studovány v rámci našeho projektu, patří např. různě substituované 2,5- a 2,6-diketopiperaziny, deriváty 1,3-difenyl-isobenzofuranu (DPIBF, **1**)<sup>4</sup> a látky odvozené od indiga, jejichž základní představitel je pigment zvaný Cibalackrot (**2**)<sup>5</sup>. Elektrochemický výzkum těchto nově syntetizovaných látek probíhá v různých nevodných prostředích na tužkových i pevných elektrodách pomocí standardních technik (polarografie, CV a RDE) v kombinaci s *in situ* UV-Vis a EPR spektroskopii<sup>5</sup>.



**1**



**2**

Práce byla umožněna díky grantu 19-22806S (GAČR) a institucionální podpoře RVO: 61388955.

#### LITERATURA

- Smith M. B., Michl J.: *J. Chem. Rev.* **110**, 6891 (2010).
- Smith M. B., Michl J.: *Annu. Rev. Phys. Chem.* **64**, 361 (2013).
- Paci I., Johnson J. C., Chen X., Rana G., Popoviae D., David D. E., Nozik A. J., Ratner M. A., Michl J.: *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 16546 (2006).
- Akdag A., Wahab A., Beran P., Rulíšek L., Dron P. I.,

- Ludvík J., Michl J.: *J. Organic Chemistry* **80**, 8 (2015).  
5. Kaleta J., Šimková L., Liška A., Bím D., Madrdejos J., Pohl R., Rulíšek L., Michl J., Ludvík J.: *Electrochimica Acta* **321**, 134659 (2019).

#### 4L-02 EFFECT OF HYDROGEN BONDING ON A VALUE OF AN OPEN CIRCUIT POTENTIAL OF POLY-(3,4- ETHYLENEDIOXYTHIOPHENE) AS A BENEFICIAL MODE FOR ENERGY STORAGE DEVICES

**IRYNA IVANKO\***, ELENA TOMŠÍK

*Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences  
of the Czech Republic, Heyrovský Sq. 2, 162 06 Prague 6  
ivanko@imc.cas.cz*

Electronic industry has increased demand for the development of easy-fabricated solid-state energy storage devices based on conducting polymer on flexible platforms such as plastic or C-based substrates<sup>1</sup>. Among electronically conducting polymers, there is a considerable interest in using poly(3,4-ethylenedioxythiophene) (PEDOT) because of its low oxidation potential, high stability in an ambient environment, mechanical flexibility, and stable oxidized form<sup>2</sup>. In order to increase electrical conductivity of conducting polymer, the post-treatment method is used, such as introduction of electron-donor or electron-acceptor impurities (n/p doping) that have an impact on electrical properties and diminished band gap between valent and conducting band. The tuning of electrical properties of conjugated polymer can be provided, for example, by utilization of protic acids to treat polymeric chains that provide the crucial changing of structure and assembling of polymer chains by hydrogen-bonding that cause enhancement electrical conductivity. Recently, it has been examined the ability of the protic acid (formic acid) to form hydrogen-bonds with S atoms of PEDOT and to induce the localized cation-radicals in conjugate system<sup>3</sup>. According to the

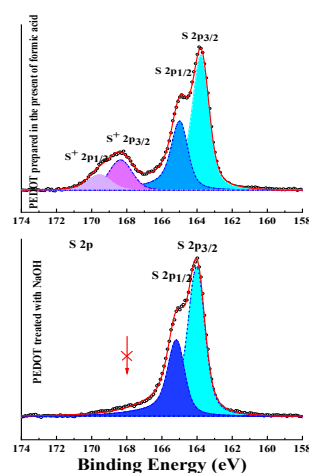


Fig. 1. High-resolution core-level of S 2p XPS spectra of PEDOT in HCOOH and PEDOT treated with NaOH

deconvoluted XPS spectra of PEDOT the film has two doublet peaks as shown in Fig. 1 which correspond to reduced thiophene sulfur and thiophene sulfur that underwent a loss of electron density due to Coulomb and/or hydrogen-bonding interactions and formation of the localized cation-radicals occur<sup>3</sup>.

*This work was supported by the Czech Science Foundation (19-04859S).*

#### REFERENCES

1. Abdelhamid M. E., O'Mullaneb A. P., Snook G. A.: RSC Adv. 5, 11611 (2015).
2. Richardson-Burns S. M., Hendricks J. L., Martin D. C.: J. Neural Eng. 4, L6 (2007).
3. Ivanko I., Svoboda J., Lukešová M., Šeděnková I., Tomšík E.: Macromol. 53, 2464 (2020).

#### 4L-03

##### ELECTROCHEMICAL PERFORMANCE OF PEDOT

**ELENA TOMŠÍK<sup>a,\*</sup>, SVETLANA LAISHEVKINA<sup>a,b</sup>, NATALIA SHEVCHENKO<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Institute of Macromolecular Chemistry CAS, Heyrovského nám. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic, <sup>b</sup> Institute of Macromolecular Compounds, Russian Academy of Sciences, Bolshoy pr., 31, 199004 Saint-Petersburg, Russia  
tomsik@imc.cas.cz

Poly (3,4-ethylenedioxythiophene) (PEDOT) is widely used as a coating on microelectrodes for bio-electronic devices. The PEDOT interface could exhibit good conductivity, stability, and switchable antifouling/antimicrobial properties<sup>1,2</sup>. The external modulation of the redox state of PEDOT films controls the adhesion behavior and viability of cells. Also, PEDOT films can be prepared by various methods that lead to the different interface structure of the films. Furthermore, its electrochemical properties depend

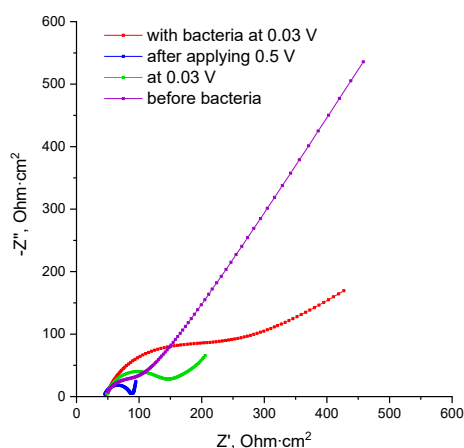


Fig. 1. Electrochemical impedance spectroscopy of PEDOT film at different conditions

on acid, temperature, and other conditions used during EDOT polymerization<sup>3</sup>.

Detecting pathogenic bacteria in food or bodily fluids is a very challenging problem, mainly because the concentration of bacteria can be as low as 10.

In the current work the electrochemical impedance spectroscopy was used to investigate the adhesion ability of *E. coli* to adsorb on the surface of PEDOT film, as presented in Fig. 1. Moreover, by applying the oxidation potential 0.5 V vs Ag/AgCl it was possible to destroy the walls of the attached bacteria.

*This work was supported by Czech health research council (NU20-06-00424).*

#### REFERENCES

1. Cao. B, Lee C.-J., Zeng Z., Cheng F., Xu F., Cong H., Cheng G.: Chem. Sci. 7, 1976 (2016).
2. Dijk G., Rutz A. L., Malliaras G. G.: Adv. Mater. Technol. 5, 1900662 (2020).
3. Ivanko I., Svoboda J., Lukešová M., Šeděnková I., Tomšík E.: Macromol. 53, 2464 (2020).

#### 4L-04

##### IMPROVEMENT OF CORROSION PROPERTIES OF DEGRADABLE IRON-BASED BIOMATERIALS

**RENÁTA ORIŇAKOVÁ, RADKA GOREJOVÁ, ZUZANA ORSÁGOVÁ KRÁLOVÁ, MARTINA PETRÁKOVÁ, ANDREJ ORIŇAK**

Department of Physical Chemistry, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovakia  
renata.orinakova@upjs.sk

The rapid development of technological equipment and healing techniques has led to an improvement in the quality of life and suggested an increase in healthy life expectancy when compared with former historic periods<sup>1</sup>. This progress is accompanied with the evolution of biomaterials. Biomaterials are commonly used as rehabilitation devices, artificial organs, or implants to repair the damaged body tissues or replace them completely, but they can also be employed in drug delivery.

Recent treatment concepts in implant medicine have shifted from permanent to transient implant devices. The degradable or absorbable biomaterials provide the temporary mechanical support during the healing process and degrade naturally in the body after fulfilling their function, thus reducing the need for a second surgery to remove the implant<sup>2,3</sup>. Biodegradable materials are beneficial for specific applications, such as cardiovascular, paediatric, and orthopaedic surgery<sup>4,5</sup>.

In the field of degradable biomaterials, the great effort is devoted to find a balance between tissue remodeling and degradation rate, since the degrading biomaterial should be resorbed without leaving inert residues. Too slow degradation may induce the problems similar to those of permanent implants, while fast and uncontrolled degradation of material can cause the impaired mechanical properties and increased

cytotoxicity<sup>6</sup>.

Iron and iron-based materials exhibit outstanding mechanical properties convenient for higher load-bearing implants<sup>7</sup>. In addition, iron materials do not release hydrogen gas during corrosion in body fluids, but rate of degradation is very slow<sup>8</sup>. Different approaches were developed to improve the corrosion rate of iron-based biomaterials, such as introduction of porosity, modification of the composition, and deposition of coatings. The most promising results have been obtained by deposition of polymeric coatings on the iron foam biomaterials<sup>9</sup>. The iron foams with open cell structure produced by a powder metallurgical replication technique were coated with the polyethylene glycol (PEG) layer (Fig. 1) by the dip coating method. The corrosion rate of the polyethylene glycol-coated samples increased and the corrosion potential shifted to more negative values as compared to uncoated iron materials<sup>9</sup>. Moreover, it was found that the deposition of the PEG layer is a promising approach to improve the biocompatibility and hemocompatibility and adjust the mechanical properties of open-cell iron foams.

The possibility of tailoring the implant to a specific application is a huge advantage of these systems.

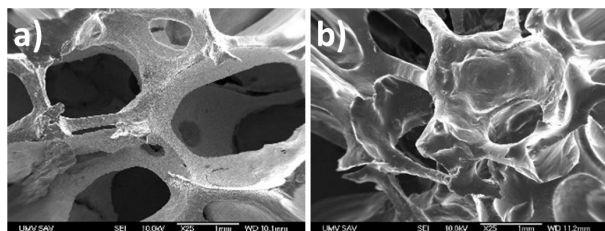


Fig. 1. SEM micrographs of the surface of iron foam without (a) and with PEG coating layer (b)

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency (project APVV-16-0029) and Scientific Grant Agency of the Ministry of Education, Science, Research and Sport of the Slovak Republic (project VEGA 1/0074/17).*

#### REFERENCES

1. Prakasam M., Locs J., Salma-Ancane K., Loca D., Largeteau A., Berzina-Cimdinu L.: *J. Funct. Biomater.* 8, 44 (2017).
2. Hermawan H.: *Prog. Biomater.* 7, 93 (2018).
3. Yusop A. H. M., Daud N. M., Nur H., Kadir M. R. A., Hermawan H.: *Sci. Rep.* 5, 1 (2015).
4. Oriňaková R., Gorejová R., Macko J., Oriňak A., Kupková M., Hrubovčáková M., Ševc J., Smith R. M.: *Appl. Surf. Sci.* 475, 515 (2019).
5. Meagher P., O’Cearbhaill E. D., Byrne J. H., Browne D. J.: *Adv. Mater.* 28, 5755 (2016).
6. Yusop A. H., Bakir A. A., Shaharom N. A., Abdul Kadir M. R., Hermawan H.: *Int. J. Biomater.* 2012, 641430 (2012).
7. Li Y., Jahr H., Lietaert K., Pavanram P., Yilmaz A., Fockaert L. I., Leeftang M. A., Poursan B., Gonzalez-Garcia Y., Weinans H., Mol J. M. C., Zhou J., Zadpoor A. A.: *Acta Biomater.* 77, 380 (2018).
8. Sharma P., Pandey P. M.: *Mater. Sci. Eng. C* 99, 838 (2019).
9. Haverová L., Oriňaková R., Oriňak A., Gorejová R.,

Baláž M., Vanýsek P., Kupková M., Hrubovčáková M., Mudroň P., Radoňák J., Orságová Králová Z., Morovská Turoňová A.: *Metals* 8, 499 (2018).

#### 4L-05 MODIFIKACE ELEKTROD NANOČÁSTICEMI GENEROVANÝMI JISKROVÝMI VÝBOJI

**JAN HRBÁČ**

*Ústav Chemie, PřF, Masarykova Univerzita, Kamenice 5,  
602 00 Brno  
jhrbac@mail.muni.cz*

Modifikace elektrodových povrchů pomocí nanomateriálů je populární téma v současné elektrochemii a elektroanalýze. Časté je využití nanočástic kovových materiálů (Au, Pt, Ag, Bi apod.) případně jednoduchých sloučenin (Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, CuS, NiO apod.) pro konstrukci senzorů s pokročilými vlastnostmi. Využití nanočástic je výhodné díky často unikátním a na velikosti závislejícím elektrickým, mechanickým, optickým, magnetickým a katalytickým vlastnostem, daným zejména velkým specifickým povrchem s vysokým podílem povrchových atomů. Kromě výhodných vlastností může hrát roli i nízká výsledná cena, čehož je často využíváno při konstrukci jednorázově použitelných senzorů. Tento aspekt se týká zejména senzorů využívajících nanočástic drahých kovů (Pt, Au, Pd apod.).

Přes slibné vlastnosti nemusí být inkorporace nanočástic do senzorů jednoduchou záležitostí. Nejčastějšími problémy jsou např. nutnost složitých a nákladných syntéz vlastních nanočástic (často využívajících toxické či k životnímu prostředí škodlivé chemikálie), snížení účinnosti díky blokování povrchu nanočástic stabilizačními činidly apod. Velmi častým problémem bývá i zhoršování vlastností senzorů v čase díky agregačním procesům nebo reakcím při styku nanomateriálu s atmosférou. Uvedené nedostatky částečně řeší námi vyvinutá a propagovaná metoda využívající miniaturní jiskrové výboje mezi elektrodou, která je zdrojem nanočástic a cílovou elektrodou, tj. výsledným senzorem (nejčastěji na bázi uhlíku, např. tiskovou elektroda nebo elektrodou z uhlíkového vlákna). Metoda spočívá v připojení elektrod ke stejnosměrnému zdroji vysokého napětí (cca 1kV) a k přiblížení zdrojové elektrody k cílové na vzdálenost, při které dojde k vytvoření jiskrového výboje (resp. sérii výbojů). Při přeskočení jiskry dochází k průchodu elektronů od elektrody připojené k zápornému pólu zdroje ke kladnému, přičemž elektrony ionizují molekuly okolní atmosféry (např. vzduchu) – dochází k lavinovitému šíření výboje. Kladně nabitě ionty atmosférického dusíku a kyslíku dopadají na povrch záporné elektrody, která se zahřívá a dochází ke vzniku plazmového oblaku, v němž převažuje materiál záporné elektrody. Při ochlazení tohoto oblaku dochází ke vzniku nanočástic, které dopadají na povrch senzoru. Tímto způsobem lze získat velmi efektivní modifikaci povrchu. Metoda je velmi jednoduchá (potřebný je zdroj vysokého napětí a zdrojový materiál), levná a bezodpadová (nevyužívá syntézu, zdrojová elektroda se odpařuje velmi málo), rychlá a automatizovatelná (rozmístění míst zasažených výbojem lze řídit 3D pozicionérem, modifikace tiskové elektrody o aktivním průměru 3 mm

rastrm cca 15x15 bodů trvá cca 1–2 minuty). Senzor je možné s výhodou připravit těsně před použitím. V rámci příspěvku budou prezentovány senzory využívající nanočástice Bi<sup>1,2</sup>, Au<sup>3,4</sup>, Pt<sup>5</sup>, Sn<sup>6</sup>, Cu a Ni<sup>7</sup>, Mo<sup>8</sup>, Fe<sup>9</sup> a uhlíku<sup>10</sup>.

#### LITERATURA

1. Riman D., Jirovsky D., Hrbac J., Prodromidis M. I.: *Electrochim. Commun.* 50, 20 (2015).
2. Riman D., Avgeropoulos A., Hrbac J., Prodromidis M. I.: *Electrochim. Acta* 165, 410 (2015).
3. Trachioti M. G., Karantzalis A. E., Hrbac J., Prodromidis M. I.: *Sensor Actuat. B – Chem.* 281, 273 (2019).
4. Trachioti M. G., Tzianni E. I., Riman D., Jurmanova J., Prodromidis M. I., Hrbac J.: *Electrochim. Acta* 304, 292 (2019).
5. Bartosova Z., Riman D., Halouzka V., Vostalova J., Simanek V., Hrbac J., Jirovsky D.: *Anal. Chim. Acta* 935, 82 (2016).
6. Trachioti M. G., Hrbac J., Prodromidis M. I.: *Sensor Actuat. B – Chem.* 260, 1076 (2018).
7. Riman D., Spyrou K., Karantzalis A. E., Hrbac J., Prodromidis M. I.: *Talanta*, 165, 466 (2017).
8. Kolozof P. A., Florou A. B., Spyrou K., Hrbac J., Prodromidis M. I., *Sensor Actuat. B – Chem.* 304, 127268 (2020).
9. Tseliou F., Pappas P., Spyrou K., Hrbac J., Prodromidis M. I.: *Biosens. Bioelectron.* 132, 136 (2019).
10. Trachioti M. G., Hemzal D., Hrbac J., Prodromidis M. I.: *Sensor Actuat. B – Chem.* 310, 127871 (2020).

#### 4L-06

### ELEKTROCHEMICKÉ STUDIUM REDOXNÍCH VLASTNOSTÍ FOSFOLŮ A JEJICH KONJUGOVANÝCH DERIVÁTŮ

**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  
lucie.kolacna@jh-inst.cas.cz

Fosfoly jsou pětičlenné heterocyklické sloučeniny obsahující dienový systém propojený fosforem. V porovnání s ostatními pětičlennými nenasycenými heterocykly (thiofeny, pyroly, furany) vykazují nejnižší aromaticitu, která je vysoce ovlivněna substituenty, zejména přímo navázanými na fosfor. Reaktivita fosforu umožňuje nastavení požadovaných vlastností molekul pomocí jednoduché chemické modifikace<sup>1,2</sup>. Díky zmíněným vlastnostem nacházejí fosfoly široké uplatnění v materiálové chemii, zejména v oblasti organické elektroniky.

Elektrochemické vlastnosti substituovaných fosfolů byly studovány v bezvodém prostředí acetonitrilu různými metodami na různých elektrodách (polarografie na rtuťové kapající elektrodě, voltametrie na rotující diskové elektrodě ze skelného uhlíku (GC), cyklická voltametrie na visící rtuťové

kapce a na GC).

Námi studované látky – pentasubstituované fosfoly – obsahují v poloze 2 na fosfolu  $\pi$ -konjugované rameno (substituovaný fenylyl). Substituenty posouvají oxidační a redukční potenciály v souladu s jejich indukčním/mesomerním efektem – substituenty s elektrondonorním vlivem snižují oxidační potenciál, substituenty s elektronakceptorním vlivem posouvají redukční potenciál k méně záporným hodnotám, v případě vícenásobné substituce se na výsledném efektu podílejí všechny substituenty. První oxidační a redukční potenciál koreluje s HOMO, resp. LUMO, menší rozdíl jejich energií odpovídá delokalizovanějšímu systému. S tím souvisí také ireverzibilita / kvazireverzibilita redukce dané molekuly. Interpretace redukčních a oxidačních potenciálů a jejich posunů v rámci studované série příbuzných derivátů přispívá k určení vlivu substituce na redoxní chování molekul a umožňuje tak nastavení požadovaných vlastností

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 18-12150 S.*

#### LITERATURA

1. Baumgartner T.: *Accounts of Chemical Research* 47, 1613 (2014).
2. Duffy M. P., Delaunay W., Bouit P. A., Hissler M.: *Chem. Soc. Rev.* 45, 5296 (2016).

#### 4L-07

### ELEKTROCHEMICKÉ STUDIUM ACYLGERMANŮ

**ALAN LIŠKA<sup>a,b</sup>, PHILIPP FRÜHWIRT<sup>b</sup>, MICHAEL HAAS<sup>c</sup>, JIŘÍ LUDVÍK<sup>a</sup>, GEORG GESCHEIDT-DEMNER<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy, Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3/2155, 158 00, Praha, Česká republika, <sup>b</sup> Institute of Physical and Theoretical Chemistry, Technische Universität Graz, Stremayrgasse 9, A-8010 Graz, Rakousko, <sup>c</sup> Institute of Inorganic Chemistry, Technische Universität Graz, Stremayrgasse 9, A-8010 Graz, Rakousko  
alan.liska@jh-inst.cas.cz

Diacylgermany typu Ivocerin<sup>®</sup> se používají v zubním lékařství jako netoxické fotoiniciátory radikálové polymerizace. Příslušné reakční mechanismy jsou známy z literatury<sup>1</sup>.

Ozařování acylgermanů viditelným světlem vede k homolytickému štěpení vazby C-Ge za vzniku radikálů. Absorpční spektra fotoiniciátorů souvisejí s elektronovými (indukčními, mezomerními) efekty substituentů přítomných na aromatických jednotkách<sup>2,3</sup>. Tyto "push-pull" efekty ovšem ovlivňují rovněž redoxní vlastnosti acylgermanů, které mohou být sledovány pomocí elektrochemických metod. Výhodou je přitom skutečnost, že první redukční krok je jednoelektronový a reverzibilní.

V rámci příspěvku budou prezentovány výsledky získané pomocí DC-polarografie a cyklické voltametrie v aprotickém prostředí. Trendy v pozorovaných redoxních potenciálech budou diskutovány s ohledem na strukturní vlastnosti studovaných látek a Hammetovy korelace v rámci



dílčích sérií (a) mono-/di-/tri-/tetraacylgermanů, (b) jedno-/dvoj-/trojjaderných polyacylgermanů a (c) tetraacylsilanů-/germanů/-stannanů<sup>4</sup>.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 19-22806S a NAWI Graz.

#### LITERATURA

- Hirt T., Moszner N., Burtscher P., Vogel K., Todd J.-C., Heintze S., Peschke A.: Report – Aus der Forschung und Entwicklung der Ivoclar Vivadent AG 19, 2 (2013).
- Haas M., Radebner J., Eibel A., Gescheidt G., Stueger H.: Chemistry – A European Journal 24, 8258 (2018).
- Radebner J., Leypold M., Eibel A., Maier J., Schuh L., Torvisco A., Fischer R., Moszner N., Gescheidt G., Stueger H., Haas M.: Organometallics 36, 3624 (2017).
- Frühwirt P., Liška A., Wasdin P. T., Kelterer A.-M., Haas M., Ludvík J., Gescheidt G.: Organometallics 39, 2257 (2020).

#### 4L-08 CYSTEAMINOVÝ TEST

**DAVID NOVÁK<sup>a</sup>, MARTINA ZATLOUKALOVÁ<sup>a</sup>, KRZYSZTOF STOLARCZYK<sup>b</sup>, JIŘÍ VRBA<sup>a</sup>, JAN VACEK<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého, Hněvotinská 3, 775 15 Olomouc, Česká republika, <sup>b</sup> Faculty of Chemistry, University of Warsaw, Ludwika Pasteura 1, 02-093 Warsaw, Poland david.novak@upol.cz

Cysteaminový test slouží pro studium reaktivity širokého spektra bioaktivních sloučenin s primárními aminy nebo thioley. Tyto funkční skupiny jsou také součástí postranních řetězců lyzinu a cysteinu. Posttranslační modifikace těchto aminokyselinových reziduí často modulují funkci a aktivitu proteinů<sup>1</sup>.

Pomocí cysteaminového testu byla porovnána reaktivita cysteaminu s elektrofilními biologicky aktivními přírodními látkami methylglyoxalem, sulforafanem, 4-hydroxynonenalem a kyselinou nitrooleovou (Schéma 1).

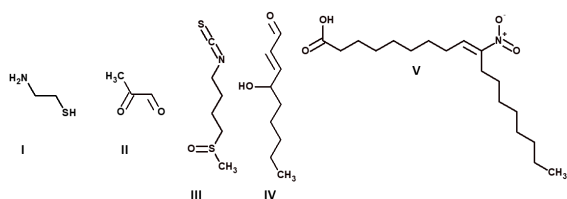


Schéma 1. Chemické struktury cysteaminu (I), methylglyoxalu (II), sulforafanu (III), 4-hydroxynonenalu (IV) a kyseliny nitrooleové (V)

Pro analýzu reakční kinetiky zmíněných molekul byla použita chronopotenciometrická rozpouštěcí analýza na rtuťové kapkové elektrodě a oxidace –SH skupin na elektrodě ze skelného uhlíku. Pro ověření elektrochemických výsledků a identifikaci reakčních produktů byla vyvinuta LC/MS

metoda založená na hydrofobní interakční chromatografii (HILIC).

Tato práce vznikla za podpory grantů GAČR 19-21237Y a IGA\_LF\_2020\_022.

#### LITERATURA

- Svrckova M., Zatloukalová M., Dvorakova P., Coufalova D., Novak D., Hernychova L., Vacek J.: Free Radic. Biol. Med. 108 (2017).

#### 4L-09 Cu(II) AKO SPÍNAČ PRO-OXIDAČNEJ AKTIVITY POLYFENOLOVÝCH ZLÚČENÍN

**MIRIAMA ŠIMUNKOVÁ<sup>a</sup>, KLAUDIA JOMOVÁ<sup>b</sup>, PETER LAURO<sup>b</sup>, MICHAL MALČEK<sup>a</sup>, LUKÁŠ BUČINSKÝ<sup>a</sup>, MARIÁN VALKO<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav fyzikálnej chémie a chemickej fyziky, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko, <sup>b</sup> Kadetra Chémia, Fakulta prírodných vied UKF, Trieda A.Hlinku 1, 949 74 Nitra, Slovensko miriama.simunkova@stuba.sk

Veľká skupina polyfenolov, flavonoidy, sú známe pre svoje dokázateľné antioxidačné účinky *in vitro*, no len málo štúdií popisuje aj ich možný pro-oxidačný charakter. Pochopenie štruktúry a chemických vlastností je kľúčom k objasneniu mechanizmu ich pôsobenia. Keďže po koordinácii s Cu(II) sa zapájajú do redoxného cyklu, v ktorom sa vytvárajú voľné radikály, môžu vykazovať aj pro-oxidačný účinok. V rámci štúdie boli analyzované štruktúrne rozdielne flavonoidy samostatne a v prítomnosti iónu medi Cu(II)<sup>1</sup>.

Zamerali sme sa na určenie spôsobu viazania sa iónov medi na flavonoidy a následný dopad na ich antioxidačné resp. pro-oxidačné správanie. Zistili sme, že pri interakcii medzi flavonoidmi a kovmi dochádza k dvom konkurenčným procesom, ktoré sa podieľajú na výslednej aktivite komplexu. Teoretické štúdium s využitím DFT a QAIM výpočtov uázalo, že najstabilnejšiemu viazaniu medi na flavonoid dochádza, ak je ión Cu(II) koordinovaný 3-OH a 4-keto skupinou. Zmeny v štruktúre boli študované s využitím EPR a UV/Vis spektroskopie. Následná aktivita bola sledovaná metódou EPR s využitím metódy spinových lapačov v simulovanej Fentonovej reakcii:  $\text{Cu}^+ + \text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{Cu}^{2+} + \text{OH}^- + \cdot\text{OH}$ . Výsledky poukazujú na pokles koncentrácie spinových aduktov po pridaní flavonoidu. V rámci UV/Vis spektroskopie bola študovaná radikál-zhášajúca aktivita voči stabilnému radikálu ABTS<sup>•+</sup>, ktorá je závislá od počtu OH-skupín ako aj o planarity molekulového skeletu.

Aplikáciou vychytávačov voľných radikálov v rámci gélovej elektroforézy sa zistila prítomnosť  $\cdot\text{OH}$ ,  $\text{O}_2^{\cdot-}$  a  $^1\text{O}_2$  a ich synergické pôsobenie na DNA. Pozorovali sme odlišnú schopnosť ochrániť DNA pred radikálovým poškodením v závislosti od štruktúry a počtu OH-skupín flavonoidu.

Objasnenie štruktúry a poznatky o pôsobení polyfenolových zlúčenín prinášajú nové možnosti ich využitia ako potenciálne liečivá, ktoré dokážu podporiť vlastný antioxidačný systém organizmu.

*Táto práca vznikla za podpory grantov STU-Mladý výskumník, APPV-19-0087, VEGA – 1/0482/20.*

## LITERATÚRA

1. Neidle S.: J. Med. Chem. 59, 13 (2016).

## LITERATÚRA

1. Jomová K., Lawson M., Droštinová L. et al.: Food Chem. Toxicol. 110, 340 (2017).

**4L-10**

**ROZPOZNANIE ŠTRUKTÚRY DNA POMOCOU  
ELEKTROCHEMICKEJ DETEKČIE JEJ  
INTERAKČIE S G-KVADRUPLEXOVÝM LIGANDOM**

**DANIEL DOBROVODSKÝ<sup>a,b</sup>, ALEŠ DAŇHEL<sup>a</sup>,  
MIROSLAV FOJTA<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> *Biofyzikálny ústav AV ČR, v.v.i, Královopolská 135, 612 65 Brno,* <sup>b</sup> *Prírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kamenice 5, 625 00, Brno*  
daniield@ibp.cz

G-kvadruplexy (G4) sú typ alternatívnych sekundárnych štruktúr DNA vyskytujúcich sa v oblastiach genómu bohatých na guanin. G4 majú úlohu v kľúčových biologických procesoch v bunke a ich stabilizácia interakciou s malými molekulami (ligandami) môže potenciálne pomôcť pri liečbe rakoviny<sup>1</sup>.

V tejto práci boli stanovené základné elektrochemické vlastnosti vybraného G4 ligandu z triedy porfyrínov, meďnatého komplexu meso-5,10,15,20-tetrakis(4-(*N*-metylpyridinium-2-yl)fenyl)-porfyrínu (Cu-TMPyPP) pomocou cyklickej voltametrie (CV) na vsiacej kvapkovej ortuťovej elektróde (HMDE). Rovnakou metódou bola následne monitorovaná interakcia Cu-TMPyPP s oligonukleotidami so schopnosťou tvoriť G4, ako aj jedno- a dvojreťazcovými oligonukleotidami. Dôsledkom interakcie s DNA došlo k výraznému posunutiu redukčného signálu Cu-TMPyPP do negatívnejších potenciálov, umožňujúcemu rozlíšenie voľnej a viazanej formy ligandu. Tento posun však nie je štruktúrne ani sekvenčne špecifický pre jednotlivé oligonukleotidy.

Cu-TMPyPP bol následne použitý ako elektrochemická sonda na charakterizáciu oligonukleotidov adsorbovaných na povrch HMDE. Po aplikácii zvyšujúceho počtu potenciálových cyklov v rozmedzí od 0 V do –1,85 V na adsorbované G4-tvoriace oligonukleotidy a následnej interakcie s Cu-TMPyPP bol pozorovaný postupný posun sledovaného katodického signálu ligandu na potenciál zodpovedajúci ligandu bez prítomnosti DNA. Tento efekt nastáva ako dôsledok desorpcie slabo adsorbovaných G4 štruktúr vplyvom vysoko negatívnych potenciálov pri cyklovaní sprístupňujúcej voľný povrch HMDE pre redukciu Cu-TMPyPP. Toto správanie nie je pozorované pri silnejšie adsorbovaných lineárnych oligonukleotidoch s výnimkou homotýmínového 30-meru, ktorý zrejme vytvára s Hg<sup>II</sup> atómami zbalenú štruktúru s podobnými elektrostatickými vlastnosťami ako G4.

*Táto práca bola podporená projektom SYMBIT reg. č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000477 financovaným Európskym fondom regionálneho rozvoja*

**4P-01**  
**ELEKTROCHEMICKÁ STUDIE DERIVÁTŮ**  
**CIBALACKROTU – POTENCIÁLNÍCH**  
**CHROMOFORŮ PRO SINGLETOVÉ ŠTĚPENÍ**

**LUDMILA ŠIMKOVÁ<sup>a</sup>, KAROL LUŠPAI<sup>a,b</sup>, JIŘÍ KLÍMA<sup>a</sup>, JIŘÍ LUDVÍK<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, CZ-18223 Praha 8, Česká republika, <sup>b</sup> Ústav fyzikálnej chémie a chemickej fyziky, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, SK-81237, Bratislava, Slovenská republika  
 ludmila.simkova@jh-inst.cas.cz

V posledních letech je velká pozornost věnována hledání vhodných chromoforů pro singletové štěpení (Singlet Fission, SF)<sup>1</sup>. Je to proces, při kterém vznikají dvě tripletové excitované molekuly z jedné singletové excitované a jedné v základním stavu<sup>2</sup>. Takto lze z jednoho fotonu excitovat dvě molekuly, což představuje jeden z nadějných směrů pro zvýšení účinnosti solárních článků. K úplnému uvedení do praxe zatím chybí vhodný a trvanlivý materiál. Hlavní dvě nadějně skupiny látek zkoumané pro SF jsou a) velké alternující uhlovodíky a jejich deriváty (např. pentacen a terylen) a b) kaptodativně stabilizované biradikaloidy, na které je náš výzkum zaměřen.

Indigo je příkladem velmi stabilního barviva, které je považováno za hlavní příklad biradikaloidu s vhodnou singletovou a tripletovou excitační energií pro singletové štěpení<sup>2</sup>. Bohužel jako kandidát na SF je vyřazen, protože rychle podléhá fotochemické cis-trans izomeraci dvojně vazby nebo přenosu protonu z dusíku na kyslík. Oproti tomu průmyslově užívané barvivo cibalackrot odvozené od indiga, které také splňuje energetické podmínky pro SF a navíc má obě zmíněné deaktivující cesty blokovány, by mohlo představovat vhodného kandidáta pro SF.

Pro případné použití cibalackrotu, resp. jeho derivátů v solárních článcích je v první řadě nezbytné studium redoxních vlastností v souvislosti s UV-Vis a EPR spektry. V této práci jsme se proto zaměřili na studium oxidace a redukce série derivátů cibalackrotu, které jsou syntetizovány pro případné využití v praktických aplikacích singletového štěpení. K standartním elektrochemickým metodám (dc-polarografie, cyklická voltametrie) jsme přidali *in situ* UV-Vis a EPR spektroechemické metody.

*Autoři děkují Dr. Miroslavu Dudičovi za syntézu studovaných molekul. Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 19-22806S 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).

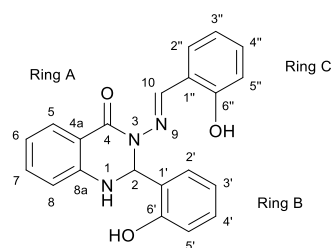
**4P-02**  
**PHOTOCHEMISTRY OF ANTI-SYN ISOMERIZATION**  
**AROUND THE –N–N= BOND**

**MICHAL HRICOVÍNÍ<sup>a,\*</sup>, JAMES ASHER<sup>b</sup>, MILOŠ HRICOVÍNÍ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovak Republic  
<sup>b</sup> Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovak Republic  
 michal.hricovini@savba.sk

The effect of ultraviolet and optical radiation on molecular structures plays an important role in a number of chemical and biological processes<sup>1,2</sup>. The isomerization from the energetically more favourable *anti*-isomer to the *syn*-isomer by UV/vis excitation has been found to occur in many organic molecules, namely in the systems possessing a double bond systems<sup>3,4</sup>.

Here we present analysis of photochemical behaviour of Schiff base possessing a quinazolinone moiety (**S1**; Figure 1)<sup>5</sup>. A series of model compounds have also been studied at the computational level in order to investigate the photochemical behaviour of the –N–N= linkage.



**Fig. 1. The structure of Schiff base (S1) with atom and ring labelling. The compound is depicted in the syn-form**

The NMR experiments in DMSO solution showed that irradiation with UV light (365 nm) leads to photochemically-induced isomerization from the *anti*- to the higher-energy *syn*-form around the –N–N= linkage. The maximum amount of conversion detected (25%) was reached within 10 min; thermodynamic equilibrium re-established itself in about 15 min. DFT calculations were performed on the investigated compound and small model systems, and reproduced the experimental fact of the *anti*-conformer being lower in energy than the *syn*-conformer. Theoretical analysis of excited states, including visualisation of natural transition orbitals, identified possible pathways for *syn-anti* isomerisation through the S<sub>3</sub> excited state with relaxation through S<sub>2</sub> via π–π\* state.

*The authors acknowledge financial support from VEGA grants No. 2/0022/18 and grant APVV-15-0726.*

**LITERATURE**

- Dugave C., Demange L.: Chem. Rev. 103, 1197 (2003).
- Kumpulainen T., Lang B., Rosspeintner A., Vauthey E.: Chem. Rev. 117, 10826 (2017).
- Pepino A., Burgos Paci M., Peláez W., Argüello G.:

Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 12927 (2015).

- Hricovíni M., Hricovíni M.: Tetrahedron 73, 252 (2017).
- Hricovíni M., Asher J., Hricovíni M.: RSC Adv. 10, 5540 (2020).

#### 4P-03

### HMOTNOSTÁ SPEKTROMETRIA SEKUNDÁRNÝCH IÓNOV: OD FORENZNEJ ANALÝZY PO METEORITICKÉ VZORKY

**KARINA KULPOVÁ\***, MONIKA JERIGOVÁ, DUŠAN VELIČ

Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, Slovenská republika

Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04

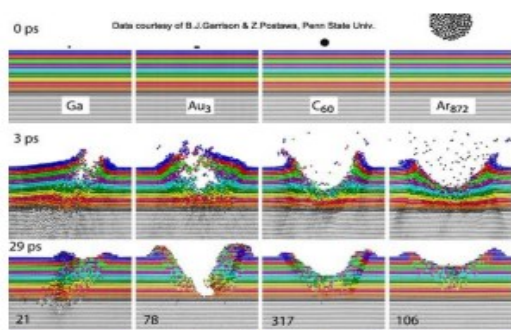
Bratislava

k.kulpova@azet.sk

#### METÓDA

Hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov, v skratke SIMS (Secondary Ion Mass Spectrometry), je spektrálna analytická metóda, ktorá sa využíva na identifikovanie pevných povrchov látok, ktoré môžu byť organického, anorganického a biologického pôvodu.

Analýza spočíva v atomárnom bombardovaní povrchu materiálov primárnymi iónmi, ktoré musia mať energiu vyššiu než je prahová energia v rozsahu 10 eV až 100 eV. Podľa zákona pružných zrážok sa primárny ión zrazí s niektorým z povrchových atómov a predá mu časť svojej kinetickej energie. Vyrazený atóm tým získa hybnosť smerom do vnútra látky, zrazí sa so susednými atómami a poruší ich rovnovážne mriežkové polohy. Jav, ktorý nastane sa nazýva kolízna kaskáda, teda emisia častíc v podobe iónov. Pri odprašovačom procese je väčšina sekundárnych častíc v neutrálnom stave, len malé množstvo sa emituje v podobe iónov. Častice sú emitované z oblasti niekoľkých nanometrov a najviac z jednej alebo dvoch monovrstiev.



Obr. 1. Porovnanie kolíznych kaskád jednotlivých primárnych iónov

#### VZORKY

Pomocou SIMS analýzy vieme skúmať široké spektrum vzoriek. Ako organický polymér sme skúmali lignín ako možnú náhradu za formaldehyd vo fenolformaledehydových živiciach, z anorganickej sféry to boli meteority a vulkanické horniny, cieľom bolo zistiť medzi nimi rozdiely, prípadne nájsť podobnosť a taktiež sa venujeme biologickým vzorkám

a forenznej detekcii nikotínu vo vlasoch fajčiarov a kofeínu v krvnej plazme.

#### VÝSLEDKY

Vo vzorkách lignínu sme dokázali, že zosieťovaný polymér je natoľko podobný živici, že by bolo možné nahradit' ním jednu z hlavných zložiek živice – formaldehyd. Pri meteoritických vzorkách sa porovnával meteorit Košice s vulkanickou horninou zo sopky z Havaja. Hlavným rozdielom medzi nimi je, že v meteoritoch by mala byť vyššia koncentrácia železa a túto skutočnosť sa nám aj podarilo potvrdiť. Tiež sme identifikovali rozdiel v pomeroch izotopov kremíka, ktorého tabelované hodnoty na Zemi sú v pomere 31:2:1 ( $\text{Si}^+$ ,  $^{29}\text{Si}^+$ ,  $^{30}\text{Si}^+$ ). Vo vulkanickej hornine bol tento pomer 32:1:1 a v meteorite Košice 47:10:1. Analýzou vlasu sa podarilo zistiť nielen jeho chemické zloženie, detegovali sa aj zvyšky silikátov z vlasových prostriedkov, no a tiež bol pozorovaný pik pre veľmi malé množstvo nikotínu.

#### ZÁVER

Pomocou hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov je naozaj možné detegovať mnoho rozličných tuhých vzoriek, cez polyméry, horniny až po rôzne biologické materiály. Jej výhodou je vysoké rozlíšenie a minimálna predúprava vzoriek.

Táto práca vznikla za podpory grantu APVV-15-0201, VEGA 1/0400/16 a ESA Contract No. 4000126501/19/NL/SC.

#### LITERATÚRA

- Frank L., Král J., v knihe: *Metody analýzy povrchů – iontové, sondové a speciální metody*, Academia Praha 2002.
- Stupavská M.: *Matricový efekt v SIMS pri charakterizácii makromolekul*. Dizertačná práca, Univerzita Komenského v Bratislave 2011.
- Aranyosiová M.: ChemZi 2, 52 (2006).
- Kulpová K.: *Hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov: porovnanie meteoritu a vulkanitu*. Bakalárska práca Univerzita Komenského v Bratislave 2019.

#### 4P-04

### VYUŽITÍ UHLÍKOVÝCH MIKROTUH JAKO ELEKTROD PRO CITLIVÉ STANOVENÍ VYBRANÝCH ANTIPSYCHOTICKÝCH LÉČIV TECHNIKOU HPLC-ED

DANIEL RIMAN<sup>a</sup>, JAN ROZSYPAL<sup>a</sup>, VLADIMÍR HALOUZKA<sup>b</sup>, JAN HRBÁČ<sup>c</sup>, DAVID JIROVSKÝ<sup>a\*</sup>

<sup>a</sup> Katedra analytické chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, <sup>b</sup> Ústav soudního lékařství a medicinského práva, Fakultní nemocnice Olomouc, Hněvotínská 3, 775 09 Olomouc, <sup>c</sup> Ústav chemie, Prírodovedecká fakulta, Masarykova Univerzita, Kamenice 5, 625 00 Brno  
jan.rozsyपाल@upol.cz

V súčasnosti najběžnejší metódou pro stanovení antipsychotických léčiv je LC-MS-MS<sup>1</sup>.

Kapalinová chromatografie s elektrochemickou detekci

(LC-ED) umožňuje citlivější a selektivnější stanovení antipsychotických léčiv ve srovnání s LC-UV s využitím podstatně levnější instrumentace než v případě LC-MS.

Pro konstrukci elektrochemických detektorů jsou populární materiály na bázi uhlíku. Jedním z netradičních zkoumaných materiálů je grafitová mikrotuha, která má dobré elektrochemické vlastnosti při nízké ceně.

Elektrochemický detektor vlastní konstrukce využívá jako pracovní elektrodu mikrotuhu Pentel AinStein méně obvyklého průměru 0,2 mm (detail konstrukce viz<sup>2</sup>). Detektor se vyznačuje nízkým proudem pozadí, schopností pracovat v prostředí s nízkou iontovou silou a rychlým ustálením základní linie. Vzhledem k popsanému chování a ke způsobu výroby tuhy je možné tvrdit, že se tuha chová jako mikroelektrodové pole<sup>2</sup>.

Analýza směsi devíti vybraných antipsychotických léků byla provedena technikou LC-ED v modelovém séru (telecí sérum). Limity detekce jsou v rozmezí 1 nmol/L (olanzapin) až 7,9 nmol/L (chlorpromazin). Detektor vykazuje lineární chování do koncentrace 500 nmol/L. Metoda byla otestována na vzorku krevní plazmy lidí intoxikovaných olanzapinem, resp. promethazinem. Naměřené hodnoty byly v dobré shodě s kontrolní metodou LC-MS.

*Tato práce vznikla za podpory grantů IGA\_PrF\_2019\_028, MUNI/A/1359/2018 a GA ČR 20-07350S.*

#### LITERATURA

- Queiroz M. E. C., Pinto M. A. L., Cruz J. C., Ushirohira J. M., Dias I. C. D., Hallak J. E. C.: *Bioanalysis 11* (2019).
- Riman D., Prodromidis M. I., Jirovsky D., Hrbac J.: *Sens. Actuators B 296* (2019).

#### 4P-05

#### ELEKTROCHEMICKÉ STUDIUM SUBSTITUOVANÝCH NOSYLAMIDŮ – PREKURZORŮ PRO PŘÍPRAVU NOVÝCH RECEPTORŮ ANIONTŮ

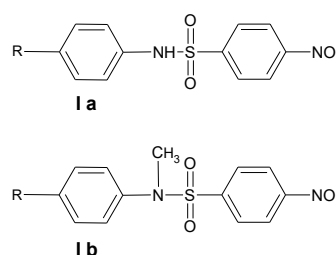
**KAROLÍNA SALVADORI<sup>a,b,c</sup>, LUDMILA  
ŠIMKOVÁ<sup>a</sup>, PAVEL MATĚJKA<sup>b</sup>, PETRA  
CUŘÍNOVÁ<sup>c</sup>, JIŘÍ LUDVÍK<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the CAS, Department of Molecular Electrochemistry and Catalysis, Dolejškova 3, 182 23 Prague 8,* <sup>b</sup> *University of Chemistry and Technology Prague, Department of Physical Chemistry, Technická 5, 160 00 Prague 6,* <sup>c</sup> *Institute of Chemical Process Fundamentals of the CAS, Department of Analytical Chemistry, Rozvojova 2/135, 165 02 Prague 6 - Suchbátka, Czech Republic*  
karolina.salvadori@jh-inst.cas.cz

Sloučeniny obsahující sulfonamidovou skupinu jsou cílem výzkumu mnoha vědeckých týmů již řadu let. Tento strukturální motiv je základem řady léčiv a v současné době je využíván především v přípravcích s diuretickými či antimalarickými účinky<sup>1</sup>. Kromě medicijního využití mají sulfonamidy své místo v organické syntéze, kde se

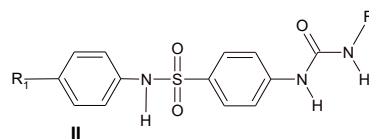
používají jako substráty pro přípravu primárních a sekundárních aminů<sup>2</sup>. Jsou však rovněž známy jako neutrální donory vodíkové vazby v supramolekulární chemii, vhodné k vázání aniontů<sup>3</sup>.

Naším cílem je návrh a příprava nových aniontových receptorů, které využívají hned několika vlastností sulfonamidové skupiny: (i) její schopnost odťahovat elektrony z místa komplexace, umožňující zvýšení efektivity receptoru, a (ii) kyselost vodíku (u prekurzorů **Ia**), který lze substitučně nahradit, a tak například ukotvit finální receptor na případný nosič. Pro účely syntézy receptorů byla připravena řada různě substituovaných sulfonamidických meziproduktů typu **Ia** a **Ib**, jejichž vlastnosti, včetně disociovatelnosti sulfonamidické skupiny (**Ia**), byly zkoumány pomocí spektroskopických technik (UV-Vis a NMR spektroskopie) a pomocí elektrochemie (cyklickou voltametrii a polarografií).



Nitroskupiny přítomné ve strukturách těchto látek jsou zde nejen důležitými substituenty umožňujícími zajistit návaznost v syntéze, ale díky své redukovatelnosti představují tzv. „redoxní sondy“ jejichž redukční potenciál odráží vlastnosti těchto molekul.

Redukce prekurzorů **Ib** v aprotických médiích probíhá čistě na nitroskupině a je z literatury obecně známa: po prvním jednoelektronovém reverzibilním kroku vzniká stabilní radikálový anion, který se při negativnějších potenciálech redukuje třemi elektrony na derivát hydroxylaminu. Pozorované potenciály pak odrážejí vliv substituentu R<sup>4,5</sup>. V případě redukce prekurzorů typu **Ia** se mění celý mechanismus na autoprotonační, kdy po prvním nevratném kroku (teoreticky zahrnujícím 4/5 elektronu) dojde k jednoelektronové reverzibilní redukci disociovaného aniontu následované multielektronovým procesem na hydroxylamin<sup>6</sup>. Takto lze sledovat kyselost sulfonamidického vodíku v závislosti na R a nitroskupinu těchto látek, tak lze považovat za jistou sondu kyselosti pro nevodné prostředí. Na základě těchto dat lze pak porozumět nejen zákonitostem chování těchto stavebních bloků v přítomnosti aniontů, ale zároveň predikovat komplexační chování konečných receptorů obecného vzorce **II**.



*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 18-12150S.*



## LITERATURA

1. Fischer G. M., Bua S., Andrews K. T. et al.: *Int. J. Parasitol. s Drug. Resist.* 7, 61 (2017).
2. Shohji N., Kawaji T., Okamoto S.: *Org. Lett.* 13, 2626 (2011).
3. Bondy Ch. R., Loeb S. J.: *Coord. Chem. Rev.* 240, 77 (2003).
4. Zuman P.: Plenum Press, New York 1967.
5. Exner O., in: N.B. Chapman, J. Shorter (ed.), *Correlation Analysis in Chemistry*, Plenum Press, N.Y., London 1978.
6. Brillas E., Farnia G., Severin M. G., Vianello E.: *Electrochimica Acta* 31, 759 (1986).

## 4P-06

## Cu(II) BINDING IN FLAVONOIDS: A DFT STUDY

MIRIAMA ŠIMUNKOVÁ, MARIÁN VALKO, LUKÁŠ BUČINSKÝ, MICHAL MALČEK\*

*Oddelenie fyzikálnej chémie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia  
michal.malcek@stuba.sk*

Flavonoids are one of the largest groups of polyphenolic compounds present in biological systems. Their antioxidant properties are strongly dependent on their chemical structure (i.e. the number and positions of hydroxyl groups) and on their metal chelating capacity<sup>1,2</sup>.

Interaction between the Cu(II) ion and the set of four flavonoids: myricetin, morin, taxifolin and 3',4'-dihydroxyflavone, is investigated using density functional theory (DFT)<sup>3</sup>. The nature of the formed Cu-flavonoid chemical bonds is inspected under the formalism of Bader's quantum theory of atoms in molecules. A scheme of the systems under study including potential Cu(II) acceptor sites is shown in Figure 1.

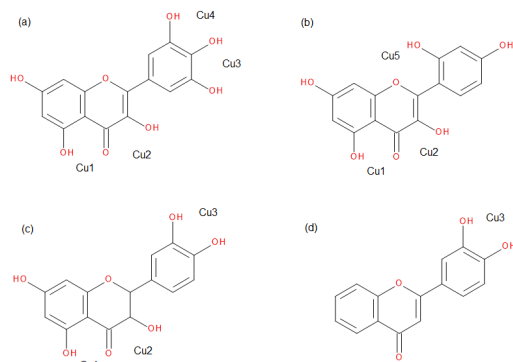


Fig. 1. Scheme of the studied flavonoids with potential Cu(II) acceptor sites

*We are grateful to the Slovak Grant Agencies APVV (contract No. APVV-19-0024 and APVV-19-0087), VEGA (contracts No. 1/0139/20, 1/0482/20 and 1/0466/18) and SIVVP project (ITMS code 26230120002).*

## REFERENCES

1. Jomová K., Hudecová L., Lauro P., Šimunková M., Alwasel S. H., Alhazza I. M., Valko M.: *Molecules* 24, 4335 (2019).
2. Jomová K., Lawson M., Drostinová L., Lauro P., Poprac P., Brezova V., Michalík M., Lukes V., Valko M.: *Food Chem. Toxicol.* 110, 340 (2017)
3. Šimunková M., Valko M., Bučinský L., Malček M.: *J. Mol. Struct.* (2020) under revision.

## 4P-07

## PROTEIN'S ELECTROCHEMICAL OBSERVATION: THE ROLE OF ELECTROACTIVE AMINO ACIDS

EVA MELNÍKOVÁ, MIROSLAV GÁL

*The Slovak University of Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Department of Inorganic Technology Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia  
eva.melnikova@stuba.sk*

Catalytic hydrogen evolution reaction (CHER) is an electrochemical reaction where a fundamental substance (the catalyst) in solution evolves gaseous hydrogen at less negative potential than in the absence of them. This electrochemical reaction can be observed at the cathode at significantly negative potentials on electrodes with considerable hydrogen over-voltage (consists in lowering the hydrogen overpotential of the electrode)<sup>1</sup>. During the last decades, the progress in protein electrochemistry using CHER was made<sup>2</sup>. Studies were performed mostly by constant current chronopotentiometric stripping analysis and examination of the so-called peak H that belongs to CHER<sup>3</sup>. In this work, CHER of selected proteins was studied using various methods, such as constant current chronopotentiometric stripping analysis (CPSA) or alternating current voltammetry. Results point to the appearance of peak H at a less negative potential of proteins containing cysteine residues. On the other hand, proteins not containing Cys residues, yield peak H at a more negative potential. We suppose that the presence of the cysteine residue simplifies the CHER. We also assume that proteins due to their different pK<sub>A</sub> value might differ after their adsorption at a charged interface and can be recognized due to different CPS response. Additionally, we showed that CPS dependences of peak H height and potential on the potential of accumulation differed in contrast to the almost identical area of peak H<sup>4</sup>.

*This research was supported by the Slovak Research and Development Agency under contract No. APVV-17-0149, NO. APVV-17-0183 and by project No. 18-18154S from the Czech Science Foundation.*

## REFERENCES

1. Heyrovský M.: *Perspectives in Bioanalysis* 1, 657 (2005).
2. Paleček E., Dorčák V.: *Applied Materials Today* 9, 434 (2017).
3. Paleček E., Tkáč J., Bartošík M., Bertók T., Ostatná V., Paleček J.: *Chem. Rev.* 115, 2045 (2015).
4. Melníková E., Izadi N., Gál M., Ostatná V.: *Electroanalysis*, in press (2019).

**4P-08**  
**VYUŽITÍ BRDÍČKOVY REAKCE PRO DETEKCI METALOTHIONEINU V MOČI**

VÍT SKOTÁK<sup>a,b</sup>, KAREL SEHNAL<sup>a,b</sup>, DOMINIK BANÁŠ<sup>b</sup>, MARTINA STAŇKOVÁ<sup>b</sup>, BOŽENA HOSNEĎLOVÁ<sup>b</sup>, BRANISLAV RUTTKAY-NEDECKÝ<sup>c</sup>, MARTA KEPINSKÁ<sup>d</sup>, TOMÁŠ PARÁK<sup>a,c</sup>, **RENE KIZEK<sup>a,d,\*</sup>**

<sup>a</sup> Ústav humánní farmakologie a toxikologie, Farmaceutická fakulta, MU, Palackého tř. 1, Brno, ČR, <sup>b</sup> Oddělení výzkumu a vývoje, PM, Studénka, ČR, <sup>c</sup> Ústav molekulární farmacie, Farmaceutická fakulta, MU, Palackého tř. 1, Brno, ČR, <sup>d</sup> Department of Biomedical and Environmental Analyses, WMU, Wrocław, Poland, <sup>e</sup> Oddělení klinických laboratoří, Nemocnice Milosrdných bratří, Polní 3, Brno, ČR kizek@sci.muni.cz

Pro rychlou diagnostiku různých zhoubných nádorů jsou intenzivně hledány nové vhodné markery<sup>1</sup>. Metalothioneiny (MT) jsou biologicky významné molekuly<sup>2–5</sup>. Existuje možnost zvýšení hladiny MT u pacientů se zhoubným nádorem, především v oblasti urogenitálního traktu. Elektrochemické metody jsou pro detekci MT dlouhodobě využívány<sup>6</sup>. O vztahu MT v moči není známo mnoho informací. Cílem této práce bylo elektrochemické studium MT v moči. Kontrolní skupina byla moč zdravých dobrovolníků (n = 10) a primo záchytů CaP (n = 14). Moč byla denaturována při 99 °C po dobu 20 min. Hladina thiolových sloučenin byla testována pomocí Brdíčkovy reakce v moči. Chemická analýza moči kontrolní skupina: kreat.: 9,4 ± 4,2 mmol/l; kys. močová: 1,9 ± 0,8 mmol/l; močovina: 96 ± 49 mmol/l; osm.: 72 ± 54 mmol/l; sarkosin: 0,06 ± 0,01 AU. Pacienti s CaP: kreat.: 9,5 ± 2,7 mmol/l; kys. močová: 2,8 ± 0,8 mmol/l; močovina: 49 ± 9 mmol/l; osm.: 236 ± 160 mmol/l; sarkosin: 0,09 ± 0,01 AUU získaných voltamogramů byla vyhodnocena plocha (AUC) pod křivkou ve 4 zónách (zóna od –0,6 V do –1,0 V, druhá od –1,0 V do –1,3 V, třetí od –1,3 V do –1,6 V a čtvrtá zóna od –1,6 V do –1,95 V). Získané AUC pro jednotlivé zóny ukázaly nejlepší závislost pro zónu 4. Průměrná AUC kontrolní skupiny (n = 28) byla 106,8 ± 11,1, RSD 30,9 %. Průměrná AUC CaP skupiny (n = 63) byla 151,7 ± 48,0, RSD 53,7 %. Průměrný rozdíl mezi kontrolní skupinou a CaP byl na statistické hladině  $P = 0,076$ . Byla provedena pilotní studie, která bude dále rozvíjena.

Tato práce vznikla za podpory grantu Liga proti rakovině Praha 2019, projektem JCOMM a za laskavého přispění společnosti Metrohm Česká republika.

**LITERATURA**

- Schilling K. et al.: Metallomics 12, 752 (2020).
- Klaasen C., Metallothionein iv, Birkhäuser, 2012.
- Brdicka R.: Nature 139, 330 (1937).
- Brdicka R.: Nature 139, 1020 (1937).
- Heyrovsky J.: Nature 142, 317 (1938).
- Olafson R. W., Olsson P. E.: Methods Enzymol. 205, 205 (1991).

**4P-09**  
**OCTAHEDRAL RUTHENIUM-NITROSYL COMPLEXES WITH EQUATORIAL 1H-INDAZOLE LIGANDS: INSIGHTS INTO THE REDOX CHEMISTRY AND NO RELEASE**

EWELINA ORLOWSKA<sup>a</sup>, **MICHAL ZALIBERA<sup>b</sup>**, PETER RAPTA<sup>b</sup>, LUKÁŠ BUČINSKÝ<sup>b</sup>, MICHAL MALČEK<sup>b</sup>, VLADIMIR B. ARION<sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup> Institute of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Vienna, Währinger Strasse 42, A-1090 Vienna, Austria, <sup>b</sup> Slovak University of Technology, Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Radlinského 9, SK-81237 Bratislava, Slovakia michal.zalibera@stuba.sk

Two novel {Ru(NO)}<sup>6</sup> (formally Ru<sup>II</sup>-NO<sup>+</sup>) complexes with four equatorially bound indazole ligands *trans*-[RuCl(Hind)<sub>4</sub>(NO)]Cl<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O ([I]Cl<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O) and *trans*-[RuOH(Hind)<sub>4</sub>(NO)]Cl<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O ([II]Cl<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O) were prepared<sup>1</sup> and their photo-induced NO release was monitored by UV/Vis and EPR spectroscopy, utilizing the specific reaction of NO<sup>+</sup> with cPTIO nitronyl nitroxide (NN<sup>•</sup>). The one-electron reduced {Ru(NO)}<sup>7</sup> (formally Ru<sup>II</sup>-NO<sup>•</sup>) complexes gave X-band EPR spectra that closely resemble signals of the extensively studied porphyrin {Ru(NO)}<sup>7</sup> complexes<sup>2</sup>. Since the Spin Hamiltonian characteristics for these are known, we have been particularly puzzled that couldn't find a unique set of parameters that would satisfactorily reproduce the X- and Q-band spectra of our systems. The multifrequency insight hints on a multicomponent character of these spectra and likely reflect the conformers with differently oriented NO<sup>•</sup> ligand. We suggest that the EPR of well-established {Ru(NO)}<sup>7</sup> systems should be revisited at higher frequencies and might need re-interpretation with potential multiple NO<sup>•</sup> conformations.

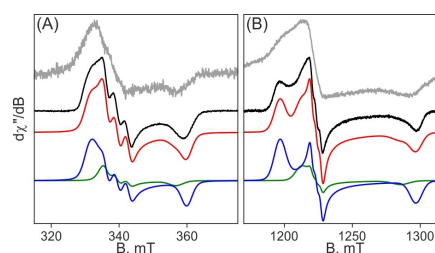


Fig. 1. (A) X-band and (B) Q-band EPR spectra of [I]<sup>+</sup> at 100 K in CH<sub>3</sub>CN (gray) and CH<sub>3</sub>CN/*n*Bu<sub>4</sub>NPF<sub>6</sub> (black). Red lines – calculated composite spectrum, and the two components (blue, green)<sup>1</sup>.

We acknowledge the financial support of the Slovak Research and Development Agency (APVV-15-0053), Slovak Scientific Grant Agency VEGA (1/0416/17, 1/0466/18).

**REFERENCES**

- Orlowska E. et al.: Inorg. Chem. 57, 10702 (2018).
- Singh P. et al.: Inorg. Chem. 47, 7106 (2008).



## 4P-10

**REDOX NONINNOCENT BEHAVIOR OF NICKEL(II), COPPER(II) AND PALLADIUM(II) COMPLEXES WITH BIS-SEMICARBAZIDE HEXAAZAMACROCYCLES****DENISA DARVASIOVÁ<sup>a</sup>, PETER RAPTA<sup>a</sup>, MARTIN BREZA<sup>a</sup>, ANATOLIE DOBROV<sup>b</sup>, VLADIMIR B. ARION<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, SK-81237 Bratislava, Slovak Republic, <sup>b</sup> Institute of Inorganic Chemistry, University of Vienna, Währinger Strasse 42, A-1090 Vienna, Austria  
denisa.darvasiova@stuba.sk

Base-metal complexes with ligand-centered radicals are of interest in multielectron catalysis inspired by metalloenzyme systems. The rational design of efficient catalysts of important chemical reactions requires an understanding of the structure and spectroscopic properties. A series of six nickel(II), copper(II) and palladium(II) complexes with hexaazamacrocycles  $H_2L^H$  and  $H_2L^{OMe}$  (Fig. 1) were synthesized and characterized by analytical, spectroscopic techniques, as well as by spectroelectrochemistry<sup>1</sup>.

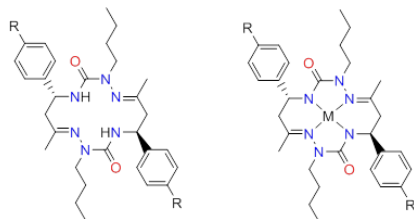


Fig. 1. Proligands and complexes reported in this work. R = H or OMe; M = Ni, Cu or Pd

The complexes contain low-spin nickel(II) and palladium(II), as well as copper(II) with  $S = 1/2$  in square-planar coordination environment. EPR spectroelectrochemical experiments with nickel(II) complexes, as well as DFT calculations indicate the strong noninnocent character of the ligand. Compounds were tested in the oxidation of styrene and C–C coupling (Henry and Knoevenagel condensation)<sup>1</sup>.

This work was supported by the Science and Technology Assistance Agency under the contracts no. APVV-15-0053, APVV-19-0024, and DS-FR-19-0035, by the Slovak Grant Agency VEGA under contracts no. 1/0504/20 and 1/0466/18.

## REFERENCE

1. Dobrov A. et al.: Inorganic chemistry (accepted manuscript).

## 4P-11

**VPLYV DYNAMIKY MOLEKÚL NA EPR SPEKTRÁ, ALEBO PREČO SA SIMULÁCIE EPR SPEKTIER NIEKEDY NEZHODUJÚ S EXPERIMENTOM****KAROL LUŠPAI<sup>a,b\*</sup>, JIŘÍ KLÍMA<sup>a</sup>, LUDMILA ŠIMKOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, Dolejškova 2155/3, 182 23 Praha 8, Česká republika, <sup>b</sup> Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko  
karol.luspai@jh-inst.cas.cz

Elektrónová paramagnetická rezonancia je dlhoročne používaná metóda na kvalitatívne ako aj kvantitatívne štúdium paramagnetických zlúčenín. Interakcia nespáreného elektrónu s okolitým magnetickým poľom je popísaná tzv. g-tenzorom, zatiaľ čo hyperjemná štruktúra spektra je popísaná tenzorom hyperjemnej interakcie a poskytuje informácie o jadrách v okolí nespáreného elektrónu. Šírka čiary je určená relaxačnými procesmi. Poznáme dva základné typy relaxačných procesov, ktoré spôsobujú rozšírenie čiar, v závislosti od pozície EPR čiar: a) efekty rozšírenia čiar spôsobené anizotropiou g-tenzora a tenzorov hyperjemnej interakcie s ohľadom na celkovú molekulovú pohyblivosť v danom prostredí, b) efekty na úrovni zmeny izotrópnej hyperjemnej interakcie určitých jadier v čase. V tomto prípade je zmena hyperjemnej interakcie v čase spôsobená intramolekulovými pohybmi, spravidla intramolekulovými konformačnými zmenami v molekule (napr. rotáciou). Ak je rýchlosť týchto intramolekulových pohybov v optimálnom rozsahu, príspevok rozšírenia čiar v jeho dôsledku môže dominovať celému spektru. Dôsledok možno pozorovať v EPR spektre ako alternujúcu šírku čiar (nie všetky čiar majú rovnakú šírku), ako aj teplotne závislé konštantny hyperjemnej interakcie niektorých jadier. Pokiaľ však rýchlosť týchto pohybov nieje úplne optimálna, spektrum sa môže javiť zdanlivo ako izotrópne, avšak až pri simulácii sa ukáže že simulácia miestami lepšie a horšie „sedí“ na experimentálne spektrum, pričom kvalita fitu má tak isto alternujúci charakter pozdĺž spektra. Vtedy treba do simulačného modelu zahrnúť aj intramolekulovú dynamiku.

Práca vznikla za podpory grantovej agentúry projekt GAČR 19-22806S a inštitucionálneho grantu RVO 61388955.

## LITERATÚRA

1. Van den Hoek W. J., v knihe: *Electron spin resonance studies on dynamic processes in some phenoxy radicals*, kap. 1, s. 7. Drukkerij J.H. Pasmans, S-Gravenhage, S-Gravenhage 1972.
2. Šimková L., Dmitrieva E., Klíma J., Dunsch L., Ludvík J.: *Solid State Electrochem.* 19, 103 (2015).
3. Šimková L., Klíma J., Lušpai K., Malček M., Rockenbauer A.: *J. Mag. Resonance*, v recenznom konaní.

**5L-01**  
**STOLETÍ HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE –**  
**OD IZOTOPŮ K PROTEOMICE****5L-02**  
*Účast zrušena***PAVEL ZACHAŘ\*, DAVID SÝKORA**

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

Hmotnostní spektrometrie, jedna z nejvýznamnějších analytických metod současnosti, má své počátky v prvních desetiletích 20. století. Kořeny hmotnostní spektrometrie však sahají hlouběji, do druhé poloviny 19. století, kdy byly studovány elektrické výboje ve zředěných plynech a přitom byly objeveny tzv. anodové/kanálové paprsky (Eugen Goldstein 1886). Experimenty německých fyziků (Goldstein, Wilhelm Wien, Emil Wiechert) prokázaly, že se jedná o proud kladně nabitých částic. Dráha těchto částic se zakřivuje v elektrických a magnetických polích a zakřivení dráhy se liší v závislosti na plynu použitém ve výbojové trubici. To vedlo ke konstrukci prvního zařízení na dělení těchto částic – kationtů použitých plynů (Wienův filtr 1899).

Z těchto základů vyšly konstrukce prvních přístrojů:

Joseph John Thomson 1910 – parabolový spektrograf,

Arthur Jeffrey Dempster 1918 – hmotový spektrometr,

Francis William Aston 1919 – hmotový spektrograf

Pomocí těchto přístrojů – jako jedinou dostupnou metodou – byla prokázána existence přirozených izotopů u většiny známých prvků, což přispělo k vysvětlení několika nesrovnalostí v Mendělejevově periodické tabulce prvků, kde podle "atomových vah" by prvkům příslušelo jiné umístění, než podle jejich chemických vlastností (Te – I, Co – Ni, Ar – K). Přesné stanovení "atomových vah" vedlo právě před sto lety (1920) k vysvětlení sluneční (vesmírné) energie jako důsledku jaderné fúze atomů vodíku na atom helia a přeměny hmotnostního rozdílu těchto částic na energii.

Studium principů fragmentace molekul při použití elektronové ionizace umožnilo identifikaci velkého počtu – zejména organických – látek. Úspěšné spojení hmotnostní spektrometrie se separačními technikami (GC, LC) rozšířilo možnosti o analýzu složitých směsí a identifikaci jejich jednotlivých složek.

Každá nová konstrukce iontového zdroje nebo analyzátoru vždy znamenala uplatnění hmotnostní spektrometrie v dalších oblastech. Dnes jsou běžné analýzy složitých přírodních extraktů, stopových kontaminantů v potravinách, lécích a složkách životního prostředí. V současnosti se uplatňují nové přístroje v kosmických výzkumech, forenzní analýze, proteomice a mnoha dalších oblastech.

Také českoslovenští vědci mají od padesátých let dvacátého století svůj podíl na rozvoji hmotnostní spektrometrie a přesně před padesáti lety našla hmotnostní spektrometrie svoje místo i na Vysoké škole chemicko-technologické v Praze, kde byl zprovozněn první GCMS přístroj v Československu.

**5L-03****JAN (JOHANN) BÖHM – CHEMIK A FOTOGRAF****IVANA LORENCOVÁ**

*Národní technické muzeum, 170 78 Praha 7*

*Ivana.lorencova@ntm.cz*

Jan (Johann) Böhm (21. ledna 1895 České Budějovice – 27. listopadu 1952 Praha) byl fyzikální chemik, zabýval se výzkumem struktury krystalů rentgenovými paprsky a přispěl k rozvoji československé krystalografie. Studoval na Německé vysoké škole technické (Deutsche Technische Hochschule, Prag) a na Německé universitě v Praze (Deutsche Karls-Universität, Prag). Od roku 1922 byl doktorem přírodních věd. Jeho prvním zaměstnavatelem byl od roku 1921 prestižní Ústav císaře Viléma pro fyzikální chemii a elektrochemii (Kaiser-Wilhelm-Institut für Physikalische Chemie und Elektrochemie) v Berlíně, který řídil chemik Fritz Haber (1868–1934) a Böhm se stal jedním z jeho čtyř asistentů. Zabýval se určováním struktury hydroxidů železa a hliníku. Je po něm pojmenován minerál böhmit. Böhm výrazně přispěl ke konstrukci přístroje, využívaného ve strukturní rentgenografii – dodnes známého jako Weissenberg-Böhmův rentgenový goniometr. V červnu 1926 byl na základě svého výzkumu poslán Fritzem Haberem do laboratoře chemika Nielse Bohra (1885–1962) do Ústavu teoretické fyziky (Institut for Teoretisk Fysik) do Kodaně, kde v té době působil radiochemik George de Hevesy (1885–1966). Společně proměřovali rentgenová spektra některých prvků. Po Fritz Haberovi to byl Hevesy, kdo ovlivnil Böhmovu životní cestu. Byli si nablízku po více než osm let; zpočátku v Kodani, ale především na Univerzitě Alberta Ludvíka (Albert-Ludwigs-Universität) ve Freiburgu im Breisgau, kde se Böhm zasloužil o vybudování nového moderního ústavu fyzikální chemie. Böhm a Hevesy spolupracovali od roku 1926 do roku 1933, kdy se změnila politická situace v Německu a jejich cesty se nuceně rozdělily. Hevesy s rodinou emigroval do Kodaně a později do Švédska. Jan Böhm ve Freiburgu zůstal a v roce 1934 byl jmenován profesorem fyzikální chemie. Böhm byl odpůrcem nacismu, pro své demokratické názory se stal pro řadu kolegů a studentů nadšených Hitlerovou politikou nepřijatelný. Nacistická ideologie v tehdejším Německu tak i jeho donutila k návratu do Československa.

O dalším Böhmově osudu rozhodl dopis, který George de Hevesy poslal v roce 1934 do Prahy profesorovi Jaroslavu Heyrovskému (1890–1967). Ten pomohl Böhmovi získat místo profesora na Německé universitě v Praze. Od roku 1935 byl Jan Böhm mimořádným profesorem fyzikální chemie a ředitelem Ústavu pro fyzikální chemii na Univerzitě Karlově v Praze. Přednášel fyzikální a anorganickou chemii a fotochemii. Uvedl do provozuschopného stavu univerzitní fotografickou laboratoř. Působil i jako ředitel fotografického ústavu na pražské německé technice. Na školách ale neměl pro své demokratické a protifašistické názory lehkou pozici mezi kolegy ani mezi studenty. Po Mnichovské dohodě v roce 1938 se situace ještě zhoršila. Böhm po uzavření vysokých škol umožnil Jaroslavu Heyrovskému vědecky dále pracovat po celou dobu války. Heyrovský mohl Böhmovi na konci války v roce 1945 přátelskou službu oplatit, neboť se zasloužil o to, aby nebyl s rodinou odsunut a byl vyjmut

z transportu do Německa.

Po skončení války v květnu 1945 byla situace pro Böhma jako příslušníka německé národnosti složitá. Nemohl najít odpovídající uplatnění, které by odpovídalo jeho schopnostem. Od roku 1946 pracoval jako chemik ve Spolku pro chemickou a hutní výrobu v Pardubicích-Rybitví ve Výzkumném ústavu organických syntéz, kde zůstal až do svého onemocnění v roce 1951. Válka i poválečné období mu přineslo nejen osobní, ale i profesní zklamání a deziluzi.

Jana Böhma od mládí přitahovala nejen chemie a fyzika, ale také fotografování. V archivech se dochovaly fotografie již z roku 1912, zprvu byly spojené s chemickými pokusy a zachycením některých fyzikálních a astronomických jevů. Fotografoval také během vojenské služby, to už fotografie zachycují i krajinu a portréty. V průběhu dvacátých a třicátých let 20. století měl možnost hodně cestovat, především v Německu a Švýcarsku, své cesty dokumentoval, pořizoval nejen fotografie krajiny – především hor, protože byl nadšený lyžař a skialpinista – ale i rodiny a přátel. Mezi jeho záliby patřilo také výtvarné umění. Za války pořizoval snímky Prahy, především barokních památek.

Během svého života zažil dvě světové války, které ovlivnily jeho život a zažil mnoho fatálních osobních i profesních změn, jeho osud byl několikrát výrazně změněn a ovlivněn lidmi kolem něj. Tři z přátel, kteří mu nejvíce pomohli, když byl v nouzi, najdeme v seznamu laureátů Nobelovy ceny za chemii: Fritz Haber, George de Hevesy a Jaroslav Heyrovský. 17. listopadu 1952 zahájila svou činnost Československá akademie věd, v témže měsíci se Jan Böhm stal členem korespondentem, ale 27. listopadu 1952 předčasně zemřel.

**5L-04****PŘÍBĚH SULFONAMIDŮ – ZACHRÁNCŮ ŽIVOTŮ: OD INFEKČÍ PŘES DIABETES PO HYPERTENZI****MARTIN KRÁTKÝ**

*Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Univerzita Karlova, Akademia Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové  
martin.kratky@faf.cuni.cz*

Sulfonamidy jsou ze syntetického pohledu poměrně snadno dostupnými sloučeninami. Byla již připravena pestrá škála těchto biologicky aktivních molekul, z nichž se mnohé uplatnily jako léčiva celé řady chorob, zejména bakteriálních a parazitických infekcí<sup>1</sup>, civilizačních chorob či bolesti a zánětu.

Sulfonamidy doslova psaly historii antimikrobní chemoterapie, když byly prvními skutečně účinnými léčivými bakteriálních infekcí. Jejich objev se spojen se jmény chemiků Josefa Klarera a Fritze Mietzsche a především lékaře Gerharda Domagka, pozdějšího nositele Nobelovy ceny za fyziologii a lékařství (1939). Domagk v r. 1932 popsal, že sulfonamidové barvivo Prontosil je schopné *in vivo* vyléčit streptokokovou infekci. O tři roky později bylo uvedeno na trh a byla jím zachráněna i dcera G. Domagka<sup>2</sup>. Ještě v témž roce bylo ale zjištěno, že Prontosil je prolečivo, které se v organismu metabolizuje na vlastní bakteriostaticky účinný sulfanilamid<sup>1</sup>.

Tento objev vyvolal boom ve výzkumu 4-aminobenzen-sulfonamidů. Byly připraveny a do praxe zavedeny stovky derivátů se širokým spektrem aktivity; ukázaly se být účinné i proti infekcím způsobeným prvoky, např. malárií<sup>1</sup>. Nicméně vývoj rezistence a objev antibiotik s výhodnějšími vlastnostmi, zejména penicilinů, vedl k jejich ústupu. Jistého návratu na výsluní se dočkaly po uvedení synergicky působící kombinace s trimethoprimem na trh (Biseptol, 70. léta), která pomohla překonat problémy s rezistencí a používá se dodnes<sup>1</sup>.

Další léčebné využití sulfonamidů vyšlo z vedlejších účinků antimikrobních sulfonamidů. Některé molekuly zvyšovaly vylučování moči – a staly se základem úspěšných diuretik a antihypertenziv (thiazidy, např. hydrochlorothiazid). Jiné snižovaly hladinu cukru v krvi – a od nich jsou odvozená stále užívaná antidiabetika na bázi sulfonylmočoviny. Další sulfonamidy se používají k léčbě glaukomu, některých typů epilepsie, zánětlivých onemocnění či tvoří základ populárních přípravků pro léčbu bolesti.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 20-19638Y a EFSA-CDN (reg. č.: CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000841) spolufinancovaného z EFRR.*

#### LITERATURA

- Hartl J., Doležal M., Miletín M., Opletalová V., Zimčík P.: *Farmaceutická chemie IV*, 168 s. Karolinum, Praha 2012.
- <https://www.sciencehistory.org/historical-profile/gerhard-domagk>, staženo 24. 6. 2020.

#### 5L-05

#### DOPLŇKOVÉ PEDAGOGICKÉ STUDIUM PRO UČITELE CHEMIE – SOUČASNOST A BUDOUCNOST

**HANA ČTRNÁCTOVÁ, VÁCLAV MARTÍNEK, EVA STRATILOVÁ URVÁLKOVÁ, PETR ŠMEJKAL, MILADA TEPLÁ, PAVEL TEPLÝ**

*Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Albertov 6, 128 43 Praha 2  
hana.ctrnactovat@natur.cuni.cz*

Budoucí učitelé chemie na základních a středních školách jsou v České republice tradičně připravováni na pedagogických a přírodovědeckých fakultách vysokých škol<sup>1</sup>. V současnosti na 12 fakultách devíti univerzit v České republice úspěšně ukončuje studium učitelství chemie 60–120 absolventů ročně. Je však známou skutečností, že zdaleka ne všichni nastoupí po skončení studia pedagogickou dráhu. Na druhou stranu je řada absolventů oboru chemie na přírodovědeckých nebo technických fakultách vysokých škol, kteří po určité době praxe v chemickém výzkumu nebo průmyslu uvažují o působení ve školství. Právě pro tyto zájemce existuje již řadu let doplňující pedagogické studium chemie (DPS chemie). Toto studium je realizováno vždy na základě akreditace MŠMT<sup>2</sup> na fakultách VŠ připravujících učitele chemie v prezenčním studiu, pokud o tuto akreditaci požádají.

Přírodovědecká fakulta UK má s tímto typem studia dlouhodobé zkušenosti. Studium je realizováno jako čtyřsemestrální s tím, že první semestr studia probíhá společná výuka všech účastníků daného ročníku DPS na PřF UK

v oblasti pedagogiky, psychologie a obecné didaktiky v rozsahu 64 hodin prezenční výuky. Další tři semestry studia jsou věnovány didaktice chemie se zaměřením na učivo chemie ZŠ a SŠ a proces výuku tohoto předmětu<sup>3</sup>. Celkový počet hodin prezenční výuky představuje 176 hodin a dále 40 hodin pedagogické praxe na zvolené základní a následně střední škole. Celkový počet hodin prezenční výuky je tedy 280. Studium je ukončeno státní závěrečnou zkouškou a obhajobou závěrečné práce, na jejíž zpracování je počítáno s dalšími 60 hodinami, převážně distanční výuky. Absolventi obdrží osvědčení o absolvování DPS chemie a vzhledem k tomu, že již absolvovali vysokoškolské studium chemie, stávají se tímto kvalifikovanými učiteli chemie. Každoročně získává na naší fakultě toto osvědčení 5–10 absolventů oboru chemie nebo oboru příbuzného chemii.

Vzhledem k nedostatku učitelů, jak jej prezentují statistiky MŠMT, přistoupilo toto ministerstvo v r. 2018 k tvorbě nového standardu studia v oblasti pedagogických věd, tzv. doplňujícího pedagogického studia k získání kvalifikace učitele pro 2. st. ZŠ a SŠ<sup>4</sup>, který vešel v platnost na jaře r. 2020. Minimální počet hodin tohoto studia je 250 hodin a z toho 70 hodin je věnováno pedagogicko-psychologickému základu, což poměrně dobře koresponduje s rozsahem současného DPS chemie na PřF UK – celkem 280 hodin výuky a z toho 64 hodin pedagogiky, psychologie a obecné didaktiky. Struktura rozdělení dalších 180 hodin je ovšem diametrálně odlišná – pouze 80 hodin je určeno pro oborovou didaktiku a 100 hodin pro reflektovanou pedagogickou praxi. Další zásadní rozdíl je pak v tom, že v tomto případě se jedná o hodiny kombinované výuky. Pro prezenční výuku standard předepisuje jako minimum pouze 80 hodin, tedy v uvedeném poměru to je 37 hodin pedagogicko-psychologického základu, tj. 58 % původní výuky, a 43 hodin oborové didaktiky, tj. 24 % původní výuky. Standard tedy v zásadě předpokládá, že je třeba, aby si absolventi studia osvojili především základy pedagogiky a psychologie, zatímco odborný obsah učiva chemie a proces jeho výuky si osvojí v průběhu pedagogické praxe. Přitom okruhy studia, které by měl absolvent v rámci DPS zvládnout, odpovídají svou úrovní vysoce kvalifikovanému učiteli chemie s mnohaletou praxí. Navíc pro získání kvalifikace učitele tohoto předmětu není zcela nutné absolvování oboru chemie na VŠ, vyžaduje se pětileté odborné vysokoškolské vzdělání, jak uvádí novela zákona 563/2004 Sb., vydaná v r. 2019<sup>1</sup>. Vzhledem k tomu, že se zároveň umožňuje udělení akreditace pro DPS i jiným institucím než jsou vysoké školy připravující učitele<sup>2</sup>, nejeví se deklarované cíle standardu přispět ke zkvalitnění studia učitelství jako adekvátní.

*Tento příspěvek vznikl v rámci projektu PROGRES Q17 Univerzity Karlovy: Příprava učitele a učitelská profese v kontextu vědy a výzkumu.*

#### LITERATURA

- Zákon č. 563/2004 Sb. o pedagogických pracovnících ve znění pozdějších předpisů. MŠMT (2019).
- Akreditace v systému dalšího vzdělávání pedagogických pracovníků. MŠMT (2019).
- Čtrnáctová H. a kol.: *Doplňující pedagogické studium – chemie – učitelství pro SŠ a ZŠ*. PřF UK (2018).
- Standard studia v oblasti pedagogických věd k získání kvalifikace učitele pro 2. st. ZŠ a SŠ. MŠMT (2020).

**5L-06****KRITÉRIA A POŽADAVKY NA BEZPEČNÉ A DIDAKTICKY OVĚŘENÉ POSTUPY PRO PROVÁDĚNÍ CHEMICKÝCH POKUSŮ VE ŠKOLÁCH A PŘI MIMOŠKOLNÍ ČINNOSTI****PETR A. SKŘEHOT, JAKUB MAREK, VERONIKA PTÁČKOVÁ, MARTIN BÍLEK, PAVEL BENEŠ, MARTIN RUSEK, KATEŘINA CHROUSTOVÁ, ZDENĚK HON, MICHAELA MELICHAROVÁ**

*Znalecký ústav bezpečnosti a ochrany zdraví, z.ú., Raichlova 2659/2, 155 00 Praha 5, Pedagogická fakulta Univerzity Karlovy, Magdalény Rettigové 4, 116 39 Praha 1, Fakulta biomedicínského inženýrství ČVUT v Praze, nám. Sítná 3105, 272 01 Kladno 2  
skrehot@zuboz.cz*

Pro předcházení nehodám při nakládání s nebezpečnými chem. látkami stanoví legislativa řadu povinností. Základním předpisem je zákoník práce, který stanoví obecnou povinnost zaměstnavatele vytvářet bezpečné a zdraví neohrožující pracovní prostředí a pracovní podmínky vhodnou organizací BOZP a přijímáním opatření k předcházení rizikům. Tuto povinnost má zaměstnavatel nejen vůči svým zaměstnancům, ale i všem osobám, které se s jeho vědomím vyskytují na jeho pracovištích (v případě škol se jedná o žáky). Další povinnosti pak můžeme najít v zák. č. 258/2000 Sb., zák. č. 309/2006 Sb., nař. vlády č. 361/2007 Sb., vyhl. č. 180/2015 Sb., v evropském Nařízení CLP a též v technických normách. Pro chemiky je klíčovou normou ČSN 01 8003, která se m.j. věnuje také zabezpečení praktické výuky chemie ve školách. Hlavní zásadou je provádět veškeré školní experimenty pouze podle bezpečných a didakticky ověřených prac. postupů. Tato povinnost reaguje na skutečnost, že se v praxi poměrně hojně rozšířilo používání neprověřených a často velmi rizikových návodů dostupných na internetu. Požadavky na bezpečné a didakticky ověřené prac. postupy ale nejsou v normě blíže vymezeny, a proto jsme se v rámci řešení projektu BEDOX pokusili tento nedostatek vyřešit následujícím výkladem: *Za bezpečný postup lze považovat takový způsob nakládání s chem. látkami, při jehož dodržení není důvodné předpokládat vznik nežádoucích účinků na život a zdraví osob, které by mohly být možnými důsledky prováděných činností bezprostředně ohroženy. Za didakticky ověřený postup pak lze považovat takovou činnost, která umožňuje osobě provádějící chemický pokus nebo osobě přihlížející získat anebo prohloubit požadované znalosti, příp. zkušenosti, a to s cílem vycházejícím z tématu, k němuž se daný experiment vztahuje.* V dalším kroku budeme usilovat o včlenění těchto definic přímo do textu uvedené normy.

*Tento příspěvek vznikl v rámci projektu TL02000226 Evaluace postupů pro bezpečnou praktickou výuku chemie ve školách.*

**5L-07****EXPERIMENTÁLNÍ ČINNOSTI A JEJICH BEZPEČNOST VE VŠEOBECNÉM CHEMICKÉM VZDĚLÁVÁNÍ POHLEDEM UČITELŮ****MARTIN BÍLEK<sup>a</sup>, KATEŘINA CHROUSTOVÁ<sup>a</sup>, MARTIN RUSEK<sup>a</sup>, PETR SKŘEHOT<sup>b</sup>, ZDENĚK HON<sup>c</sup>, MICHAELA MELICHAROVÁ<sup>c</sup>**

<sup>a</sup> *Pedagogická fakulta UK, M. Rettigové 4, 116 39 Praha 1,*  
<sup>b</sup> *Znalecký ústav bezpečnosti a ochrany zdraví, z.ú., Ostrovského 253/3, 150 00 Praha 5, <sup>c</sup> Fakulta biomedicínského inženýrství ČVUT, nám. Sítná 3105, 272 01 Kladno 2  
martin.bilek@pedf.cuni.cz*

Cílem projektu BEDOX (Evaluace postupů pro bezpečnou praktickou výuku chemie ve školách), který se ve spolupráci týmů Fakulty biomedicínského inženýrství ČVUT, Znaleckého ústavu bezpečnosti a ochrany zdraví a Pedagogické fakulty Univerzity Karlovy zaměřuje na bezpečnou laboratorní praxi ve všeobecném chemickém vzdělávání, je analýza současného stavu pedagogické praxe v dané oblasti a příprava elektronické databáze videozáznamů prezentujících výběr bezpečných chemických experimentů využitelných v podmínkách základních škol a gymnázií.

K získání aktuálních informací o současném stavu školních experimentálních činností a jejich bezpečnostních souvislostí byly zjišťovány názory a zkušenosti učitelů chemie na bezpečnost práce v souvislosti s experimentálními činnostmi z jejich praxe. Anonymní dotazník tvořily tři části, a to charakteristika respondenta, školní experimentální činnosti a bezpečná laboratorní praxe. Na základě kalkulace minimálního počtu respondentů byly získány odpovědi od 354 učitelů chemie z českých základních škol a gymnázií. Pro možnost zobecnění získaných výsledků bylo přistoupeno navíc k volbě tzv. stratifikovaného vzorku respondentů, tedy jejich minimálního poměrného zastoupení ze všech krajů České republiky. Kvalifikovaný odhad poměrného zastoupení učitelů chemie v jednotlivých krajích vycházel z údajů o počtu učitelů chemie na druhém stupni ZŠ podle ročenky MŠMT a odhadu počtu učitelů chemie na gymnáziích. Z analýzy dat získaných z popisné části dotazníku plyne, že zařazování experimentálních činností stále není příliš frekventovaným obsahem všeobecného chemického vzdělávání. Méně než 40 % učitelů zařazuje demonstrační pokus „aspoň jednou týdně“, více než 60 % „aspoň jednou za měsíc“. Žakovské experimenty jsou součástí výuky „aspoň jednou týdně“ jen u méně než 15 % a „aspoň jednou měsíčně“ u méně než 40 % respondentů. To jsou čísla velmi malá, a alarmující je i skutečnost, že jedním z vážných důvodů respondenti uvádějí souvislosti s dodržováním bezpečnosti práce.

*Tento příspěvek vznikl v rámci řešení projektu TAČR TL02000226 Evaluace postupů pro bezpečnou praktickou výuku chemie ve školách.*

**5L-08**  
**DALŠÍ VZDĚLÁVÁNÍ PEDAGOGICKÝCH**  
**PRACOVNÍKŮ NA PŘF UK JAKO NÁSTROJ**  
**ZVÝŠOVÁNÍ KVALITY UČITELŮ CHEMIE**

**PETR ŠMEJKAL, MILADA TEPLÁ, LUDĚK MÍKA,**  
**HANA ČTRNÁCTOVÁ**

*Katedra učitelství a didaktiky chemie, Přírodovědecká  
 fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2  
 psmejkal@natur.cuni.cz*

Kvalitní učitel je základním předpokladem kvalitního vzdělávání na všech jeho úrovních. S maximální péčí a s ohledem na vysokou kvalitu se přirozeně snaží budoucí pedagogy připravovat fakulty vysokých škol připravující učitele. Nicméně, ani po ukončení svého vysokoškolského studia nemohou učitelé ustrnout v bodě znalostí a dovedností nabytých při studiu na vysoké škole. Vzhledem k tomu, že svět se neustále bouřlivě mění a nové objevy v oborech učitelství a nové didaktické či technické trendy jsou téměř na denním pořádku, musí se každý učitel dále sebezvzdělávat tak, aby jeho výuka odrážela současný stav vědění, aby byla moderní, stále motivující a zajímavá, s využitím moderních metod, forem i prostředků výuky. Jednou z řady příležitostí pro vlastní sebezvzdělávání jsou kurzy zaměřené na další vzdělávání pedagogických pracovníků (DVPP). Význam a potřebu dalšího vzdělávání pedagogických pracovníků si uvědomuje i zákonodárce, který v Zákoně č. 563/2004 o pedagogických pracovnících zřetelně ukládá nutnost realizace DVPP a vymezuje jeho formy<sup>1</sup>, přičemž o kvalitu tohoto vzdělávání se stará prostřednictvím akreditací příslušných kurzů či akcí a aktivit DVPP<sup>2</sup>. Katedra učitelství a didaktiky chemie Přírodovědecké fakulty Univerzity Karlovy aktivně participuje v realizaci kurzů dalšího vzdělávání pedagogických pracovníků již řadu let a její pracovníci získali v organizaci a vedení kurzů řadu zkušeností, na jejichž sdílení je zaměřen tento příspěvek. Dále je příspěvek zaměřen na sdílení obsahu a koncepce těchto kurzů DVPP. Cíli realizace kurzů DVPP naší katedrou je seznámení jejich účastníků s 1) moderními poznatky na poli vědy a techniky, 2) moderními didaktickými trendy a 3) moderními technickými prostředky využitelnými pro názornou a atraktivní výuku. S ohledem na první cíl tak kurzy zaměřujeme např. na problematiku nanotechnologií, moderní organické syntézy, instrumentální analýzu a techniky analýzy látek apod. S ohledem na moderní didaktické trendy se v rámci kurzů DVPP zaměřujeme zejména na badatelsky orientovanou výuku, projektovou výuku a obecně na podporu motivace žáků ve výuce chemie. S tím souvisí i snaha o smysluplnou implementaci moderních technických a výukových prostředků a využití ICT, mj. také např. stereoskopického zobrazení, virtuální reality či stále populárnějšího 3D tisku. Většina kurzů je, ve snaze maximálně podpořit vlastní aktivitu učitelů a získání potřebných dovedností, zaměřena prakticky či experimentálně a praktická část tak tvoří většinu časové dotace kurzů. I teoreticky laděné kurzy jsou doplněny řadou, minimálně demonstračních, experimentů. Například kurz zaměřený na bezpečnost práce v chemické laboratoři a úpravu nakládání s chemickými látkami ve škole obsahuje teoretické části zaměřené na současnou zákonnou úpravu, uchovávání

chemikálií a na práci s MSDS listy, ale také zahrnuje praktickou část zaměřenou na zvládnutí poskytnutí první pomoci při úrazu v laboratoři, na pochopení účinků některých chemikálií a směsí či na likvidaci chemikálií a směsí nebo na zvládnutí ovládnutí hasicího přístroje. I DVPP kurzy zaměřené na přípravu pomůcek prostřednictvím 3D tisku jsou zaměřeny převážně prakticky. Účastníci se nejprve dozví o principech a metodách 3D tisku, přičemž následně navrhnu a vymodelují prototyp vybrané výukové pomůcky a vytisknou jej pomocí vhodné technologie, čímž získají nezbytné zkušenosti pro své vlastní pokusy s 3D tiskem. Samotná podpora učitelů v dalším vzdělávání nicméně nekončí předání certifikátu o absolvování kurzu DVPP. Materiály využitě v rámci kurzů jsou dále distribuovány prostřednictvím vhodných webových portálů. Např. 3D modely jsou zveřejněny na portálu [www.thingiverse.com](http://www.thingiverse.com)<sup>3</sup>, výukové pomůcky zase na portálu [www.studiumchemie.cz](http://www.studiumchemie.cz), např. 3D modely molekul optimalizované pro vhodné zobrazovací programy<sup>4</sup>. Materiály z kurzů jsou dále distribuovány e-mailem či prostřednictvím cloudových úložišť. Dále probíhá čilá komunikace mezi pracovníky katedry a učiteli s ohledem na problémy, které mohou nastat při aplikaci metod, poznatků či dovedností v rámci kurzů získaných. Kurzy DVPP jako takové jsou vesměs hodnoceny velmi pozitivně. Účastníci dobře hodnotí zejména praktické využití a dobrou aplikovatelnost nabytých poznatků ve své práci ve škole a také podporu poskytovanou lektory kurzu.

*Tato práce vznikla za podpory projektů Progres Q17 a Progres Q46.*

#### LITERATURA

1. Zákon č. 563/2004 Sb., o pedagogických pracovnících, dostupné z <https://www.msmt.cz/dokumenty/aktualizovani-zakona-o-pedagogickych-pracovnicich-k-1-zari?highlightWords=z%25C>.
2. *Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy*, 2020 [online]. Akreditace v systému DVPP [cit. 30.6.2020]. Dostupné z: <https://www.msmt.cz/vzdelavani/dalsi-vzdelavani/akreditace-v-systemu-dvpp>
3. *MakerBot Industries, LLC*, 2020 [online]. MakerBot Thingiverse [cit. 30.6.2020]. Dostupné z: <https://www.thingiverse.com/search?q=Lumec&type=things&sort=relevant>
4. *Katedra učitelství a didaktiky chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova*, 2020, [online]. 3D modely molekul [cit. 30.6.2020]. Dostupné z: <https://studiumchemie.cz/molekula/>

## 5L-09

**HISTORY OF CHEMISTRY AS PART OF THE PRE-SERVICE TEACHER EDUCATION CURRICULUM**VESNA MILANOVIĆ<sup>a</sup>, **MARTIN BÍLEK**<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia, <sup>b</sup> Faculty of Education, Charles University, M. Rettigové 4, 116 39 Prague 1, Czech Republic  
martin.bilek@pedf.cuni.cz

The inclusion of the topics from history of chemistry in pre-service chemistry teachers education could enable future teachers to see the evolution of chemistry through centuries, the historical steps in the formation of chemical knowledge, progression of ideas, rejection of initial theories based of new evidences, and the difficulties the scientists faced in their work and life. Throughout learning these historical contents pre-service chemistry teachers could improve their understanding the nature of science. Additionally, they could identify the potential of history of chemistry as a context for learning the nature of science in their future teaching practice.

Based on these in the literature described benefits, an elective course entitled Chemistry as part of society through centuries has been introduced in the education of future teachers at Faculty of Education Charles University in Prague.

Twelve topics were elaborated in the framework of this course. Among them, ten topics were dedicated to historical development of chemistry, one topic was related to history of chemistry education, while the last topic served for summarization and making implications for the future. The course was organized in English language and realized through lectures and use of various teaching materials. Apart completing different tasks during teaching, students' final activity included searching literature and writing essays.

From the students' portfolios that contain all their works in the framework of the course, it is evident that students made a progress in the knowledge of history of chemistry contents, as well as in understanding the nature of science. The students expressed positive attitudes towards the new course.

*The work is supported by the program PROGRES Q17, part 5 "Teachers Education and Teacher's Profession in Science and Research Context" at Faculty of Education Charles University.*

## REFERENCES

1. Milanović V. D., Bilek M.: *Chemistry as Part of Society Through Centuries – The First Experience from Teachers' Education*. In *DidSci+2020 – Book of Abstracts*. Krakow, UP, 2020.
2. Milanovic V. D., Trivic D. D.: *Sci. & Educ.* 29, 43 (2020).

## 5L-10

**PŘÍPRAVA STUDIJNÍHO KURZU „UDRŽITELNÁ CHEMIE“ PRO STUDENTY FAKULTY CHEMICKO-TECHNOLOGICKÉ, UNIVERZITY PARDUBICE****BARBORA KAMENICKÁ, TOMÁŠ WEIDLICH**

Univerzita Pardubice, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 95, 532 10 Pardubice 532 10  
barbora.kamenicka@student.upce.cz

Rozvoj a povědomí o udržitelné chemii jsou možné pouze za předpokladu, že nastupující generace bude znát principy, metody a techniky udržitelné chemie a technologie<sup>1</sup>. Právě za tímto účelem byl připraven studijní kurz zaměřený na zmíněné téma „Udržitelná chemie“ pro studenty Fakulty chemicko-technologické, Univerzity Pardubice. Hlavním cílem projektu je rozšíření teoretických, popřípadě praktických znalostí a povědomí studentů o problematice tzv. udržitelné chemie. Tento kurz má studenty seznámit s pojmy udržitelná (zelená) chemie, s jejím vznikem a převážně pak s dvanácti principy udržitelné chemie. Výuka se zaměřuje na důležité oblasti zelené chemie jako je organická syntéza, katalýza, možnosti odstraňování kontaminantů ze znečištěných vod a průběžnou analýzu odpadních vod<sup>1</sup>.

Kurz je doplněn o videonahrávky s demonstračními experimenty, které jsou taktéž orientované na principy udržitelné chemie. Jednotlivé demonstrační experimenty na sebe navazují a řeší problematiku syntézy Fluoresceinu<sup>2</sup> a dále pak *in situ* bromaci Fluoresceinu bez využití toxického bromu za vzniku Eosinu Y<sup>3</sup>. Během tohoto procesu výroby dochází ke kontaminaci vod bromovanými deriváty (k nárůstu parametru AOX). Na syntézu Eosinu Y proto navazuje inovativní debromace znečištěných vod pomocí Devardovy slitiny. Na závěr je studentům představena možnost aplikace kyvetových testů Hach Lange pro rychlou a jednoduchou analýzu znečištěných vod.

Tento kurz nejen přiblíží problematiku výuky vysokoškolských studentů v oblasti udržitelné chemie a ochrany životního prostředí, ale také zajistí kvalitu vzdělání studentů prostřednictvím zajímavých a inovativních seminářů s demonstračními experimenty. Tento příspěvek prezentuje přípravu popsaného semináře a jednotlivé na sebe navazující demonstrační experimenty a možnost využití celého kurzu v praxi jako inovaci výuky udržitelné chemie.

*Tato práce vznikla za podpory Interní rozvojové soutěže Univerzity Pardubice IRS 2020\_032.*

## LITERATURA

1. Anastas P. T., Kirchoff M. M.: *Acc. Chem. Res.* 35, 686 (2002).
2. Pay A. L., Kovash C., Logue B. A.: *J. Chem. Educ.* 94, 1580 (2017).
3. Groweiss A.: *Org. Process Res. Dev.* 4, 30 (2000).



### 5L-11 MODERNIZÁCIA VÝUČBY TEÓRIE CHEMICKEJ VÁZBY V KURZE ANORGANICKEJ CHÉMIE NA FCHPT STU V BRATISLAVE

**JÁN PAVLIK, JOZEF ŠVOREC, PETER SEGĽA**

*Oddelenie anorganickej chémie, Fakulta chemickej  
a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita,  
Radlinského 9, 81237 Bratislava, Slovensko  
jan.pavlik@stuba.sk*

Meniaca sa organizácia štúdia na FCHPT STU v Bratislave podnietila v uplynulých rokoch vznik novej učebnice všeobecnej a anorganickej chémie koncipovanej ako ťažiskový učebný text pre predmety Anorganická chémia I a Anorganická chémia II. Rýchlo rastúci objem poznatkov v oblasti chemickej fyziky a čoraz vyššia dostupnosť užívateľsky prijateľnej kvantovej chémie motivovali autorov prehodnotiť pri jej písaní výklad niektorých vžitých pojmov súvisiacich s chemickou väzbou a jej matematickým opisom. V súvislosti s dodržaním filozofie, podľa ktorej by každý nosný pojem mal byť slovné zadefinovaný, narazili autori tiež na absenciu mnohých takýchto definícií a boli preto nútení ponúknuť vlastné, ideálne vo forme zrozumiteľnej pre poslucháčov úvodného semestra bakalárskeho štúdia. Niektoré z týchto nových pohľadov a usporiadanie výuky teórie chemickej väzby sú náplňou tohto príspevku

*Práca vznikla s podporou projektu KEGA 017STU-4-2017  
a KEGA 018STU-4-2020.*

#### LITERATÚRA

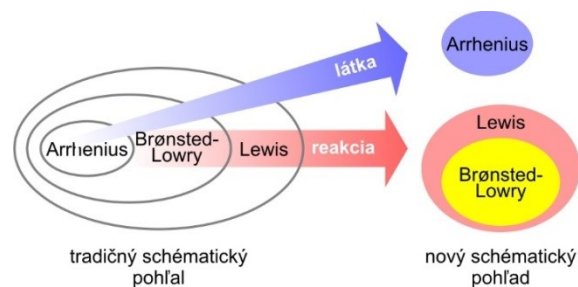
1. Segľa P., Potočňák I., Jorík V., Pavlik J., Švorec J., Tatarko M.: *Anorganická chémia – Základy anorganickej chémie*. Slovenská chemická knižnica v Bratislave 2019.

### 5L-12 PROJEKTY SKVALITNENIA VÝUČBY ANORGANICKEJ CHÉMIE NA VYSOKÝCH ŠKOLÁCH: KYSELINY A ZÁSADY

**PETER SEGĽA, JÁN PAVLIK, MIROSLAV TATARKO**

*Ústav anorganickej chémie technológie a materiálov,  
Oddelenie anorganickej chémie, Fakulta chemickej  
a potravinárskej technológie 812 37 Bratislava, Slovensko  
peter.segla@stuba.sk*

Výsledkom projektov KEGA je vznik kvalitných farebných vysokoškolských učebníc anorganickej chémie. Kyseliny a zásady patria k najbežnejším chemickým látkam a reakcie medzi nimi k najrozšírenejším chemickým reakciám. Preto je pochopiteľné, že sa chemici snažili formulovať vedecky podložené teórie kyselín a zásad. Mnoho štúdií naznačuje, že študenti majú ťažkosti s učením sa rôznych konceptov kyselín a zásad. Každá z uvedených teórií má svoje obmedzenia a každá je užitočná pre určité typy látok a reakcií.



Vo všeobecnosti však môžeme konštatovať, že definície kyselín a zásad sa stávajú všeobecnejšími a menej obmedzujúcimi, ak prechádzame od Arrheniovej k Brønstedovej a nakoniec k Lewisovej teórii kyselín a zásad. V súvislosti s acidobázickými reakciami sa bežne zamieňajú pojmy *teória* a *definícia*. Striktne vzaté, z uvedených teórií je teóriou len Arrheniova. V prípade Brønstedovej a Lewisovej teórie ide skôr o definície.

*Práca vznikla s podporou projektu KEGA 017STU-4-2017  
a KEGA 018STU-4-2020.*

#### LITERATÚRA

1. Segľa P., Jorík V., Švorec J., Tatarko M.: *Anorganická chémia – Základy anorganickej chémie*. Slovenská chemická knižnica v Bratislave 2019.

### 5L-13 POJÍZDNÁ LABORATOŔ

**PATRIK PAŘÍK**

*Ústav organickej chémie a technológie, Fakulta chemicko-  
technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10  
Pardubice  
Patrik.Parik@upce.cz*

Fakulta chemicko-technologická Univerzity Pardubice již více než deset let systematicky a s velkým důrazem uskutečňuje mnoho popularizačních a prezentačních aktivit, ať již individuálně nebo společně s dalšími fakultami v rámci celé Univerzity Pardubice. Akce jsou určeny rozmanitým věkovým i zájmovým skupinám cílových zájemců od dětí mateřských škol přes školáky základních a středních škol až po širokou veřejnost. Fakulta nedisponuje zázemím pro uskutečňování takových akcí, tedy speciálně vybavenou laboratoří nebo polytechnickou dílnou, naprostá většina akcí se koná v areálech cizích institucí nebo na veřejných prostranstvích. Propagátoři a demonstrátoři tedy obvykle jezdí za svými návštěvníky.

Pro provádění různých popularizačních ukázek a experimentů chemické povahy mimo domovské pracoviště je nezbytné na místo určení přepravit všechny potřebný materiál. Jsou to laboratorní pomůcky, přístroje, nádoby a samozřejmě také chemikálie, vyprodukované odpady nevylučuje. Volba demonstračních vychází nejenom z očekávané cílové skupiny návštěvníků, typu a doby trvání akce, nýbrž také z lokalizace akce a způsobu organizace celé události, tzn. budou-li pokusy prováděny demonstračně a jednorázově nebo

naopak opakovaně „zážitkovým“ způsobem. Tomu všemu je nutno uzpůsobit kromě typu i množství potřebného a tedy přepravovaného materiálu.

Aktér takových „road show“ vybírá a zvažuje vybavení podobně jako cestovatel plánující vícedenní putování nebo dovolenkář chystající se kempovat. Musí disponovat pomůckami často protichůdných vlastností, jako jsou odolnost, spolehlivost, nízká váha a rozměry, kompaktnost, rozumná cena. Rovněž celá sada všech pomůcek pro všechny naplánované demonstrace by měla mít kompaktní rozměry a únosnou hmotnost. V neposlední řadě by měla být převážena v dostatečně odolných a bezpečných obalech pro minimalizaci všech možných rizik. V příspěvku budou prezentovány zkušenosti načerpané v problematice „výletů s chemií“, různé způsoby provedení rozmanitých chemických demonstrací mimo domácí pracoviště a budou představena vhodná materiálová řešení k jejich uskutečňování.

#### LITERATURA

1. Pařík P.: *ChemZi 11*, 96 (2015).
2. Pařík P.: *Czech. Chem. Soc. Symp. Ser. 14*, 212 (2016).

### 5P-01 PROBLEMATIKA PORÉZNÍCH LÁTEK JAKO NADSTAVBOVÝ MATERIÁL PRO VZDĚLÁVÁNÍ NA STŘEDNÍCH ŠKOLÁCH

MARTIN HAROK, DANA KRIČFALUŠI, TOMÁŠ  
ZELENKA

Katedra chemie, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03  
Ostrava  
martin.harok@centrum.cz

Diskuse nad cílem a obsahem vzdělávání v České republice probíhají v posledních letech vlastně neustále. Nové strategie vzdělávání zdůrazňují nutnost osvojení si klíčových kompetencí, jejich provázanost se vzdělávacím obsahem a uplatnění získaných vědomostí a dovedností v praktickém životě. Z tohoto aspektu vychází i připravovaný metodický materiál uplatnitelný ve vzdělávání na středních školách, který je tematicky zaměřený na oblast porézních látek. Aplikace porézních materiálů je v praxi nesmírně široká, proto je jistě žádoucí případným zájemcům poskytnout vhodné metodické prostředky pro vzdělávání v této oblasti. Připravovaný metodický materiál vychází z analýzy pokrytí tématu porézních látek v rámci vzdělávání na středních odborných školách, případně gymnáziích. V rámci zohlednění tohoto faktoru byly analyzovány kurikulární dokumenty, jež se váží k jednotlivým typům daného vzdělávání<sup>1,2</sup>. Práce rovněž zahrnuje základní poznatky o porézních látkách<sup>3</sup>, jejich charakterizaci a možnosti vyhodnocení datových údajů z nich plynoucích<sup>4</sup>.

Cílem práce je mj. „vizualizovat“ a uspořádat vztahy mezi pojmy tematického celku například za použití myšlenkových map, neb díky nim můžeme snáze pochopit strukturu dané problematiky. Na schématu 1 je prezentována struktura a stěžejní témata pro řešenou problematiku.

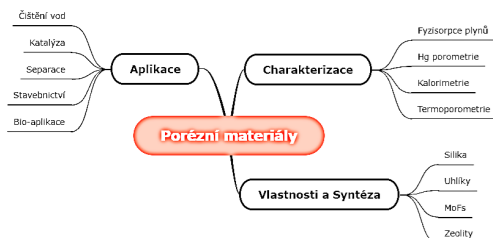


Schéma 1.

Tato práce vznikla za podpory projektu SGS08/PřF/2020.

#### LITERATURA

1. RVP pro gymnázia
2. RVP pro střední odborné vzdělání
3. Taraba B.: *Struktura pevných látek*. Ostravská Univerzita 2008.
4. Lowell S., Shields J. E., Thomas M. A., Thommes M.: *Characterization of Porous Solids and Powders: Surface Area, Pore Size and Density*. Springer, Netherlands 2004.

### 5P-02 JAK ROZVÍJET U ŽÁKŮ BADATELSKÉ DOVEDNOSTI?

MARTIN HAROK, KATEŘINA TRČKOVÁ,  
KAROLÍNA FARMAČKOVÁ, MICHAELA  
DOSTALÍKOVÁ

Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, 30. dubna 22,  
701 03 Ostrava  
martin.harok@centrum.cz, katerina.trckova@osu.cz,  
farmackovakarolina@gmail.com, P19014@student.osu.cz

V rámci projektu Studentská grantová soutěž (SGS) se zabýváme testováním námi připravených badatelských úloh žáky 8. ročníku ZŠ a příslušných ročníků víceletých gymnázií. Pozorováním žáků při ověřování úloh a následnou analýzou vyplněných pracovních listů bylo zjištěno, že žáci nemají problém s praktickým provedením úloh, ale největší obtíže jim činí formulace výzkumného problému, přesný zápis postupu a výsledků pozorování do pracovních listů<sup>1,2</sup>. Naše zjištění se stalo námětem pro diplomové práce<sup>3-6</sup>, přípravu metodického materiálu pro učitele z praxe<sup>7</sup> a zpracování tohoto příspěvku. Domníváme se, že klíčem k úspěchu je systematická práce motivovaných a kreativních učitelů, kteří budou u žáků rozvíjet badatelské dovednosti od MŠ nebo 1. stupně ZŠ prostřednictvím inovativních výukových metod<sup>3,7</sup>. Zaváděním těchto metod do výuky budou především u žáků podporovat čtení s porozuměním<sup>4</sup> („Jak s textem pracovat? Jak se orientovat v tabulkách nebo grafech? Jak vybrat a sestavit účelné informace? Jak pracovat podle návodu?“)

Při práci s textem žák provádí činnosti, tzv. kognitivní postupy, při kterých získává, zpracovává a vyhodnocuje informace<sup>8,9</sup>. Čtenářskou gramotnost je také možné rozvíjet zaváděním projektové metody do výuky<sup>3,7</sup> a multi-komponentních úloh zadaných verbálně či nonverbálně, vyžadující divergentní myšlení a rozpracování problémové situace do myšlenkové mapy<sup>4,7</sup>. Za účelem náviku analýzy problémové situace a systematizace poznatků byly do pracovních listů vloženy rozpracované myšlenkové mapy. Bylo statisticky prokázáno, že strukturace rozboru problémové situace pozitivně ovlivňuje zápis postupu a výsledků pozorování u úloh vyžadujících složité myšlenkové operace<sup>10</sup>. Byly připraveny didaktické hry, jejichž cílem je naučit žáky hravou formou správně pokládat otázky, rozvíjet komunikační dovednosti, spolupráci v týmu, logické a taktické myšlení, upevňovat nabyté vědomosti a propojovat je do souvislostí<sup>6</sup>. Jakým způsobem a do jaké míry, ovlivní zavádění tohoto připraveného didaktického materiálu do výuky badatelské dovednosti žáků, bude předmětem našeho dalšího šetření.

Tato práce vznikla za podpory projektu SGS01/PřF/2019-2020, *Inovativní metody ve výuce chemie*.

#### LITERATURA

1. Trčková K., Bujok P.: Komparace výsledků bádání na téma směsi. In M. Rusek, M. Tóthová, K. Vojtř, *Project-based education and other activating strategies in science education XVII.* (s. 209–217). Praha: Pedagogická fakulta (2019).

2. Trčková K., Kričfaluši D.: *Biologie, chemie, zeměpis 28*, 33 (2019).
3. Blokešová P.: *Pracovní listy pro přírodovědný kroužek*. Diplomová práce, Ostravská univerzita, PřF (2020).
4. Černá S.: *Čtenářská gramotnost ve výuce chemie*. Diplomová práce, Ostravská univerzita, PřF (2020).
5. Kubný J.: *Kovy v projektové výuce*. Diplomová práce, Ostravská univerzita, PřF (2020).
6. Lukášová J.: *Didaktická hra jako prostředek rozvoje badatelských dovedností*. Diplomová práce, Ostravská univerzita, PřF (2020).
7. Trčková K., Kričfaluši D., Belinová K., Černá S., Dostálíková M., Farmačková K., Veverková T.: *Inovativní metody ve výuce chemie*, v tisku.
8. Heldová D.: *PISA-čitatelská gramotnost: Úlohy 2009*. Bratislava: NÚCEM (2011).
9. Potužníková E. (ed.): *PIRLS 2011: koncepce mezinárodního výzkumu čtenářské gramotnosti*. Praha: Ústav pro informace ve vzdělávání (2011).
10. Trčková K., Bujok P., Farmačková K.: *Mental Mapping in the Inquiry Process*, v tisku.

and expertise procedures used in Institute of Forensic Science in Košice, some analytical procedures used in Slovak army (titrations – potentiometric, complexometric – CaO, MgO determination, calcite analysis, analysis of gunshot residues after shooting from firearm, metal determination by UV-Vis, determination of active chlorine and determination of total alkalinity of decontamination agent by titrimetry) that were established into Inorganic, Analytical and Physical chemistry laboratory practices. Moreover, the chemical and physico-chemical methods that are essential for visualization of dactyloscopic traces used in the Institute of Forensic Science of Slovak Republic Police Corps, Section of Dactyloscopy, were introduced to Biochemistry laboratory practice.

*This work was supported by the Ministry of Education, Science, Research and Sport of the Slovak Republic under the grant KEGA 008UPJŠ-4/2018.*

### 5P-03

#### CHEMICAL LABORATORY PRACTICES SUPPLEMENTED BY THE DIRECT PARTICIPATION OF EXPERTS FROM PRACTICE IN THE TEACHING PROCESS

**ZUZANA VARGOVÁ<sup>a</sup>, MIROSLAV ALMÁŠI<sup>a</sup>,  
RENÁTA ORIŇAKOVÁ<sup>a</sup>, MICHAELA RENDOŠOVÁ<sup>a</sup>,  
RASTISLAV SERBIN<sup>a</sup>, RASTISLAV VARHAC<sup>a</sup>,  
MÁRIA GANAJOVÁ<sup>a</sup>, JANA DINAJOVÁ<sup>b</sup>, PETER  
CHOVAN<sup>c</sup>, MARTIN DZURA<sup>c</sup>, ŠTEFAN BOVA<sup>d</sup>**

<sup>a</sup> *Institute of Chemistry, Faculty of Science, P. J. Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 041 54 Košice,*

<sup>b</sup> *Company Duslo, a.s. production operation Strážske, Priemyselná 720, 072 22 Strážske, <sup>c</sup> Institute of Forensic Science of Slovak Republic Police Corps, Department of Natural Sciences Research and Criminal Identification in Košice, Kuzmányho 8, 041 02 Košice, <sup>d</sup> BovaCHEM, s.r.o., Garbiarska 14, 048 01 Rožňava, Slovakia  
michaela.rendosova@student.ujps.sk*

Based on the social situation in Slovakia, the connection between the young people education and practical experiences from industry and services is necessary for a future prosperous society. These career fields have considerable demands on future employees, mainly for the processing of information, including numerical literacy and problem-solving skills.

Therefore chemical educational institutes should also be responsible for these requirements. The subjects of practical education are crucial for the readiness and applicability of graduates in the labour market. Based on these requirements, in cooperation with experts from industrial companies and institutions, we innovate chemical laboratory practices in bachelor study programme. Experts directly participate in practical exercises focusing on the requirements of practice.

We present the diagnostic procedures used in company DUSLO, a. s., production operation Strážske, the analytical

### 6L-01 WHAT BRINGS THE COMPLEX VIEW TO TRIAZOLE FUNGICIDES IMPACT

**JANA JAKLOVÁ DYTRTOVÁ<sup>a,b,\*</sup>, MICHAL JAKL<sup>c</sup>**

<sup>a</sup> Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the CAS, Flemingovo nám. 2, 166 10 Prague 6, <sup>b</sup> Department of Physiology and Biochemistry, Faculty of Physical Education and Sport, Charles University, José Martího 31, 162 52 Prague 6, <sup>c</sup> Department of Agro-Environmental Chemistry and Plant Nutrition, Faculty of Agrobiolgy, Food and Natural Resources, Czech University of Life Sciences Prague, Kamýcká 129, 165 00 Prague – Suchdol, Czech Republic  
jana.dytrtova@uochb.cas.cz

Triazoles influence the enzymes (14 $\alpha$ -demethylase and aromatase), included in the sterol synthesis<sup>1</sup>. However, the spectrum of influenced enzymes might be broader, because triazoles influence the production of e.g. flavonoids and chlorophylls. Moreover, their presence together with antioxidants or essential metals and other cations<sup>2-5</sup> significantly influences the redox potential of the system<sup>6</sup>.

Moreover, the impact on enzymes is also influenced by other chemicals present in the system. We are talking about the cocktail effect. The cocktail effect is created by the contribution of other triazoles present in the treating mixture and by essential elements with biological activity (e.g. Cu<sup>+</sup> or Cu<sup>2+</sup>) or eventually with other naturally present biologically active agents<sup>6</sup>.

The chemical/biochemical activity of triazoles is transformed by their interaction mostly with essential metals. They can form complexes<sup>3</sup> or decay<sup>4,5,7</sup>. It is important to notice that the final impact is hardly predicable without the experimental view.

It might be alarming that the presence of triazole in the plant-soil system change increase the production of some flavonoids. And the presence of azoles in soil decreases the amount of green biomass as well as fruits and chlorophylls.

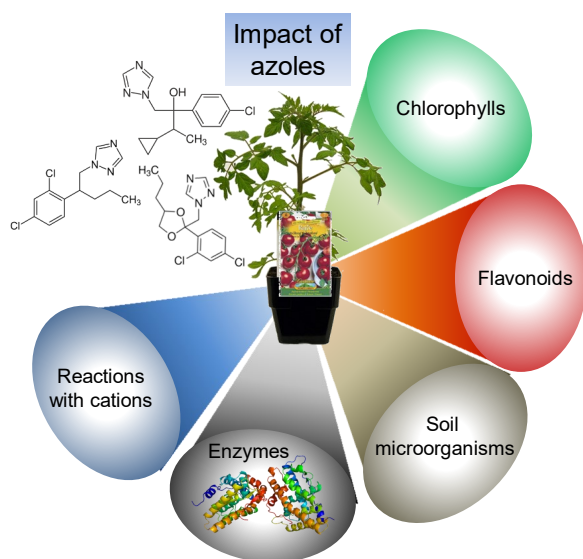


Fig. 1. Selected impacts of triazoles on soil-plant system

The research was supported by the Czech Science Foundation (project 18-01710S).

#### REFERENCES

1. Egbuta C., Lo J., Ghosh D.: *Endocrinology* 155, 4622 (2014).
2. Jaklová Dytrtová J., Jakl M., Schröder D., Norková R.: *Int. J. Mass Spectrom.* 338, 45 (2013).
3. Jakl M., Fanfrlík J., Jaklová Dytrtová J.: *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 31, 2043 (2017).
4. Jaklová Dytrtová J., Jakl M., Schröder D., Čadková E., Komárek M.: *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 25, 1037 (2011).
5. Kovač I., Jakl M., Fanfrlík J., Andrushchenko V., Jaklová Dytrtová J.: *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 34, e8714 (2020).
6. Jaklová Dytrtová J., Straka M., Bělohožníková K., Jakl M., Ryšlavá H.: *Food Chem.* 262, 221 (2018).
7. Jaklová Dytrtová J., Jakl M., Navrátil T., Cvačka J., Pačes O.: *Electrochim. Acta* 211, 787 (2016).

### 6L-02 CHANGES IN THE ACTIVITIES OF SELECTED ENZYMES IN SOIL AFTER THE ADDITION OF TRIAZOLE FUNGICIDES

**MICHAL JAKL<sup>a,c</sup>, JANA JAKLOVÁ DYTRTOVÁ<sup>a,b,\*</sup>**

<sup>a</sup> Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the CAS, Flemingovo nám. 2, 166 10 Prague 6, <sup>b</sup> Department of Physiology and Biochemistry, Faculty of Physical Education and Sport, Charles University, José Martího 31, 162 52 Prague 6, <sup>c</sup> Department of Agro-Environmental Chemistry and Plant Nutrition, Faculty of Agrobiolgy, Food and Natural Resources, Czech University of Life Sciences Prague, Kamýcká 129, 165 00 Prague – Suchdol, Czech Republic  
m.jakl@chemist.com

Triazoles are frequently used fungicides, which were developed to block the biosynthesis of fungal ergosterol to be used in crop protection and medicine. However, triazoles inhibit two enzymes (14 $\alpha$ -demethylase and aromatase), both included in the sterol synthesis of all organisms<sup>1</sup>. The effects of the single triazole application were studied several times and they are well described. However, within their application they are not used as a single compound but in a mixtures of different triazoles. Additionally, triazoles can be accumulated in the environment and they can also interact with other chemicals present. We bring the information how selected and representative triazoles<sup>2-5</sup> (tebuconazole, cyproconazole, penconazole) influence the enzymatic activity of soil microbiota. We demonstrate that the cocktails of triazoles are more efficient in aromatase inhibition than simple summation of their particular contributions.

The research was supported by the Czech Science Foundation (project 18-01710S).

#### REFERENCES

1. Egbuta C., Lo J., Ghosh D.: *Endocrinology* 155, 4622 (2014).

- Jaklová Dyrtrtová J., Jakl M., Schröder D., Čadková E., Komárek M.: *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 25, 1037 (2011).
- Jaklová Dyrtrtová J., Jakl M., Schröder D., Norková R.: *Int. J. Mass Spectrom.* 338, 45 (2013).
- Jakl M., Fanfrlík J., Jaklová Dyrtrtová J.: *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 31, 2043 (2017).
- Kovač I., Jakl M., Fanfrlík J., Andrushchenko V., Jaklová Dyrtrtová J.: *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 34, e8714 (2020).

## 6L-03

## TRIAZOLE FUNGICIDES SEPARATION USING CD-MEKC

ISHAK KOVAC<sup>a,d</sup>, MICHAL JAKL<sup>a,b</sup>, RENATA KONÁŠOVÁ<sup>a</sup>, JANA JAKLOVÁ DYTRTOVÁ<sup>a,c,\*</sup>

<sup>a</sup> Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Czech Academy of Sciences, Flemingovo nám. 542/2, 160 10 Prague 6, <sup>b</sup> Czech University of Life Sciences Prague, Faculty of Agrobiology, Food and Natural Resources, Department of Agro-Environmental Chemistry and Plant Nutrition, Kámyčká 129, 165 00 Prague – Suchbát, <sup>c</sup> Charles University in Prague, Faculty of Physical Education and Sport, Department of Physiology and Biochemistry, José Martího 269/31, 162 52 Prague 6, <sup>d</sup> Charles University in Prague, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry Albertov 2038/6, 128 43 Prague 2, Czech Republic  
ishak.kovac@uochb.cas.cz; jana.dytrtova@uochb.cas.cz

The capillary electrophoresis is one of the advantageous methods for the analysis of samples with complex matrices considering its simplicity, separation efficiency, and cost efficiency<sup>1-3</sup>. We developed a method for separation of a broad spectrum of triazoles (i.e. penconazole (Pen), tebuconazole (Teb), and two cyproconazole (Cyp) diastereoisomers A and B) fungicides with CD-MEKC. All three of them have a very low pKa i.e. 1.76, 1.57, and 1.57, for Cyp, Pen, and Teb respectively<sup>4</sup>. Considering low pKa values, we expected low mobility of selected fungicides, therefore, we have chosen micellar electrokinetic capillary electrophoresis mediated with CD for separation.

The instrument for analysis was the CE apparatus (Agilent Technologies 7100 CE), equipped with a diode array detection (DAD) system. All measurements were performed at 200 nm with a constant cassette temperature of 15 °C. The separation was conducted in internally uncoated fused silica capillary with outer polyimide coating (Polymicro Technologies, Phoenix, AR, USA) of 500/425 mm (total/effective) length and 50 × 375 μm (I.D. × O.D.). The separation voltage was –15 kV (with an electric current in the range from 34.4 to 35.2 μA), electric input power range from 0.5–0.6 W per 1 m capillary length. To improve the solubility of fungicides and separation the buffer was a hydrodynamic mixture of 20% of methanol as an organic modifier.

The best separation and instrument sensitivity observed in BGE consisted of 50 mM phosphoric acid, 50 mM TRIS with 20% v/v of methanol as an organic modifier with pH 4.8 (Fig. 1). The BGE consisted of sulfated γ-cyclodextrin as a selector in concentration 17.5 mg/mL and 15 mM SDS as an anionic surfactant. Due to the presence of methanol, the constant of dissociation for the constituents of BGE was

modified<sup>5,6</sup> and pH was simulated in PeakMaster<sup>7</sup> software and confirmed with a pH meter.

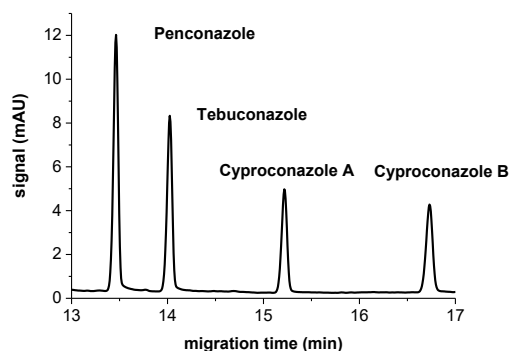


Fig. 1. Electropherogram of Pen, Teb and Cyp A and Cyp B mixture in 6 μmol/L concentration. Separation voltage –15 kV, temperature 15 °C, uncoated fused silica capillary 500/425 mm (tl/el), 50 × 375 μm (I.D.×O.D.). BGE: TRIS/Phosphate (50mM/50mM), 20% Methanol, 17.5 mg/L SyCD and 15 mM SDS

With this methodology achieved LOD values were: 0.73; 1.88; 0.60; and 1.18 (μmol/L) for Pen, Teb, Cyp A and B, respectively. While LOQ values were 2.18; 5.66; 1.80; and 3.55 (μmol/L) for Pen, Teb, Cyp A and B, respectively. The linear regression ranged from the lowest for the standard of Cyp A with value 0.9991 to the best value for Pen standard 0.9998. The separation methodology is applicable for the determination of triazole fungicides from tomato peel.

The research was supported by the Czech Science Foundation (project 18-01710S).

## REFERENCES

- Otsuka K., Terabe S.: *Bulletin of the Chemical Society of Japan* 71, 2465 (1998).
- Fuguet E., Ràfols C., Bosch E., Abraha M. H., Rosés M.: *J. Chromatogr. A* 942, 237 (2002).
- Pico Y., Rodríguez R., Manes J.: *TrAC Trends in Analytical Chemistry* 22, 133 (2003).
- Konašová R., Dyrtrtová J. J., Kašička V.: *J. Chromatogr. A* 1408, 243 (2015).
- Bhattacharyya A., Maandal A., Lahiri S.: *Electrochim. Acta* 25, 559 (1980).
- Schindler P., Robinson R., Bates R. G.: *J. Res. Natl. Bur. Stand.* 72, 141 (1968).
- Gas B., Jaros M., Hruska V., Zuskova I., Stedry M.: *Lc Gc Europe* 18, 282 (2005).

## 6L-04

**ENHANCED ELECTROCHEMICAL PERFORMANCE OF STRUCTURED BORON DOPED DIAMOND ELECTRODES BY INCREASING THE NUMBER OF DEPOSITED POROUS LAYERS**

**SIMONA BALUCHOVÁ<sup>a</sup>, MARIOLA BRYCHT<sup>b</sup>, MICHAL NEDVĚD<sup>a</sup>, ANDREW TAYLOR<sup>c</sup>, SILVIA SEDLÁKOVÁ<sup>c</sup>, VINCENT MORTET<sup>c</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 00 Prague, CZ, <sup>b</sup> University of Lodz, Faculty of Chemistry, Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Tamka 12, 91-403 Łódź, PL, <sup>c</sup> FZU - Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, Na Slovance 2, 182 21 Prague, CZ  
simona.baluchova@natur.cuni.cz

Porous boron-doped diamond (BDD<sub>porous</sub>) is a novel electrode material possessing improved characteristics<sup>1</sup>, compared to planar BDD films. However, one of the most crucial factors determining final characteristics of BDD<sub>porous</sub> electrodes is the number of deposited porous layers.

This study reports on characterization and analytical performance of three BDD<sub>porous</sub> electrodes with different number of deposited layers<sup>2</sup> (2, 3, and 5). Scanning electron micrographs showed homogenous coverage of the 3D template by polycrystalline diamond for all studied samples. Next, cyclic voltammetric experiments with various redox probes were performed to assess electrochemical behaviour of different BDD<sub>porous</sub> electrodes. With increasing number of diamond coatings, enhanced rates of electron transfer kinetics along with the larger effective surface areas were observed. Since studied BDD<sub>porous</sub> materials were confirmed non-cytotoxic and suitable as growth substrates for neurons<sup>3</sup>, the effects of number of layers on sensing properties towards neurotransmitter dopamine were investigated and significant boosting of analytical performance was recognized with increasing layer number.

Evidently, electrochemical features of BDD<sub>porous</sub> depend significantly on the number of deposited layers and our results indicate enhanced performance of structured BDD electrodes when number of consecutive diamond coatings increases.

*This research was performed within the framework of Specific University Research (SVV 260560). Financial supports provided by the Grant Agency of Charles University (project 390119) and by the Czech Science Foundation (project 20-03187S) are gratefully acknowledged.*

## REFERENCES

- Baluchová S. et al: *Electrochim. Acta* 327, 135025 (2019).
- Vlčková Živcová Z. et al: *Diam. Relat. Mat.* 87, 61 (2018).
- Krůšek J. et al: *Phys. Status Solidi B-Basic Solid State Phys.* 256, 1800424 (2019).

## 6L-05

**KONTROLA ÚPRAVY SPECIÁLNÍCH VOD S VYUŽITÍM MĚŘENÍ POTENCIÁLU PEVNÉ STRÍBRNÉ AMALGÁMOVÉ ELEKTRODY**

**LADISLAV NOVOTNÝ, ANETA KARÁSKOVÁ**

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

Téma tohoto sdělení je součástí dílčí fáze nedávno zahájeného výzkumu alternativních možností sledování postupu čištění speciálních vod<sup>1</sup> na základě měření potenciálů  $E$  (vs. merkurosulfová elektroda) pevných stříbrných amalgámových elektrod AgSAE<sup>2-6</sup> zasunutých do vzorků těchto vod, po přidavku určené koncentrace AgNO<sub>3</sub>. Dosud publikované předběžné výsledky<sup>2-5</sup> (získané v rámci spolupráce s JE Dukovany) ukázaly jejich závislost na podmínkách měření vč. velikosti elektrod, jejich složení a způsob přípravy, různých časových vlivů, okamžitých i kvazi-ustálených potenciálů, složení roztoků a jejich úprav, volby vhodných segmentů experimentálního uspořádání, citlivosti, opakovatelnosti atd. Kalibrační závislosti  $E$  vs.  $\log c$  AgNO<sub>3</sub> poskytovaly přímky se strmostí okolo 36 mV/log  $c$ . Rychlost časového ustálení potenciálů  $E-t$  po ponoření AgSAE do roztoku závisela na koncentraci AgNO<sub>3</sub> a pohybovala se mezi 240 s (při  $5 \cdot 10^{-5}$  mol l<sup>-1</sup>) a 100 s (při  $1 \cdot 10^{-2}$  mol l<sup>-1</sup>). S využitím AgSAE poskytl kvazi-ustálené potenciály  $E_i$  elektrody AgSAE v pořadí pěti upravovaných vzorků vod z JE Dukovany  $V_i$ ,  $i = 1-5$  (po přidavku  $1 \cdot 10^{-2}$  mol l<sup>-1</sup> AgNO<sub>3</sub>) diagram  $E_i$  vs.  $V_i$ . Jeho dostatečně opakovatelný průběh v daném pořadí vzorků s trojúhelníkovým maximem u  $E_3$ ,  $V_3$  byl charakteristický. Nejlepší opakovatelnost poskytl AgSAE o průměru  $d > 1$  mm. Současně bylo zjištěno, že z praktických hledisek bylo výhodnější pracovat při  $1 \cdot 10^{-3}$  M AgNO<sub>3</sub> vedoucí k esovitému charakteristickému diagramu  $E_i$  vs.  $V_i$ . S využitím pořadí šesti vzorků vod dodaných z Teplárny Náchod – innogy Energo, s.r.o. následovalo pak obdobné studium  $E-t$  a  $E_i$  vs.  $V_i$ ,  $i = 1-6$  s 3 uzralými a s 3 nově připravenými AgSAE. Větší množství získaných dat umožnilo tak potvrdit i dále upřesnit dosud získané poznatky (mj. i za využití statistických proložení) a účelně orientovat další testování a optimalizaci měření.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR SGS\_2020\_003 a projektu Univerzity Pardubice č. SD373001/82/30352 (2016).*

## LITERATURA

- Pitter, P., *Hydrochemie*. Vol. 4., VŠCHT Praha 2009.
- Novotný L.: užitiný vzor PUV 2014-30527, Praha 2014.
- Novotný L.: užitiný vzor PUV 2007-19501, Praha 2007.
- Novotný L., Kabutey A., Petráňková R., Langášek P.: *Waste Forum* 2, 209 (2018).
- Karásková A., Novotný L., Petráňková R., Kabutey A.: *Waste Forum* 3, 219 (2019).
- Novotný L., Yosypchuk B: *Chem. Listy* 94, 1118 (2000).



**6P-01**  
**PHOTOCHEMICAL DEGRADATION OF TOLUENE**  
**AND CHLOROBENZENE**

**LUCIA FAŠKOVÁ, DANIELA PAVÚKOVÁ, EMÍLIA**  
**MALIŠOVÁ, LADISLAV ŠTIBRÁNYI, JÁN HÍVEŠ**

*Department of Inorganic Technology, Faculty of Chemical*  
*and Food Technology, Slovak University of Technology,*  
*Radlinského 9, 811 07 Bratislava, Slovakia*  
*lucia.faskova@stuba.sk*

Toluene and chlorobenzene are widely used in the chemical industry as solvents or intermediates<sup>1</sup>. Within this use, a great amount of these materials is emitted into the environment. In Slovakia, there is an old landfill considered to be an environmental burden containing both toluene and chlorobenzene, which can possibly jeopardize nearby water sources. Since this situation needs a solution, we decided to choose photochemical means for degradation of these substances.

We prepared model solutions of toluene and chlorobenzene in distilled water in a concentration of 0.1 ml/l and transferred them to a photoreactor. The photoreactor consists of a low-pressure mercury lamp providing a single 254 nm electromagnetic wave. Model solutions were irradiated for almost an hour. We sampled and analysed the reaction mixture in the periods of 10, 20, 30 and 55 minutes. After 55 minutes of low-pressure mercury lamp operation, we were able to degrade 54.9 % of toluene and 46.1 % of chlorobenzene.

The samples of solutions were extracted to methanol using solid phase extraction and analysed using gas chromatography/mass spectrometry (GC/MS). Analysis using GC/MS was performed in order to obtain more information on the structure of reaction products for assessment of ecotoxicological properties. Comparison with the available library of substances allowed us to detect following substances:

- products of photodegradation of toluene: benzaldehyde, benzyl alcohol, phenol, all of three isomers of cresol
- products of photodegradation of chlorobenzene: 2-chlorophenol, 4-chlorophenol, benzyl alcohol, biphenyl-2-ol, phenol

From the ecotoxicological properties of pure reaction products we can state that reaction products of toluene are less toxic than original molecule, yet those originated from chlorobenzene are more toxic. However, there is no evidence or research on effect of mixtures of such substances on model organisms and with this in mind we can only make assumptions.

*We are grateful for financial support under the projects OP*  
*VaV ITMS 26240120034, VEGA 1/0343/19, APVV-17-0183*  
*and Young Researchers Grant within Slovak University of*  
*Technology (ElCapFe).*

**REFERENCES**

1. Ullmann F., in book: *Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry*, Weinheim, Federal Republic of Germany 1985.

**6P-02**  
**ODSTRAŇOVANIE MIKROBIÁLNEHO**  
**ZNEČISTENIE Z POVRCHOVÝCH VÔD POMOCOU**  
**ŽELEZANOV**

**JÁN HÍVEŠ, EMÍLIA MALIŠOVÁ, MICHAELA**  
**BENKÖOVÁ, ANDREA ČERVENKOVÁ, DANIELA**  
**PAVÚKOVÁ, LUCIA FAŠKOVÁ**

*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU*  
*v Bratislave, Oddelenie anorganickej technológie,*  
*Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko*  
*emilia.malisova@stuba.sk*

Cyanobaktérie zastupujú v ekosystéme nenahraditeľnú úlohu; sú producentmi kyslíka, tvoria biomasu, viažu dusík a oxid uhličitý. Pri určitých, pre ne vyhovujúcich environmentálnych podmienkach, ako sú napríklad zvýšený obsah nutričov alebo zvýšená teplota prostredia, dochádza k ich premnoženiu a tvorbe tzv. vodného kvetu. Premnoženie cyanobaktérií nepriaznivo ovplyvňuje kvalitu vody. Po vytvorení vodného kvetu uvoľňujú do vody toxické látky, cyanotoxíny, ktoré predstavujú zdravotné riziko pre človeka, zvieratá i rastliny. Riešením problému premnoženia týchto organizmov v povrchových vodách môže byť aplikácia železanov, silných ekologických oxidačných činidiel.

Táto práca bola zameraná na sledovanie interakcie železanu s baktériami z prírodných vodných zdrojov. Skúmal sa vplyv železanu na konkrétny druh cyanobaktérie *Anabaena flosaquae*, študovali sa reálne vzorky vody so zvýšeným obsahom cyanobaktérií odobraté z prírodnej vodnej plochy Šaštín-Gazárka a vyhodnocoval sa vplyv železanov na cyanotoxín mikrocystín-LR, ktorý patrí medzi najbežnejšie produkované toxíny cyanobaktérií. Na základe mikroskopického vyhodnotenia vplyvu železanu bolo preukázané značné poškodenie buniek cyanobaktérie už za použitia pomerne nízkych koncentrácií železanu (jednotky miligramov). Pôsobením železanu na mikrocystín-LR dochádzalo k zmene jeho štruktúry, pričom rozkladné produkty tejto reakcie neboli vyhodnotené ako toxické. Po aplikácii železanov do vôd odobraných z prírodného vodného zdroja sa dosahovali lepšie chemické, biologické, mikrobiologické aj ekotoxikologické výsledky.

*Táto práca vznikla vďaka podpore Ministerstva Školstva,*  
*Vedy, Výskumu a Športu SR v rámci projektu VEGA*  
*1/0343/19, Agentúrou pre podporu výskumu a vývoja APVV-*  
*17-0183 a vďaka Grantovej schéme na podporu excelentných*  
*tímov mladých výskumníkov v podmienkach STU v Bratislave*  
*(ElCapFe).*

**6P-03****NETRADIČNÍ ZPŮSOB UPLATNĚNÍ  
POTENCIOMETRIE PRO KONTROLU  
TECHNOLOGICKÉHO ČIŠTĚNÍ SPECIÁLNÍCH VOD****ANETA KARÁSKOVÁ, LADISLAV NOVOTNÝ\*,  
JITKA OUHRABKOVÁ***Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická,  
Ústav environmentálního a chemického inženýrství,  
Studentská 573, 532 10 Pardubice  
nvt.l@seznam.cz*

Výzkum podmínek uplatnění netradičních postupů je součástí zjišťování a ověřování možností postupného zavádění technických inovací. Jedním z příkladů z oblasti elektrochemie<sup>1</sup> a vodohospodářství<sup>2</sup> je nedávno zahájený<sup>3-6</sup> širší výzkum ověřování sledování technologického čištění pomocí určování změn potenciálu s pevnými stříbrnými amalgámovými elektrodami AgSAE. Příprava AgSAE se podobá nebo blíží postupu přípravy AgSAE pro voltametrická měření, zveřejněnému např. v cit.<sup>7,8</sup>. V podstatě jde o snahu sledovat vliv jednotlivých úprav zmíněných vod na jejich kvalitu pomocí změn potenciálu  $E$  v daných vzorcích vod poté, co do nich byla přidána určená konstantní (např. 0,01 nebo 0,001 mol l<sup>-1</sup>) koncentrace AgNO<sub>3</sub>. Tento výzkum vychází z již popsaných poznatků, že série  $n$ -vzorků vod odebraných z jednotlivých fází procesu čištění umožňuje za vhodných podmínek získat diagram závislosti příslušného potenciálu  $E$  na  $n$ . V návaznosti na dosud získané poznatky (i s využitím vod z JE Dukovany)<sup>3-5</sup> o vlivu časových změn  $E$ , koncentrace AgNO<sub>3</sub>, složení a velikosti AgSAE způsobu jejich přípravy atd. jsou nyní shromažďovány další důležité poznatky v těchto směrech, a to i pro obdobné teplotenské vody apod. Jim je věnován tento příspěvek.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR SGS\_2020\_003 a projektu Univerzity Pardubice č. SD373001/82/30352 (2016).*

**LITERATURA**

- Scholz F.: *Electroanalytical methods*. Springer-Verlag, Berlin 2002.
- Pitter P.: *Hydrochemie*. Vol. 4., VŠCHT Praha 2009.
- Novotný L.: užitný vzor PUV 2014-30527, Praha 2014.
- Novotný L.: užitný vzor PUV 2007-19501, Praha 2007.
- Novotný L., Kabutey A., Petráňková R., Langášek P.: *Waste Forum* 2, 209 (2018).
- Karášková A., Novotný L., Petráňková R., Kabutey, A.: *Waste Forum* 3, 219 (2019).
- Novotný L., Yosypchuk B.: *Chem. Listy* 94, 1118 (2000).
- Yosypchuk B., Novotný L.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 32, 141 (2002).

**6P-04****THE INFLUENCE OF HIGH TEMPERATURE  
SYNTHESIS ON THE STRUCTURE OF GRAPHITIC  
CARBON NITRIDE AND ITS HYDROGEN  
GENERATION ABILITY****EMILIA ALWIN<sup>a,c</sup>, KAMILA KOČÍ<sup>b</sup>, ROBERT  
WOJCIESZAK<sup>c</sup>, MICHAŁ ZIELIŃSKI<sup>a</sup>, MIROSLAVA  
EDELMANNOVÁ<sup>b</sup>, MARIUSZ PIETROWSKI<sup>a,\*</sup>**

*<sup>a</sup> Faculty of Chemistry, Adam Mickiewicz University in Poznań, Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań, Poland, <sup>b</sup> Institute of Environmental Technology, VŠB-Technical University of Ostrava, 17 listopadu 15/2172, Ostrava, 70800, Czech Republic, <sup>c</sup> Univ. Lille, CNRS, Centrale Lille, Univ. Artois, UMR 8181 - UCCS - Unité de Catalyse et Chimie du Solide, F-59000 Lille, France  
kamila.koci@vsb.cz*

Graphitic carbon nitride (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>) was obtained by thermal polymerization of dicyandiamide, thiourea or melamine at high temperatures (550 and 600 °C), using different heating rate (2 or 10 °C min<sup>-1</sup>) and synthesis time (0 or 4 h). The effects of the synthesis conditions and type of the precursor on the efficiency of g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> were studied. The most efficient was the synthesis from dicyandiamide, 53 %, while the efficiency in the process of synthesis from melamine and thiourea were much smaller, 26 % and 11 %, respectively. On the basis of the results provided by XRD, XPS, FTIR, UV-vis, TGA, EA, the best precursor and the optimum conditions of synthesis of g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> were identified to get the product of the most stable structure, the highest degree of ordering and condensation of structure and finally the highest photocatalytic activity. It was found that as the proton concentration decreased and the degree of condensation increased, the hydrogen yields during the photocatalytic decomposition of water-methanol solution was significantly enhanced. The hydrogen generation was 1200 μmol g<sup>-1</sup> and the selectivity towards hydrogen of more than 98 %.

*This research was funded by grant no. POWR.03.02.00-00-1023/17 co-financed by the European Union through the EUROPEAN SOCIAL FUND under the OPERATIONAL PROGRAM KNOWLEDGE EDUCATION DEVELOPMENT and from ERDF "Institute of Environmental Technology – Excellent Research" (No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000853) and by using LARGE RESEARCH INFRASTRUCTURE ENREGAT supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic under project No. LM2018098. The authors thank Center for Advanced Technology, Adam Mickiewicz University in Poznań, Poland, for the scanning electron microscopy (SEM) images.*

**6P-05**  
**ACTIVATED CHARCOAL AND FERRATES**  
**FOR PHARMACEUTICALS REMOVAL**

**DANIELA PAVÚKOVÁ, LUCIA FAŠKOVÁ, EMÍLIA MALIŠOVÁ, LADISLAV ŠTIBRÁNYI, JÁN HÍVEŠ**

*Department of Inorganic Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 811 07 Bratislava, Slovakia  
 daniela.pavukova@stuba.sk*

Pharmaceuticals are chemical substances known and used for their high biological activity. An ongoing expansion in pharmaceutical markets together with increased drug consumption are the main reasons for their elevated occurrence in the environment. As a result of insufficient removal during wastewater treatment processes residues and metabolites of pharmaceuticals are reported to be detected in the surface, drinking and groundwater and in soil all over the world in concentrations ranging between ng/L and mg/L (ref.<sup>1</sup>). Although there is no clear evidence of the effect on human health there are studies showing that if animals are exposed to pharmaceutical residues certain changes in their behaviour and physiology occur. For example, changes in feeding behaviour and body mass resulting from exposure to antidepressant fluoxetine was found in wild starlings<sup>2</sup>. In European perch, the significant oxazepam-induced effect on boldness was found<sup>3</sup>. These facts call for a new and efficient method of removal of such residues and metabolites. This work investigates the application of activated charcoal (AC) and ferrates for wastewater cleaning. Model solutions of four pharmaceuticals (diclofenac, carbamazepine, diphenhydramine hydrochloride, and venlafaxine) in distilled water were prepared with a concentration of 10 mg/L. For the experiments with AC, the volume of 50 mL of stock solution was transferred into beaker and 1, 5, 10, 15 and 20 mg of activated charcoal were added. Experiments with ferrates were also conducted with 50 mL of stock solution with addition of 0,1; 0,2; 0,3; 0,5 and 1 mg of ferrates. For both types of experiments, the mixture was then stirred for 15 minutes at 500 rpm. Before the analysis mixture was filtered. The overall better removal efficiency was obtained using activated charcoal. The highest removal efficiency (99 %) was achieved using activated charcoal in the diclofenac solution. The low removal efficiency of ferrates could be caused by their sensitivity to pH values. In stock solution pH values were about 6 and with the addition of ferrates, pH increased.

*This work was supported under project OP VaV ITMS 26240120034, by Ministry of Education, Science, Research and Sport of Slovak Republic under the contracts VEGA 1/0343/19 and APVV 17 0183. We are also grateful for support by Young Researchers Grant within Slovak University of Technology (ElCapFe).*

**REFERENCES**

1. aus der Beek T., Weber F. A., Bergmann A., Hickman S.: *Environ. Toxicol. Chem.* 35, 4 (2016).
2. Bean T. G., Boxall A. B. A.: *Philos. Trans. R. Soc. B.* 369 (2014).

3. Saristo M., Lagesson A., Bertram G. M., Fick J.: *Sci. Total Environ.* 655 (2019).

**6P-06**  
**VYUŽITÍ VSTUPNÍCH FILTRŮ KONTINUÁLNÍHO**  
**MONITORINGU TROPOSFÉRIKÉHO OZONU KE**  
**STANOVENÍ POU**

**KATEŘINA KOMÍNKOVÁ<sup>a</sup>, GABRIELA VÍTKOVÁ<sup>a</sup>, DAVID KAHOUN<sup>b</sup>, PAVLA FOJTÍKOVÁ<sup>b</sup>, VLASTIMIL HANUŠ<sup>a</sup>, JAN TRÍŠKA<sup>a,b</sup>, IVAN HOLOUBEK<sup>a</sup>**

*<sup>a</sup> Ústav výzkumu globální změny AV ČR, Bělidla 986/4a, 603 00 Brno, <sup>b</sup> Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta JU, Branišovská 1760, 370 05 České Budějovice  
 kominkova.k@czechglobe.cz*

Národní atmosférická observatoř (NAO) Košetice je pozadovou stanicí zaměřující se na monitorování výskytu, změn trendů koncentrací a dálkového přenosu vybraných atmosférických polutantů a skleníkových plynů spolu se sledováním základních meteorologických charakteristik.

Stanovení koncentrace troposférického ozónu (O<sub>3</sub>) probíhá kontinuálně ve výškách 8, 50 a 230 m za využití UV fotometrických analyzátorů Thermo Scientific 49i umístěných v klimatizovaných boxech na ochozech 250 m vysokého atmosférického stožáru. Každý z přístrojů je na vstupu své vzorkovací linky chráněn před mechanickým znečištěním PTFE filtrem o průměru 47 mm a velikosti pórů 5 μm. Tyto filtry jsou umístěny v PTFE držáku a v měsíčních intervalech pravidelně vyměňovány v rámci rutinní údržby zařízení. V obdobném režimu fungují i analyzátory Tekran 2537B sloužící ke kontinuálnímu monitoringu koncentrací plynné rtuti v úrovních 4 a 240 m. Jejich vstupní filtry jsou z téhož materiálu, avšak o velikosti pórů 0,2 μm. Analýza těchto filtrů, které by se jinak vyhodili jako odpad, může poskytnout další informace o stavu prostředí v okolí stanice.

V rámci této studie byla testována možnost sledování vybraných 16 PAU prostřednictvím extrakce z použitých filtrů. Výsledky obsahu PAU byly interpretovány jednak z hlediska sezónní fluktuační koncentrací a jednak z hlediska výškového gradientu. Dále bylo provedeno srovnání výsledků z filtrů z obou typů analyzátorů mezi sebou.

Pro účely sledování PAU byla vypracována a validována metoda stanovení 16 PAU pomocí HPLC s fluorescenčním detektorem. Filtry byly odebírány celoročně během vzorkovací kampaně 2017–2019 vždy ve všech výškách. Vzorky z tohoto období vykazovaly výraznou snižující se koncentraci ΣPAHs se vzrůstající výškou. Rovněž byla potvrzena sezónní fluktuační celkové koncentrace PAU s maximy v zimních měsících během výše uvedené vzorkovací kampaně. Získaná data byla porovnávána s nejnovejšími daty obsahu PAU a jejich sezónní a roční variabilitou<sup>1</sup>.

*Tato práce vznikla za podpory MŠMT v rámci programu CzeCOS, číslo projektu LM2015061*

## LITERATURA

1. Miura K., Shimada K., Sugiyama T., Sato K., Takami A., Chan Ch. K., Kim I. S., Kim Y. P., Lin N.-H., Hatakeyama S.: *Scientific Reports* 9, 12591 (2019).

## 6P-07

## ELEKTROCHEMICKÁ ANALÝZA NOVÝCH SYNTETICKÝCH DROG NA BÁZI FENTANYLU

**TOMÁŠ NAVRÁTIL<sup>a,\*</sup>, JANA SKOPALOVÁ<sup>b</sup>, MARTA CHOÍNSKA<sup>a,c</sup>, JAN LANGMAIER<sup>a</sup>, JAN ALBRECHT<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, <sup>b</sup> Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, <sup>c</sup> UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2  
tomas.navratil@jh-inst.cas.cz

Príspevek je zaměřen na problematiku elektrochemické analýzy a studium metabolických přeměn nových, velmi nebezpečných psychotropních látek ze skupiny fentanylů. Fentanyl (Schéma 1), superpotentní agonista  $\mu$ -opioidních receptorů, patří do skupiny syntetických opioidů – derivátů 4-anilidopiperidinu. Používá se jako analgetikum (anodynum). Je asi 100x (jeho deriváty až 10 000x) účinnější než morfin. Studované substance nalézají využití v anesteziologii, jako analgetika, avšak bývají zneužívány jako rekreační drogy (např. sufentanil, furanylfentanyl v kombinaci s heroinem), či aplikovány při protiteroristických zásazích.

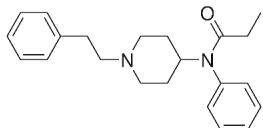


Schéma 1. Fentanyl

Fentanyl a jeho analogy se nejčastěji stanovují pomocí extrakce kapalina–kapalina (L–L), SPE extrakce, GC, HPLC v kombinaci s různými způsoby detekce (např. UV nebo MS/MS)<sup>1</sup>. Podstatně méně často jsou pro tyto účely používány elektrochemické metody a elektrochemické detektory<sup>2</sup>.

V souladu s náplní řešeného projektu GA ČR 20-07350S jsme se zaměřili na kinetiku a termodynamiku přenosu fentanylu a jeho vybraných derivátů (sufentanilu, furanylfentanylu, carfentanilu a thiofentanylu) a jeho hlavního metabolického produktu norfentanylu přes polarizovaná rozhraní kapalina–kapalina. Předmětem sdělení budou elektroanalytické a fyzikálně-chemické poznatky charakterizující transport jejich iontových forem přes uvedená kapalinová rozhraní a výsledky studia jejich elektrochemických přeměn.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 20-07350S, a specifického vysokoškolského výzkumu (SVV260560) (M.Ch.).*

## LITERATURA

1. Albrecht J.: *MSc. Thesis*, Univerzita Palackého

v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Olomouc 2019.

2. Choinska M., Langmaier J., Skopalova J., Navratil T.: *In preparation* (2020).

## 6P-08

## EFFECTS OF SYRINGIC ACID ON DEGRADATION POTENTIAL OF SOIL MICROBIOTA AGAINST MCPA AND THE CONDITION OF SOIL AND PLANTS

**MAGDALENA URBANIAK<sup>a</sup>, ELŻBIETA MIERZEJEWSKA<sup>b</sup>, TOMAS MACEK<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Department of Biochemistry and Microbiology, University of Chemistry and Technology, Prague, Czech Republic

<sup>b</sup> UNESCO Department of Ecohydrology and Applied Ecology, Faculty of Biology and Environmental Protection, University of Lodz, Poland  
urbaniam@vscht.cz

Microorganisms can degrade almost all organic pollutants but this process might be very slow in some cases. Rhizoremediation based on the interactions between plant exudates and microorganisms, is a promising way to enhance the removal of xenobiotics from the environment.

Cucurbits play an important role in the process. Their root exudates stimulate the growth of microorganisms and their degradative activity. Plant secondary metabolites (PSM) can serve as primary source of carbon for microorganisms and stimulate the expression of genes involved in the degradation.

The aim of the study is to 1) assess the role of selected PSM (syringic acid), characteristic to cucurbits, in the microbial degradation of the herbicide: MCPA (2-methyl-4-chlorophenoxyacetic acid), 2) determine the influence of the syringic acid on the properties of MCPA-contaminated soil (physico-chemical parameters and exotoxicity) and 3) evaluate the growth and physiological parameters of two cucurbit species grown on that soil: zucchini (*C. pepo*) and cucumber (*C. sativus*).

The results showed that simultaneous application of MCPA and syringic acid contributed to the increased detection of MCPA degradative genes. Samples spiked with both MCPA and syringic acid demonstrated two-fold higher number of detected degradative genes. Addition of syringic acid significantly influenced the pH and N, P, K content of soil. Cucumber variants showed greater soil ecotoxicity than zucchini, where effect of MCPA was mitigated by the syringic acid, but not in the cucumber variants.

Cucumber growth was fully suppressed in variants with MCPA or MCPA+syringic acid, while the growth of zucchini was stimulated in MCPA+syringic acid variants and suppressed in MCPA variants. Application of MCPS+syringic acid led to a significant increase in chlorophyll formation, too.

Our findings demonstrate that syringic acid stimulated the degradation potential of soil microbiota toward MCPA but also mitigated the toxic effect of the herbicide on zucchini, but not on cucumber.

*The research was supported by the European Structural and Investment Funds, OP RDE-funded project CHEMFELLS4UCTP CZ.02.2.69/0.0/0.0/17\_050/0008485).*

## 7L-01

**RYCHLÁ KAPALINOVÁ EXTRAKCE HOMOLOGŮ SEABORGIA****PAVEL BARTL<sup>a\*</sup>, MOJMÍR NĚMEC<sup>a</sup>, JAN JOHN<sup>a</sup>, JON PETTER OMTVEDT<sup>b</sup>, JAN ŠTURSA<sup>c</sup>**

<sup>a</sup> Katedra jaderné chemie, FJFI ČVUT v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha 1, Česká republika, <sup>b</sup> Department of Chemistry, University of Oslo, P.O. Box 1033 Blindern, 0315 Oslo, Norsko, <sup>c</sup> Oddělení urychlovačů, ÚJF AV ČR, Husinec-Řež 130, 250 68 Řež, Česká republika  
pavel.bartl@fffi.cvut.cz

V posledních několika letech je v laboratoři cyklotronou U-120M (ÚJF, Řež) budováno experimentální pracoviště pro přípravu, transport a studium vlastností a chování krátkodobých radionuklidů v rámci infrastruktury CANAM a projektu CAAS. Základem zařízení byla terčová komora a plynový transportní systém vyvinutý na UiO (Oslo)<sup>1</sup>. V rámci spolupráce všech tří subjektů je v současné době vyvíjena nová, automatizovaná terčová komora. Na KJCH ČVUT je souběžně vyvíjen také mikrofluidní kapalinově-extrakční systém, který bude přímo navazovat na plynový transportní systém. Snahou je vybudovat automatizované kapalinově-extrakční zařízení s co nejkratší dobou zdržení a optimalizovat účinný extrakční separační systém pro jasnou identifikaci prvků 6. skupiny Mendělejevovy periodické tabulky prvků, a to včetně Sg.

Chemická část práce se zaměřuje na optimalizaci parametrů kapalinově-extrakčního systému Cyanex 600 (org)/HNO<sub>3</sub> (aq) s využitím extrakce krátkodobých izotopů Mo a W (jako homologů Sg) připravených na cyklotronu U-120M<sup>2</sup>. Optimalizována je, v prvním přiblížení, především koncentrace činidla Cyanex 600 a koncentrace HNO<sub>3</sub> v rovnovážném režimu. Zkoumána je také kinetika extrakce Mo a W, i v porovnání s jinými, běžně užívanými systémy. Parametry jako je např. doba zdržení a průtoková rychlost versus účinnost extrakce jsou rovněž předmětem optimalizace, a to zejména v kontinuálním mikrofluidním režimu metodami kapilární extrakce při režimu segmentovaného toku a extrakce v mikromixéru.

*Tato práce byla provedena v rámci infrastruktury CANAM (projekt LM2015056) a Centra pro pokročilé aplikované vědy (CAAS, projekt CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000778), obojí podporováno Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy ČR.*

## LITERATURA

1. Samadani F., Alstad J., Bjørnstad T., Stavsetra L., Omtvedt J. P.: *Radiochim. Acta* 98, 757 (2010).
2. Bremer A., Stauch C., Geist A.: *GLOBAL 2015 Proceedings*, May 2015, Paris, France.

## 7L-02

**VÝVOJ FLUORIDOVÝCH TERČOVÝCH MATRIC PRO STANOVENÍ <sup>236</sup>U A DALŠÍCH AKTINOIDŮ METODOU AMS****TOMÁŠ PRÁŠEK<sup>a\*</sup>, MOJMÍR NĚMEC<sup>a</sup>, PETER STEIER<sup>b</sup>, MICHAEL KERN<sup>b</sup>, MAKI HONDA<sup>b</sup>, KARIN HAIN<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Katedra jaderné chemie, FJFI ČVUT v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha 1, Česká republika, <sup>b</sup> VERA Laboratory, Institute of Isotopic Research and Nuclear Physics, UNIVE, Währinger Straße 17, A1090 Vienna, Austria  
tomas.prasek@fffi.cvut.cz

S rozvojem urychlovačové hmotností spektrometrie (AMS) v posledních letech se díky svým vlastnostem stal uran-236 velmi cenným izotopovým stopovačem, pokrývajícím řadu analytických aplikací, zejména pak v oblasti jaderné bezpečnosti a s ní spjatých forenzních analýz. Uplatnění však nalézá i při studiu přírodních procesů, např. hlubokomořského proudění či půdní eroze. Alternativou k zavedeným analytickým postupům, při nichž je uran nejčastěji převeden do formy oxidu v chemické matici oxidu železitého, se ukazují být fluoridové matrice, jejichž hlavními výhodami jsou řádově vyšší dosahované hodnoty iontových proudů a významné omezení vzniku isobarických interferencí. Tyto vlastnosti byly opakovaně úspěšně demonstrovány především pro fluorid uraničitý, doposud však nedošlo k implementaci fluoridových matric do postupů pro rutinní analýzy, a to především díky problémům s návazností na předchozí zpracování přírodních vzorků a čistotou výsledných sloučenin. S ohledem na tyto skutečnosti byla vyvinuta nová metoda přípravy fluoridových matric pro AMS stanovení <sup>236</sup>U, spočívající v redukci uranu ve výchozím roztoku hydrazinem a následném spolusrážení fluoridů s Nd v roli neizotopního nosiče<sup>1</sup>. Jelikož při prvotních měřeních bylo dosaženo velmi slibných výsledků, zejména z hlediska dosažených iontových výtěžků, jež dosahovaly přibližně dvacetkrát vyšších hodnot nežli referenční oxidická matrice, byl vyvinutý postup dále modifikován náhradou neodymu monoizotopním praseodymem. Předpokládána je rovněž možnost využití této matrice při stanovení dalších aktinoidů, např. <sup>241</sup>Am či izotopů Pu.

*Tento výzkum je součástí projektu RAMSES (CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000728).*

## LITERATURA

1. Prášek T., Němec M., Steier P., et al.: *Nuclear Instr. Methods Phys. Res. B* 472, 64 (2020).

## 7L-03

NOVÁ METODA ZNAČENÍ PSMA-11 POMOCÍ  $^{68}\text{Ga}$   
V  $\text{NaHCO}_3$ KAMILA URBANOVÁ<sup>a,b</sup>, DANIEL SEIFERT<sup>b</sup>,  
MARTIN VLK<sup>a</sup>, ONDŘEJ LEBEDA<sup>b</sup><sup>a</sup> Katedra jaderné chemie, FJFI ČVUT v Praze, Břehová 7,  
11519 Praha 1, <sup>b</sup> Oddělení radiofarmak, ÚJF AV ČR,  
Husinec-Řež, čp. 130, 250 68 Řež  
urbanova@ujf.cas.cz

Prostatický specifický membránový antigen (PSMA) je membránový protein typu II, který je výrazně exprimován na povrchu buněk rakoviny prostaty. Jednou z jeho hlavních funkcí je zprostředkování internalizace ligandu. Tato vlastnost PSMA se využívá v diagnostice a terapii rakoviny prostaty.

V průběhu let byly vyvinuty malé molekuly s vysokou afinitou k PSMA, jež byly značeny pozitronovými zářiči (např.  $^{68}\text{Ga}$ ,  $^{18}\text{F}$ ,  $^{11}\text{C}$ ,  $^{64}\text{Cu}$  nebo  $^{86}\text{Y}$ ), ale i zářiči terapeutickými ( $^{177}\text{Lu}$ ,  $^{225}\text{Ac}$ ). Jeden z těchto radioaktivně značených ligandů, [ $^{68}\text{Ga}$ ]PSMA-11, je jedním z nejrozšířenějších radiofarmak zobrazení karcinomu prostaty metodou PET.

Ve většině postupů značení PSMA-11 pomocí  $^{68}\text{Ga}$  se reakční složky i vícekrát čistí a reakční směs je nezbytně zahřívát. To prodlužuje celý proces, což je s ohledem na krátký poločas radionuklidu  $^{68}\text{Ga}$  (68 min) nežádoucí. Výsledkem je značená sloučenina v relativně velkém objemu pufru (5–10 ml), nebo v malém množství ethanolu, který se obvykle odpaří dosucha před rozpuštěním v přiměřeném objemu vhodného rozpouštědla.

Cílem naší práce bylo navrhnout a otestovat způsob značení, který redukuje nezbytný počet kroků na minimum, probíhá prakticky kvantitativně za laboratorní teploty a vede k produktu v přiměřeně malém objemu finálního roztoku.

Práce realizované v Ústavu jaderné fyziky AV ČR, v. v. i. byly podpořeny z projektu EATRIS-CZ (LM2015064).

## LITERATURA

- Eder M., Schäfer M., Bauder-Wüst U., Hull W.-E., Wängler C., Mier W., Haberkorn U., Eisenhut M.: *Bioconjugate Chem.* 4, 688 (2012).
- Bařinka C., Rojas C., Slusher B., Pomper M.: *Curr. Med. Chem.* 19, 856 (2012).
- Wang Y., Shao G., Wu J., Cui C., Zang S., Qiu F., Jia R., Wang Z., Wang F.: *Contrast Media Mol. Imaging* 2018, 8046541 (2018).
- Golan H., Esa M., Moshkoviz K., Feldhaim A., Hoch B., Shalom E.: *Petach Tikva/IL, Enhancing Capacity and Synthesis of 68-Ga-PSMA with lyophilized ready to use Kit for Nuclear Pharmacy Applications*. Poster ECR 2019/C-1952, doi: 10.26044/ecr2019/C-1952.

## 7L-04

VLIV VLASTNOSTÍ HORNINOVÉHO PROSTŘEDÍ  
NA MIGRACI RADIONUKLIDŮVÁCLAVA HAVLOVÁ\*, MILAN ZUNA, TOMÁŠ  
ROSENDORF, EVA GALEKOVÁ, KATEŘINA  
KOLOMÁ, FILIP JANKOVSKÝ, EVA HOFMANOVÁÚJV Řež, a.s., Hlavní 130, Řež, 250 68 Husinec  
vaclava.havlova@ujv.cz

Horninové prostředí jako poslední bariéra multibariérového konceptu hlubinného úložiště (HÚ) radioaktivních odpadů (RAO) plní primární bezpečnostní funkci *Omezit transport radionuklidů do biosféry nízkou hydraulickou vodivostí horninového masivu oproti jiným horninovým masivům*<sup>1</sup>. Současně i jeho vlastnosti a charakteristiky vstupují do bezpečnostního hodnocení HÚ. Pro popis migrace radionuklidů v horninovém prostředí směrem od HÚ RAO k biosféře jsou významné následující procesy:

- rozpustnost radionuklidu
- difúze do horninové matrice
- sorpce na horninovou matici

V rámci projektu Výzkumná podpora bezpečnostního hodnocení HÚ byly shromážděny horninové vzorky různých typů magmatických a metamorfovaných hornin Českého masivu. Část horninového materiálu reprezentovaly i puklinové výplně, jejichž charakteristiky měly doplnit vstupní soubor pro budoucí hodnocení bezpečnost. Pro všechny horninové vzorky byla provedena mineralogická charakterizace (RTG analýza) a petrologická charakterizace vzorků<sup>2</sup>.

Puklinové výplně (např. jílové minerály, biotit, oxyhydroxidy Fe, kalcit) mají obecně vyšší specifický povrch či kationtovou výměnnou kapacitu, tj. vlastnosti, které mohou významně ovlivnit sorpci radionuklidů (viz Tabulka I).

Sorpční experimenty byly provedeny s radionuklidy, které vykazují různou míru sorpce na horninové vzorky a vzorky puklinových výplní (např.  $^{134}\text{Cs}$ ,  $^{85}\text{Sr}$ , U, Se). První experimenty na materiálech puklinových výplní ukázaly, že jejich přítomnost může výrazně napomoci zvýšení záchytu radionuklidů (např.  $^{134}\text{Cs}$ ) při jejich migraci do biosféry, a tedy i zvýšení bezpečnostní funkce horninového prostředí<sup>2</sup>.

## Tabulka I

Hodnoty kationtové výměnné kapacity (CEC) pro vzorky hornin a puklinové výplně (označeny šedě)<sup>2</sup>

Vzorek	Frakce	CEC [meq100 g <sup>-1</sup> ]	CEC <sub>sum</sub> [meq100 g <sup>-1</sup> ]	Obsah slíd [hm. %]
PZV1	B	0,38	0,45	13
TIV1	C	0,07	0,13	5,5
PDV1	C	0,09	0,18	7
D2	C	n.a.	n.a.	5,5
S3-3	C	0,27	0,43	4
S3-4	C	n.a.	n.a.	4
S4-3	C	n.a.	n.a.	4,5
2S4-2	C	n.a.	n.a.	11
2S4-4	C	0,07	0,25	< LOD

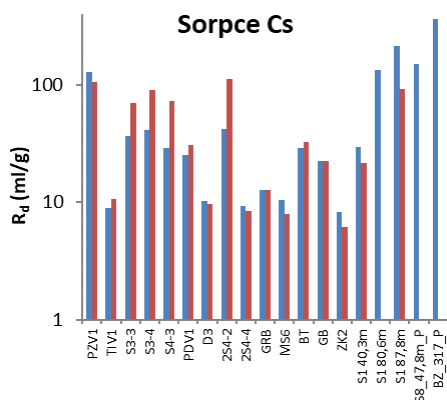


Schéma 1. Sorpce vybraných radionuklidů na horniny a vzorky puklinových výplní<sup>2</sup>

Hodnoty difúzních charakteristik byly experimentálně stanoveny pomocí metody průnikových difúzních experimentů<sup>2</sup>. Pro difúzní charakteristiky (efektivní difúzní koeficient  $D_e$ ) lze říci, přestože zkoumané vzorky pochází z různých lokalit napříč ČR a jedná se o různé horninové typy, že získané difúzní efektivní koeficienty se pohybují v poměrně úzkém rozmezí: pro  $^3\text{H}$   $(4-10) \cdot 10^{-13} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ , pro  $^{36}\text{Cl}$   $(1-10) \cdot 10^{-13} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$  a pro  $^{125}\text{I}$   $(1-4) \cdot 10^{-13} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ . U vzorků metamorfovaných hornin se podařilo prokázat aniontovou exkluzi, která vede k nižším hodnotám  $D_e$  pro  $^{36}\text{Cl}$  a  $^{125}\text{I}$  v porovnání s  $^3\text{H}$ .

Prezentované výsledky byly dosaženy v rámci projektu Výzkumná podpora bezpečnostní hodnocení hlubinného úložiště, financovaného SURAO (SO2014-061-01) a v rámci projektu EURAD WP FUTURE.

#### LITERATURA

- Gondolli J., Červinka R., Dobrev D., Havlová V., Hustáková H.: *Vlastnosti, události a procesy pro bezpečnostní hodnocení hlubinného úložiště*. MS SURAO TZ 330/2018, Praha 2018.
- Havlová V., Zuna M., Brázda L., Kolomá K., Galeková E., Rosendorf T., Jankovský F.: *Migrační procesy radionuklidů v prostředí krystalických hornin a migrační parametry hornin Českého masivu*. Revize 1. MS SURAO, ZZ 333/2018, Praha 2019.

#### 7L-05

### GEOCHEMICKÁ CHARAKTERIZACE KVARTÉRNÍCH ČÍNSKÝCH SPRAŠÍ S VYUŽITÍM METOD AKTIVAČNÍ ANALÝZY

JIŘÍ MIZERA, VÁCLAV SUCHÝ, JAN KAMENÍK, IVANA KRAUSOVÁ, VLADIMÍR STRUNGA

Ústav jaderné fyziky AV ČR, v.v.i., 250 68 Husinec-Řež  
mizera@ujf.cas.cz

Kvartérní eolické sedimenty, především sekvence spraší a paleopůd, představují nejdelší detailní záznam kvartérních klimatických změn a poskytují důležitá data pro paleoenvironmentální rekonstrukce. V oblasti Sprašové plošiny v severní části centrální Číny obecně reprezentují vrstvy spraší glaciální suchá období zvýšeného přísunu prachu přinášeného ze severu převládajícím zimním monzunem a vrstvy paleopůd interglaciální semiaridní období s nižší eolickou depozicí a zvýšenou pedogenezí díky převaze teplého a vlhkého letního monzunu z jihu. Profil kvartérních sprašových sedimentů o mocnosti cca 175 m odkrytý poblíž Lingtai v jihozápadní části Sprašové plošiny je významnou studijní lokalitou, v níž sekvence 33 střídajících se vrstev spraše a paleopůdy překrývá svrchně miocenní formaci červených jílu o stáří cca 2,6 mil. let. Studie se zaměřila na mladší vrstvy posledního glaciálu (doby ledové) ve svrchních 15 metrech profilu, v nichž byly v rámci česko-čínského výzkumného projektu v letech 1996–2000 identifikovány globální geomagnetické exkurzní události – Laschamp před 47 až 38 tis. lety a Mono Lake před 27 až 26 tis. lety<sup>1</sup>.

Pro detailní geochemickou charakterizaci celého souboru osmdesáti vzorků byly použity metody instrumentální neutronové a fotonové aktivační analýzy (INAA a IPAA) – krátkodobá INAA pro makroprvky, dlouhodobá INAA pro stopové prvky, a pro vybrané vzorky IPAA pro stanovení Y, Zr a Nb. Geochemická data byla porovnáována s předchozí pedologickou charakterizací profilu a s měřením magnetické susceptibilitu a jasně prokázala, především na obsahu vápníku a prvků asociovaných s jílovými minerály, střídání glaciálních a interglaciálních období. Geochemická charakterizace čínských spraší poskytla též důkaz podporující naši hypotézu původu australoasijských tektitů, podle níž mají tato impaktová skla stejný zdrojový materiál jako spraše – sedimenty v pouštích severozápadní Číny<sup>2</sup>.

Studie byla podpořena MŠMT v rámci projektů LM2015056, LM2015074 a CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000728.

#### LITERATURA

- Zhu R., Guo B., Pan Y., Liu Q., Zeman A., Suchy V.: *Sci. China Ser. D* 43, 1 (2000).
- Mizera J., Řanda Z., Kameník J.: *Earth-Sci. Rev.* 154, 123 (2016).



## 7L-06

## RADIOGENIC SYSTEM AND RADIATION EFFECTS OF U-DECAY CHAINS IN NATURAL PYROBITUMEN

**VLADIMÍR STRUNGA<sup>a,f</sup>, MARTINA HAVELCOVÁ<sup>b</sup>, JAN LORINČÍK<sup>c</sup>, KRISTÍNA SIHELSKÁ<sup>c</sup>, KLÁRA ŘEZANKOVÁ<sup>c</sup>, PAVEL KŮS<sup>c</sup>, DO THI MINH<sup>c</sup>, VLADIMÍR MACHOVIČ<sup>e,b</sup>, MARKÉTA HOLÁ<sup>d</sup>, VLADIMÍR HAVRÁNEK<sup>a</sup>, JIŘÍ MIZERA<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav jaderné fyziky AV ČR, v.v.i., 250 68 Husinec-Řež,

<sup>b</sup> Ústav struktury a mechaniky hornin AV ČR, v.v.i., 182 09,

Praha 8, <sup>c</sup> Centrum výzkumu Řež, 250 68 Husinec-Řež,

<sup>d</sup> Department of Chemistry – Faculty of Science, Masaryk

University, 611 37 Brno, <sup>e</sup> Central Laboratories UCT,

University of Chemistry and Technology, 166 28 Praha 6,

<sup>f</sup> Institute of geochemistry, mineralogy and mineral resources

– Faculty of Science, Charles University, Praha 8

strunga@ujf.cas.cz

Pyrobitumens are natural bituminous substances mostly insoluble in organic solvents as a result of molecular cross-linking. Bituminous crack fillings, lenses, and veins from Permian Rudník member sedimentary rocks in Krkonoše Piedmont Basin may locally contain significant amounts of uranium. The uranium is found in several microns to tens of micron size uraninite grains encapsulated within the pyrobitumen (anthraxolite) matrix. Due to this, the radiogenic system appears to be well preserved for radiometric age determination of the uranium mineralization.

Parnell<sup>1</sup> in his study suggested Jurassic age of the anthraxolite, based on a simplified method of chemical dating using electron microprobe.

Neutron activation analysis, microbeam analytical methods, chromatography, mass spectrometry and vibrational spectroscopy methods were employed to obtain data for our study. Obtained FTIR spectra of anthraxolites show continuous changes in relation to uranium content that is attributed to radiation-induced alteration of the bituminous matrix. Our study re-examines the possible range of the mineralization age as well as suggests the possible source of uranium, based on the lead isotopic composition of the uraninite.

*The study has been supported by the Czech Science Foundation (GAČR) project 19-05360S “Radiolytic alteration of organic matter in uranium environments”. It has been performed using open access infrastructures CANAM (Center of Accelerators and Nuclear Analytical Methods) and SUSEN (Sustainable Energy) funded by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic within projects LM2015056, LM2015093, R4S - LQ1603.*

## REFERENCE

1. Parnell J. in: *Bitumens in Ore Deposits*. pp 510–517, Springer Berlin Heidelberg 1993.

## 7L-07

## POUŽITÍ GRAFENOVÉ ANALYTICKÉ ELEKTRODY PRO ANALÝZU URANU VE VODNÝCH SYSTÉMECH

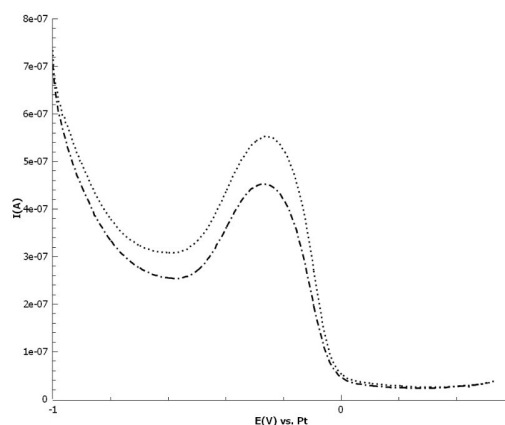
**MARTIN STRAKA, LÓRANT SZATMÁRY, MICHAL SUHÁJEK**

ÚJV Řež, a.s., Hlavní 130, 250 68 Husinec-Řež

martin.straka@ujv.cz

Přítomnost uranu ve vodách přírodního i antropogenního původu vytváří poptávku po způsobech systematického monitorování jeho koncentrace. Nová analytická elektroda založená na práškovém grafenu a ekvivalentní dobře známé a široce používané grafitové pastové elektrodě<sup>1</sup>, byla testována na schopnost analyzovat obsah uranu ve vodném systému metodou diferenciální pulzní voltametrie. Testována byla též chemická sorpce uranu na práškovém grafenu pro zhodnocení jejího vlivu na celkové výsledky. Výsledky nicméně naznačují, že k chemické sorpci prakticky nedochází a celkové výsledky je tak možno interpretovat čistě z elektrochemického hlediska.

Hlavním cílem práce je posoudit možnosti vývoje analytické elektrody pro použití při koncentracích typických pro důlní kaly a laguny vzniklé po těžbě, stejně jako pro přilehlé přírodní vody<sup>2</sup>. Elektroda byla proto testována v oblastech koncentrací na úrovni ppm a nižších (až do řádu desítek ppb). Elektroda vykazuje čistou odezvu s lineární kalibrační křivkou. Dosažené výsledky byly porovnané s měřením ICP-MS a vykazují dostatečnou shodu. Elektrochemická měření s elektrodami tohoto typu mohou sloužit jako rychlá, snadno použitelná a relativně levná alternativa běžně používaných metod vyžadujících komplikovanou a nákladnou instrumentaci. Získané výsledky budou také sloužit jako znalostní báze pro vývoj grafenových elektrod obohacených o sorbenty, které jsou selektivní ve vztahu k uranu a umožní použití elektrody v kombinaci s reálnými komplexními vzorky.



Obr. 1. Diferenciální pulzní voltammogram pro dva roztoky uranu rozdílné koncentrace. Pracovní elektroda: grafen, pomocná elektroda: sklografit, kvazi-referenční elektroda: Pt

Pro experimenty byl využit komerční grafen (Sigma-Aldrich), jako pojivo byl využit minerální olej Sigma v poměru do 20 hm. %.

*Práce byly realizovány v rámci projektu TAČR TH04030285  
„Inovativní sorbenty na bázi zeolitu modifikovaného iontovou  
kapalinou pro sorpci a detekci uranu a těžkých kovů“.*

LITERATURA

1. Adams N.: Anal. Chem. 30, 1576 (1958).
2. Petrová S., Soudek P.: Chem. Listy 107, 283 (2013).

## 7P-01

**POVRCHOVO-KOMPLEXAČNÉ MODELY  
TECHNECISTANU NA KOMPOZITE BIOUHLIE/  
MONTMORILLONIT – VSÁZKOVÉ A DYNAMICKÉ  
SORPČNÉ ŠTÚDIUM****MARTIN DAŇO<sup>a\*</sup>, KAREL ŠTAMBERG<sup>a</sup>, EVA  
VIGLAŠOVÁ<sup>a,b</sup>, MICHAL GALAMBOŠ<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Katedra jaderné chemie, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické, Břehová 7, 115 19 Praha 1, Česká republika, <sup>b</sup> Katedra jadrovej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovensko  
martin.dano@fffi.cvut.cz

Príspevok prináša výsledky z výskumu sorpčných vlastností dvoch typov sorbentov: BC1 pripravený pyrolýzou bambusu a BC2 jeho kompozit s montmorillonitom K10 (cit.<sup>1</sup>). Cieľom bolo zistiť ich aplikovateľnosť v separácii  $TcO_4^-$  z vodného prostredia použitím  $NH_4ReO_4$  ako nosiča. Povrchové vlastnosti sme skúmali metódou XRF a potenciometrickými titraciami za účelom identifikácie funkčných skupín<sup>2</sup>. Aplikovali sme dva modely – model chemickej rovnováhy a iónovo-výmenný model. Vsádzkové experimenty nám poskytli informácie o vplyve pH a kinetike. V dynamickom usporiadaní experimentov sme použili atematicko-fyzikálne modelovanie<sup>3</sup>. Významné je zistenie, že pre sorpciu je optimálna oblasť pH 2–3, čo nasvedčuje prítomnosti nie len protonizovaných funkčných skupín, ale aj kovov v aniónovej forme:  $TcO_4^-$  a  $ReO_4^-$ . Výsledky poukazujú na vhodné sorpčné vlastnosti obidvoch skúmaných sorbentov pre  $TcO_4^-$ , pričom BC2 kompozit s montmorillonitom K10 vykazuje vyššiu sorpčnú kapacitu a rýchlejšiu kinetiku.

*Tento príspevok bol financovaný Operačným programom VVV č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000728 – Výzkum ultrastopových izotopů a jejich využití v sociálních a environmentálních vědách urychlovačovou hmotnostní spektrometrií. Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. APVV-18-0534.*

## LITERATURA

1. Viglašová E., Galamboš M., Danková Z., Krivosudský L., Lengauer C.L., Hood-Nowotny R., Soja G., Rompel A., Mlatík M., Briančin J.: Waste Manage. 79 (2018).
2. Filipská H., Štamberg K. Acta Polytech. 45, 5 (2005).
3. Štamberg K., Palágyi Š.: J. Radioanal. Nucl. Chem. 293 (2012).

## 7P-02

**SORPCE VYBRANÝCH RADIONUKLIDŮ  
NA CEMENTOVÉ MATERIÁLY****JANA KITTNEROVÁ<sup>a</sup>, BARBORA DRTINOVÁ<sup>a</sup>,  
KAREL ŠTAMBERG<sup>a</sup>, DUŠAN VOPÁLKA<sup>a</sup>, GUIDO  
DEISSMANN<sup>b</sup>, STEVE LANGE<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Katedra jaderné chemie, ČVUT FJFI, Břehová 7, 115 19 Praha 1, Česká republika, <sup>b</sup> Forschungszentrum Jülich GmbH, 52425 Jülich, Germany  
Jana.Kittnerova@fffi.cvut.cz

Pro hodnocení bezpečnosti úložišť radioaktivních odpadů, včetně hlubinného úložiště vyhořelého jaderného paliva, je nutné zkoumat chování radionuklidů, které budou v úložištích přítomny. Mezi tyto radionuklidy patří vedle uranu např. radium, stroncium a baryum. Jejich migrace je ovlivněna sorpcí na materiálech inženýrských bariér úložišť, které mohou být i na bázi cementu. V této studii byla sledována sorpce vybraných radionuklidů na cementové materiály. Chování radionuklidů je popsáno distribučním poměrem ( $R_d$ ) mezi kapalnou a pevnou fází (L/S) nebo sorpční izotermou.

K experimentům byla použita vytvrdlá cementová pasta (HCP, typ CEM I) a syntetická cementová fáze (CSH).

Hodnoty  $R_d$  získané pro sorpci Ra a Sr (často označovaného jako analog  $Ra^1$ ) na komerční cementový materiál HCP CEM I byly průměrně rovny 90 L kg<sup>-1</sup> pro Ra a 9 L kg<sup>-1</sup> pro Sr; bylo zjištěno, že hodnoty  $R_d$  pro Ra rostou s rostoucím poměrem fází L/S. Příčinou tohoto chování je zjevně nelinearita sorpční izotermy, zde konvexního typu. Sorpce Sr se naopak zdá poměrem fází neovlivněna, což koresponduje s izotermou blízkou se lineárnímu tvaru.

Sorpční experimenty se syntetickou cementovou fází CSH potvrdily výrazné rozdíly v sorpčním chování mezi Ra, Ba a Sr, přičemž hodnoty  $R_d$  rostly v pořadí Sr (~ 100 L kg<sup>-1</sup>) < Ba (~ 650 L kg<sup>-1</sup>) < Ra (~ 2000 L kg<sup>-1</sup>). Podobně byl potvrzen rozdíl mezi sorpcí na skutečné cementové materiály a čistou fází CSH, která je hlavní sorpční složkou v hydratovaném cementu<sup>1</sup>.

*Tato práce vznikla za podpory projektu Evropské unie pro výzkum a odbornou přípravu v rámci programu Horizont 2020 Evropského společenství pro atomovou energii (EURATOM) (H2020-NFRP-2014/2015) v rámci grantové dohody č. 662147 (CEBAMA) a grantu Studentské grantové soutěže ČVUT č. SGS19/1930HK4/3T/14.*

## LITERATURA

1. Tits J., Wieland E., Müller C. J., Landesman C., Bradbury M. H.: J. Colloid Interface Sci. 300, 78 (2006).

**7P-03****THE ASSESSMENT OF NICKEL MIGRATION IN THE BARRIER MATERIALS OF A DEEP GEOLOGICAL REPOSITORY****KAROL KOČAN<sup>a,b,\*</sup>, EVA HOFMANOVÁ<sup>a</sup>**<sup>a</sup> ÚJV Řež, a.s., Hlavní 130, 250 68 Husinec-Řež, <sup>b</sup> Czech Technical University in Prague, Břehová 7, 115 19 Prague 1  
karol.kocan@ujv.cz

Activation product  $^{59}\text{Ni}$  ( $T_{1/2} = 76 \pm 5 \cdot 10^3 \text{ y}$ )<sup>1</sup> represents one of a key radionuclide in the safety assessment of the deep geological repository. In order to determine nickel behaviour in barrier materials, radioisotopes of shorter half-life or stable isotopes are used<sup>2-4</sup>.  $^{63}\text{Ni}$  ( $T_{1/2} = 101,2 \pm 1,5 \text{ y}$ )<sup>5</sup> was used for this study. However, due to high retardation of nickel and  $^{63}\text{Ni}$  being pure beta emitter, the determination of sorption and diffusion characteristics is challenging. This work, therefore, aims to develop procedures for determining sorption and diffusion properties of nickel in various barrier materials.

The following barrier materials were chosen: bentonite BaM (the Czech commercial bentonite), Na-Kunipia (purified Kunipia F® bentonite into the Na-form), concrete (CEM I), and two hostrock samples from Bukov URF (biotite migmatite and migmatized biotite gneiss)<sup>6-8</sup>. Batch sorption experiments were performed with all materials whereas diffusion experiments with bentonites only. Planar source diffusion method, in which tracer diffuses in the saturated sample, was chosen to allow obtaining the diffusion coefficient in a reasonable time span. On the other hand, this requires to measure beta activity in bentonite slices. Several desorption solutions were tested to extract the retarded  $^{63}\text{Ni}$  from bentonite samples into the liquid phase for the subsequent liquid scintillation counting.

Depending on the water composition, nickel will occur in the form of  $\text{Ni}^{2+}$  and complexes (e.g. carbonates, hydroxides, chlorides), which has a great effect on its migration behaviour<sup>9</sup>. Nickel speciation, calculated with PhreeQC, was therefore considered in the development of methods and interpretation of the experimental results.

An enormous decrease of  $^{63}\text{Ni}$  activity (no carrier added) was observed in the liquid phase after the interaction with all materials. The methodology of batch experiments was therefore redesigned in order to get reliably measurable  $^{63}\text{Ni}$  activities. Under the same ionic strength, higher sorption of nickel was observed for Na-Kunipia. First diffusion experiments with Na-Kunipia have shown low nickel mobility. The most effective way to extract  $^{63}\text{Ni}$  from bentonite slices is acidification so far.

*This work has been partly funded by EJP EURAD WP Future.*

## REFERENCES

- Galán M., LNE-LNHB/CEA Table de Radionucléides –  $^{59}\text{Ni}$ , (2010).
- Sato H.: Jap. Nucl. Cyc. Dev. Inst., JNC TN 8400 99-062, (1999).
- Sato H.: Jap. Nucl. Cyc. Dev. Inst., JNC TN 8400 99-060, (1999).
- Sato H., Yui M.: J. Nucl. Scin. Tech. 34, 334 (1996).
- Collé R., Zimmerman B. E., Cassette P., Laureano-Perez

L.: App. Rad. Isot. 66, 60 (2008).

- Hofmanová E., Červinka R., Vopálka D., et al.: SÚRAO Technical Report 420/2019/ENG (2019).
- Tachi Y., Shibutani T., Sato H., Yui M.: J. Cont. Hydrol. 47, 171 (2001).
- Smutek J.: <https://www.pvpbukov.cz/en/about-urf/>, downloaded 30.06.2020.
- Hakanen M., Ervanne H., Puukko E.: Posiva Report 2012-41 (2012).

**7P-04****OPTIMALIZACE INAA PRO STANOVENÍ PRVKOVÝCH PŘÍMĚSÍ VE VZORCÍCH HEROINU A KOKAINU****JAN KAMENÍK<sup>a,\*</sup>, JAN KUČERA<sup>a</sup>, MARTIN KUCHAR<sup>b</sup>**<sup>a</sup> Ústav jaderné fyziky AV ČR, 250 68 Husinec – Řež 130,<sup>b</sup> Laboratoř forenzní analýzy biologicky aktivních látek, Ústav chemie přírodních látek, VŠCHT Praha, Technická 3, 166 28 Praha 6

kamenik@ujf.cas.cz

Obsah prvkových příměsí v zachycených vzorcích heroínu a kokainu může být užitečnou informací pro zjišťování původu a způsobu nakládání (např. ředění) s těmito omamnými a psychotropními látkami. Instrumentální neutronová aktivační analýza (INAA) může být pro tento účel výhodná, například z důvodu nedestrukčního charakteru metody (bez nutnosti rozkladu), nízké závislosti na složení matrice, praktické absenci chyby slepého pokusu, možnosti vyjádření nejistoty výsledku pro každé jednotlivé stanovení. Vzhledem k dobře definovanému teoretickému principu získala metoda INAA statut primární metody měření pro chemickou analýzu<sup>1</sup>.

Využití INAA pro stanovení prvků v reálných vzorcích heroínu a kokainu bylo demonstrováno ve studii proveditelnosti<sup>2</sup>. Pro plné využití potenciálu INAA v analýze těchto látek byla provedena série měření s čistým heroínem a kokainem. Vzorky byly také v různé míře naředěny látkami, které jsou používány v řetězci producentů a distributorů (kofein, lidokain, paracetamol, fenacetin).

Heroin a kokain je obvykle dostupný pro analýzu v malých množstvích. Proto byl protokol INAA upraven pro navážku přibližně 40 mg. Pečlivě byl vyhodnocen signál pocházející z ozařovacího pouzdra, který by mohl ovlivnit stanovení nízkých obsahů například sodíku a lanthanu.

Zkoumané materiály, pokud jsou ve formě hydrochloridu, obsahují přirozeně vysoký obsah Cl (jednotky hmotnostních procent). Aktivací neutrony vzniká radioaktivní izotop  $^{38}\text{Cl}$  s poločasem přeměny 37 minut, který zvyšuje detekční limit INAA pro prvky stanovené pomocí radionuklidů s poločasem přeměny kratším než přibližně 5 hodin. Pomocí doplnění měření po delší vymírací době od krátkodobé aktivity bylo dosaženo lepších podmínek pro stanovení například Mn.

*Tato práce vznikla za podpory grantu Ministerstva vnitra ČR číslo VI20192022162.*

## LITERATURA

- Greenberg R. R., Bode P., de Nadai Fernandes E. A.: Spectrochim. Acta B 66, 193 (2011).
- Kučera J., Kameník J., Sabol J., Šesták B., Kolář P., Roman M.: *Sborník příspěvků z konference Pokroky v kriminalistice 2017*, s. 101, Policejní akademie ČR v Praze, Praha 2018.

## 7P-05

**CHARAKTERISTIKA EXTRAČNÝCH VLASTNOSTÍ CHALMEX PROCESU PRE SEPARÁCIU Am(III) A Eu(III)**

**MIRIAM MINDOVÁ<sup>a</sup>, PETR DISTLER<sup>a</sup>, JAN JOHN<sup>a</sup>, DMYTRO BAVOL<sup>b</sup>, BOHUMÍR GRÜNER<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Katedra jaderné chemie, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT, Břehová 78/7, 115 19 Praha 1, <sup>b</sup> Ústav anorganické chemie Akademie věd ČR v.v.i., Hlavní 1001, 250 68 Řež

miriam.mindova@fffi.cvut.cz

Pre separáciu trojmocných aktinoidov a lantanoidov boli doposiaľ vyvinuté rôzne extrakčné procesy. Medzi nich patrí aj proces CHALMEX (Chalmers Group Actinide Extraction). Jeho organickú fázu reprezentuje extrakčná molekula CyMe<sub>4</sub>-BTBP (Schéma 1), ďalej extrakčné činidlo a zároveň rozpúšťadlo TBP (tributylfosfát), ktorý sa používa v PUREX procese na separáciu U(VI) a Pu(IV), a rozpúšťadlo FS-13 (fenyiltrifluormethylsulfon), ktoré doposiaľ vykazovalo dobrú stabilitu voči ionizujúcejmu žiareniu (Schéma 2). Kvapalinovú extrakciu prevádzame z vodnej fázy, v tomto prípade 4M kyseliny dusičnej<sup>1,2</sup>.

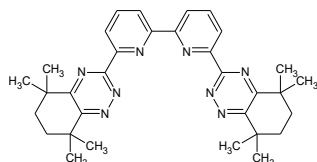


Schéma 1. Štruktúra CyMe<sub>4</sub>-BTBP

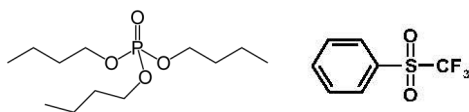


Schéma 2. Štruktúra TBP a FS-13

Keďže pri prepracovaní ožiareného jadrového paliva bude extrakčný systém vystavený vysokej dávke, ktorá môže spôsobiť degradáciu činidla aj rozpúšťadiel a ich následnú neschopnosť extrahovať, je potrebné najprv daný systém vyskúšať v laboratórnom meradle, ožiariť ho a skúmať jeho chovanie a vlastnosti. Bola skúmaná kinetika extrakcie a vplyv teploty na hodnotu extrakčných veličín. Z nameraných dát boli vypočítané termodynamické veličiny a rychlostné koeficienty.

Následne, pre priblíženie sa skutočnosti behom prepracovania, bol systém ožiarený pomocou urýchlených elektrónov rôznymi dávkami až do 500 kGy pri štyroch rôznych teplotách. Taktiež boli skúmané rozdielne chovania, keď bola ožiarená samotná organická fáza a keď organická fáza bola v kontakte s kyselinou dusičnou.

U ožiarených systémov bola študovaná zostatková koncentrácia CyMe<sub>4</sub>-BTBP a TBP v závislosti na dávke. Ďalej bola stanovená štruktúra degradačných produktov a aduktov, ktoré v organickej fáze počas ožarovania vznikajú.

*Táto práca vznikla za podpory grantu MŠMT ČR, projekt Centrum pokročilých aplikovaných prírodných vied (CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000778), grantu SGS ČVUT v Praze (SGS18/192/OHK4/3T/14) a grantu Horizon 2020 Euratom Research and Innovation Programme of the European Union (projekt GENIORS, No. H2020-755171).*

## LITERATÚRA

- Halleröd J., Ekberg Ch., Authen T. et al.: Solvent Extr. Ion Exch. 36, 4 (2018).
- Kondé J., Distler P., John J., Švehla J., Gruner B., Bělčická Z.: Procedia Chem. 2 (2016).

## 7P-06

**CHARAKTERISTIKA VLASTNOSTÍ EXTRAČNÍCH SYSTÉMŮ VYUŽÍVAJÍCÍCH HYDROFILNÍ MASKOVACÍ ČINIDLA PŘI EXTRAKCI MINORITNÍCH AKTINOIDŮ A LANTHANOIDŮ DO TODGA**

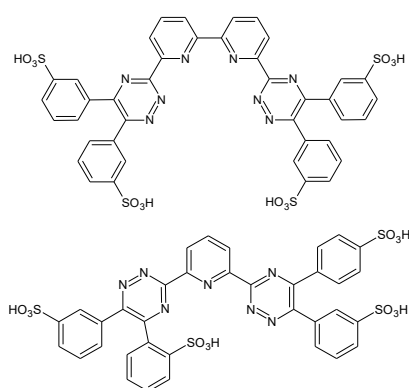
**JAN ŠEBESTA<sup>a</sup>, PETR DISTLER<sup>a</sup>, JAN JOHN<sup>a</sup>, DMYTRO BAVOL<sup>b</sup>, BOHUMÍR GRÜNER<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Katedra jaderné chemie, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT, Břehová 78/7, 115 19 Praha 1, <sup>b</sup> Ústav anorganické chemie Akademie věd ČR v.v.i., Hlavní 1001, 250 68 Řež

Sebesja6@fffi.cvut.cz

Proces i-SANEX (Innovative Selective Actinide Extraction) je jedním z procesů pro separaci minoritních aktinoidů od lantanoidů během prepracování ožáreného jaderného paliva. Při zpracování ožáreného jaderného paliva navazuje i-SANEX na proces PUREX. Základními aspekty i-SANEX procesu jsou přítomnost maskovacího činidla ve vodné fázi, které selektivně tvoří sloučeniny s An(III) v prostředí HNO<sub>3</sub>, a extrakce Ln(III) N-donorovým činidlem TODGA do organické fáze<sup>1</sup>.

Pro úvodní charakterizaci systémů byly studovány termodynamické, kinetické a separační vlastnosti (rozdělovací poměry a separační faktory) systémů s hydrofilními maskovacími činidly TS-BTP a TS-BTBP, které jsou na Schématu 1, při teplotách 15, 25, 35 a 45 °C. Získané výsledky změny entropie, změny entalpie, hodnot rozdělovacích poměrů a separačních faktorů pro Am(III) a Eu(III) ve studovaných systémech byly porovnány s hodnotami uvedenými v literatuře. Pro extrakci Eu(III) byl pro maskovací činidlo TS-BTP rovněž určen kinetický model a vypočtena aktivační energie a frekvenční faktor reakce.

Schéma 1. **Struktura TS-BTBP a TS-BTP**

Základem dalších experimentů bylo ozáření extrakčních systémů různými dávkami urychlenými elektrony o střední energii 3,5 MeV za účelem simulace radiační zátěže, které budou tyto systémy vystaveny během přepracování ozářeného jaderného paliva. Tímto způsobem byly ozářeny dva typy systémů. První obsahoval pouze 0,35M HNO<sub>3</sub>, ve které bylo přítomno 18 mM maskovacího činidla, zatímco v druhém systému byla rovněž přítomna organická fáze – 0,2 M TODGA/5% oktan-1-ol v kerosenu. V závislosti na absorbovaných dávkách (0, 50, 100, 150, 200 a 300 kGy), teplotě a složení ozařovaného systému byly vyhodnoceny separační vlastnosti jednotlivých systémů. U ozářených systémů byla dále metodou HPLC-ESI-MS studována zbytková koncentrace maskovacích činidel a extrakčního činidla TODGA.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR, projekt Centrum pokročilých aplikovaných přírodních věd (CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000778), grantu SGS ČVUT v Praze (SGS18/192/OHK4/3T/14) a grantu Horizon 2020 Euratom Research and Innovation Programme of the European Union (projekt GENIORS, No. H2020-755171).*

#### LITERATURA

1. Peterman D., Geist A., Mincher B., Modolo G., Galan H., Olson L., McDowell R.: *Ind. Eng. Chem.* 55 (2016).

#### 7P-07

#### VYHORETÉ JADROVÉ PALIVO: PRÁVNÁ ÚPRAVA NAKLADANIA V PODMIENKACH SLOVENSKEJ REPUBLIKY

MICHAL GALAMBOŠ<sup>a</sup>, EVA VIGLAŠOVÁ<sup>a,b</sup>, JANA ŠMELKOVÁ<sup>c</sup>, MATÚŠ MICHALOVIČ<sup>c</sup>, MARTIN DUFALA<sup>c</sup>

<sup>a</sup> *Katedra jadrovej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovenská republika,* <sup>b</sup> *Katedra jaderné chemie, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické, Břehová 7, 115 19 Praha, Česká republika,* <sup>c</sup> *Katedra správného a environmentálneho práva, Právnická fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Šafárikovo námestie č. 6, Bratislava, Slovenská republika*  
 michal.galambos@uniba.sk

Vyhoreté jadrové palivo je jadrové palivo, ktoré bolo ožiarené v aktívnej zóne jadrového reaktora a bolo z nej natrvalo odstránené. Vyhoreté jadrové palivo sa môže považovať buď za použiteľný zdroj energie, ktorý sa môže prepracovať, alebo sa môže určiť na konečné uloženie, ak sa považuje za rádioaktívny odpad. Požiadavky na nakladanie s vyhoretým jadrovým palivom vymedzuje atómový zákon – č. 541/2004 Z. z. o mierovom využívaní jadrovej energie a zákon č. 308/2018 Z. z. o Národnom jadrovom fonde a o zmene a doplnení atómového zákona. Príspevok sa zaoberá právnou úpravou nakladania s vyhoretým jadrovým palivom v podmienkach Slovenskej republiky so zreteľom na zodpovednosť pri nakladaní a vplyv uloženého vyhoretého jadrového paliva na životné prostredie a zdravie obyvateľstva.

*Tento príspevok bol podporený Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. APVV-18-0534.*

#### LITERATÚRA

1. Krajňák A., Galamboš M., Roskopfová O., Viglašová E.: *Bezpečnosť jaderné energie* 22, 155 (2014).
2. Galamboš M., Krajňák A., Viglašová E.: *Bezpečnosť jaderné energie* 22, 204 (2014).
3. Viglašová E., Krajňák A. Galamboš M.: *Bezpečnosť jaderné energie* 22, 329 (2014).

**7P-08****ENGINEERED BIOCHAR FROM AGRICULTURAL BAMBOO WASTE FOR REMOVAL OF NITROGEN POLLUTANTS****EVA VIGLAŠOVÁ<sup>a,b</sup>, MICHAL GALAMBOŠ<sup>a</sup>,  
MARTIN DAŇO<sup>b</sup>, VIPUL KUSUMKAR<sup>a</sup>, DAVID DIVIŠ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Department of Nuclear Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovak republic, <sup>b</sup> Department of Nuclear Chemistry, Faculty of Nuclear Science and Physical Engineering, Czech Technical University in Prague, Břehová 7, 115 19 Praha, Czech republic  
eva.viglasova@uniba.sk

The significance and novelty of our study is mainly in the use of bamboo as a cheap and easily accessible fast-growing starting material for the preparation of a biochar-clay composite, which adsorbs effectively nitrates from aqueous solution. We described in detail a method for preparation of biochar from bamboo in an experimental reactor and subsequent preparation of its composite with a clay mineral, montmorillonite. We show that the prepared composite may be used as an efficient adsorbent for the removal of anions from wastewater or industrial effluents. In our study we focused on nitrates which in this respect represent a serious environmental issue. We also describe the kinetics of the adsorption process. For further improving the sorption characteristics, a biochar/montmorillonite composite was produced and synthesized in an experimental pyrolysis reactor, using bamboo as biomass feedstock. The composite was characterized by physico-chemical and structural methods (FTIR, SEM, SEM/EDX, SSA, low temperature nitrogen adsorption method). The adsorption studies for removal nitrates from aqueous solutions were investigated by batch method at laboratory temperature. The experimental data were fitted by three adsorption models (Langmuir, Freundlich and DR;  $R^2 > 0.93$ ). The maximum adsorption capacity achieved by biochar was about 6 and by biochar/montmorillonite composite 9 [mg g<sup>-1</sup>]. The results suggest that the bamboo-based biochar/montmorillonite composite can be used efficiently in the treatment of industrial effluents or wastewater containing anionic pollutants.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-18-0534 and Scientific Grant Agency VEGA, Project No. 1/0507/17.*



### 8L-01 ORGANICKÉ ELEKTROLYTY PRO REDOXNÍ PRŮTOČNÉ BATERIE

MILAN KLIKAR\*, KAMIL RAK, ZUZANA  
BUREŠOVÁ

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-  
technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10  
Pardubice  
milan.klikar@upce.cz

Redoxní průtočná baterie (RPB) je technologické zařízení umožňující velkokapacitní uskladnění elektrické energie. RPB se využívá především ve spojení s obnovitelnými zdroji energie, jako jsou fotovoltaické či solární elektrárny. Klíčovou složkou této baterie je elektrolyt podléhající vratné redoxní reakci. Historicky nejvyužívanějšími elektrolyty v RPB jsou soli vanadu. Z pohledu ceny a s přihlednutím k ekologickým aspektům je však mnohem perspektivnější využití elektrolytů na bázi organických sloučenin. Proto je v současnosti věnována pozornost především vývoji nových organických elektrolytů, které by v budoucnu nahradily materiály anorganické<sup>1</sup>.

Obrovskou výhodou organických materiálů je možnost jejich strukturální modifikace. Těmito modifikacemi lze pak snadno ladit elektrochemické vlastnosti cílových elektrolytů. Klíčovým strukturálním motivem v organickém elektrolytu je vhodné oxidační či redukční centrum podléhající vlastní elektrochemické redoxní reakci. Avšak pouze chemická stabilita oxidované i redukované formy organického elektrolytu zajistí požadovanou reverzibilitu dané redoxní reakce. Jelikož při elektrochemických redoxních reakcích bývají často generovány částice s nepárovými elektrony, musí být zajištěna jejich stabilita nejlépe pomocí rezonance do přílehlého p-systému. Proto jsou v současnosti konstruovány organické redoxní systémy založené především na (hetero)aromatických skeletech<sup>2</sup>.

RPB mohou pracovat ve vodných i nevodných prostředích. Avšak z pohledu ceny, bezpečnosti a ekologického hlediska je v dnešní době intenzivně rozvíjena oblast organických, ve vodě rozpustných elektrolytů. Takovéto organické materiály musejí být dále dekorovány vhodnými solubilizujícími skupinami zajišťujícími vysokou rozpustnost ve vodě (> 1 M). Mezi organické, ve vodě rozpustné sloučeniny s nejvyšším komercionalizačním potenciálem v oblasti RPB patří bezesporu deriváty anthrachinonu, flavinu či 4,4'-bipyridinu (viologenu)<sup>1</sup>.

V rámci naší pracovní skupiny se proto stal viologen modelovou molekulou pro návrh a syntézu podobných pyridinů, u nichž byl systematicky zkracován/prodlužován p-systém či měněna poloha atomů dusíku (Schéma 1). Tyto sloučeniny byly následně podrobeny primárním voltametričtým testům. Na jejich základě byly podrobně diskutovány vztahy mezi strukturou cílového elektrolytu a jeho elektrochemickými vlastnostmi<sup>3</sup>.

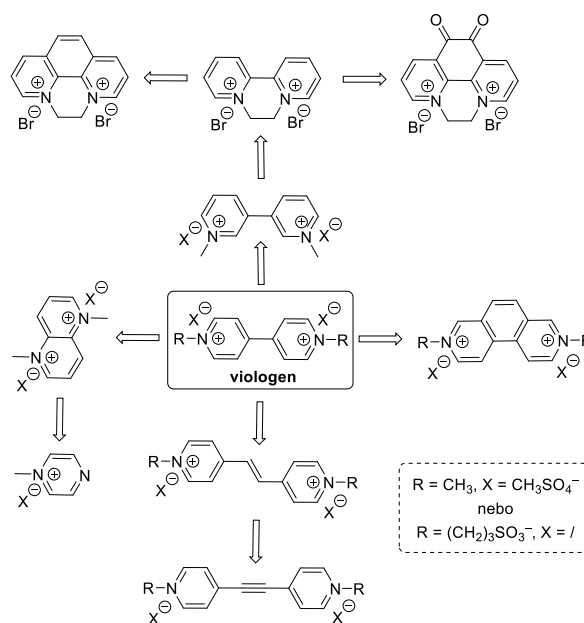


Schéma 1. Struktury cílových organických elektrolytů

Tato práce vznikla za podpory projektu „Baterie na bázi organických redoxních látek pro energetiku tradičních i obnovitelných zdrojů (ORBAT)“, reg. č.: CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_025/0007445, financovaného z EFRR.

#### LITERATURA

1. Winsberg J., Hagemann T., Janoschka T., Hager M. D., Schubert U. S.: *Angew. Chemie - Int. Ed.* 56, 686 (2017).
2. Zhang C., Zhang L., Ding Y., Peng S., Guo X., Zhao Y., He G., Yu G.: *Energy Storage Mater.* 15, 324 (2018).
3. Rak K.: *Diplomová práce*, Univerzita Pardubice, Pardubice (2020).

### 8L-02 DERIVÁTY PYRIMIDINU PRO APLIKACI V OLED

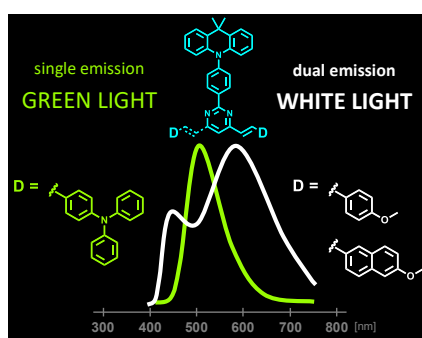
MICHAELA FECKOVÁ<sup>a,b</sup>, FILIP BUREŠ<sup>a</sup>, SYLVAIN  
ACHELLE<sup>b</sup>, PASCAL LE POUL<sup>b</sup>, FRANCOISE  
ROBIN-LE GUEN<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-  
technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573,  
Pardubice CZ-53210, Czech Republic, <sup>b</sup> University of Rennes  
1, CNRS, ISCR (Institut des Sciences Chimiques de Rennes) -  
UMR 6226, Rennes F-35000, France  
Michaela.Feckova@student.upce.cz

Pyrimidin, neboli 1,3-diazin, je elektron-deficitní heterocyklus hojně využívaný v rozličných odvětvích chemie<sup>1</sup>. Jeho vlastnosti, jako vysoká aromaticita, bazicita, schopnost koordinovat ionty kovů, a elektronakceptorní charakter činí z pyrimidinu vhodnou strukturální jednotku pro design sloučenin s požadovanými chemickými, optickými a elektronickými vlastnostmi. Díky těmto vlastnostem pyrimidin nachází své uplatnění ve výrobě OLED (organická světlo emitující dioda, z angl. organic light-

emitting diode) zařízení jako: (i) fluorescenční materiál, (ii) fosforescenční materiál, (iii) TADF materiál, (iv) hostitelský materiál, (v) elektrony přenášející materiál<sup>2</sup>. Vzhledem ke zvyšujícímu se počtu luminoforů pro aplikaci v OLED technologii se otázka vnější účinnosti a barevné čistoty produkovaného světla stává podstatnější. Při porovnání s ostatními šestičlennými dusíkatými heterocykly od pyrimidinu odvozené materiály hrají podstatnou a jedinečnou roli v OLED technologii.

V tomto kontextu byla připravena série trojramenných push-pull molekul s pyrimidinem jako centrální akceptorní jednotkou, akridinem, methoxy a difenylamino periferními donory (obr. 1).



Obr. 1. Schématické znázornění emisních vlastností pyrimidinových derivátů

Tato práce byla financována Univerzitou Pardubice a krajem Bretaň (Francouzská republika).

#### LITERATURA

1. Achelle S., Rodríguez-López J., Robin-le Guen F.: *ChemistrySelect* 1852 (2018).
2. Komatsu R., Sasabe H., Kido J.: *J. Photonics Energy* 032018-1 (2018).

#### 8L-03

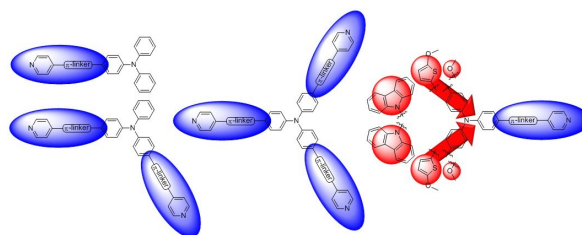
### LINEÁRNÍ, KVADRUPOLÁRNÍ A TRIPODÁLNÍ TRIFENYLAMINY: STRUKTURNÍ ASPEKTY

**JIRÍ TYDLITÁT<sup>a\*</sup>, SYLVAIN ACHELLE<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, <sup>b</sup> University of Rennes 1, CNRS, Institut des Sciences Chimiques de Rennes - UMR6226, F35000 Rennes, France.  
jiri.tydlitat@upce.cz

V posledních desetiletích značně narůstá popularita organických materiálů s aplikacemi v optoelektronice. Na sloučeniny založené na konjugovaném systému násobných vazeb s různým uspořádáním<sup>1</sup> a počtem elektron donorních a akceptorních skupin je zaměřena velká pozornost z hlediska potenciálního využití v organických světlo-emitujících diodách, fotovoltaických zařízeních s aktivní účastí organických materiálů, nelineární optice nebo v materiálech se senzoryckými vlastnostmi (pH senzory, senzory iontů a další). Trifenylaminy jsou široce zkoumány jako centrální

elektron donory v tzv. push-pull sloučeninách. Navázáním jednoho až tří elektron akceptorních pyridinových kruhů, případně v kombinaci s dalšími elektron donorními skupinami byly připraveny chromofory s emisí závislou na pH prostředí. Podle množství přidané kyseliny tak bylo možné vratně změnit barvu emitovaného záření od modré přes bílou až po žlutooranžovou<sup>2,3</sup>. V rámci našeho výzkumu byl studován vliv rozvětvení struktury, délky p-systému i vliv počtu navázaných elektron akceptorních pyridinů stejně jako elektron donorních methoxy, karbazol a methoxythiofenových skupin (obr. 1).



Obr. 1. Trifenylaminy s různým strukturálním uspořádáním

Tato práce vznikla za podpory projektu „ORGBAT“, reg. č.: CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_025/0007445, financovaného z EFRR.

#### LITERATURA

1. Klikar M., Solanke P., Tydlitát J., Bureš F.: *Chem. Rec.* 16, 1886 (2016).
2. Tydlitát J., Achelle S., Rodríguez-López J., Pytela O., Mikysek T., Cabon N., Robin-le Guen F., Miklík D., Růžičková Z., Bureš F.: *Dyes Pigm.* 146, 467 (2017).
3. Tydlitát J., Fecková M., le Poul P., Pytela O., Klikar M., Rodríguez-López J., Robin-le Guen F., Achelle S.: *Eur. J. Org. Chem.* 1921 (2019).

#### 8L-04

### SYNTEZA INHIBITORŮ KINAS S VYUŽITÍM ESCHENMOSEROVY REAKCE

**LUKÁŠ MAREK\*, JIŘÍ HANUSEK**

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice  
St46953@student.upce.cz

Inhibitory tyrosin-kinas představují jednu z nejintenzivněji zkoumaných skupin léčiv, jelikož moderní medicíně umožnily cíleně provádět zásahy do regulace mnoha buněčných procesů. Tím byla otevřena cesta ke zcela novým možnostem v léčbě autoimunních, respiračních a především nádorových onemocnění<sup>1</sup>. Jedním z léčiv, které našly uplatnění v klinické praxi<sup>2</sup>, je **Nintedanib 1**. Farmakofor tohoto potentního inhibitoru tyrosin-kinas tvoří 3-[amino(aryl)methylidyl]-1,3-dihydro-2H-indol-2-onová struktura **2**. V naší výzkumné skupině byla nedávno<sup>3</sup> vyvinuta nová syntetická cesta vedoucí ke sloučeninám tohoto strukturálního typu – *Eschenmoserova* reakce 3-bromindol-2-onů **3** s aromatickými thioamidy **4**. V rámci zkoumání obecnosti reakce a vlivu substituce použitých reaktantů byla připravena řada strukturálně blízkých sloučenin, včetně několika

v literatuře<sup>4</sup> již známých derivátů s popsanou biologickou aktivitou.

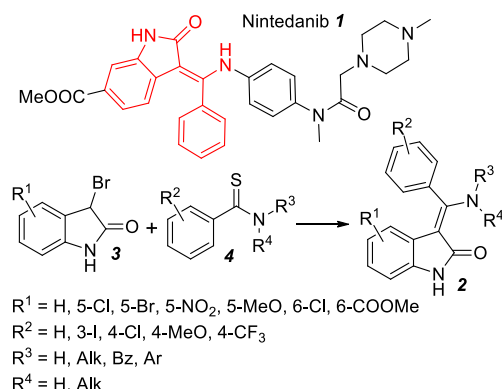


Schéma 1.

## LITERATURA

1. Ward R. A., Goldberg F. W. v knize: *Kinase Drug Discovery*, RSC, Cambridge 2011.
2. Roth G. J., Colbatzky F., Dallinger C., Schlenker-Herceg R., Hilberg F., Kaiser R.: *J. Med. Chem.* 1053, 58 (2015).
3. Kammel R., Tarabová D., Růžičková Z., Hanusek J.: *Tetrahedron Lett.* 1861, 73 (2017).
4. Oxindoles as kinase inhibitors. Merck Patent GmbH. PCT Intl. Patent Appl. Publ. WO 131186 A1, 14 December 2006.

## 8L-05

## ORGANICKÉ SELENIDY PRO DEPOZICE ATOMÁRNÍCH VRSTEV

JAROSLAV CHARVOT<sup>a</sup>, DANIEL POKORNÝ<sup>a</sup>, RAUL ZAZPE<sup>b</sup>, JAN MACÁK<sup>b</sup>, FILIP BUREŠ<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, <sup>b</sup> Centrum materiálů a nanotechnologií, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Nam. Čs. legií 565, 53002 Pardubice  
 jaroslav.charvot@student.upce.cz

Technologie ALD (Atomic Layer Deposition) umožňuje tvorbu libovolně vysokých a uniformních tenkých filmů na různě tvarované povrchy, a to i za mírných podmínek. Tenké vrstvy chalcogenů přechodných kovů (TMD – Transition Metal Dichalcogenides) poskytují slibné vlastnosti ve fotokatalýze, při využití jako elektrod pro Li baterie či polovodičů. Pro depozice selenidů pomocí ALD se využíval  $\text{H}_2\text{Se}$ , jehož hlavní nevýhodou je vysoká toxicita. Jako velice užitečné se později ukázaly bis(trialkylsilyl)selenidy, které poskytují vysokou reaktivitu, těkavost a zároveň termální stabilitu.

Tato práce se zabývá rozšířením bis(trialkylsilyl)selenidové řady o jejich analogy bis(trialkylstanyl)selenidy a dále cyklické silylselenidy, jenž si ponechávají požadované vlastnosti jako dostatečná těkavost, či termální stabilita, avšak poskytují sníženou citlivost vůči vzdušné vlhkosti.

Struktura připravených látek byla potvrzena pomocí GC/MS a heteronukleární NMR spektroskopie. DSC a TG analýzy pak poskytly informace o termálních vlastnostech, které jsou klíčové pro využití v ALD. Vybrané deriváty byly nakonec testovány jako ALD prekurzory při tvorbě tenkých filmů  $\text{MoSe}_2$ .

Tento projekt je financován Grantovou agenturou České republiky (18-03881S).

## 8L-06

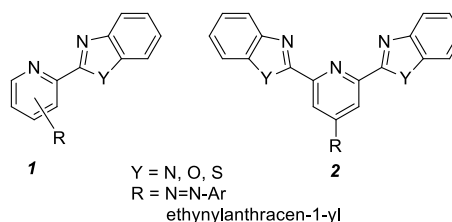
## SYNTHESIS OF NOVEL PHOTOISOMERISABLE PYRIDINE LIGANDS FOR SPIN-CROSSOVER COMPLEXES

JAKUB ORVOŠ, RÓBERT FISCHER, IVAN ŠALITROŠ, BARBORA BRACHŇÁKOVÁ

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia  
 jakuborvos@gmail.com

Possessing a unique combination of magnetic and photoresponsive properties, *spin-crossover* complexes with photoisomerisable ligands are studied intensively, because of their potential use in preparation of modern photoactive materials<sup>1,2</sup>. Light-induced change in ligand structure can alter spin state of a complex, which is accompanied by modification of magnetic properties. This feature is of a great interest in the search for new high capacity memory media and photoswitches<sup>2</sup>. Lack of commercially available photoactive ligands and their non-trivial preparation encouraged us to explore and create new synthetic pathways to access some of these interesting compounds.

Here we present synthesis of novel bidentate and tridentate pyridine-based ligands, bearing photoswitchable azobenzene and anthracene moieties (Scheme 1). Utilising base catalysed Mills reaction<sup>3</sup> or Buchwald-Hartwig coupling of *N*-Boc-arylhazidines followed by oxidation<sup>4</sup>, we successfully created ligands **1** and **2** in up to 65 % overall yield from commercially available starting materials. Ethynylantracene-1-yl derivatives **2** were synthesized via Sonogashira cross coupling.



Scheme 1. Structures of synthesized ligands

Grant agencies (APVV-18-0197 and VEGA 1/0552/18) are acknowledged for the financial support.

## REFERENCES

1. Brachňáková B., Šalitraš I.: *Chem. Pap.* 72, 773 (2018).
2. Jureschi C. M., Linares J., Boulmaali A., Dahoo P. R., Rotaru A., Garcia Y.: *Sensors* 16, 187 (2016).

3. Schmidt S. O., Naggert H., Buchholz A.: Eur. J. Inorg. Chem. 2175 (2016).
4. Lim Y. K., Lee K. S., Cho C. G.: Org. Lett. 5, 979 (2003).

**8L-07**

*Účast zrušena*

**8L-08****SYNTEZA POTENCIÁLNÍCH INHIBITORŮ  
PROTEASOMU ZALOŽENÝCH NA  
SALICYLAMIDECH S ALDEHYDICKOU NEBO  
VINYLSULFONOVOU FUNKČNÍ SKUPINOU****ELIŠKA PILAŘOVÁ<sup>a</sup>, ALEŠ IMRAMOVSKÝ<sup>a</sup>, KAREL  
PAUK<sup>a</sup>, RADEK JORDA<sup>b</sup>, VLADIMÍR KRYŠTOF<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-  
technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10  
Pardubice, <sup>b</sup> Laboratoř růstových regulátorů, Univerzita  
Palackého v Olomouci & Ústav experimentální botaniky  
AV ČR, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc  
st41903@student.upce.cz

Proteasom je proteinový komplex přítomný ve všech eukaryotických buňkách. Je zodpovědný za degradaci již nepotřebných nebo poškozených proteinů. Tyto proteiny jsou nejprve označeny ubiquitinem a následně rozloženy na jednotlivé aminokyseliny protolytickou reakcí, která štěpí peptidickou vazbu za pomoci enzymů tzv. proteas. Tento děj probíhá speciálně na proteasomu 26S, který rozeznává proteiny s označené ubiquitinem. Proteasom 26S se skládá ze dvou částí – řídicí jednotka a jádro. Jádro se dále skládá z 28 podjednotek rozdělených do 4 kruhů (2 vnější a 2 vnitřní)<sup>1,2</sup>.

Inhibice proteasomu je jednou ze strategií pro potlačení nekontrolovatelné proliferace buněk mnohočetného myelomu. Náš předchozí výzkum objevil nové deriváty *O*-benzylsalicylamidů s peptidickým řetězcem skládajícím se z *L*-leucinu a *L*-fenylyalaninu zakončených aldehydickou funkční skupinou, které vykazují antiproteasomální aktivitu<sup>3</sup>.

Nyní se soustředíme na nové aminokyseliny, jako jsou *L*-tryptofan, *L*-norleucin, *L*-cyklohexylalanin a *L*-prolin v kombinacích s *L*-leucinem a aldehydickou či vinylsulfonovou funkční skupinou.

Zaměřili jsme se na originální deriváty se třemi aminokyselinami a to konkrétně na kombinaci dvou *L*-leucinů s jinou třetí aminokyselinou, která se nacházela peptidickým v řetězci buď uprostřed, anebo na konci řetězce. Všechny tyto deriváty byly, případně budou testovány na proteasomální aktivitu.

*Tato práce vznikla za podpory Fakulty chemicko-  
technologické, Univerzity Pardubice a projektu GA 18-  
03847S.*

**LITERATURA**

1. Kubiczková L., Matějčková J., Sedlářková L., et al.: *Klin. Onkol.* 26, 11 (2013).
2. Sulistio Y. A., Heese K.: *Mol. Neurobiol.* 53, 905 (2016).
3. Jorda R., Dušek J., Řezníčková E., Pauk K., Magar, P., Imramovský A., Kryštof V.: *Eur. J. Med. Chem.* 135, 142 (2017).

**8L-09****ORGANIC MATERIALS FOR ELECTRONIC  
MEMORY DEVICES****JIRÍ PFLEGER, YADU RAM PANTHI, DRAHOMÍR  
VÝPRACHTICKÝ**

*Institute of Macromolecular Chemistry, Czech Academy of  
Sciences, Heyrovsky Sq. 2, 162 06 Prague 6  
jiri.pfleger@imc.cas.cz*

Organic electronics is a rapidly boosting technology, in which electronic memory devices represent an important but not yet developed part. For the targeted applications of organic electronics, like RFID tags used for smart packaging, for manufacturing and warehouse automation or security systems, simple low-level performance devices are required, which could be produced by printing. Resistive-type memory elements (ReRAM) made from switchable resistive organic materials can fulfill such requirements. Electrical bistability usually arises from changes of the intrinsic materials properties, such as phase, conformation, charge transfer or redox state, in response to the applied electric field.

We present here a resistor-type memory (ReRAM) based on thin films of molecularly-doped polymer made of soluble poly[2,5-(2-octyldodecyl)-3,6-diketopyrrolopyrrole-alt-5,5-(2,5-di(thien-2-yl)thieno [3,2-b]thiophene)] (DPPDPT) mixed with a soluble low-molecular weight 2-diethyl-aminopropyl perylene (Per-2DEAPA) acceptor additive. Alternatively, multilayer structures with an added thin insulating layer of poly[2-cyanoethyl(vinyl)ether with admixed Au nanoparticles were prepared, which showed pronounced and reproducible hysteresis in their current voltage characteristics. Depending on the composition, the maximum achieved ON/OFF ratio was about 10<sup>3</sup> with writing/erasing voltage +/-5 V and reading at applied 0.5 V.

As a second system single component polymer rewritable resistive memory devices were prepared using a newly synthesized poly(*N*-(3-(9*H*-carbazol-9-yl)propyl) methacryl-amide) sandwiched as a thin film between glass/ITO and Al electrodes. The polymer was prepared by a radical polymerization of the *N*-(3-(9*H*-carbazol-9-yl)propyl)-methacryl amide using azobisisobutyronitrile as a radical initiator. The molar mass of the polymer was relatively low (*M*<sub>w</sub> = 6000) but the film forming abilities were sufficient.

The device showed well pronounced and repeatable hysteresis in I–V characteristics with a switching effect: maximum ON/OFF ratio was about 200, and a retention time exceeding 2 hours. After some initial instability during memory element forming, the ON and OFF current was stable during more than 40 repeated write/erase cycles.

*Work supported by the MEYS of the Czech Republic, program INTEREXCELLENCE, Project LTAUSA19066.*

### 8L-10 SYNTEZA FLUOROVANÝCH DIAMINŮ A JEJICH VYUŽITÍ V PŘÍPRAVĚ 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, 532 10 Pardubice, <sup>b</sup> TOSEDA s.r.o., U Panasonicu 376, 53006, Staré Čívce  
pavel.simon1@student.upce.cz

Široce využívané aromatické polyimidy našly uplatnění v mnoha inženýrských oborech především díky kombinaci vysoké tepelné a chemické odolnosti, pevnosti, tažnosti a dobré dielektrické vlastnosti. Nedostatkem komerčních aromatických polyimidů je jejich barevnost a špatná optická propustnost.

Tato práce se zabývá syntézou fluorovaných diaminů, které byly dále použity pro přípravu polyimidů. Byl studován vliv struktury diaminu na vlastnost finálního polyimidového filmu. Celkem byly připraveny 2 série diaminů s rozdílným fluorovaným centrem. Diaminy byly syntetizovány z perfluorovaných aromatických sloučenin a aminofenolů za bazické katalýzy.

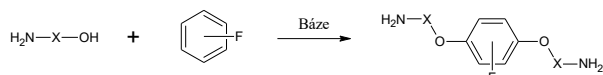


Schéma 1. Syntéza diaminů

Ze syntetizovaných diaminů byly připraveny polyimidové filmy, u kterých byly studovány termální, optické a mechanické vlastnosti. Příprava polyimidů vycházela ze 3 komerčně dostupných dianhydridů a připravených diaminů.

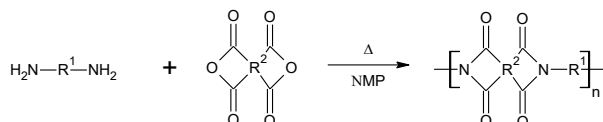


Schéma 2. Příprava polyimidů

Nejlepší připravené polyimidové filmy vykazovaly excelentní termální stabilitu a dobré optické vlastnosti. Některé filmy mají výborné mechanické vlastnosti. Tato skutečnost dává vysokou pravděpodobnost uplatnění připravených filmů v některém průmyslovém odvětví, kde se běžně tyto filmy využívají. Jako např. filtry, membrány, displeje nebo pro vesmírné aplikace.

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

### 8L-11 FOTOREDOXNÍ TRANSFORMACE V ORGANICKÉ CHEMII ZPROSTŘEDKOVANÉ DIKYANPYRAZINEM

FILIP BUREŠ, ZUZANA BUREŠOVÁ

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice  
filip.bures@upce.cz

Fotoredox katalýza je v současné době považována za spolehlivý nástroj organické syntézy, který zažívá poměrně bouřlivou renesanci. Transformace indukované viditelným světlem jsou obecně prováděny za mírných reakčních podmínek bez přítomnosti externího zdroje energie mimo světlo. Vedle dobře známých organokovových fotoredox katalyzátorů, jako jsou polypyridyl komplexy ruthenia a iridia, lze ve fotoredox katalýze využít i čistě organické substance, jako jsou např. xanthenová barviva. Jejich strukturní modifikace a ladění vlastností jsou však limitovány a proto jsou dnes syntetická barviva rovněž významnou skupinou katalyzátorů. V nedávné době byl v naší pracovní skupině vyvinut velice efektivní katalyzátor na bázi push-pull dikyanpyrazinu (DPZ)<sup>1</sup> ve tvaru písmene X nesoucí dva elektron donory na bázi 5-methoxythiofen-2-ylu. Tato molekula vykazuje širokou absorpci viditelného světla a fundamentální vlastnosti dobře uzpůsobené pro fotoredox katalýzu. V příspěvku bude prezentována jeho vylepšená příprava, fundamentální fotoredox vlastnosti a řada organických transformací, ve kterých byl katalyzátor úspěšně využit<sup>2-6</sup>.

Tato práce vznikla za podpory grantu CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_025/0007445.

#### LITERATURA

1. Zhao Y., Zhang C., Chin K. F., Pytela O., Wei G., Liu H., Bureš F., Jiang Z.: RSC Adv. 4, 30062 (2014).
2. Hloušková Z., Tydlitát J., Kong M., Pytela O., Mikysek T., Klikar M., Almonasy N., Dvořák M., Jiang Z., Růžička A., Bureš F.: ChemistrySelect 3, 4262 (2018).
3. Liu X., Ye X., Bureš F., Liu H., Jiang Z.: Angew. Chem. Int. Ed. 54, 11443 (2005).
4. Zhang C., Li S., Bureš F., Lee R., Ye X., Jiang Z.: ACS Catal. 6, 6853 (2016).
5. Wei G., Zhang C., Bureš F., Ye X., Tan C.-H., Jiang Z.: ACS Catal. 6, 3708 (2016).
6. Hloušková Z., Klikar M., Pytela O., Almonasy N., Růžička A., Jandová V., Bureš F.: RSC Adv. 9, 23797 (2019).

**8P-01**  
**SYNTHESIS OF POLYHYDROXYLATED**  
**PYRROLIZIDINE ALKALOIDS BY OLEFINATION**  
**REACTIONS OF ISOXAZOLIDINE DIOLS**

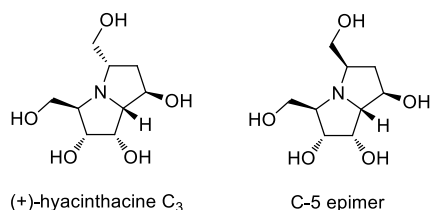
**LÍVIA DIKOŠOVÁ, RÓBERT FISCHER**

*Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry,  
 Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9,  
 812 37 Bratislava, Slovakia  
 liv.dikos@gmail.com*

Polyhydroxylated pyrrolizidines are a common structural motif amongst the wide range of natural products that exhibit interesting inhibition properties<sup>1</sup>. Our synthetic target, alkaloid (+)-hyacinthacine C<sub>3</sub> shows a good inhibition activity against *C. saccharolyticum* β-glycosidase (IC<sub>50</sub> = 25 μM) and bovine liver β-galactosidase (IC<sub>50</sub> = 52 μM)<sup>2</sup>.

This work builds on the ongoing interest of our research group in the synthesis and utilisation of bicyclic pyrroloisoxazolidines<sup>3</sup>, that have been previously used to prepare (–)-hyacinthacine B<sub>2</sub><sup>4</sup>.

This report deals with the synthesis of pyrrolizidine alkaloid (+)-hyacinthacine C<sub>3</sub> and its C-5 isomer starting from L-mannose derived nitrone that undergoes a *syn*-stereoselective 1,3-dipolar cycloaddition with vinylene carbonate, followed by Wittig's olefination of the isoxazolidine diol with P-ylide, which introduces essential functional groups to the molecule and thus enables us to prepare natural hyacinthacine C<sub>3</sub> and its C-5 epimer.



Scheme 1. (+)-Hyacinthacine C<sub>3</sub> and its C-5 epimer

*We would like to thank gratefully to the Slovak Grant Agency VEGA (project no. 1/0552/18).*

**REFERENCES**

1. Compain P., Martin O. R.: *Imminosugars: from Synthesis to Therapeutic Applications*, Wiley & Sons, Chichester 2007.
2. Kato A., Kato N., Adachi I., Hollinshead J., Fleet G. W. J., Kuriyama C., Ikeda K., Asano N., Nash R. J.: *J. Nat. Prod.* 70, 993 (2007).
3. a) Malatinský T., Spišáková M., Babjak M., Doháňošová J., Marek J., Moncol J., Fischer R.: *Eur. J. Org. Chem.* 6, 1086 (2017); b) Beňadiková D., Medvecký M., Filipová A., Moncol J., Gembický M., Prónayová N., Fischer R.: *Synlett* 25, 1616 (2014).
4. Malatinský T., Otočková B., Dikošová L., Fischer R.: *Chemistry Select* 4, 4233 (2019).

**8P-02**  
**PREPARATION OF SELECTED MONO- AND DI-**  
**CATIONIC IONIC LIQUIDS DERIVED FROM**  
**1-METHYLIMIDAZOLE, PYRIDINE,**  
**3-METHYLPYRIDINE, 4-BENZYL PYRIDINE AND**  
**THEIR ANTIMICROBIAL PROPERTIES**

**JANA FOJTÁŠKOVÁ\*, LUCIE OBALOVÁ, PETR PÁNEK**

*Institute of Environmental Technology, VŠB – Technical  
 University of Ostrava, 17.listopadu 15/2172, 708 00 Ostrava-  
 Poruba  
 jana.fojtaskova@vsb.cz*

It is known that ionic liquids, which are liquid at room temperature, have potential for the application in many scientific and technological fields. In this work a series of mono- (IL) and new dicationic (DIL) ionic liquids derived from 1-methylimidazole, pyridine, 3-methylpyridine, 4-benzylpyridine were prepared by two-step reaction pathway. In first step (quaternization) prepared bromides with high purity and high yields were then converted to tetrafluoroborate. Obtained products were characterized by use of <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, <sup>19</sup>F-NMR, FT-IR and UV-Vis spectroscopies and physico-chemical parameters such as melting point, density, conductivity, viscosity, miscibility with polar and non-polar solvents and thermal stability (TG analysis) were determined. The IIs were tested for their antimicrobial activity by taking some kinds of bacterial strains (gram-positive and gram-negative).

*This work was financially supported by the Ministry of Industry and Trade of the Czech Republic, project No. FV10089 "Synthesis of ionic liquids in a microwave reactor". Experimental results were accomplished by using Large Research Infrastructure ENREGAT supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic under project No. LM2018098.*

**8P-03**  
**PŘÍPRAVA A VYUŽITÍ KONJUGOVANÝCH**  
**DERIVÁTŮ PYRIDYLAMINU**

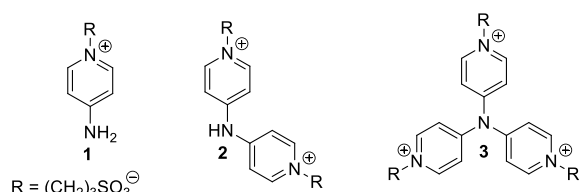
**MONIKA GRYGAROVÁ, ZUZANA BUREŠOVÁ, FILIP BUREŠ**

*Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-  
 technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10  
 Pardubice  
 St54475@student.upce.cz*

Redoxní průtočné baterie mohou snadno ukládat velké množství elektrické energie. Díky vysoké kapacitě a výkonu zmírňují kolísavou produkci obnovitelných elektráren a tím přispívají ke zlepšení stability elektrické sítě. Tyto baterie vynikají aplikací s relativně nízkými náklady, dlouhou životností a nízkým samovybíjením. Na rozdíl od baterií v pevné fázi jsou v redoxních průtočných bateriích využívány redoxně aktivní materiály rozpuštěné v elektrolytu. Typická redoxní průtočná baterie se skládá ze dvou zásobníků elektrolytu, ze kterých jsou tyto elektrolyty čerpány přes dvě porézni uhlíkové elektrody<sup>1,2</sup>.



Naším cílem bylo syntetizovat sloučeniny vhodné pro využití jako redoxně aktivní látky v průtočných bateriích. Mezi základní požadavky na připravované organické látky patří reverzibilita redoxního procesu, rozpustnost ve vodě a stabilita. Pro tento účel byly syntetizovány tři cílové sloučeniny **1–3**, jejichž struktura je založena na pyridylaminu (obr. 1)<sup>3</sup>. Základními strukturálními motivy jsou 4-amino-pyridin, dipyridin-4-ylamin a tripyridin-4-ylamin, které podléhaly kvarternizaci na atomech dusíku propan-1,3-sultonem. Všechny připravené sole byly podrobeny primárnímu voltametrickému testování. U sloučeniny **3** byla dále studována rozpustnost v neutrálním elektrolytu (1M Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>). V příspěvku budou diskutovány především syntetické cesty vedoucí k těmto sloučeninám a jejich možné uplatnění v redoxních průtočných bateriích.



Obr. 1. Struktury cílových organických sloučenin

Tato práce vznikla za podpory projektu „Baterie na bázi organických redoxních látek pro energetiku tradičních i obnovitelných zdrojů (ORGBAT)“, reg. č.: CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_025/0007445, financovaného z EFRR.

## LITERATURA

1. Janoschka T., Martin N., Hager M. D., Schubert U. S.: *Angew. Chemie - Int. Ed.* 55, 14427 (2016).
2. Zhang D., Forner-Cuenca A., Taiwo O. O., Yufit V., Brushett F. R., Brandon N. P., Gu S., Cai Q.: *J. Power Sources* 447, 227249 (2020).
3. Bureš F., Cvejn D., Melánová K., Beneš L., Svoboda J., Zima V., Pytela O., Mikysek T., Růžičková Z., Kityk I. V., Wojciechowski A., Alzayed N. J.: *J. Mater. Chem. C* 4, 468 (2016).

## 8P-04

## IONTOVÉ PUSH-PULL DERIVÁTY IMIDAZOLU

**MARCELA CHRTKOVÁ, PATRIK PAŘÍK, FILIP BUREŠ**

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice

marcela.chrtkova@student.upce.cz

Jako push-pull systémy jsou označovány konjugované systémy násobných vazeb spojující elektronodonor a elektronakceptorní část molekuly. Důsledkem polarizace dochází k vnitřnímu přenosu náboje, díky kterému se staly tyto systémy středem zájmu mnoha studií a našly využití především v materiálové chemii v oblasti optoelektronických zařízení<sup>1</sup>. V návaznosti na předchozí práci<sup>2</sup> vzniklou na našem pracovišti byl do role elektronakceptorní jednotky zvolen

skelet 4,5-difenyl-1,3-dimethylimidazolia, který byl přes benzenové jádro ( $\pi$ -můstek) vázané v poloze 2 konjugován se substituentem jak elektronodorním, tak elektronakceptorním. Pro srovnání byl připraven i derivát nesubstituovaný (Schéma 1).

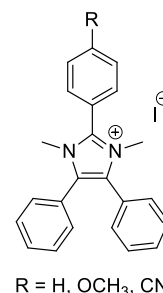


Schéma 1. Obecná struktura připravených imidazoliů

Uvedené imidazoliové soli byly připraveny z odpovídajících imidazolů kvarternizací. Ty byly získány Suzukiho-Miyauraovou reakcí, resp. přímou tvorbou imidazolového jádra. Čistota a struktura chromoforů byla potvrzena bodem tání, HR-MALDI hmotnostní spektrometrií, FT-IR spektroskopií a <sup>1</sup>H a <sup>13</sup>C NMR spektroskopií. Vliv kvarternizace a mezomerních efektů vybraných substituentů byl studován spektrálně (UV-Vis spektroskopie) a z hlediska termických vlastností pomocí DSC analýzy. Z porovnání experimentálně zjištěných dat pro imidazolia a výchozí imidazoly pak byly vyvozeny jednoduché vztahy struktura-vlastnosti a z optického chování vyhodnocena míra přenosu vnitřního náboje.

## LITERATURA

1. Bureš F.: *Chem. Listy* 107, 834 (2013).
2. Varga J.: *Diplomová práce*, Univerzita Pardubice, Pardubice (2017).

## 8P-05

## DENITRAČNÉ KROS-KAPLINGY NITROSTYRÉNOV

**MICHAELA MARČEKOVÁ, BRANISLAV FERKO, PAVOL JAKUBEC**

Oddelenie organickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko  
michaela.marcekova@stuba.sk

Pri kovom katalyzovaných skřížených kaplingov dochádza k vytvoreniu novej väzby medzi fragmentami dvoch rôznych zlúčenín. Reakcie tohto typu sa vyznačujú jednoduchým technickým prevedením, použitím minimálneho množstva katalyzátora, ale zároveň zahŕňajú ohraničený počet funkčných skupín na rôznorodých substrátoch.

Momentálne rastúci dopyt po prechodných kovoch v mnohých priemyselných odvetviach je jednou z hnacích síl pre rozvoj ekonomicky a ekologicky efektívnejších kros-kaplingov. Hnacou silou pre rozvoj nových kaplingov je nahradenie drahých prechodných kovov (Pd, Pt) za menej

toxické kovy (Fe, Ni) alebo ich úplná eliminácia v reakciách. Nemenej dôležitý je vývoj nových kros-kaplingových partnerov.

Atraktívnymi základnými stavebnými blokmi v organickej chémii, ktoré slúžia ako kľúčové nástroje na prípravu novej C-C väzby sú nitrostyrény. Vyznačujú sa reaktivitou ako akceptory v konjugovaných adíciách, dienofily pri Diels-Alderovej reakcii a v súčasnosti sú známe aj v alternatívnych kaplingových reakciách založených na adično-elimináčnom mechanizme<sup>1</sup>. Ďalším dôležitým faktorom pre ich výber v nových kros-kaplingoch bola nielen komerčná dostupnosť, ale aj jednoduchá príprava Henryho kondenzáciou z aldehydu a nitrometánu<sup>2</sup>.

Kľúčovou časťou vývoja novej reakcie bola optimalizácia reakcie spoľahlivého nového reakčného partnera k aromatickým nitrostyrénom v bezprecedentných skřížených kaplingoch. Atraktívnymi substrátmi sú buď komerčne dostupné deriváty alebo látky ľahko pripraviteľné pomocou nenáročnej jedнокrokovkej syntézy. Medzi tieto nádejné látky spadajú fotosenzitívne substráty, ktoré majú potenciál generovať radikál<sup>3</sup>.

Ambíciou novej metodike bola úplná eliminácia prechodných kovov z reakcií, ktorú je možné uskutočniť aplikáciou moderných fotochemických a ekologických trendov v chémii. Stále viac sa dynamicky rozvíjajúca oblasť zelenej chémie umožňuje generovanie reaktívnych vysokoenergetických intermediátov pomocou denného svetla s obrovským potenciálom v organickej syntéze. Touto metódou generovaný radikál sa následne aduje na nitrostyrén, pričom v nasledujúcom kroku dochádza k eliminácii nitroskupiny vplyvom reakčných podmienok (Schéma 1).

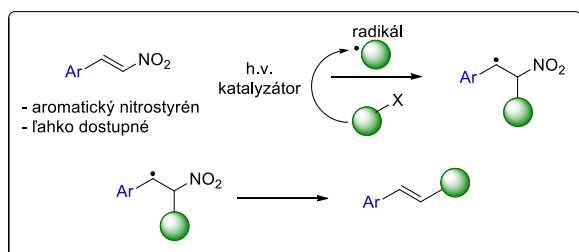


Schéma 1. Schématické znázornenie priebehu adično-elimináčného mechanizmu navrhovaného skříženého kaplingu

Práca vznikla za podpory Vedeckej grantovej agentúry MŠVVaŠ a SAV (zmluva č. VEGA 1/0489/19) a grantu v rámci Programu na podporu mladých výskumných pracovníkov na STU v Bratislave.

#### LITERATÚRA

1. Marčeková M., Ferko B., Detková K. R., Jakubec P.: *Molecules* (odoslané do tlače).
2. Worrall D. E.: *Org. Synth.* 9, 66 (1929).
3. Schweitzer-Chaput B., Horwitz M. A., de Pedro Beato E., Melchiorre P.: *Nature Chem.* 11, 129 (2019).

#### 8P-06

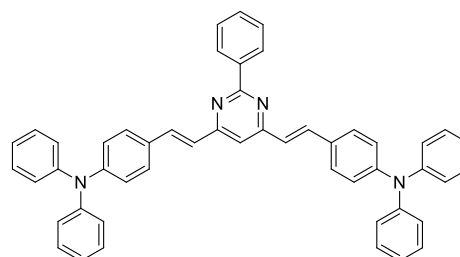
#### PUSH-PULL DERIVÁTY PYRIMIDINU A JEJICH VLASTNOSTI

**GABRIELA PERGLOVÁ, MICHAELA FECKOVÁ, FILIP BUREŠ**

*Ústav organickej chémie a technológie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 25, 532 10 Pardubice*

*Gabriela.Perglova@student.upce.cz*

Pyrimidin predstavuje díky svým jedinečným vlastnostem, jako je např. vysoká aromaticita, silný elektron-akceptorní charakter, bazicita a schopnost koordinace atomů a iontů kovů velmi žádaný stavební blok ke konstrukci  $\pi$ -konjugovaných organických sloučenin, jež nacházejí své využití v organoelektronice, nelineární optice, oblasti pH senzorů či biozobrazování<sup>1</sup>. Při biozobrazování je využíváno sond na bázi pyrimidinových derivátů k označení zkoumané struktury a následnému vyvolání detekovatelného signálu<sup>2</sup>. V návaznosti na to byly připraveny tři cílové chromofory s pyrimidinem jako centrální elektron-akceptorní jednotkou push-pull systému spojenou styrylovým  $\pi$ -můstkem s difenylaminovým periferním donorem. Následně byl zkoumán vliv polohy a počtu donorních jednotek na vlastnosti cílových látek.



Obr. 1. Struktura vybraného cílového derivátu (nahore) a jeho solvatochromní chování (fotka pořízena při ozařování ruční UV lampou  $\lambda_{exc}=245$  nm)(dole)

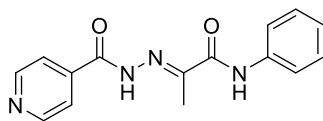
#### LITERATURA

1. Achelle S., Ple N.: *Curr. Org. Synth.* 9, 163 (2012).
2. Yang Y., Zhao Q., Feng W., Li F.: *Chem. Rev.* 113, 192 (2013).

## 8P-07

STUDIUM ANTIMYKOBAKTERIÁLNÍ AKTIVITY  
HALENOVANÝCH DERIVÁTŮ (*E*)-2-(2-ISO-  
NIKOTINOYLHYDRAZINYLIDEN)-*N*-FENYL-  
PROPANAMIDUVÁCLAV PFLÉGR<sup>a</sup>, MARTIN KRÁTKÝ<sup>a</sup>, JIŘINA  
STOLÁŘIKOVÁ<sup>b</sup>, JARMILA VINŠOVÁ<sup>a</sup><sup>a</sup> Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci  
Králové, Akademika Heyrovského 1203/8, 500 05 Hradec  
Králové, <sup>b</sup> Zdravotní ústav se sídlem v Ostravě, Partyzánské  
náměstí 2633/7, 702 00 Ostrava  
PflegrV@faf.cuni.cz

Vývoj terapeutických možností pro léčbu tuberkulózy (TB), zejména s ohledem na selekci multilékově rezistentních kmenů, představuje nutnost urgentního řešení této choroby v globálním měřítku. Uvádíme novou ucelenou sérii sloučenin, ve které sledujeme ovlivnění antimykobakteriální aktivity modelové molekuly (*E*)-2-(2-isonikotinoylhydrazinylden)-*N*-fenypropanamidu **I**. Tato sloučenina **I** byla již dříve připravena<sup>1</sup> a vykázala minimální inhibiční koncentraci (MIC) srovnatelnou s isoniazidem (INH), vysoce účinným léčivem TB první linie, ale nebyla dále systematicky studována. S cílem zvýšení antimykobakteriální aktivity molekuly **I** jsme připravili celou řadu jejích derivátů, substituovaných na fenylu, především halogeny.

Obr. 1. Modelová sloučenina **I**

U všech připravených sloučenin byla testována aktivita vůči *Mycobacterium tuberculosis* a některým kmenům atypických mykobakterií (*M. avium*, *M. kansasii*) s významně nižšími hodnotami MIC (někdy až 33× nižšími) ve srovnání s parentním léčivem INH (MIC = 1 μM), který byl použit jako syntetický prekurzor a standard pro porovnání aktivity. Prezentované deriváty jsou vysoce selektivní, nevykazují cytotoxicitu vůči savcím buňkám (testy byly prováděny na buňkách HepG2 a MonoMac6). Zároveň byla studována inhibiční aktivita proti Gram-pozitivním kokům, vůči kterým však nebyly aktivní.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR (reg. č. 20-19638Y) a Univerzity Karlovy (SVV 260 547).

## LITERATURA

1. Kryukova L. M., Zelenin K. N., Értevtisian L. N., Dobrego V. A.: Pharm. Chem. J. 11, 26 (1977).

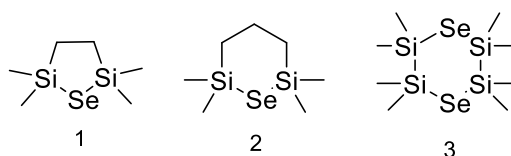
## 8P-08

CYKlickÉ SILYLSELENIIDY: ORGANICKÉ  
SLOUČENINY SELENU JAKO PREKURZORY PRO  
DEPOZICE ATOMÁRNÍCH VRSTEVDANIEL POKORNÝ<sup>a</sup>, JAROSLAV CHARVOT<sup>a</sup>, RAUL  
ZAZPE<sup>b</sup>, MILAN KLIKAR<sup>a</sup>, JAN MACAK<sup>b</sup>, FILIP  
BUREŠ<sup>a</sup><sup>a</sup> Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-  
technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10,  
Pardubice, <sup>b</sup> Centrum materiálů a nanotechnologií, Univerzita  
Pardubice, Nám. Čs. Legií 565, 530 02, Pardubice  
st56842@student.upce.cz

Zajímavé vlastnosti nanovrstev selenidů přechodných kovů lze s úspěchem využívat v elektronice, fotokatalýze a dalších mnoha aplikacích. Stále větší oblibu pro tvorbu tenkých filmů získává ALD (Atomic Layer Deposition), především díky schopnosti nanášet požadované vrstvy s minimálním počtem defektů na různě tvarované povrchy jako nanočástice nebo nanotrubičky. Pro depozice selenidů však bylo testováno pouze několik látek, a to vysoce toxický H<sub>2</sub>Se nebo Et<sub>2</sub>Se, který však na rozdíl od příbuzné metody CVD neposkytuje uspokojivé výsledky. V roce 2009 představené bis(trialkylsilyl)selenidy<sup>1</sup> s vysokou těkavostí a reaktivitou dosahují excelentních výsledků při depozicích tenkých vrstev.

Nevhodou bis(trialkylsilyl)selenidů je však jejich vysoká citlivost na vzdušnou vlhkost. Tato práce navrhuje tři cyklické silylselenidy, obsahující jeden či dva atomy selenu, s cílem zvýšit chemickou odolnost vůči vzdušné vlhkosti a nakonec samotná depozice tenkých vrstev MoSe<sub>2</sub> reakcí cyklického silylselenidu s MoCl<sub>5</sub>, kdy nejlepšími výsledky bylo dosaženo za použití selenidu **3**.

Popsaná syntéza cílových látek je doplněna strukturální analýzou pomocí GC/MS a NMR spektroskopie. Termální vlastnosti byly studovány s využitím DSC a TG analýz. Diskutována je i zmíněná odolnost vůči vzdušné vlhkosti a nakonec samotná depozice tenkých vrstev MoSe<sub>2</sub> reakcí cyklického silylselenidu s MoCl<sub>5</sub>, kdy nejlepšími výsledky bylo dosaženo za použití selenidu **3**.



Tento projekt je financován Grantovou agenturou České republiky (18-03881S).

## LITERATURA

1. Pore V., Hatanpää T., Ritala M., Leskelä M.: J. Am. Chem. Soc. 131, 3478 (2009).

**8P-09**  
**SYNTHESIS OF NEW ISOXAZOLIDINYL EPOXIDES**  
**– USEFUL PRECURSORS FOR PREPARING**  
**ISOXAZOLIDINYL 1,2,3-TRIAZOLES**

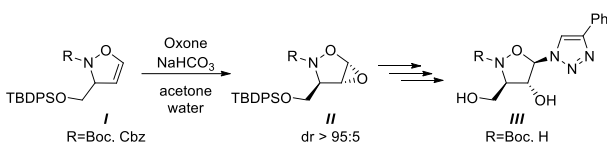
**RADKA ŠTADÁNIOVÁ, RÓBERT FISCHER**

*Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic  
 radka.stadaniova@gmail.com*

Isoxazolidines play a very important role in organic chemistry as constituents of biologically interesting compounds<sup>1</sup>. Among them, isoxazolidinyl 1,2,3-triazoles represent an important group of heterocyclic compounds, which have been found to be promising drug candidates in pharmacological research<sup>2,3</sup>.

Recently, we have achieved the first entry into the synthesis of novel types of isoxazolidinyl 1,2,3-triazoles with an isoxazolidine ring hydroxylated at C-4 carbon atom<sup>4</sup>.

The key intermediates, 4,5-unsubstituted 2,3-dihydroisoxazoles **I** with important hydroxymethyl group attached at C-3, have been prepared according to the procedure based on the elimination reaction of the 5-hydroxyisoxazolidines. Epoxidation reactions of 2,3-dihydroisoxazoles with *in situ* generated 3,3-dimethyldioxirane yielded desired isoxazolidinyl epoxides **II** (Scheme 1), which were subjected to regioselective epoxide ring opening reactions with halogenating reagents providing 5-haloisoxazolidin-4-ols. Model 5-chloroisoxazolidine was subsequently used in nucleophilic substitution reaction with sodium azide to obtain the corresponding 5-azidoisoxazolidine. Finally, the triazole scaffold **III** was prepared applying the 1,3-dipolar cycloaddition of 5-azidoisoxazolidine with phenylacetylene.



Scheme 1. Synthetic route to isoxazolidinyl 1,2,3-triazoles

*We would like to gratefully thank the Slovak Grant Agency VEGA (project no. 1/0552/18).*

REFERENCES

- Chiacchio M. A., Giofrè S. V., Romeo R., Romeo G., Chiacchio U.: *Curr. Org. Synth.* 13, 726 (2016).
- Piotrowska D. G., Balzarini J., Głowacka I. E.: *Eur. J. Med. Chem.* 47, 501 (2012).
- Romeo R., Giofrè S. V., Carnovale C., Campisi C., Parenti R., Bandini L., Chiacchio M. A.: *Bioorg. Med. Chem.* 21, 7929 (2013).
- Záborský O., Štadániová R., Doháňošová J., Moncol J., Fischer R.: *Synthesis* 49, 4942 (2017).

**8P-10**  
***N,N*-DIFENYLTHIOFEN-2-AMIN JAKO DONORNÍ**  
**JEDNOTKA PRO PUSH-PULL CHROMOFORY**

**KATEŘINA ŠTURSOVÁ\*, MILAN KLIKAR, JIŘÍ KULHÁNEK**

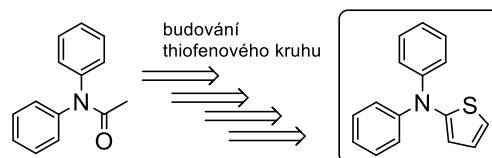
*Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice  
 katerina.stursova@student.upce.cz*

Organické push-pull chromofory jsou sloučeniny tvořené  $\pi$ -konjugovaným systémem násobných vazeb, který je dále dekorován vhodnými elektrondonorními a akceptorními substituenty. Vzájemnou interakcí těchto substituentů dochází k intramolekulárnímu přenosu náboje v push-pull molekule. Tyto vysoce polarizované molekuly poté disponují mimořádnými optoelektronickými vlastnostmi<sup>1</sup>. Díky těmto vlastnostem se push-pull chromofory staly fenoménem v oblasti materiálové chemie, využívají se zejména v optoelektronických a polovodičových zařízeních, ale jejich aplikační rozsah zahrnuje například i oblast bioobrazování<sup>2,3</sup>.

Trifenylamin (TFA) se řadí mezi nejpobulárnější elektrondonorní jednotky využívané v push-pull chromoforech. Systematická náhrada jednoho fenylového jádra v TFA za heteroaromatický thiofen poskytuje *N,N*-difenylothiofen-2-amin (DFTA) jako poměrně nový donorní prekursor disponující oproti TFA vyšší donorní silou i polarizabilitou.

V současné době jsou přípravy DFTA založeny především na moderních cross-couplingových reakcích<sup>4</sup>. Avšak tyto reakce využívají drahé katalyzátory, nutnost práce pod inertní atmosférou a rovněž poskytují nízké výtěžky. Proto je zajímavou alternativou syntézy DFTA budování thiofenového kruhu za využití cyklokondenzačních reakcí<sup>5</sup> (obr. 1). Tato syntéza využívá jako výchozí látku levný a komerčně dostupný *N,N*-difenylacetamid. Čtyřkroková reakční cesta poté poskytuje cílový DFTA v uspokojivém výtěžku, nevyžaduje drahé katalyzátory a nevyžaduje práci pod inertní atmosférou.

DFTA jako donorní prekursor lze v „ortho“ poloze thiofenu dále snadno lithiovat či halogenovat a tím vytvořit reakční centrum pro tvorbu C-C vazby ve smyslu cross-couplingové reakce. Tímto způsobem lze DFTA skelet snadno zavést do libovolné struktury push-pull chromoforu.



Obr. 1. Budování heteroaromatického cyklu jako optimální reakční cesta poskytující cílový DFTA

LITERATURA

- Bureš F.: *RSC Adv.* 4, 58826 (2014).
- Ostroverkhova O., v knize: *Handbook of Organic Materials for Optical and (Opto)Electronic Devices: Properties and Applications*, Woodhead Publishing Ltd, Cambridge 2013.

- Yang Y., Zhao Q., Feng W., Li F.: Chem. Rev. 113, 192 (2013).
- Hooper M., Hartwig J., Utsunomiya M.: Org. Chem. 68, 2861 (2003).
- Hartmann H., Gerstner P., Rohde D.: Org. Lett. 11, 1998 (2001).

**8P-11**

Účast zrušena

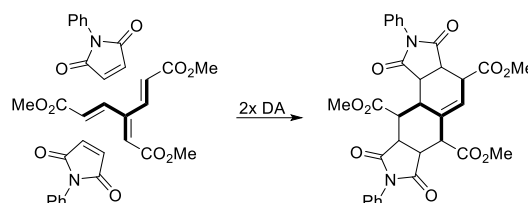


Schéma 2. Diels-Alderové reakcie

Táto práca vznikla za podpory grantu GAČR (r.č. 18-17868S) a Univerzity Karlovej (SVV 260 401, GAUK 1348119).

## LITERATÚRA

- Henning H., Sherburn M.: Angew. Chem. Int. Ed. 51, 2298 (2012).
- Kratochvíl J., Novák Z., Ghavre M., Nováková L., Růžička A., Kuneš J., Pour M.: Org. Lett. 17, 520 (2015).

**8P-12**
**SYNTÉZA A REAKTIVITA SUBSTITUOVANÝCH [3]DENDRALÉNOV S VYLADENÝMI ELEKTRÓNOVÝMI VLASTNOSTAMI**

**RASTISLAV ANTAL, ZBYNĚK BRŮŽA, ONDŘEJ KRATOCHVÍL, MILAN POUR**

Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Akadematika Heyrovského 1203/8, 500 05 Hradec Králové  
 antalr@faf.cuni.cz

Dendralény sú acyklické skrížené konjugované oligoény so zaujímavou, doposiaľ neprebádanou reaktivitou a vysokým potenciálom pre ďalšiu syntézu<sup>1</sup>. V našej práci sme sa zamerali na prípravu rôzne substituovaných elektrónovo deficitných [3]dendralénov obsahujúcich elektrón-odťahujúce skupiny (napr. karboxylová skupina) alebo kombináciu skupín odťahujúcich a poskytujúcich elektróny. Syntéza je založená na ľahko dostupných Z-metalodiénoch **I** a metaloalkénoch **II**, ktoré vstupujú do Migita-Stilleho kaplingu<sup>2</sup> (schéma 1). Syntézy a ďalšie možné využitia týchto nových zlúčenín **III** napr. v domino Diels-Alderových sekvenciách (schéma 2) budú diskutované.

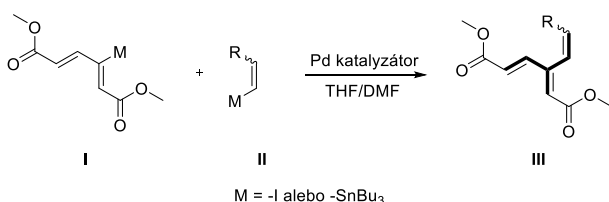


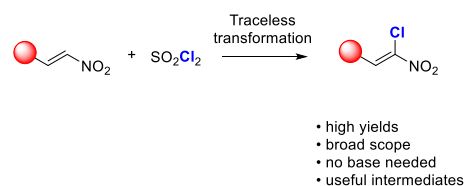
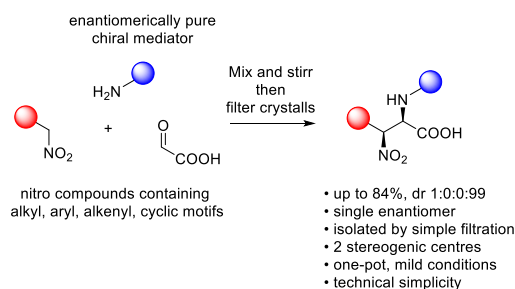
Schéma 1. Migita-Stilleho kapling

**8P-13**
**SYNTHETIC CHAMELEON AND ITS TRANSFORMATIONS**

**MICHAELA MARČEKOVÁ, BRANISLAV FERKO, PAVOL JAKUBEC**

Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia  
 Pavol.jakubec@stuba.sk

The nitro group represents one of the most versatile functional groups in organic chemistry. The nitro group can undergo seemingly countless synthetic manipulations yielding a variety of useful organic compounds. This fact has been highlighted by Seebach, who pointed out the “chameleon quality” of the nitro group<sup>1</sup>.



Scheme 1. New faces of the synthetic chameleon

The reactivity of nitro compounds strongly depends on the hybridization of the atom bonded to the nitro group. Both nitroalkanes (C(sp<sup>3</sup>)-NO<sub>2</sub> bonding) and nitroalkenes (C(sp<sup>2</sup>)-NO<sub>2</sub> bonding) are the abundant feedstock of organic chemistry readily accessible by various robust methods.

Herein, we would like to report on the recent discoveries in the stereoselective transformations of nitro compounds. Stereoselective nitro-Mannich reaction (*aza*-Henry) has recently received significant attention and became a valuable tool of asymmetric synthesis<sup>2</sup>. However, the reaction typically requires a sophisticated catalyst or technically challenging reaction set-up to proceed with high stereoselectivity.

We took advantage of the reaction's reversible character and combined it with the crystallization-induced asymmetric transformation. Such a combination allowed the development of the crystallization-driven *aza*-Henry reaction proceeding with high stereoselectivity under mild reaction conditions (Scheme 1)<sup>3</sup>.

Traceless β-chlorination of nitrostyrene (Scheme 1) allows new and straightforward access to highly functionalized building blocks poised for further cross-coupling manipulation<sup>4</sup>.

*This research was funded by the Slovak Research and Development Agency, grant number APVV-16-0258 and VEGA, grant number 1/0489/19.*

#### REFERENCES

1. Calderari G., Seebach D.: *Helv. Chim. Act.* 68, 1592 (1985).
2. Noble A., Anderson J. C.: *Chem. Rev.* 113, 2887 (2013).
3. Marčeková M., Gerža P., Šoral M., Moncol J., Berkeš D., Kolarovič A., Jakubec P.: *Org. Lett.* 21, 4580, (2019).
4. Marčeková M., Ferko B., Detková K. R., Jakubec P.: *Molecules* 25, 3390 (2015).

## 9L-01 POLYIMIDOVÉ SEPARAČNÍ MEMBRÁNY

PETR SYSEL

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

Separace složek z jejich směsí využitím membrán nabývá stále více na svém významu jak v praxi, tak v oblasti výzkumu. Jedná se většinou o postupy, které jsou přínosné z ekonomického i ekologického hlediska. V úvahu připadají procesy zpracovávající velká množství suroviny (např. čištění zemního plynu) i nepoměrně menší kvanta (např. dělení enantiomerů z racemické směsi). Izolace enantiomerů představuje významnou výzvu v řadě odvětví, výrazně např. ve farmaceutickém průmyslu.

Klíčovým předpokladem pro vyhovující fungování každého membránového separačního procesu je pochopitelně nalezení vhodné membrány. Membrána musí vykazovat nejenom únosnou relaci mezi propustností a dělicí schopností, ale po celou dobu jejího fungování také odolnost všem v úvahu přicházejícím vlivům. Ačkoliv membrány mohou být i kovové nebo keramické, jejich rozhodující podíl je v současnosti na bázi polymerů. Nezanedbatelný podíl mezi polymerními membránami zaujímají ty, připravené z polyimidů. Jedná se o všestranně odolné polymery až do teplot okolo 200 °C, pro které byly nalezeny velmi příznivé separační charakteristiky, zatím zejména pro plynná média<sup>1</sup>.

V této práci byla pozornost zaměřena na přípravu a charakterizaci polyimidů, které by potenciálně mohly být využity pro dělení enantiomerů z racemických směsí. Byly využity postupy, při kterých je příslušný selektor zabudován do hlavního řetězce lineárního polyimidu jako jeden z monomerů (diamin) nebo jako terminační činidlo (monofunkční karboxylová sloučenina) vysoce větveného polyimidu. V této fázi výzkumu byly zejména optimalizovány podmínky přípravy příslušných polyimidů tak, aby byla zachována optická aktivita složek i ve finálním produktu. Dále pak byl řešen problém omezené samonosnosti plochých, homogenních membrán (o tloušťce v desítkách μm) připravených z výše specifikovaných produktů. Jednou z testovaných cest bylo zabudování přírodního aditiva halloysitu nesoucího selektor do polyimidové matrice.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 20-06264S.*

### LITERATURA

- Liaw D.-J., Wang K.-L., Huang Y.-C., Lee K.-R., Lai J.-Y., Ha C.-H.: Prog. Polym. Sci. 37, 907 (2012).

## 9L-02 MULTIRESPONSIVNÍ POLYMERY

PETR ŠTĚPÁNEK, JIŘÍ PÁNEK, MARTIN HRUBÝ

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

Multiresponzivní polymery umožňují vytvořit nejrůznější materiály, které reagují na změny několika parametrů svého prostředí současně. V příspěvku budou nejprve popsány odpovědi polymerů na změny jednotlivých parametrů, především teploty, pH, osvětlení, přítomnost nízkomolekulárních látek a vliv těchto podnětů na polaritu polymerních řetězců. Dále jsou představeny vlastnosti polymerů reagujících na několik podnětů současně<sup>1</sup>, a to jak pro homopolymery, tak pro statistické a blokové kopolymery. Nejčastějším případem je vzájemné ovlivňování citlivosti ke změnám teploty a pH. V závěru jsou diskutovány možné aplikace multiresponzivních kopolymerů.

*Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (grant č. 18-07983S) a Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR (grant č. LM2015064)*

### LITERATURA

- Hruby M., Stepanek P., Panek J., Papadakis C. M.: Coll. Polym. Sci. 297, 1383 (2019).

## 9L-03 PORÉZNÍ HYPERSESÍTOVANÉ POLYACETYLENY S PYRIDINOVÝMI A N-ETHYLPYRIDINOVÝMI SEGMENTY

ALENA HAŠKOVÁ<sup>a</sup>, ŠTĚPÁNKA TITLOVÁ<sup>a</sup>,  
BOGDANA BASHTA<sup>a</sup>, JAN SEDLÁČEK<sup>a</sup>, EVA  
VRBKOVÁ<sup>b</sup>, ELIŠKA VYSKOČILOVÁ<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8, 128 00 Praha 2,

<sup>b</sup> Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6  
alena.hashkova@natur.cuni.cz

Byly připraveny mikro/mesoporézní polyacetylenové sítě s vysokým obsahem pyridinových segmentů (až 7,86 mmol/g) a specifickým povrchem až 923 m<sup>2</sup>/g. Pro přípravu byla použita řetězová koordinační homo- a kopolymerizace polohových izomerů diethynylpyridinů, jejímž produktem byly sítě s polyenovými hlavními řetězci hustě propojenými pyridindiolovými spojkami. Primární sítě byly dále postpolymerizačně kvarternizovány reakcí s ethylbromidem za vzniku sítí s N-ethylpyridiniovými segmenty. Kvarternizace probíhala při zachování mikro/mesoporézní textury sítí (obsah N-ethylpyridiniových segmentů až 4,24 mmol/g, specifický povrch až 592 m<sup>2</sup>/g).

Polyacetylenové sítě se segmenty typu N-ethylpyridinia byly rovněž připraveny jedнокrokovou spontánní (nekatalyzovanou) kvarternizační polymerizací diethynylpyridinů



s ethylbromidem. Produkty této polymerizace byly kovalentně hůře definované.

Sítě obsahující *N*-ethylpyridiniové segmenty byly úspěšně testovány jako heterogenní katalyzátory pro reakci styrenoxidu s oxidem uhlíčitým. Síť obsahující pyridinové segmenty se ukázaly jako účinné při reverzibilní sorpci vody z plynné fáze.

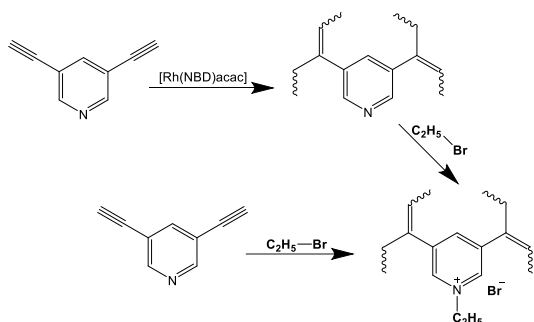


Schéma 1. Příprava porézních sítí obsahujících pyridinové a *N*-ethylpyridiniové skupiny

Tato práce vznikla za podpory grantů GAČR 20-01233S a GAUK 1296120.

#### 9L-04

### KOMPATIBILIZACE POLYMERNÍCH SMĚSÍ BLOKOVÝMI KOPOLYMERY SE ZŘETELEM NA ASYMETRII KOPOLYMERU

**JOSEF JŮZA, IVAN FORTELNÝ**

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

Cílem materiálového výzkumu polymerních směsí je mimo jiné zlepšení mechanických vlastností. Ty úzce souvisejí s fázovou strukturou. Jednou z cest ke zlepšení je kompatibilizace<sup>1</sup>. Jeden z jejích způsobů, přidáním blokovaného kopolymery sestávající z jednoho bloku shodného, kompatibilního, či mísitelného s jednou fází a z jednoho bloku kompatibilního s druhou fází, popsali kromě mnoha dalších i Leibler<sup>2</sup> a Noolandi<sup>3</sup> svými modely, které jsme využili i k nedávným<sup>4</sup> i nyní prezentovaným výpočtům.

Vyšší afinita některého z bloků k některé z objemových fází se podle daných modelů projevuje protichůdně: Ač by se dalo intuitivně očekávat zvýšení kompatibilizačního efektu, vede rovněž ke zvýšení obsahu kopolymery v této objemové fázi a tím snížení v mezifázové oblasti, v níž má kompatibilizační účinek. S většinou použitých hodnot jednotlivých charakteristik systému převládá vliv snížení obsahu kopolymery v mezifázové oblasti a kompatibilizační účinek zeslábl. U řetězce s rozdílnými délkami bloků je efekt ještě jednoznačnější: při silné asymetrii poskytuje model výrazné zvýšení obsahu ve fázi kompatibilní s delším z bloků kopolymery na úkor obsahu na rozhraní fází, na němž může kompatibilizovat, a tím se účinek výrazně snižuje.

Tato práce vznikla v rámci projektu TN01000008 řešeného s finanční podporou TA ČR.

#### LITERATURA

1. Hudson S. D., Jamieson A. M. in D. R. Paul, C. B. Bucknall (eds) *Polymer Blends*, Vol. 1: Formulations, kap. 15. J. Wiley and Sons, New York 2000.
2. Leibler L.: *Makromol. Chem., Macromol. Symp.* 16, 1 (1988).
3. Noolandi J.: *Makromol. Chem. Rapid Commun.* 12, 517 (1991).
4. Fortelný I., Jůza J.: *Polymer.* 150, 380 (2018).

#### 9L-05

### VZTAH MEZI MOLEKULÁRNÍ STRUKTUROU, NADMOLEKULÁRNÍ STRUKTUROU A MIKROMECHANICKÝMI VLASTNOSTMI POLYMERŮ

**MIROSLAV ŠLOUF\*, VERONIKA GAJDOŠOVÁ, HELENA VLKOVÁ, PAVEL NĚMEČEK, SABINA KREJČÍKOVÁ, JIŘINA HROMÁDKOVÁ**

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

Mechanické vlastnosti syntetických polymerů i biopolymerů velmi úzce souvisí s jejich molekulární a nadmolekulární strukturou. Stanovení mechanických vlastností je nedílnou součástí výzkumu a vývoje nových polymerních materiálů. Standardní metodou pro testování mechanických vlastností je tahová zkouška poskytující základní vlastnosti materiálu jako je modul pružnosti, mez kluzu, pevnost a tažnost<sup>1</sup>. Pro řadu aplikací ovšem nelze tahovou zkoušku nebo jiné makroskopické zkoušky použít buď pro nedostatek materiálu na přípravu normou předepsaných, poměrně velkých zkušebních těles<sup>2</sup> nebo proto, že potřebujeme zkoumat vlastnosti materiálu v různých částech daného vzorku – tzv. lokální mechanické vlastnosti.

Tento příspěvek se zaměřuje na jednu z metod stanovení mikromechanických vlastností, která u polymerních materiálů zatím není příliš častá – měření mikrotvrdoosti (v anglické literatuře poněkud přesněji: mikroindentační měření tvrdosti neboli *microindentation hardness testing*)<sup>3,4</sup>. Stručně popíšeme princip, výhody a omezení mikromechanických zkoušek. V hlavní části příspěvku ukážeme, že mikromechanické vlastnosti tvoří jakýsi spojovací článek mezi molekulární strukturou, nadmolekulární strukturou a makromechanickými vlastnostmi polymerů. Na závěr na konkrétních příkladech z praxe doložíme, že přesnost mikroindentace může být i vyšší než u makromechanických zkoušek v důsledku skutečnosti, že na poměrně malém vzorku můžeme provést i několik desítek až stovek automatizovaných indentačních měření, ale přitom jsou používané síly stále ještě dostatečně vysoké (což ne vždy platí u *nanoindentace*), takže při správné přípravě vzorků lze dosáhnout velmi dobré spolehlivosti a reprodukovatelnosti.

Tato práce vznikla za podpory projektu TN01000008.

## LITERATURA

1. ČSN EN ISO 527-1.
2. ČSN EN ISO 572-2.
3. Balta Calleja F. J., Fakirov S., v knize: *Microhardness of polymers*, kap. 1 a 5, s. 1. Cambridge University Press, Cambridge 2000.
4. Šlouf M., Krejčíková S., Hromádková J.: *Chem. Listy* 111, 239 (2017).

## 9L-06

**BOTNÁNÍ A PLASTIFIKACE  
POLYDIMETHYLSILOXANU A POLY  
(TRIMETHYLSILYL)PROPYNU V METHANOLU  
A DIMETHYLKARBONÁTU: DMA FILMŮ  
V PROSTŘEDÍ PAR**

**TEREZA-MARKÉTA DURĐÁKOVÁ<sup>a</sup>, ZDENĚK  
HRDLIČKA<sup>b</sup>, MARCELA DENDISOVÁ<sup>a</sup>, MARIE  
ŠVECŮVÁ<sup>a,c</sup>, ONDŘEJ VOPIČKA<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav fyzikální chemie, <sup>b</sup> Ústav polymerů, <sup>c</sup> Ústav analytické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6  
zdenek.hrdlicka@vscht.cz

Botnání a plastifikace polydimethylsiloxanu (PDMS), kaučukovité polymerní sítě, a poly(trimethylsilyl)propynu (PTMSP), sklovitého polymeru, byly studovány dynamickou mechanickou analýzou (DMA) v prostředí par methanolu a dimethylkarbonátu. Dále bylo optickou metodou studováno objemové zbotnění a Ramanovou mikroskopií vliv botnání. Elastický modul zbotnaného PDMS vykazoval mocinnou závislost na objemovém zlomku polymeru, botnání bylo prakticky ideální ve smyslu objemové aditivity a Ramanova spektra čistého a zbotnaného PDMS byla nerozeznatelná. Oproti tomu zbotnaný PTMSP vykazoval počáteční plátó elastického modulu pružnosti, výrazně nižší změny objemu, než by odpovídalo aditivitě, a výrazné spektrální změny polymeru po zbotnění v kapalinách. K relaxaci řetězců fyzikální struktury PTMSP docházelo až po dosažení mezní koncentrace těkavé látky v polymeru, která poměrně přesně odpovídala kapacitě první adsorpční vrstvy, což je parametr Guggenheimova, Andersonova a de Boerova (GAB) modelu vícevrstvé adsorpce určený nezávislým měřením sorpce par<sup>1</sup>. Možným mechanismem sorpce těkavých sloučenin ve sklovitých polymerech je tudíž adsorpce na sklovitý polymer s tím, že k fyzikální relaxaci řetězců dochází v blízkosti stavu nasycení volného objemu polymeru molekulami nízkomolekulárního plastifikátoru.

*Autoři děkují za finanční podporu od Grantové agentury ČR, projekty 13-32829P a 18-08389S. Tento výstup vznikl také v rámci projektu Specifického vysokoškolského výzkumu – projekt č. A2\_FCHI\_2020\_015.*

## LITERATURA

1. Durďáková T.-M., Hrdlička Z., Dendisová M., Švecová M., Vopička O.: *Polymer* 188, 122140 (2020).

## 9L-07

**DISSOLUTION OF CELLULOSE, A SEMI-  
CRYSTALLINE POLYMER**

**ADRIANA ŠTURCOVÁ, NIKOLAY KOTOV,  
VLADIMÍR RAUS, ALEXANDER ZHIGUNOV**

*Institute of Macromolecular Chemistry CAS, Heyrovského  
nám. 2, 162 06 Prague  
sturcova@imc.cas.cz*

Polymers, unlike non-polymeric substances, do not dissolve instantly and polymer dissolution is a multi-step process, which involves mass-transport events.

Cellulose in plant cell walls crystallises into microfibrils, which consist of amorphous domains and of highly ordered crystalline domains with widths of several nanometers and lengths of tens of nanometers. In these crystalline regions of microfibrils, the individual chains are tightly packed due to highly cooperative network of intra- and inter-molecular hydrogen bonds and due to entropic factors (solvophobic effect). Such highly organised structure does not energetically favour solubility and treatments involving harsh conditions that are costly and environmentally damaging have to be used to dissolve cellulose.

In the work presented, we have compared the behaviour and structure of mixtures composed of cellulose and either of the following cellulose solvent systems: an organic solvent *N,N*-dimethylacetamide with addition of lithium chloride salt (DMAc-LiCl) and an ionic liquid 1-butyl-3-methylimidazolium chloride (bmimCl). Both of these solvent systems have been thoroughly described in literature either on their own or with cellulose in order to understand the driving forces and the mechanisms underlying dissolution of cellulose. While DMAc-LiCl solvent system consists of an organic solvent and a salt, the second system – an ionic liquid, has properties that are similar to organic liquids as well as properties that are similar to liquid salts. Both solvent systems are capable of dissolving cellulose without forming covalent bonds with its chains and the dissolution process in either of them is very sensitive to the content of water.

By the means of vibrational spectroscopy and X-ray diffraction, the structural differences in cellulose chains solubilised by DMAc-LiCl and by bmimCl will be shown in this work; further, temperature-induced structural transitions in binary systems cellulose/bmimCl and ternary systems cellulose/bmimCl/water will be described. An attempt will be made to explain these differences and transitions in terms of rearrangement of hydrogen bonds and as a consequence of hydrodynamic flow. The role of capillarity will be also indicated.

*With institutional support RVO:61389013.*

## 9L-08

**POLYMÉRNE KOMPOZITY NA BÁZE 2-D MXÉNU A POLYMÉRNEJ MATRICE**

**MATEJ MIČUŠÍK<sup>a</sup>, EVGENI OVODOK<sup>b</sup>, MARIA IVANOVSKAYA<sup>b</sup>, SERGEY POZNYAK<sup>b</sup>, MICHAL PROCHÁZKA<sup>a</sup>, ANASTAZIA STEPURA<sup>a</sup>, YARINA SOYKA<sup>a</sup>, MÁRIA OMASTOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 84541 Bratislava, Slovensko, <sup>b</sup> Bieloruská štátna univerzita, Výskumný ústav pre fyzikálne a chemické problémy, Leningradskaya 14, 220006 Minsk, Bielorusko  
matej.micusk@savba.sk

2D materiály sa tešia vysokému záujmu v materiálovom výskume vďaka svojim excelentným elektrónickým, mechanickým a optickým vlastnostiam, ktoré pochádzajú z ich ultratenkej hrúbky a 2D morfológie. Najznámejším 2D materiálom je graféň. MXén je jedna z alternatív 2D štruktúr<sup>1</sup>. Kombináciou 2D materiálov ako sú MXény a 1D plniva ako sú uhlíkové nanotrubičky a ich zabudovanie do polymérnej matrice je možné pripraviť kompozit s nízkym perkoláčnym prahom s vysokou elektrickou vodivosťou a vynikajúcou schopnosťou tieniť elektromagnetické žiarenie.

Najprv sme sa zamerali na prípravu a charakterizáciu MXénových 2D nanočastíc, ktoré sme potom použili ako aktívne plnivo v polymérnych kompozitov.

Prvou úlohou bola charakterizácia a príprava východiskových látok potrebných na prípravu MAX fázy, potrebnej na syntézu MXénových nanoštruktúr.

Karbid titánu (TiC) je hlavnou zložkou pri príprave TiXC MAX fáz, kde X reprezentuje najčastejšie Al, ale môžu sa použiť aj iné kovy, prípadne kombinácia kovov. Podrobne sme študovali elektronické stavy titánu a uhlíka ako aj vnútorné defekty v TiC materiály, ktoré môžu ovplyvniť výsledné vlastnosti 2D vrstiev finálnych MXénov.

Študovali sa štruktúry defektov a procesy tvorby fázy, ktoré sa vyskytujú v materiály a na povrchu TiC pri tepelnom spracovaní v rôznych prostrediach (vzduch, vodík, vákuum) pomocou röntgenovej difrakcie (XRD), skenovacej elektrónovej mikroskopie (SEM), elektrónovej paramagnetické rezonancie (EPR), röntgenovej fotoelektrónovej spektroskopie (XPS) a infračervenej spektroskopie (IR). Na povrchu nespracovaného TiC boli oxidačné stavy titánu (TiO<sub>2-x</sub>) a uhlíka vo forme karbonát-karboxylových štruktúr (O=C=O). Uhlíkové vakancie v kryštalickej mriežke TiC sa prejavovali ako paramagnetické defekty. Tepelné spracovanie TiC v redukčnom médiu vedie k zvýšeniu elektrickej vodivosti spojenej s tvorbou štruktúrnych defektov. Žiarenie TiC na vzduchu spôsobuje jeho oxidáciu za tvorby TiO<sub>2</sub> v modifikácii anatas. Boli pozorované paramagnetické defekty typické pre TiC aj TiO<sub>2-x</sub>.

SEM obrázky ukázali, že pôvodný TiC sa skladá z kryštálov s heterogénnymi veľkosťami s vrstevnatou štruktúrou. XRD spektrum potvrdilo prítomnosť jednej kubickej fázy TiC s parametrom pre základnú bunku  $a = 4,326(3)$  Å.

Po zamiešaní do polymérnych matric budeme študovať výsledné mechanické a elektrické vlastnosti pripravených polymérnych kompozitov a ich schopnosť tieniť elektromagnetické žiarenie.

*Táto práca vznikla za podpory grantu APVV-SK-BY-RD-19-0011 a grantu № X20CJKI-004 of Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research.*

## LITERATÚRA

- Zhou X., Hu X., Yu J., Liu S., Shu Z., Zhang Q., Li Q., Ma Y., Xu H., Zhai T.: Adv. Funct. Mater. 28, 1 (2018).

## 9L-09

**POLYMERIC NANOCOMPOSITES WITH EPOXY MATRIX AND 2D NANOFILLERS MXENES**

**ANASTASIIA STEPURA<sup>a</sup>, MICHAL PROCHÁZKA<sup>a</sup>, ANDREY ANISKEVICH<sup>b</sup>, MARIA OMASTOVÁ<sup>a\*</sup>**

<sup>a</sup> Polymer Institute, Dubravska cesta 9, 845 41 Bratislava Slovakia, <sup>b</sup> Institute for Mechanics of Materials, University of Latvia, Jelgavas str. 3, Riga, LV-1004, Latvia  
anastasii.a.stepura@savba.sk, maria.omastova@savba.sk

MXenes, new type of 2D materials, gained tremendous attention through last years<sup>1</sup>. Mostly it is caused by their properties: good electrical conductivity, the ability to transmit high percentage of visible light, etc<sup>2</sup>. There is wide variety of MXene application, one of which is using them as fillers in polymeric composites<sup>3</sup>. There is a possibility to use numerous polymeric matrices, depending on a desired resulting property of final composite.

In this work epoxy/MXene composites were prepared. Different amount of MXene concentrations was used (0.01–2.00 wt. %) for nanocomposites fabrication. As polymeric matrix water-based epoxy resin was used. MXene pasta contains some amount of water, therefore it is easier to disperse MXenes in this kind of epoxy. MXenes were characterized by SEM and XPS methods.

Nanocomposites were prepared by solution casting method, mixed combining magnetic stirrer and hand mixing. Solution was poured into a silicon form as stripes and also on polypropylene plates as thin films (200 μm) by doctor blade method with wet film applicator. Obtained samples were tested with See System for contact angle values measurement and with Nanoindenter for hardness and Young modulus parameters. The obtained results showed 63.5°±0.99° with water, 0.8±0.1 GPa and 0.25±0.02 GPa for reduced modulus and hardness respectively, what are higher values then for pure epoxy. In the next step, carbon nanotubes will be added as 1D filler for increasing electrical properties.

Prepared nanocomposites can be applied as new type of antistatic coating with improved mechanical properties.

*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).*

## REFERENCES

- Gogotsi Y., Anasori B.: ACS Nano. 13, 8491 (2019).
- Zhan X., Si Ch., Zhou J., Sun Zh.: Nanoscale Horiz. 5, 235 (2020).
- Jimmy J., Kandasubramanian B.: Eur. Polymer J. 122, 109367 (2020).

## 9L-10 POLYAMIDY, POLYESTERAMIDY A NANOMATERIÁLY

**JIRÍ BROŽEK**

*Ústav polymerů, Vysoká škola chemicko-technologická  
v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6  
jiri.brozek@vscht.cz*

Výzkum v oblasti polyamidů, především polyamidu 6, je spojen s prof. Ottou Wichterlem, jak bylo vzpomenuo při setkání absolventů ústavu/katedry polymerů na VŠCHT Praha při příležitosti 70 let výuky chemie a technologie polymerů v roce 2019. V průběhu doby se výzkum zaměřoval i na jiné typy polyamidů, modifikace polyamidu 6, přípravu blokových kopolymerů polyamid 6/polyether a polybutadien, kopolyamidů a polyesteramidů. Oblast výzkumu zahrnuje nejen konstrukční plasty, ale ve skupině polyestramidů i materiály s vyšší citlivostí k biologické rozložitelnosti. V poslední době jsou předmětem výzkumu materiály s magickou předponou nano.

V oblasti přípravy nanovláknenných vrstev jsme se zaměřili na studium roztokových vlastností polyesteramidů na bázi  $\epsilon$ -kaprolaktamu a  $\epsilon$ -kaprolaktonu o různém poměru strukturálních jednotek a tím i obsahu krystalické fáze ve vztahu k morfolonii vytvářených vláknenných vrstev<sup>1</sup>. Polyamid 4 je termicky nestabilní, neboť v blízkosti teploty tání dochází k rychlému úbytku hmotnosti vzorku – degradaci, a proto je nepracovatelný z taveniny<sup>2</sup>. Z polyestramidů a polyamidu 4 byly elektrostatickým zvlákněním z roztoků polymerů ve směsích kyseliny mravenčí a octovové připraveny nanovláknenné vrstvy<sup>1,2</sup>. V obou případech je polyelktrolytický efekt příznivý pro jejich vytváření. Oba typy vrstev jsou studovány z hlediska jejich biokompatibility.

Polymerní nanokompozity na bázi polyamidu 6 a polyesteramidů byly připraveny s využitím montmorillonitu<sup>3</sup>, hydrotalcitu<sup>4</sup> a grafen oxidu<sup>5,6</sup>. Úspěch v přípravě nanokompozitů spočíval v cílené modifikaci plniv zlepšující jejich interakce se složkami polymerační směsi a polymerem.

*Tato práce vznikla za podpory VŠCHT Praha..*

### LITERATURA

1. Malinová L., Stolínová M., Lubasová D., Martinová L., Brožek J.: Eur. Polym. J. 49, 3135 (2013).
2. Blažková L., Malinová L., Benešová V., Roda J., Brožek J.: J. Polym. Sci., Part A: Polym. Chem. 55, 2203 (2017).
3. Kredatusová J., Brožek J.: Appl. Clay. Sci. 62-63, 94 (2012).
4. Lennerová D., Kovanda F., Brožek J.: Appl. Clay Sci. 114, 265 (2015).
5. Minář J., Brožek J.: Eur. Polym. J. 91, 212 (2017).
6. Minář J., Brožek J., Michalcová A., Hadravová R., Slepíčka P.: Compos. B Eng. 174, 107019 (2019).

## 9L-11 SYNETICKÉ MATERIÁLY V KNIHOVNÍCH FONDECH – PŘEDSTAVENÍ PROJEKTU

**PETRA VÁVROVÁ, JITKA NEORALOVÁ, DANA  
HŘEBECKÁ, NIKOLA ŠIPOŠOVÁ, HANNA SHARAI,  
JOSEF KOMÁREK, JIRÍ BROŽEK, RADKA  
KALOUSKOVÁ, LENKA MALINOVÁ**

*Národní knihovna České republiky, Klementinum 190, 110 00  
Praha 1*

*VŠCHT Praha, Ústav polymerů, technická 5, 166 28 Praha 6  
Petra.Vavrova@nkp.cz*

Knihovní fondy a konkrétně knižní vazba obsahuje řadu materiálů, jako je papír, textil, sešů ale i prvky ze syntetických materiálů. Přírodní a syntetické materiály se liší mechanismem degradačních reakcí, mírou citlivosti k rizikovým faktorům (atmosférické znečištění, světlo, klimatické podmínky, chemické látky apod.). V roce 2018 v rámci grantových projektů Ministerstva kultury na podporu aplikovaného výzkumu a vývoje národní a kulturní identity (NAKI II) byl zahájen mezioborový, multidisciplinární projekt s názvem „Syntetické materiály v knihovních fondech“, jehož dílčí výsledky budou prezentovány. Cílem projektu je výzkum a vývoj metodik nedestruktivního průzkumu a identifikace jednotlivých druhů syntetických materiálů v knižní vazbě a procesů jejich degradace a vývojem a ověřením metodik a pracovních postupů konzervace a restaurování syntetických materiálů v novodobém knihovním fondu. Výsledkem projektu je tvorba metodiky preventivní péče, ukládání, manipulace a zpřístupnění knihovních fondů obsahující syntetické materiály.

Specializovaný průzkum rozsáhlých knihovních fondů zaměřený na syntetické materiály, především ty s nižší stabilitou a životností, poskytuje vhodnou platformu pro výzkum a ochranu knih s plastovými prvky, ochranu ostatních materiálů, knih i zaměstnanců. Průzkum využívá především nedestruktivní metody identifikace jednotlivých druhů syntetických materiálů v knižní vazbě a procesů jejich degradace. Restaurování a konzervace syntetických materiálů se v poslední době stalo nosným tématem řady setkání odborné veřejnosti, která pořádá NKČR spolu s MCK v Brně pod záštitou Pracovní skupiny Plasty v rámci KKR AMG. Nedostatek ověřených metod konzervace a restaurování plastů ohrožuje fyzický stav a životnost knih v původní historické formě a jejich autenticitu. Výsledky vývoje a ověření metodik a pracovních postupů konzervace a restaurování syntetických materiálů budou využitelné nejen pro knihovní fondy, ale pro kulturní dědictví vyrobené z plastů obecně. Nízká stabilita některých plastů, uvolňování zdraví škodlivých a materiály ohrožujících látek a představuje významné ohrožení dochování předmětů kulturní hodnoty pro budoucí generace. Metodika preventivní péče, ukládání, manipulace a zpřístupnění knihovních fondů obsahující syntetické materiály nastává podmínky ochranného režimu fondů, kde objekty nejsou monomateriálové a dochází k interakci přírodních materiálů se syntetickými. Zároveň umožní v omezené míře bezpečně zpřístupnění fondů veřejnosti.

V rámci plnění úkolů projektu byly pořízeny mobilní FT-IR a Ramanův spektrometr a komora pro sluneční

simulace SUNTEST. Mobilní spektrometry jsou nedestruktivní přístroje k určení a identifikaci materiálového složení, FT-IR analýza v kombinaci s Ramanem přináší široké spektrum informací o materiálech knižní vazby, složení plastů, restaurátorských a úložných materiálech. Analýzy *in-situ* nelze nahradit analýzami v externích laboratořích (odběr vzorku, převoz památky, riziko poškození při manipulaci a transportu aj.). Knižní fondy s plastovými prvky jsou z evidenčních a technických důvodů uloženy dohromady s knihami z jiných materiálů. Důkladná analýza působení plastů a produktů jejich degradace na ostatní materiály umožní vytvořit efektivní strategii preventivní péče zabezpečující dobrý fyzický stav knihovních fondů celkově. Komora pro sluneční simulace SUNTEST slouží pro normované zkoušení materiálů a tzv. umělé stárnutí světlem. Tyto zkoušky jsou základem pro normované testování stability plastů. Světelný zdroj je v komoře xenonová výbojka o výkonu 1800 W. Na základě analýz vzorků syntetických materiálů z vyřazených knih, které byly podrobeny umělému, resp. urychlenému stárnutí v této komoře, budou zkoumány příčiny degradace plastů, složení degradačních produktů a citlivost plastů na chemické a fyzikální působení. Výsledky těchto zkoumání budou využity při vývoji a ověřování metod konzervace a restaurování plastů, použitých v knižní vazbě nebo tvořící vlastní knihu (dětské knížky z plastu). Molární hmotnost analyzovaných materiálů a její distribuce bude stanovena pomocí gelové permeační chromatografie (GEC, SEC). Výkvěty změkčovadel na povrchu vzorku jsou analyzovány plynovou chromatografií a případně kapalinovou chromatografií s detektorem pro detekci a identifikaci složek. Termická stabilita polymerních vzorků je hodnocena pomocí termogravimetrické analýzy (TGA). Teplota skelného přechodu, teplota (interval teplot) tání a entalpie tání jsou měřeny pomocí diferenciální snímací kalorimetrie (DSC).

*Tato práce vznikla za podpory dotačního programu MK ČR, konkrétně NAKI II č. DG18P02OVV001 s názvem „Syntetické materiály v knihovních fondech“ (2018-2022).*

#### LITERATURA

1. Hager P. A., Ingalls H. B.: *Plastics. Basic Condition reporting: A Handbook*. Southeastern Registrars Association.
2. Albertsson A.-C., Gronig M., Hakkarainen M.: *J. Polym. Environ.* 14, (2006).
3. Lavédrine B. et. al.: *Preservation of Plastic Artefacts in Museum Collections*. Bietlot Imprimerie, Belgium 2012.
4. Shashoua Y.: *Conservation of Plastics*. Elsevier, UK 2008.

#### 9L-12

#### DEGRADATION AND PRESERVATION OF CELLULOSIC OBJECTS OF CULTURAL HERITAGE

**JANA JURISOVÁ, MILAN KRÁLIK, KATARÍNA VIZÁROVÁ, VLADIMÍR DANIELIK, IZABELA VAJOVÁ**

*Faculty of Chemical and Food Technology, STU in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava 1, Slovak Republic  
jana.jurisova@stuba.sk*

Paper belongs to the oldest polymeric composites prepared by humankind<sup>1</sup>. The industrial progress in papermaking in the early 19<sup>th</sup> century led to technologies using alum (KAl(SO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>) and rosin (abietic acid being the main component of it) and the papers became acidic. Consequently, degradation processes have proceeded more rapidly. Splitting of cellulosic chains by hydrolysis and oxidation, including microbiological effects, are considered to be the main processes causing the decrease of mechanical strength and the changes of colour<sup>2</sup>. The application of sizing agents amplified hydrophobic/hydrophilic differences between the properties of the surface and the bulk of the paper as well. These facts necessitate an application of either polar (water-based) or non-polar (alkanes, perfluoroalkanes, hexametyldisiloxane and similar) deacidification systems. Polar systems allow to swell cellulosic bundles and soluble deacidification components (e.g. Mg(HCO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>) can diffuse to interior of paper sheets. In case of non-polar systems, “hydrophobic” steps are followed by “hydrophilic” ones (usually, application of water vapours). After deacidification treatment, a uniform distribution of deacidification agents in the body of paper is required what is a very challenging task<sup>3</sup>. As a continuation of the project KnihaSk<sup>4</sup>, we got involved in the solution of the outlined problems in the framework of the project: “Synthesis, compatibilization and transport of components of multifunctional systems suitable for the stabilization of cellulosic materials”.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the Contract no. APVV-18-0155.*

#### REFERENCES

1. Biermann C.: *Handbook of Pulping and Papermaking*, 2nd Edition, eBook ISBN: 9780080533681, Imprint: Academic Press, Published Date: 22nd July 1996.
2. Fellers C. et al.: *Ageing/Degradation of Paper. A literature survey*. FoU-projektet for papperskonservering, Report No. 1 E, ISSN 0284-5636 Stockholm, 1989.
3. Katuščák S., Vodný Š., Vizárová K., US Patent Application 20180209911 (2018).
4. <https://www.polygrafia-fotografia.sk/projekt-pre-ochranu-knih-kniha-sk/>

## 9L-13

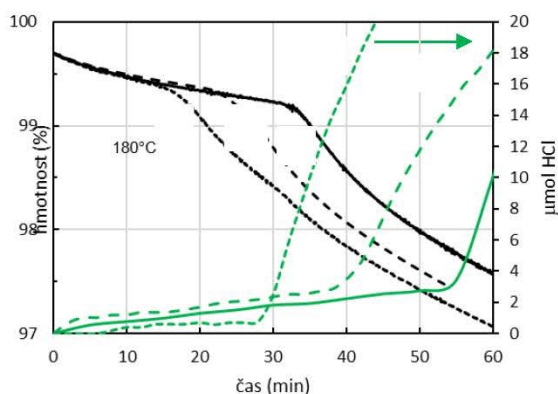
**HODNOCENÍ STABILITY KNIŽNÍCH DESEK Z POLYVINYLCHLORIDU****JIRÍ BROŽEK, VÁCLAVA BENEŠOVÁ, LENKA MALINOVÁ, RADKA KALOUSKOVÁ**

Ústav polymerů, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6  
radka.kalouskova@vscht.cz

V depozitářích knihoven se v současnosti nachází řada knih s deskami z PVC, jejichž uchování pro další generace je provázáno problémy s deteriorací původních vlastností, vyvolaných stárnutím či neopatrným zacházením s knihami. Proces deteriorace je možné hodnotit různými metodami, které jsou však vesměs invazivní. Navíc často, v případě starších knih, postrádáme informace o jejich historii a o složení materiálů použitých k vazbě. Řešením může být porovnání stávajícího stavu desek a stavu po umělém stárnutí, jehož podmínky simulují dlouhodobé uložení v archívech.

Nejjednodušší neinvazivní detekční metodou je IR spektrometrie. Nicméně poměrně složité formulace knižních desek, povrchové úpravy, znečištění apod. mohou komplikovat identifikaci i sledování změn v průběhu stárnutí.

Jednoznačně lze rozsah degradace a stávající odolnosti knižních desek z PVC vyjádřit hodnotou tepelné stability, tedy dobou po níž v průběhu tepelného namáhání nedochází, nebo jen v malé míře, k uvolňování HCl z PVC materiálu. Tepelnou stabilitu lze hodnotit řadou metod, např. měřením změny pH, vodivosti nebo potenciálu roztoku obsahujícího absorbované degradační produkty. Ne zcela typické je stanovení tepelné stability TGA v ISO módu, které ve srovnání s ostatními metodami vyžaduje výrazně nižší množství vzorku.



Obr. 1. Závislost množství uvolněného HCl ze vzorků PVC (DHC) a úbytek hmotnosti vzorků PVC (TGA v ISO módu) na době tepelného namáhání (180 °C, vzduch, referenční směs PVC vystavená po dobu 0 h (vz.1), 193 h (vz. 2) a 389 h (vz. 3) umělému stárnutí

Tato práce vznikla za podpory projektu DG18PO2OVV001 – Syntetické materiály v knihovných fondech v rámci programu NAKI II.

## LITERATURA

1. Kalousková R., Novotná M., Vymazal, Z.: Polym. Degrad. Stab. 95, 903 (2004).
2. Lagana A., v knize: *Modern Material and contemporary art* ICOM CC, Lisbon 2011.
3. Kalousková R., Benešová V., Malinová L., Brožek J.: Sborník konference, KalSem Velké Bílovice 2019.

## 9L-14

**MOŽNOSTI VYUŽITÍ PVB RECYKLÁTU VE SMĚSÍCH S PVC****DAGMAR MĚŘÍNSKÁ, ALICE TESAŘÍKOVÁ**

UTB ve Zlíně, Vavrečkova 275, 760 01  
merinska@utb.czbro

Byla připravena a pozorována PVC matrice s různým poměrem koncentrace PVB a recyklovaného PVB. Všechny testy byly provedeny za účelem potvrzení, že recyklovaný PVB může být znovu použit v průmyslu, zejména v polymerních směsích s plastifikovaným PVC<sup>1</sup>. Proto bylo zjištěno, v jakých poměrech jsou mísitelné tyto polymery a jak jejich mísitelnost ovlivňuje materiálové vlastnosti připravených směsí. Testované polymery měly velmi podobné polaritu makromolekul obsahovaly změkčovadla. Použitý PVB však měl velmi vysokou molekulovou hmotnost, 5,5krát vyšší než použitý PVC.

I takto by tyto polymery by měly být mísitelné, měření mechanických vlastností a diferenciální skenovací kalorimetrie potvrdilo výrazně nižší pevnost směsí, zejména když poměr PVB byl mezi 10–60 %. Bylo to právě způsobeno zmíněnou vysokou molekulovou hmotností použitého PVB – což zvyšuje entalpii Gibbovy energie z procesu míchání. Čistý PVC má nízkou E', která se zvyšuje s rostoucí frekvencí. Zvyšující se koncentrace PVB vede k nižším hodnotám E'. V případě recyklovaného PVB hodnoty Shore A vykazují stejnou závislost na obsahu plniva (%) jako v případě čistého PVB. Velmi malý rozdíl hodnot Shore A je možné pozorovat v oblasti od 40 % R-PVB. Toto chování závisí na obsahu PVB v polymerní směsi<sup>2</sup>.

Tato práce vznikla za podpory UTB ve Zlíně.

## LITERATURA

1. Tupy M., Mokrejs P., Merinska D., Svoboda P., Zvonicek J.: J. Appl. Polym. Sci. 131, 39879 (2014).
2. Merinska D., Tupy M., Kasparkova V., Popelkova J., Zvonicek J., Pistek D., Svoboda P.: Macromol. Symp. 286, 107 (2009).

## 9L-15

**ANTIKOROZNÍ OCHRANA KONSTRUKČNÍCH DÍLŮ Z OCHUZENÉHO URANU: ORGANICKÉ POLYMERY I NÍZKOTAJÍCÍ SMALTY**

**JIRÍ PÁNEK<sup>a</sup>, VOLODYMYR LOBAZ<sup>a</sup>, ZDEŇKA SEDLÁKOVÁ<sup>a</sup>, MIROSLAV ŠLOUF<sup>a</sup>, MIROSLAVA LUKEŠOVÁ<sup>a</sup>, NIKOLAY KOTOV<sup>a</sup>, MAGDALENA KONEFAL<sup>a</sup>, JIŘINA HROMÁDKOVÁ<sup>a</sup>, MARTIN HRUBÝ<sup>a</sup>, TOMÁŠ CHMELA<sup>b</sup>, PAVEL KRUPÍČKA<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Ústav makromolekulární chemie AV ČR v. v. i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, <sup>b</sup> UJP PRAHA a.s., Nad Kamínkou 1345, 156 10 Praha 5  
panek@imc.cas.cz

Použití ochuzeného uranu (OU) jako materiálu pro konstrukci systémů stínění ionizujícího záření je značně omezeno náchylností tohoto kovu ke korozi, přičemž účinná antikorozní ochrana nebyla dosud nalezena. V příspěvku jsou předložena dvě možná řešení tohoto problému: pokrytí uranového povrchu radiačně odolným polymerem nebo sklovitou anorganickou vrstvou – smaltem.

Základem polymerní povrchové vrstvy je polyurethanová matrice na bázi diizokyanát : diol v molárním poměru 1 : 1. Jako diizokyanátová složka byl zvolen isoforondiizokyanát. Diolová složka má dvě komponenty, 1,4-benzendimethanol a polykarbonát 5651, zastoupené v molárním poměru 1:1. Do polyurethanové matrice je vmíšeno listkové plnivo – koloidní silika Aerosil A205. Pro další zlepšení termické a radiační stability matrice byly přidány antioxidanty Chimassorb 944 (oligomerní HALS) a 2,6-di-*tert*-butyl-4-methylphenol (BHT, butylovaný hydroxytoluen). Složení materiálu bylo navrženo s ohledem na radiační odolnost polyurethanů<sup>1</sup>.

Dalším testovým materiálem je anorganický polymer ve formě ultrafosfátového skla. V odborné literatuře dosud nebylo popsáno využití skelných smaltových vrstev k pokrývání OU, i když koeficient teplotní roztažnosti uranu (12,0 až 13,6 · 10<sup>-6</sup>/°C) se dobře shoduje s roztažností fosfátových skel. Fosfáty mají navíc k uranu dobrou chemickou afinitu, což podporuje vzájemnou adhezi. Vyvinutý antikorozní smalt na ochranu OU je založen na skle PbO·ZnO·P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> (cit.<sup>2</sup>) s nízkou teplotou skelného přechodu  $T_g = 262$  °C. Byla optimalizována příprava tohoto skla i technika, která umožňuje vytvoření smaltové vrstvy na povrchu OU. Navržená metoda je jednoduchá a rychlá, neprodukuje mnoho odpadů a je vhodná pro pokrytí složitých tvarů uranových dílů, přičemž vyžaduje pouze odmaštění povrchu kovu před aplikací vrstvy.

*Práce byla finančně podpořena Ministerstvem průmyslu a obchodu ČR v rámci programu TRIO (projekt FV10164).*

## LITERATURA

1. Párvu R., Podinã C., Zaharescu T., Jipa S.: Optoelectron. Adv. Mat. 4, 11 (2010).
2. Liu H. S., Chin T. S., Yung S. W.: Mater. Chem. Phys. 50, 1 (1997).

## 9L-16

**POLYMERNÍ KONTRASTNÍ ČINIDLA PRO ZOBRAZOVÁNÍ MAGNETICKOU REZONANCÍ****MARTIN HRUBÝ**

Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6  
mhruby@centrum.cz

Zobrazení magnetickou rezonancí (MRI) patří ke klíčovým technikám dnešní neinvazivní medicínské diagnostiky. Obvykle využívá zobrazení jader vodíku <sup>1</sup>H ve vodě, která je v živých tkáních přítomna všude ve velkém množství, a poskytuje velmi detailní zejména anatomické, ale i funkční zobrazení. V některých případech ale není dostatečný kontrast mezi sousedními tkáněmi, což ztěžuje až znemožňuje interpretaci získaného zobrazení. V takových případech se využívají kontrastní činidla měnící relaxivitu vody, která jsou schopná díky nerovnoměrné biodistribuci odlišit i jinak velmi obtížně odlišitelné sousední tkáň. Naprostá většina dnes užívaných kontrastních látek jsou nízkomolekulární sloučeniny. Polymery však mají některé výhody pro tyto aplikace, které budou v příspěvku rozvedeny, například hromadění v pevných nádorech EPR („Enhanced Permeability and Retention“) efektem, ligandově specifické cílení do lymfatické tkáně atd.

Pro <sup>1</sup>H MRI budou představeny kontrastní látky na základě chemicky modifikovaných biodegradovatelných polysacharidů glykogenu a mannanu obsahujících makrocyclické komplexy gadolinia<sup>1,2</sup>.

Pro některé aplikace je žádoucí minimální pozadí tak, aby byla vidět prakticky jen kontrastní látka. Pro tyto aplikace je zvláště vhodné <sup>19</sup>F MRI, protože fluor, přírodní monoizotop, má v těle velmi malé pozadí a přitom výhodné vlastnosti pro magnetickou rezonanci. Pro <sup>19</sup>F MRI budou představeny fluorované termoresponsivní polymery jako kontrastní látky<sup>3,4</sup>.

*Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (grant č. 18-07983S), Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR (grant č. LTC19032) a AZV Ministerstva zdravotnictví ČR (grant č. NU20-08-00095).*

## LITERATURA

1. Rabyk M., Galisova A., Jiratova M., Patsula V., Srbova L., Loukotova L., Parnica J., Jirak D., Stepanek P., Hruby M.: J. Mater. Chem. B 6, 2584 (2018).
2. Aasen S. N., Pospisilova A., Eichler T. W., Panek J., Hruby M., Stepanek P., Spriet E., Jirak D., Skaftnesmo K. O., Thorsen F.: Int. J. Mol. Sci. 16, 21658 (2015).
3. Kolouchova K., Sedlacek O., Jirak D., Babuka D., Blahut J., Kotek J., Vit M., Trousil J., Konefal R., Janouskova O., Podhorska B., Slouf M., Hruby M.: Biomacromolecules 19, 3515 (2018).
4. Sedlacek O., Jirak D., Galisova A., Jager E., Laaser J. E., Lodge T. P., Stepanek P., Hruby M.: Chem. Mater. 30, 4892 (2018).



9L-17

**PŘÍPRAVA KOPOLYMERŮ POLY (PROPYLENFUMARÁT-CO- $\epsilon$ -KAPROLAKTON) PRO MEDICINÁLNÍ APLIKACE****LENKA MALINOVÁ, MONIKA VONDRÁKOVÁ**

Ústav polymerů, Vysoká škola chemicko-technologická  
v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 - Dejvice  
lenka.malinova@vscht.cz

Poly(propylenfumarát) (PPF) je nenasycený lineární polyester, který může být síťován *in situ* prostřednictvím svých fumarátových dvojných vazeb a tudíž ho lze využít jako kostní cement. PPF splňuje řadu lékařských požadavků – je injekovatelný, biokompatibilní, biodegradabilní, a vykazuje výrazně nižší teplotu síťování v porovnání s poly(methylmethakrylátovým) (PMMA) kostním cementem, který se v praxi používá. Oproti PMMA má PPF také vhodnější mechanické vlastnosti, které lépe odpovídají vlastnostem spongiózní kosti. PPF má i přes své výjimečné vlastnosti omezení v podobě hydrofobního charakteru a rigidity řetězce<sup>1,2</sup>. Proto se PPF kombinuje s jinými polymery, převážně poly( $\epsilon$ -kaprolaktonem) a jeho deriváty, poly (mléčnou kyselinou) či kopolymerem kyseliny mléčné a glykolové.

Příspěvek se zabývá přípravou kopolymerů PPF s různým poměrem  $\epsilon$ -kaprolaktonu (CL). Kopolymerace probíhala při 150 °C po dobu 2 hodin za iniciace 2-ethylhexanoátem cínatým (1 mol. %). Všechny kopolymeru měly vysoký obsah kopolymeru >90 % a jednu teplotu skelného přechodu korelující se složením. Připravené materiály byly amorfní do obsahu CL strukturních jednotek 66 mol. %, poté byly mírně krystalické. Pomocí <sup>1</sup>H-NMR analýzy byl zjištěn obsah CL strukturních jednotek v kopolymeru, který byl v dobré shodě s obsahem CL v zásadě. Molární hmotnost kopolymerů rostla s rostoucím poměrem CL strukturních jednotek.

Připravené kopolymeru bylo možné samosíťovat pomocí iniciačního systému – iniciátoru dibenzoylperoxidu a katalyzátoru *N,N*-dimethyl-*p*-toluidinu. Kopolymeru lze také sesíťovat s využitím síťovacího činidla poly(ethylenglykol)-dimethakrylátu a stejného iniciačního systému.

*Tato práce vznikla za podpory VŠCHT Praha.*

## LITERATURA

1. Wang S., Lu L., Gruetzmacher J. A., Currier B. L., Yaszemski M. J.: *Macromolecules* 38, 7358 (2005).
2. Wang S., Kempen D. H., Simha N. K., Lewis J. L., Windebank A. J., Yaszemski M. J., Lu L.: *Biomacromolecules* 9, 1229 (2008).

9L-18

**ENZYME-MEDIATED INJECTABLE POLY(AMINO ACID)S BASED HYDROGELS MODIFIED WITH BIOMIMETIC PEPTIDES FOR CARTILAGE TISSUE ENGINEERING****JANA DVOŘÁKOVÁ<sup>a</sup>, KATRIN NEUBAUEROVÁ<sup>a</sup>,  
OLGA JANOUŠKOVÁ<sup>b</sup>, VLADIMÍR PROKS<sup>a</sup>**<sup>a</sup> Department of Biomaterials and Bioanalogous System,<sup>b</sup> Department of Biological Models, Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Heyrovsky nám. 2, 162 09 Prague 6, Czech Republic  
dvorakova@imc.cas.cz**Introduction**

The *in situ* formed biomimetic hydrogels represent a very attractive class of biomaterial scaffolds. Modern advanced biomaterials are designed to mimic selected features of the extracellular matrix (ECM) of living tissues. Herein we present development of the synthetic, enzymatically degradable poly(amino acid)s based injectable hydrogel affording controlled immobilization of cell adhesion peptide RGD to encapsulate rat mesenchymal stem cells (rMSCs) and evaluate the potential of this system for cartilage tissue engineering.

**Methods**

The enzymatically degradable copolymer of poly(*N*<sup>5</sup>-2-hydroxyethyl-L-glutamine)-bearing tyramide units ((PHEG-Tyr) was synthesized as the gel precursors from poly( $\gamma$ -benzyl-L-glutamate) (PBLG)<sup>1</sup>.

The hydrogels were formed *in situ* using dual syringe by horseradish peroxidase (HRP)/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-mediated crosslinked reaction. The effect of various n<sub>H2O2</sub>/n<sub>TYR</sub> and n<sub>TYR</sub>/n<sub>HRP</sub> ratios on the time of gelation, gel yields, swelling, and viscoelastic properties were investigated. The biomimetic azido-(PEG)<sub>6</sub>RGDSGGGY-NH<sub>2</sub> peptide ligands was covalently binding to the gel precursors using click chemistry in defined concentration.

For cell encapsulation studies, rMSCs were encapsulated at a density of 3·10<sup>6</sup> cells/mL and cultured for up to 2 weeks in chondrogenic differentiation media. Live/dead staining was used to evaluate cell attachment and viability after 2 and 7 days. Real-time PCR and laser scanning confocal microscopy were used to evaluate the expression of chondrogenic markers (aggrecan, SOX-9, collagen II).

**Results and discussion**

The PHEG-Tyr was modified using click chemistry with cell adhesion peptides RGD. The concentration of peptides in resulting hydrogels was range 0.5–5 mM.

The hydrogels were prepared with different stiffnesses (G' = 1.2 kPa and G' = 3.5 kPa). The biological experiments showed that the PHEG-Tyr based hydrogels proved to be non-cytotoxic for the rMSCs. We observed good viability, adhesion, and proliferation of rMSCs after encapsulated by the injection process to the hydrogel after day 2 and 7. We evaluated the spreading of cells and the formation of the cellular protrusion in the 3D matrix depending on the RGD content and gel stiffness. The rMSCs adhered best to the hard

hydrogel with the concentration of RGD higher than 2 mM. The morphology of cells growth in the hydrogel with 2mM RGD changed from circular to spread shape from 1 to 4 days. The cells are also formed a connection between each other. After 7 and 14 days of incubation in the chondrogenic medium the chondrogenic induction, expressions of collagen II proteins, and chondrocyte-specific genes (SOX9, aggrecan) were detected.

### Conclusions

This study exhibited injectability and rapid PHEG-Tyr/RGD gel formation, as well as mechanical stability of hydrogel, and cell ingrowth. The P2HPG-tyr/RGD hydrogels demonstrated attractive properties for application in cartilage tissue engineering.

*This work was supported by the Czech Science Foundation (No. 18-03224S).*

### LITERATURA

1. Dvořáková J., Šálek P., Korecká L., Pavlová E., Černocho P., Janoušková O., Koutníková B., Proks V.: *J. Appl. Polym. Sci.* 137, 48725 (2020).

### 9L-19

#### POLYMERNÍ INHIBITORY VÍCEČETNÉ LÉKOVÉ REZISTENCE PRO LÉČBU PEVNÝCH NÁDORŮ

**ALENA BRAUNOVÁ<sup>a\*</sup>, MARTIN KAŇA<sup>b</sup>, JÚLIA KUDLÁČOVÁ<sup>a</sup>, MILADA ŠÍROVÁ<sup>b</sup>, LIBOR KOSTKA<sup>a</sup>, TOMÁŠ ETRYCH<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, <sup>b</sup> Mikrobiologický ústav AV ČR, Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4  
braunova@imc.cas.cz

Vícečetná léková rezistence (*angl. Multidrug resistance, MDR*) je častou příčinou nedostatečné účinnosti protinádorové terapie. Jako mechanismus vzniku MDR u nádorových buněk je uváděna především nadměrná exprese ATP dependentních efluxních pump na bázi ABC transportérů (zejména P-glykoproteinu, *P-gp*), díky nimž buňka vyloučí léčivo – cytostatikum – ještě dříve, než začne léčebně působit. Řešením mohou být tzv. inhibitory P-gp, jejichž použití by mělo vést ke zvýšení retence cytostatik uvnitř nádorových buněk, a tak i k překonání MDR a k dosažení účinnější protinádorové terapie. Inhibice P-gp byla popsána nejen u nízkomolekulárních látek (ritonavir, reversin atd.), ale také např. u poly(propylenoxidu) (PPO). PPO je ovšem ve vodě nerozpustný, což omezuje jeho použití v biologických systémech. Je známo, že polymerní nosiče léčiv na bázi vodorozpustných kopolymerů *N*-(2-hydroxypropyl)methakrylamidu (PHPMA) umožňují dopravu a řízenou aktivaci léčiva v nádorech a zároveň snižují jejich nežádoucí vedlejší účinky.

Naším cílem bylo připravit a studovat PHPMA nosiče léčiv nesoucí cytostatikum a zároveň P-gp inhibitor. Připravili jsme proto blokové kopolymery na bázi PHPMA-*b*-PPO. Díky svému amfifilnímu charakteru se tyto kopolymery samospořádávají ve vodním prostředí do supramolekulárních micelárních struktur, což vede k jejich

přednostní akumulaci v pevných nádorech díky tzv. efektu zvýšené propustnosti a zadržce (*EPR efekt*). Kromě hydrofilizace umožňuje PHPMA blok i vazbu cytostatika pomocí biodegradovatelné pH-senzitivní hydrazonové vazby, umožňující uvolnění léčiva specificky v nádorové tkáni či buňkách. V naší práci jsme se zaměřili na studium vlivu detailní struktury blokového kopolymeru na jeho fyzikálně-chemické i biologické vlastnosti. Použitelnost polymerních micel s vlastní P-gp inhibiční aktivitou i jako nosiče cytostatika byla potvrzena jak na buněčných liniích vykazujících MDR, tak i na odpovídajícím myším modelu. Bylo zjištěno, že výhodou začlenění polymerního inhibitoru MDR (PPO) přímo do struktury micelárního kopolymeru je nejen zlepšení retence a působení léčiv uvnitř nádorových buněk v důsledku inhibice P-gp, ale také významné zlepšení účinnosti použité chemoterapie.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR LTAUSA 18083.*

### 9L-20

#### BIODEGRADOVATELNÉ POLYMERNÍ KONJUGÁTY S INHIBITORY MMP PRO CÍLENOU INHIBICI METASTATICKÝCH PROCESŮ

**JANA KOUSALOVÁ<sup>a</sup>, LADISLAV SIVÁK<sup>b</sup>, MAREK KOVÁŘ<sup>b</sup>, TOMÁŠ ETRYCH<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav makromolekulární chemie AV ČR v. v. i., Heyrovského náměstí 2, 16206 Praha 6, <sup>b</sup> Mikrobiologický ústav AV ČR v. v. i., Vídeňská 1083, 14220 Praha 4  
kousalova@imc.cas.cz

Cílená protinádorová terapie je inovativní oblast v onkologii, která přispívá ke zvýšení úspěšnosti terapie různých typů rakoviny. Jeden z rysů nádorů je degradace extracelulární matrix (ECM) umožňující růst primárního nádoru a tvorba metastáz. Vývoj v biologii nádorových buněk umožnil sledování buněčných procesů zodpovědných za šíření rakovinných buněk z původního místa nádoru a vzniku metastáz. Za toto jsou například zodpovědné matrix proteinázy (MMP), které se z tohoto důvodu jeví jako vhodný potencionální cíl protinádorové terapie. Jedná se o skupinu proteináz podílejících se například na degradaci ECM a angiogenezy<sup>1</sup>. MMP jsou ve vysoké koncentraci exprimovány různými maligními buňkami a jejich nadměrná exprese je přímo úměrná agresivitě nádoru a tvorbě metastáz<sup>2,3</sup>. Přičemž jsou v těchto tkáních detekovány především MMP-2 a MMP-9.

Z tohoto důvodu jsem se rozhodli využít nízkomolekulární inhibitor MMP-2 a MMP-9 a připravit jeho dlouhocirkulující dopravní systém jeho navááním na vysokomolekulární biodegradovatelný polymerní nosič. Tato konjugace by měla vézt ke zlepšení farmakologických vlastností vybraného inhibitoru, zvýšení akumulace v solidních nádorech prostřednictvím EPR efektu, snížení pravděpodobnosti vzniku metastáz, respektive podávané dávky a vedlejší toxicity. Jako inhibitor uvedených MMP byl vybrán actinonin a kopolymer HPMA jako vhodný polymerní nosič. Byla připravena série polymerních konjugátů lišících se v použité spojce mezi actinoninem a polymerním nosičem.

U všech konjugátů byla změřena hydrolytická stabilita při různých hodnotách pH a na základě těchto výsledků byly vytipovány tři polymerní konjugáty, které byly podrobeny *in vitro* a testování *in vivo* biologickému testování. Byla stanovena aktivita při depleci metastatického rozsevu po podání laboratorním zvířatům nesoucím vysoce metastazující 4T1 prsní karcinom.

*Tato práce byla podpořena Grantovou agenturou ČR v rámci grantu 19-01417S.*

## LITERATURA

1. Verna R. P., Hansch C.: *Bioorg. Med. Chem.* 15, 2223 (2007).
2. Chambers A. F. et al.: *J. Natl. Cancer Inst.* 89, 1260 (1997).
3. Kahari V. M. et al.: *Ann. Med.* 31, 34 (1999).

## 9L-21

**POLYMERNÍ NANOLÉČIVA S pH-SENSITIVNÍM UVOLŇOVÁNÍM DEXAMETHASONU PRO LOKALIZOVANOU LÉČBU REVMATOIDNÍ ARTRITIDY**

**ALENA LIBÁNSKÁ<sup>a</sup>, EVA RANDÁROVÁ<sup>a</sup>, FRANCK LAGER<sup>b</sup>, GILLES RENAULT<sup>b</sup>, DANIEL SCHERMAN<sup>c</sup>, TOMÁŠ ETRYCH<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6 - Břevnov, <sup>b</sup> Université de Paris, Institut Cochin, INSERM, CNRS, F-75014 Paris, France, <sup>c</sup> Faculté de Pharmacie, Université de Paris, CNRS UMR 8258, Inserm U1267, 75270, Paris, France  
libanska@imc.cas.cz

Polymerní materiály jsou intenzivně studovány jako systémy umožňující cílenou dopravu léčiv do zánětů<sup>1</sup>. Díky fyziologické vasodilataci stěn krevních kapilár v zánětu umožňují polymerní konjugáty dopravit léčivo přímo do postižené tkáně, i bez použití směřujících jednotek<sup>2</sup>.

Za účelem zvýšení terapeutického potenciálu jsme syntetizovali polymerní konjugát na bázi kopolymerů *N*-(2-hydroxypropyl)metakrylamidu s kovalentně navázanou fluorescenční značkou a protizánětlivým léčivem dexamethasonem (DEX). To bylo navázáno na polymer pH-senzitivní hydrazonovou vazbou pomocí speciální spojky (založené na 4-(2-oxopropyl)benzoové kyselině) mezi léčivem a polymerním řetězcem. Ta umožňuje rychlé uvolnění léčiva z nosiče v nižším pH zánětlivé tkáně a minimální uvolňování léčiva v pH krve. Rychlé uvolnění léčiva v prostředí zánětu je klíčové v případě potřeby okamžité odpovědi na akutní fázi zánětlivých nemocí.

Myší model akutní artritidy, vyvolané lokálně pomocí Freundova adjuvanc, byl použit pro potvrzení akumulace polymerních konjugátů v zánětu. Ta se objevila velmi rychle po podání polymerních konjugátů a trvala až do konce experimentu. Během testování terapeutické aktivity konjugátů s léčivem, byla prokázána jejich vyšší protizánětlivá aktivita oproti samotnému léčivu. Nejúčinnější terapeutický efekt měla opakovaná i.p. aplikace polymerního konjugátu v koncentraci 1 mg DEX eq./kg, kde došlo k poklesu zánětu o více než 90 %.

*Tato práce vznikla za podpory grantů GAČR (19-00956Y), MŠMT (LTAUSA18083), MŠMT (BIOCEV-FAR LQ1604), BIOCEV (CZ.1.05/1.1.00/02.0109) a France Life Imaging (ANR-11-INBS-0006).*

## LITERATURA

1. Thakur S., Riyaz B., Patil A., Kaur A., Kapoor B., Mishra V.: *Biomed. Pharmacother.* 106, 1011 (2018).
2. Yuan F., Quan L., Cui L., Goldring S. R., Wang D.: *Adv. Drug Deliv. Rev.* 64, 786 (1998).

## 9L-22

**PEPTIDE-MODIFIED POLYMER SURFACES FOR HUMAN EMBRYONAL STEM CELLS CULTIVATION**

**VLADIMÍR PROKS<sup>a</sup>, JOSEF JAROŠ<sup>b,c</sup>, ILYA KOTELNIKOV<sup>a</sup>, PETR ŠÁLEK<sup>a</sup>, JOSEF LAVICKÝ<sup>b,c</sup>, JAKUB POSPÍŠIL<sup>a</sup>, ALES HAMPL<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Institute of Macromolecular Chemistry AS CR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, Praha 6-Břevnov, Czech Republic, <sup>b</sup> Department of Histology and Embryology, Faculty of Medicine, Masaryk University, Kamenice 3, Brno, Czech Republic, <sup>c</sup> Cell and Tissue Regeneration, International Clinical Research Center, St. Anne's University Hospital Brno, Czech Republic  
proks@imc.cas.cz

The interaction between the human embryonal stem cells (HESc) and their environment is vital for their migration and differentiation during the embryonic development and morphogenesis. The study of these specific interactions is important. Stem cell niche is represented by proteins of the extracellular matrix, cell junctions and soluble factors. Cell culture surfaces modified by synthetically prepared peptide motives (cell surface receptors ligands) can provide unique platform for studies of single molecule-ligand influence on cell behavior.

To prepare surfaces, we have developed and utilized a system combining the covalent bond of peptides to linkers applying click chemistry and a protein-repulsive surface made poly(2-hydroxyethyl methacrylate) based polymer (pHEMA). The pHEMA surface retains its protein repulsive properties after biomimetic modification<sup>1</sup> and therefore lowers the probability of false positive results by preventing the non-specific adhesion of cells on adsorbed proteins from the culture medium.

Our goal is to analyze the response of HESc to synthetic peptides and to characterize molecular pathways. This knowledge can be utilized for cell culture expansion and creating relevant models for disease modelling and developmental studies.

*This project was supported by grants by Czech Science foundation GACR 18-05510S*

## REFERENCES

1. Pop-Georgievski O., Zimmermann R.: *Kotelnikov I., Proks V., Romeis D., Kučka J., Caspari A., Rypáček F., Werner C.: Langmuir* 34, 6010 (2018).

## 9L-23

**REACTIVE OXYGEN SPECIES (ROS)-RESPONSIVE POLYMERSOMES WITH SITE-SPECIFIC CHEMOTHERAPEUTIC DELIVERY INTO ROS-RICH TUMOR *IN VIVO***
**VLADIMIR SINCARI\*, ELIEZER JÄGER, ALESSANDRO JÄGER, MARTIN HRUBÝ**

University Institute of Macromolecular Chemistry v.v.i.,  
Academy of Sciences of the Czech Republic, Heyrovsky Sq. 2,  
162 06 Prague 6, Czech Republic  
sincari@cas.imc.cz

ROS such as, hydrogen peroxide (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>), is a component of cell signalling pathways that are necessary for the growth, development, and fitness of living organisms. However, imbalances in H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> production lead to oxidative stress and inflammation events, which damage tissue and organ systems and are correlated with the onset and advancement of various diseases, including cancer<sup>1,2</sup>. Hence, the design of PS able to be responsive to these inherent feature of the TME has been proposed as a promising approach for the cancer treatment.

A new oxidative responsive amphiphilic diblock copolymer based on a novel methacrylamide monomer bearing pinacol-type boronic ester functional moieties and N-(2-hydroxypropyl)methacrylamide (HPMA) was synthesized by a reversible addition-fragmentation chain transfer (RAFT) polymerization and characterized by standard techniques (1H NMR and SEC). Monodisperse polymersomes (PS1 and PS2) ~ 100 nm in diameter loaded with the chemotherapeutic drug doxorubicin (Dox) were produced by microfluidic flow-focusing method. Characterization of the PS and their degradation under presence of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> was probed by 1H NMR, SEC, dynamic and static light scattering techniques. The therapeutic effect of PS was tested on *in vitro* and *in vivo* biological models and was compared with the marketed free chemotherapeutic Dox.

The developed PS platform allows the specific delivery of Dox at the inherent ROS levels typically found in the TME. The *in vivo* results clearly show efficient suppression of tumor cell growth in mice bearing EL4 T cell lymphoma. The survival time of the animals was also extended if compared with DOX-free. Along, the reduced side effects of the chemotherapy were substantially improved with the PS such as balance of the body weight, less cardiotoxicity of DOX, one of the main drawbacks of this current chemotherapeutic drug in the clinic, as observed after the decreasing of serum creatine kinase levels monitored in blood. The results from this pioneer work strongly suggest that ROS-responsive PS produced in a size and polydispersity controlled way exhibit physico-chemical and biological properties required for practical applications as nanomedicines with potential for tumor-targeting DOX delivery based on the ROS-triggered release mechanism *in vivo*.

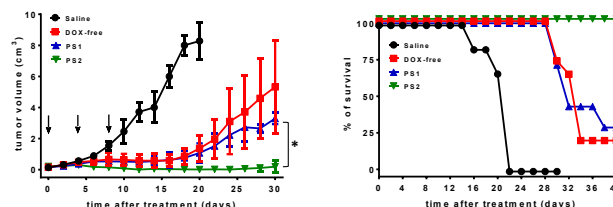
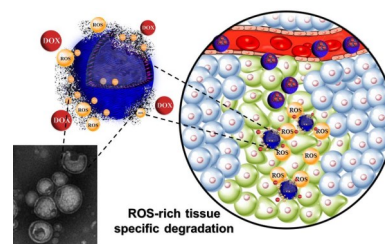


Schéma 1. Mechanism of ROS-triggered degradation (top), *In vivo* effect of PS vs DOX-free and Saline on the growth of T cell lymphoma EL4 (bottom right) and Kaplan-Meier survival plot of mice after 3 × 5 mg DOX (equivalent)/kg administration and untreated control (n=4–6; black arrows indicate injections) (bottom left).

This work was financially supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of Czech Republic, project POLYMAT LO1507. A.J. and E.J. acknowledges financial support from the Czech Science Foundation, grant no. #20-13946Y (A.J.) and #20-15077Y (E.J.).

## REFERENCES

1. Minelli A., Bellezza I., Conte C., Culig Z.: *Biochim. Biophys. Acta* 179, 83 (2009).
2. Hancock J. T., Desikan R., Neill S. J.: *Biochem. Soc. Trans.* 29, 345 (2001).

**9P-01**  
**PORÉZNÍ ORGANICKÉ POLYMERY**  
**S KARBALDEHYDOVÝMI SKUPINAMI**  
**A LADITELNOU TEXTUROU**

LUCIE HAVELKOVÁ, BOGDANA BASHTA, JAN SEDLÁČEK

*Katedra fyzikální a makromolekulární chemie,  
 Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8,  
 128 00 Praha 2  
 lucie.havelkova@natur.cuni.cz*

Porézní organické polymery (POP) typu hypersesitovaných polyacetylenických sítí s permanentní porozitou ( $S_{\text{BET}}$  až 916 m<sup>2</sup>/g) a vysokým obsahem karbaldehydových skupin (až 7,6 mmol/g) byly připraveny (i) přímou homopolymerizací 1,3-diethynylbenzaldehydu nebo kopolymerizací monoethynylbenzaldehydů s vhodnými síťovadly<sup>1</sup> (Schéma 1A) a (ii) homo- a kopolymerizací *N*-(ethynylbenzyliden)anilinů a následným hydrolytickým detemplátováním primárních sítí (Schéma 1B). V závislosti na způsobu přípravy se funkcionalizované POP zásadně lišily charakterem textury. POP připravené cestou přímé polymerizace vykazovaly hierarchizovanou mikro/mesoporézní texturu. Naopak, u POP připravených dvoustupňovou syntézou byla dosažena čistě mikroporézní textura, přičemž velikost mikropórů bylo možno ovlivňovat velikostí odstraňovaného templátu [R = -CH<sub>3</sub> vs. -C(CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>, Schéma 1B]. V rámci příspěvku budou dále prezentovány adsorpční vlastnosti připravených POP.

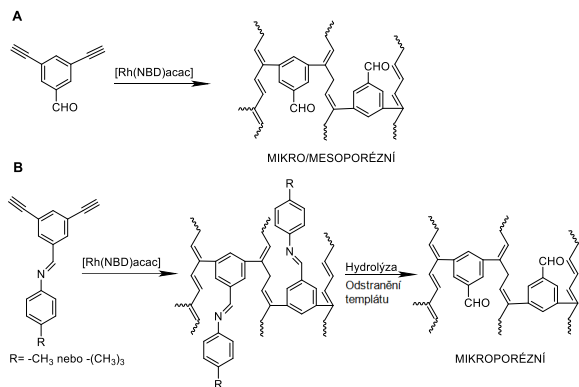


Schéma 1. Příprava POP přímou polymerizací (A) a dvoustupňovou syntézou využívající detemplátování (B)

*Tato práce vznikla za podpory grantů GAČR 20-01233S a GAUK 210119.*

**LITERATURA**

- Havelková L., Hašková A., Bashta B., Brus J., Lhotka M., Vrbková E., Kindl M., Vyskočilová E., Sedláček J.: Eur. Polym. J. 114, 279 (2019).

**9P-02**  
**REOLOGICKÉ VLASTNOSTI ELASTOMÉRNÝCH**  
**KOMPOZITNÝCH MATERIÁLŮV**

**KLAUDIA HLOŽEKOVÁ<sup>a</sup>, ANDREA**  
**KVASNIČÁKOVÁ<sup>a</sup>, JÁN KRUŽELÁK<sup>a</sup>, MAREK**  
**GOŘALÍK<sup>b</sup>**

*<sup>a</sup> Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU,  
 Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko, <sup>b</sup> Polymérne  
 centrum, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati  
 ve Zlíně, Zlín, Česká republika  
 klaudia.hlozekova21@gmail.com*

Elastomérne magnetické kompozity predstavujú skupinu tzv. smart materiálov, kombinujúcich elasticke vlastnosti kaučukových matric a magnetické vlastnosti kovových magnetík. Hoci sú ich vlastnosti závislé najmä od typu elastomérnej matrice, ich spracovateľské, fyzikálno-mechanické a magnetické vlastnosti závisia aj od typu a obsahu magnetického plniva. Elastomérne magnetické kompozity vykazujú výborné elasticke a magnetické vlastnosti, ktoré sa využívajú pri aplikáciách v mikrovlnnej a radarovej technológii, magnetických snímačoch a zobrazovačoch, senzoroch magnetických, či elektromagnetických polí.

Z hľadiska aplikácie magnetických plnív s vysokou viskozitou je vysoká pravdepodobnosť ovplyvňovania nielen fyzikálno-mechanických, ale aj reologických a spracovateľských charakteristík. Preto cieľom daného výskumu je práve hodnotenie reologických charakteristík elastomérených kompozitných materiálov, ktoré boli pripravené aplikáciou magneticky mäkkého mangánato-zinočnatého feritu v koncentračnom rozmedzí od 100 do 500 dsk do kaučukových matric na báze prírodného (NR) a butadiénakrylnitrilového kaučuku (NBR). Na hodnotenie reologických vlastností bol použitý oscilačný reometer RPA 2000.

Boli merané a vyhodnotené závislosti komplexnej viskozity  $\eta^*$  a jej zložiek od šmykovej rýchlosti  $\gamma$  pri 90 °C. Zistilo sa, že pri nízkych šmykových rýchlostiach s rastúcou koncentráciou mangánato-zinočnatého feritu rastie viskozita, ale pri vyšších šmykových rýchlostiach dané plnivo nemá na viskozitu výrazný vplyv. Pokles viskozity kompozitných materiálov s rastúcou šmykovou rýchlosťou poukazuje na pseudoplastický charakter kaučukových zmesí.

*Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja Slovenskej republiky, projekt. č. APVV-16-0136 a APVV-19-0091.*

## 9P-03

## INVESTIGATION OF RADIO-FREQUENCY PLASMA MODIFIED OAK WOOD

PETER JURKOVIČ<sup>c</sup>, IGOR NOVÁK<sup>a\*</sup>, IVAN CHODÁK<sup>a</sup>, JÁN SEDLIAČIK<sup>b</sup>, JÁN MATYAŠOVSKÝ<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Polymer Institute SAS, Bratislava, Slovakia, <sup>b</sup> Faculty of Wood Sciences and Technology, Technical University in Zvolen, Zvolen, Slovakia, <sup>c</sup> VIPO, a.s., Partizánske, Slovakia  
igor.novak@savba.sk

The low-temperature plasma can be used for a treatment of the wood surface to improve its adhesion to various substrates. There are two reasons why in that case to apply discharge plasma leads to the surface treatment. Firstly, discharge plasma in air itself significantly increases hydrophilicity of the wood because of formation various polar groups (e.g. hydroxyl, carbonyl, carboxyl, etc.), and the wood macromolecules are also cross-links (up to a few microns), what leads to the increase in scratch resistance, and to the improvement in barrier properties of the wood material. Second reason for the plasma use is an increase of adhesion in adhesive joint between polymeric adhesive and wood substrate due to growth of wood wettability, what is important for industrial application. The treatment of the wood by discharge plasma is limited to a few nanometers without affecting the bulk properties of the wood<sup>1-3</sup>. The increased surface polarity due to oxidations reaction during modification of wood by RF discharge plasma improves its wettability and hydrophilicity<sup>4</sup>. The RF discharge plasma is an efficient and ecologically friendly method for wood modification<sup>5</sup>.

A significant increase of the polar component of oak wood surface energy after modification by RF discharge plasma has been observed. The treatment of the oak wood by RF plasma exhibited relatively smaller aging effect, but the modified surface never recovers to its initial hydrophobic state. The roughness of the RF plasma-treated oak wood surface analyzed by AFM slightly decreased, but no significant changes were observed using SEM because the changes were only at micro-level. FTIR-ATR spectra confirm an increase of the oak wood polarity during RF plasma treatment due to growth in –OH group amount. The content of oxygen and nitrogen after RF plasma treatment of oak wood increased. The content of COOH, C–O and C=O groups after treatment by RF plasma significantly increased. The shear strength of adhesive joint of oak wood using polyurethane adhesive increased non-linearly with activation time.

*This contribution was supported by Ministry of Education of the Slovak Republic and Slovak Academy of Sciences, project VEGA, Grant No.1/0570/17, APVV-16-0177, APVV-17-0456, APVV-18-0378, APVV-19-0269.*

## REFERENCES

- Moghadamzadeh H., Rahimi H., Asadollahzadeh M., Hemmati A. R.: Intern. J. Adhesion and Adhesives 31, 816 (2011).
- Müller G., Schöpfer C., Vos H., Kharazipour A., Polle A.: Bioresources 4, 49 (2009).
- Novák I., Popelka A., Krupa I., Chodák I., Janigová I., Nedelčev T., Špírková M., Kleinová A.: Vacuum 86, 2089 (2012).
- Olaru N., Olaru L., Cobiliac G. H.: Roman. J. Phys. 50, 1095 (2005).
- Wolkenhauer A., Avramidis G., Hauswald E., Militz H., Viöl W.: Intern. J. Adhesion and Adhesives 29, 18 (2009).

## 9P-04

## ANIONTOVÉ DENDRIMERY S KARBOSILANOVÝM JÁDREM A POLYAMIDOAMINOVOU VNĚJŠÍ VRSTVOU

SUSANNE KRKOŠKA<sup>a</sup>, PETR SYSEL<sup>a</sup>, ANTONÍN EDR<sup>b</sup>, TOMÁŠ STRAŠÁK<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Ústav polymerů, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6, <sup>b</sup> Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Rozvojová 135, 165 02 Praha 6  
Susanne.Krkoska@vscht.cz

Přestože v současnosti dendrimery představují zavedenou součást makromolekulární popř. supramolekulární chemie, je stále značné úsilí věnováno vývoji nových strategií umožňujících optimální nastavení dendritických struktur pro danou aplikaci<sup>1</sup>. Především v oblasti biomedicínálních aplikací tento typ látek disponuje značným potenciálem. Díky přesně definované, makromolekulární struktuře tyto látky mohou mimikovat funkci a aktivitu některých biomolekul a působit jak terapeuticky tak diagnosticky.

V příspěvku bude prezentován nový typ dendrimerních sloučenin, založený na spojení dvou funkčně kontrastních vrstev. Nepochybně vnitřní část dendrimery tvoří karbosilanové jádro nulté až druhé generace (CS<sub>0-2</sub>) s využitím atomů křemíku jako větvičích jednotek. Na karbosilanové jádro navazuje 1–2 generace polární polyamidoaminové vrstvy (PAMAM<sub>1-2</sub>). Spojení obou částí je umožněno mezistupněm realizovaným adicí thiolové skupiny methyl-merktoacetátu na terminální allyly CS-jádra a následnou aminolýzou methylesteru ethylendiaminem. Takto jsou získány terminální aminy, které slouží jako multifunkční jádro pro výstavbu PAMAM-vrstvy/vrstev. Samostatně jsou CS i PAMAM dendrimery dobře známy a široce studovány v mnoha oblastech biomedicínského výzkumu<sup>2</sup>. PAMAM dendrimery v současnosti patří mezi nejrozšířenější, komerčně dostupné dendrimery. Variací různého poměru CS a PAMAM složky získáme reprezentativní sérii dendritických látek (CS<sub>x</sub>PAMAM<sub>y</sub>) demonstrující možnosti nové syntetické strategie. Prezentovány budou aniontové formy nových dendrimery, které budou dále testovány jako terapeutika amyloidóz.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 20-06264S a 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.*

## LITERATURA

1. Astruc D., Boisselier E., Ornelas C.: *Chem. Rev.* 110, 1857 (2010).
2. Herma R., Wrobel D., Liegertova M., Müllerová M., Strašák T., Malý M., Semerádová A., Štofík M., Appelhans D., Malý J.: *Int. J. Pharm.* 562, 51 (2019).

## 9P-05

**KOMBINOVANÉ SÍRNE A PEROXIDOVÉ  
VULKANIZAČNÉ SYSTÉMY APLIKOVANÉ PRI  
SIEŤOVANÍ ELASTOMÉRNÝCH MATERIÁLOV**

**JÁN KRUŽELÁK<sup>a</sup>, ANDREA KVASNIČÁKOVÁ<sup>a</sup>,  
RASTISLAV DOSOUDIL<sup>b</sup>, IVAN HUDEC<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava,* <sup>b</sup> *Fakulta elektrotechniky a informatiky, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovensko*  
jan.kruzela@stuba.sk

Cieľom práce bolo hodnotenie vlastností elastomérnych kompozitných materiálov, ktoré boli pripravené aplikáciou barnatého feritu do kaučukových matric na báze prírodného (NR) a syntetického butadiénakrylonitrilového (NBR) kaučuku. Barnatý ferit, ktorý plnil funkciu magnetického plniva, sa do kaučukových zmesí aplikoval v konštantnom množstve. Na sieťovanie kaučukových matric sa využili kombinované sírne a peroxidové vulkanizačné systémy. Následne sa hodnotil vplyv zloženia vulkanizačných systémov na sieťovú hustotu, morfológiu, fyzikálno-mechanické, dynamicko-mechanické a magnetické vlastnosti. Dosiahnuté výsledky ukázali, že sieťová hustota a fyzikálno-mechanické vlastnosti sa menili v závislosti od meniaceho sa pomeru síry a peroxidu v kombinovaných vulkanizačných systémoch. Z morfológie vzoriek kompozitov vyplýva, že kompatibilita a homogenita medzi magnetickým plnivom a kaučukovou maticou bola najnižšia v prípade kompozitov vulkanizovaných sírnym systémom. Zvyšovaním obsahu peroxidového vulkanizačného systému, kompatibilita medzi plnivom a kaučukovými maticami narastá. Najlepšiu kompatibilitu a homogenitu dosahovali kompozity sieťované len peroxidovým vulkanizačným systémom. Túto skutočnosť možno pripísať prítomnosti kovulkanizačného činidla peroxidovej vulkanizácie – zinkovej soli kyseliny metakrylovej, ktorá zvyšuje adhéziu na medzifázovom rozhraní plnivo – kaučuk. Hodnoty koercivity a remanentnej magnetickej indukcie sa pohybovali v úzkom intervale experimentálnych hodnôt. Vyplýva z toho zistenie, že nezávisia od zloženia vulkanizačného systému a ani od typu kaučukovej matrice. Magnetické parametre elastomérnych kompozitov sú závislé iba od obsahu magnetického plniva.

*Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja Slovenskej republiky, projekt. č. APVV-16-0136 a APVV-19-0091.*

## 9P-06

**POLYMÉRNE KOMPOZITY SCHOPNÉ TIENIŤ  
ELEKTROMAGNETICKÉ ŽIARENIE**

**ANDREA KVASNIČÁKOVÁ<sup>a</sup>, JÁN KRUŽELÁK<sup>a</sup>,  
JARMILA VILČÁKOVÁ<sup>b</sup>, IVAN HUDEC<sup>a</sup>, PATRIK  
MACÚRIK<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko,* <sup>b</sup> *Centrum polymerných materiálov, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, třída Tomáše Bati 5678, 760 01 Zlín, Česká republika*  
andrea.kvasnicakova@stuba.sk

V súčasnosti rýchly rozvoj bezdrôtovej elektroniky a súvisiacich elektronických zariadení spôsobuje čoraz vážnejšie problémy s elektromagnetickým znečistením. Všetky tieto elektronické zariadenia produkujú elektromagnetické žiarenie, tzv. elektromagnetický smog. Tento smog má nepriaznivý vplyv najmä na ľudské zdravie, ale tiež naruša fungovanie iných elektronických zariadení. Jednou z metód ako eliminovať elektromagnetické žiarenie je tienenie. Tienenie vo všeobecnosti predstavuje bariéru, ktorá bráni prechodu elektromagnetického (EM) žiarenia. Jedným z takýchto materiálov schopných účinne tieniť EM žiarenie sú polymérne magnetické kompozity pozostávajúce z feromagnetických plnív zabudovaných do kaučukovej matrice.

Cieľom tejto práce bola príprava polymérnych kompozitných materiálov na báze butadiénakrylonitrilového kaučuku a hodnotenie vplyvu mangánato-zinočnatého feritu na vulkanizačné charakteristiky, fyzikálno-mechanické a tieniace charakteristiky pripravených kompozitov. Z výsledkov merania a hodnotenia tieniacich vlastností vyplynulo, že tieto kompozity vykazovali absorpčnú tieniacu účinnosť pod úrovňou –20 dB, čo znamená pohltenie takmer 99% dopadajúceho žiarenia. Ďalším zistením je aj fakt, že s rastúcim obsahom magnetického plniva dochádzalo k posunu efektívneho absorpčného rozmedzia smerom k nižším frekvenciám dopadajúceho elektromagnetického žiarenia. Napriek tomu, že kompozity vykazovali vhodné tieniace vlastnosti, fyzikálno-mechanické vlastnosti takto pripravených kompozitov sa s rastúcim obsahom magneticky mäkkého plniva zhoršovali.

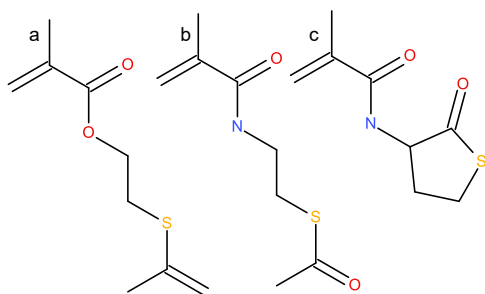
*Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja Slovenskej republiky, projekt. č. APVV-16-0136 a APVV-19-0091.*



## 9P-07

**SYNTEZA THIOMERŮ PRO PŘÍPRAVU DEGRADOVATELNÝCH HYDROGELŮ****HANA MACKOVÁ, MIROSLAV VETRÍK, MIROSLAVA DUŠKOVÁ-SMRČKOVÁ, DANIEL HORÁK***Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v. v. i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6 - Břevnov  
mackova@imc.cas.cz*

Thiolované polymery–thiomery mají potenciál v regenerativní medicíně a teranostice jako depoty léčiv i lapače reaktivních forem kyslíku. K přípravě těchto makromolekulárních materiálů byly využity monomery obsahující chráněnou či maskovanou thiolovou skupinu: 2-acetylthioethyl-methakrylát, homocystein thiolakton methakrylamid a 2-acetylthioethyl methakrylamid (obr. 1 a, b, c), které byly dále kopolymerovány s 2-hydroxyethyl-metakrylátem (HEMA) či *N*-(2-hydroxypropyl)metakrylamidem (HPMA). Cílem bylo připravit ve vodě rozpustné lineární makromolekuly řízenou radikálovou polymerizací adičně fragmentačním přenosem řetězce s molekulovou hmotností nepřesahující 40 000 a s úzkým indexem polydispersity. K přípravě thiomery byla použita 4,4'-azobis(4-kyanovalerová kyselina) a 4-kyano-4-(fenylkarbonothioylthio)pentanová kyselina jako iniciátor a přenosové činidlo. Nejvyšší výtěžky (80 %) i nejlepší kontrolu molekulové hmotnosti vykazovaly kopolymery HEMA, HPMA vykazoval nižší konverze (cca. 40 %). Kopolymery 2-acetylthioethyl methakrylátu a homocystein thiolakton methakrylamidu se podařilo připravit s úzkou molekulovou distribucí < 1,3. Všechny typy kopolymerů pak byly použity k přípravě degradovatelných superporézních hydrogelů síťovaných disulfidickými můstky, které degradují v přítomnosti nízkomolekulárních thiolů. Degradovatelnost byla ověřena v roztoku cysteinu či glutathionu.



Obr. 1. **Reaktivní monomery obsahující thiolovou skupinu. 2-Acetylthioethyl methakrylát (a), homocystein thiolakton methakrylamid (b), 2-acetyl thioethyl methakrylamid (c)**

*Tato prezentace vznikla za podpory: GA ČR 20-07015S.*

## 9P-08

**KERATIN – NATURAL POLYMER FOR REDUCING FORMALDEHYDE EMISSIONS FROM WOOD-BASED PANELS****JÁN MATYŠOVSKÝ<sup>a\*</sup>, PETER JURKOVIČ<sup>a</sup>, PETER DUCHOVIČ<sup>a</sup>, IGOR NOVÁK<sup>b</sup>***<sup>a</sup> VIPO, a.s., Partizánske, Slovensko, <sup>b</sup> Ústav polymérov SAV, 845 41 Bratislava, Slovensko  
jmatyasovsky@vipo.sk*

Keratins belong to a large group of fibrous proteins, which form part of the skin layer and associated structures such as hair, nails, horn, and feathers. Research was focused on the biopolymer keratin because the main characteristic of the keratin protein is the high content of thio-amino acids – methionine and cysteine. Keratin hydrolysates were prepared using sheep wool “Merino” of the composition: nitrogen 12.15%, ash 2.53%, sulphur 2.21%, fat 7.16%.

Preparation technology was optimized on a laboratory scale and the samples were characterized by FTIR-ATR spectroscopy and X-ray photoelectron spectroscopy (XPS)<sup>1</sup>. Changes in the spectra of keratin hydrolysates are mainly shown in the content of sulphur, in proportion between the reduced C-S form and SO<sub>3</sub> oxidized form.

Antioxidation activity of keratin hydrolysates were studied in a polyethylene glycol (PEG) matrix employing the non-isothermal differential scanning calorimetry (DSC). In the data treatment, the Berthelot-Hood equation was chosen as the temperature function. The kinetic parameters enabled the assessment of the induction period of oxidation for application temperatures. For the comparison of the stabilizing effect, the protection factors and antioxidant efficiency were calculated. The results show that the antioxidant activity of the samples depends on the preparation procedure, purity, etc. Protection factors decreased with increasing temperature and decreasing concentration<sup>2,3</sup>.

Technical applications were also directed to the application of keratin hydrolysates at modification of urea-formaldehyde (UF) resin mixtures to reduce the release of formaldehyde from bonded wood-based panels<sup>4,5</sup>. Formaldehyde emissions were assessed from five-layer plywood according to JIS A 1460 (2001) “Building boards. Desiccator method” Quality of gluing was tested according to standards EN 314-1 and EN 314-2. Tested plywood fulfils the requirements of the standard for class of gluing 1 – they are suitable for application in normal interior environment. Measured values of extinctions of tested samples confirmed the lowering of formaldehyde emissions for each concentration of keratin hydrolysate in comparison with the reference sample. The most significant decreasing of formaldehyde up to 37% was obtained for 5% dosage of keratin with the highest sulphur and sulphide bonds content.

*This research has been funded by Slovak Research and Development Agency, Grants No. APVV-15-0124, APVV-16-0177, APVV-17-0456 and APVV-18-0378 is greatly acknowledged.*

## REFERENCES

1. Matyašovský J. et al.: *JALCA* 114, 20 (2019).
2. Šimon P. et al.: *5th Central and Eastern European Conference for Thermal Analysis and Calorimetry*, Roma 2019.
3. Cibulková, Z. et al.: In *ChemZi: Zborník abstraktov*, 71. zjazd chemikov, Smokovec. 2019, s. 148.
4. Bekhta P. et al.: *Eur. J. Wood Wood Prod.* 77, 495 (2019).
5. Kúdela J. et al.: *Wood Res.* 62, 939 (2017).

## 9P-09

**INVESTIGATION OF HOT-MELT ADHESIVES  
BASED ON SELECTED METALLOCENE  
COPOLYMERS**

**IGOR NOVÁK<sup>a\*</sup>, JURAJ PAVLINEC<sup>a</sup>, IVAN  
CHODÁK<sup>a</sup>, JOZEF RYCHLÝ<sup>a</sup>, ANGELA KLEINOVÁ<sup>a</sup>,  
ZUZANA NÓGELLOVÁ<sup>a</sup>, JOZEF PREŤO<sup>b</sup>, VLADIMÍR  
VANKO<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Polymer Institute SAS, Bratislava, Slovakia, <sup>b</sup> VIPO, a.s.,  
Partizánske, Slovakia  
igor.novak@savba.sk

Hot-melt adhesives (HMA) represent a sort of thermoplastic adhesives, that are mostly blended from standard polymer as a basis for achieving particular mechanical properties while other components are added according to requirements regarding the properties for specific applications<sup>1</sup>. Some of HMA disadvantages involve thermal load of the substrate, and loss of bond strength at higher temperatures, up to complete melting of the adhesive. Metallocene polyolefins are recently tested frequently as a basis for hot-melt adhesives with improved performance<sup>2</sup>. Metallocene ethylene-octene copolymer (MeEO) non-polar chains interact well with non-polar surfaces. Nevertheless, efforts to adjusting the adhesive properties hot-melt adhesives based on MePO application parameters, especially regarding increased adhesion to polar surfaces, focus to basic polyolefin chains polarity increase, or polar polymers addition to the adhesive compositions. An increase of MeEO polarity<sup>3</sup> has been achieved by free radical grafting of acrylic acid (AA) and/or crotonic acid (CRA) to polymer macromolecules activated with oxygen-ozone mixture. The formed graft copolymer was used as an additive to formulate HMA with increased applicability in adhesive properties<sup>4</sup>.

FTIR analysis verified that AA and/or CRA was present in grafted MeEO. The bands for C=O (1715 cm<sup>-1</sup>) and COC (1170 cm<sup>-1</sup>) indicate that AA and/or CRA chains are present. The FTIR absorbance intensity ratio for the acid carbonyl compounds at 1715 cm<sup>-1</sup> and the reference band at 1464 cm<sup>-1</sup> was used to determine the PAA concentration in the grafted copolymer. The total free surface energy of MeEO grafted by AA and/or CA exhibit an increase depending on the amount of grafted AA or CRA. The HMA peel temperature resistance modified with grafted MeEO increased by more than 10 °C while the temperature resistance values of the adhesive joints in shear tests were similar. During the peel tests, the adhesive joints of the cardboard-unmodified HMA exhibit adhesive failure, but the joints of cardboard-HMA modified with grafted MeEO show cohesive destruction.

*This contribution was supported by Ministry of Education of the Slovak Republic and Slovak Academy of Sciences, project VEGA, Grant No.1/0570/17, APVV 14-0566.*

## REFERENCES

1. Conley B., McLennaghan A., Yalvac S.: *EAS* 22, 34 (2014).
2. Pavlinec J., Novák I., Rychlý J., Kleinová A., Nógellová Z., Preťo J., Vanko V., Chodák I.: *J. Plast. Film Sheet.* 35, 239 (2019).
3. Yalvac S., Karjala T., O'Bryan E.: *Adhes. Seal. Ind.* 12, 34 (2005).
4. Fasce L. A., Costamagna V., Pettarin V., Strumia M., Frontini P. M.: *Express Polym. Lett.* 2, 779 (2008).

## 9P-10

**ANTIBACTERIAL TREATMENT  
OF POLYETHYLENE WITH HALOGEN  
COMPOUNDS AND LOW-TEMPERATURE PLASMA**

**IGOR NOVÁK<sup>a\*</sup>, ANTON POPELKA<sup>b</sup>, IVAN  
CHODÁK<sup>a</sup>, MARIÁN LEHOCKÝ<sup>c</sup>, JÁN  
MATYAŠOVSKÝ<sup>d</sup>, PETER JURKOVIČ<sup>d</sup>**

<sup>a</sup> Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences 845 41  
Bratislava, Slovakia, <sup>b</sup> Center for Advanced Materials, Qatar  
University, Doha, Qatar, <sup>c</sup> Centre of Polymer Systems,  
University Institute, Tomas Bata, University in Zlín, 760 01  
Zlín, Czech Republic, <sup>d</sup> VIPO, a.s., Partizánske, Slovakia  
igor.novak@savba.sk

Polyethylene (PE) has found uses in various biomedical applications, such as the production of catheters<sup>1</sup>. However, PE often leads to unfavorable infections that represent serious clinical complications. These infections can result in implant failure, which can lead to numerous health problems. To overcome this disadvantage, an anti-infection modification of PE is frequently applied<sup>2</sup>. Anti-infective properties of polymers are achieved by the incorporation of an anti-infection agent into the polymer bulk or by copolymerization of an anti-infection agent with a monomer. The antibacterial surface treatment was demonstrated to be the preferred choice because it exhibited several advantages: it did not influence the bulk properties of the polymer, antibacterial agents were not released from the polymer volume, and the procedure was relatively simple and effective<sup>3</sup>. In this study, a multistep approach consisting of plasma treatment of polymer surface, radical graft polymerization of acrylic acid (AA) and the immobilization of antibacterial agents, was used<sup>4</sup>. The antibacterial agents are capable of inhibiting the proliferation of microorganisms on the polymer surface<sup>5</sup>. Branched low-density PE foils were used in this study, benzalkonium chloride and bronopol were tested as antibacterial agents.

PE samples were activated with barrier discharge plasma at atmospheric pressure, then were grafted with acrylic acid (AA) and subsequently were immobilized with halogen compounds, i.e. bronopol and/or benzalkonium chloride. The best results were obtained for antibacterial PE samples with benzalkonium chloride than for bronopol. The activity of antibacterial PE against bacterial strain *Staphylococcus aureus* were better compared to *Escherichia coli*. The activity

of antibacterial polymer against *Escherichia coli* was not sufficiently demonstrated.

*This contribution was supported by Ministry of Education of the Slovak Republic and Slovak Academy of Sciences, project VEGA, Grant No.1/0570/17, APVV-15-0124 and APVV-16-0177.*

#### REFERENCES

1. Sanchis R., Fenollar O., García D., Sánchez L., Balart R.: Intern. J. Adhes. Adhesives 28, 445 (2008).
2. Zhang W., Chu P. K., Ji J., Zhang Y., Fu R. K. Y., Yan Q.: Polymer 47, 931 (2006).
3. Asadinezhad A., Novák I., Lehocký M., Sedlářik V., Vesel A., Junkar I., Sába P., Chodák I.: Plasma Proc. Polym. 7, 504 (2010).
4. Popelka A., Novák I., Lehocký M., Bílek, F., Kleinová A., Mozetic M., Špírková M., Chodák I.: Express Polym Lett. 9, 402 (2015).
5. Saxena S., Ray A. R., Mindemart J., Hilborn J., Gupta B.: Plasma Proc. Polym. 7, 610 (2010).

#### 9P-11

##### PROPERTIES OF MXENE LAYERS

**YARYNA SOYKA<sup>a</sup>, MICHAL PROCHAZKA<sup>a</sup>, MATEJ MICUSIK<sup>a</sup>, DAIVA ZELENIAKIENE<sup>b</sup>, MARIA OMASTOVA<sup>a\*</sup>**

<sup>a</sup> Polymer Institute, Dubravská cesta 9, 845 41 Bratislava Slovakia, <sup>b</sup> Kaunas University of Technology, Studentu st. 56, 51424 Kaunas, Lithuania  
Yaryna.soyka@savba.sk, maria.omastova@savba.sk

MXenes are a large family of 2D materials with unique optoelectronic properties and tuneable surface termination. Different MXenes are prepared from different MAX phases of the formula  $M_{n+1}AX_n$ , where M is the most common transition metal, A is an element of the 13 or 14 group of the periodic table of elements, X is usually C and/or N<sup>1</sup>. By etching of the A layers from MAX phase, MXene are formed. The surface of etched MXenes contains functional group e.g., -O, -F, -OH, leads negatively charged surface.

MXene layers were prepared by delamination of MXene pasta prepared at Drexel university. MXene solution type  $Ti_3C_2Tx$  were sprayed on plasma modified PET foils up to 4 layers. Prepared MXene was characterized by XPS measurement. Obtained layered surfaces were tested with See System for contact angle values measurement, using diiodomethane and water. The conductivity of samples was measured by multimeter.

The surface of pure PET foil is hydrophobic. After plasma treatment it is turned to hydrophilic<sup>2</sup>. MXenes layers were sprayed and characterized by contact angle and conductivity measurements. Sprayed MXene layers are hydrophilic. This experiment will continue with spraying up to 10 layers. First results showed, that MXene layers are hydrophilic. Changes of MXene layers resistivity was monitored within 5 months. The resistivity of MXene layers increased with time, from 7.5  $\Omega$  after preparation up to 41.6  $\Omega$  after 5 months of staying at ambient condition. It means that

MXene is oxidizing in the air. Changes of MXene structures are also study by XPS.

MXene layers can be used e.g. electrode materials for energy storage devices, or layers in perovskite type of solar cells.

*This work developed under the M-era.Net research project titled NANO2COM, the research was funded by grants No. M-ERANET-18-414-Nano2Com from Slovak Academy of Sciences, No. S-M-ERA.NET-18-1 from the Research Council of Lithuania, and by project VEGA 02/0010/18 (Slovakia).*

#### REFERENCES

1. Naguib M., et al.: Adv. Mat. 23, 4248 (2011).
2. Miran M.: Materials 12, 441 (2019).

#### 9P-12

##### COMPARISON OF NANOFIBROUS MEMBRANES WITH COMMERCIAL CULTURING MEMBRANES FOR RETINAL TISSUE ENGINEERING

**HANA STUDENOVSKÁ\*, JITKA NOVÁČKOVÁ, LUĎKA MACHOVÁ, OLGA JANOUŠKOVÁ, DAVID RAIS, VLADIMÍR PROKS**

Institute of Macromolecular Chemistry CAS, Heyrovský Sq. 2, 162 06 Prague 6  
studenovska@imc.cas.cz

The transplantation of retinal pigment epithelial (RPE) cells via nanofibrous membrane could be a promising therapeutic option for the treatment of an age-related macular degeneration or other degenerative retinal disorders. In this work, two commercial culturing membranes for retinal tissue engineering made either from poly(ethylene terephthalate) (PET) or polyimide (PI) were compared with a thin polylactide nanofibrous membrane (NM).

#### Experimental methods

Following membranes were studied: poly(ethylene terephthalate) membrane (track-etched, thickness 10  $\mu\text{m}$ , pore density  $1 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ ), polyimide membrane (track-etched, thickness 7  $\mu\text{m}$ , pore density  $2.2 \times 10^7 \text{ cm}^{-2}$ ), and nanofibrous membrane based on 380-nm-thick polylactide fibres (thickness 3.7  $\mu\text{m}$ , porosity 72%). NMs were prepared by electrospinning<sup>1</sup> that easily allowed an embedding of a supporting frame (Fig. 1). Poly(L-lactide-co-DL-lactide) (ratio of LLA/DLLA 90/10, Mw 868 270 g/mol, PDI 2.3) was dissolved in dry pyridine at a concentration of 11 wt%. The solution was electrospun at 7 kV of applied voltage, 250  $\mu\text{l/h}$  of feeding rate and 10 cm gap. The sheets of the membrane were fixed to commercial cell culture insert Falcon (Corning Inc., Kennebunk, ME, USA) devoid of the original membrane. ARPE-19 cells were seeded for 24 hours on NMs with/without laminin coating, and on PET and PI membranes. Viability of ARPE-19 cells was monitored in different stages of sample preparation with Alamar blue assay for ARPE viability and with a confocal microscopy for evaluation of live/dead cells. Viability of ARPE-19 cells in NMs was tested also after loading to the surgical injector with a flat loading tube. For cutting of nanofibrous samples from a cell

cultivation insert we applied a) Punch (4 mm in diameter, modified to oval shape, sterilized with ethanol and b) Femtosecond laser ablation. Cell cultivation insert with ARPE seeded NM was placed onto a sterile glass-bottom dish. The samples were cut by laser ablation with in-house developed laser microfabrication station using ultrashort laser pulses of 800 nm central wavelength (25 fs FWHM duration, 1  $\mu$ J/pulse) generated in LEGEND-USP laser amplifier (Coherent, Inc.) at a repetition rate of 1 kHz and focused with off-axis parabolic mirror (numerical aperture 0.26) on the cell seeded membrane in nutrient liquid.

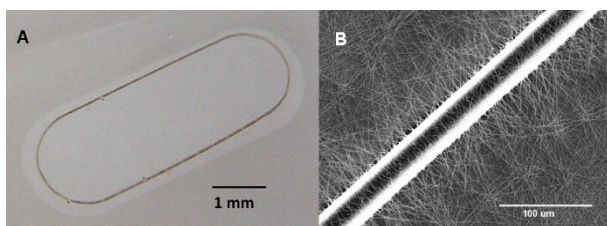


Fig. 1. Nanofibrous carrier with embedded supporting PET frame. The carrier was cut from a cell culture insert with a modified punch. Three visible marks on the frame allow to control a side orientation of the carrier (a), Detail of the PET frame embedded in the nanofibrous membrane of the carrier (b).

### Results and discussions

Flat surface of commercial PET and PI membranes with track-etched porosity enable formation of RPE monolayer. However, lower number of pores with a manufacturer-specified pore size is not sufficient to mimic real Bruch's membrane properties. In contrast to commercial membranes, electrospun membrane offers a three dimensional surrounding with large pore size which supports continuous flow of nutrients for seeded cells. PET and PI membranes could not be cut with our laser manufacturing setup because high thickness of the membranes. Cutting of NMs with a femtosecond laser is feasible. During laser ablation radicals and ions are generated in culturing medium. Seeded cells are sensitive to such a stress and are easily removed from the NMs, especially in case of laminin uncoated NMs. There is no significant difference between cutting with punch and with laser in laminin coated NMs. These membranes showed better contact of ARPE cells with nanofibrous surface, which reflects in mechanically more stable adhesion of cells on the NMs during laser ablation and injector loading/unloading cycle.

### Conclusions

The presented ultrathin and highly porous nanofibrous membranes have key characteristics in order to improve the integration and the functionality of transplanted RPE cells in comparison with commercial membranes. Moreover, a femtosecond laser proved as a powerful tool in preparation of nanofibrous samples for retinal tissue engineering in sterile conditions.

The authors would like to thank the Czech Science Foundation (Grant no: 18-04393S) for providing financial support.

### REFERENCES

1. Popelka Š., Studenovská H., Abelová L., et al.: Biomed. Mat. 10, 045022 (2015).

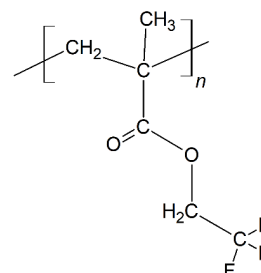
### 9P-13

#### NANOKOMPOZITY NA BÁZI FUNKCIONALIZOVANÉHO OXIDU ŽELEZITÉHO A POLY(2,2,2-TRIFLUORETHYL METHAKRYLÁTU)

JONÁŠ UŘIČÁŘ<sup>a</sup>, JAROSLAV MINÁŘ<sup>a</sup>, MUSTAPHA RAIHANE<sup>b</sup>, JIŘÍ BROŽEK<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, <sup>b</sup> Av Abdelkrim Khattabi, B.P. 511 – 40000 Marrakech  
uricarj@vscht.cz

Tato práce je zaměřena na přípravu nanokompozitů na bázi poly(2,2,2-trifluorethyl methakrylátu)<sup>1</sup> s nanočásticemi  $\gamma$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Problém nedostatečné kompatibility anorganických nanočástic s polymerní maticí byl vyřešen funkcionalizací povrchu nanočástic organovazným křemičitým činidlem 3-(trimethoxysilyl)propyl methakrylátem<sup>2</sup>. Polymerizovatelnou dvojnou vazbou organovazného křemičitého činidla byly nanočástice kovalentně navázány do vznikajících řetězců při následné polymerizaci 2,2,2-trifluorethyl methakrylátu metodou *grafting to in situ*<sup>3</sup>.



Obr. 1. Struktura poly(2,2,2-trifluorethyl methakrylát)

Z připravených vzorků byly separovány řetězce s kovalentně navázaným nanoplňivem od řetězců volných. U materiálů byly sledovány výsledné termické vlastnosti, smáčivost povrchu, stupeň dispergace plniva a tokové chování.

Tato práce vznikla za podpory VŠCHT Praha a UCA Marrakech.

### LITERATURA

1. Karamane M., Raihane M., Tasdelen M. A., Uyar T., Lahcini M., Ilsouk M. a kol.: J. Polym. Sci. A Polym. Chem. 55, 411 (2017).
2. Guo Z., Lei K., Li Y., Ng H. W., Prikhodko S., Hahn H. T.: Compos. Sci. Technol. 68, 1513 (2008).
3. Kickelbick G.: Prog. Polym. Sci. 28, 83 (2003).

## 9P-14

## MODIFIKACE POLYMERŮ UV ZÁŘENÍM A NÁSLEDNÝM CHEMICKÝM ROUBOVÁNÍM

VIKTORIE NEUBERTOVÁ<sup>a</sup>, VÁCLAV ŠVORČÍK<sup>b</sup>, ZDEŇKA KOLSKÁ<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Ústecké materiálové centrum, Přírodovědecká fakulta, Univerzita J. E. Purkyně, Pasteurova 3632/15, 400 96 Ústí nad Labem, <sup>b</sup> Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická, 166 28 Praha viki.kivi21@gmail.com

Práce se věnuje studiu povrchových vlastností polymerních materiálů před a po povrchové modifikaci. Vzhledem k nízké smáčivosti povrchu polymerů je jejich konečná úprava důležitá k získání potřebných vlastností pro specifické aplikace, např. povlaky, adheze, separační membrány, elektrická zařízení, biomedicínské materiály<sup>1–4</sup>. Modifikace povrchů polymerních materiálů proběhly ve dvou krocích: (i) působením UV záření o vlnových délkách 254 nebo 365 nm a následně (ii) chemickým roubováním *I.* alaninu, *II.* leucinu a *III.* kurkuminu. Testovanými polymerními materiály byly polyethylentereftalát, polyetheretherketon, polyvinylchlorid, polyvinylidenchlorid a dva typy celulosy. K charakterizaci povrchů testovaných polymerních materiálů před a po jednotlivých krocích modifikace byly použity metody: (i) goniometrie pro stanovení smáčivosti povrchů, (ii) elektrokinetická analýza pro studium povrchové chemie, náboje a polaritu, (iii) skenovací elektronová mikroskopie (SEM) pro získání informací o topografii povrchů, (iv) Brunauerova Emmettova Tellerova metoda pro stanovení velikosti povrchu a Barrettův Joinerův Halendův model pro stanovení porozity materiálů a (v) rentgenová fotoelektronová spektroskopie pro stanovení prvkového složení povrchů. Na vybraných substrátech byly provedeny antibakteriální testy.

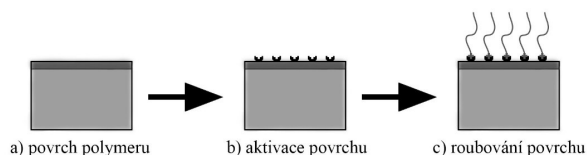


Schéma 1. Princip funkcionalizace povrchu polymeru a) povrch polymeru b) aktivace povrchu c) roubování povrchu. Obrázek vytvořen autorkou.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 20-01639S a grantu Ministerstva zdravotnictví ČR NV19-08-00051.

## LITERATURA

- Goddard J. M., Hotchkiss J. H.: Prog. Polym. Sci. 32, 698 (2007).
- Keating IV J. J., Imbrogno J., Belfort G.: ACS Appl. Mater. Interfaces 8, 28383 (2016).
- Di C. A., Liu Y. Q., Yu G., Zhu D. B.: Acc. Chem. Res. 42, 1573 (2009).

## 9P-15

## ANTIMICROBIAL COTTON FABRIC VIA SURFACE-INITIATED PHOTOATRP OF (2-DIMETHYLAMINO) ETHYL METHACRYLATE

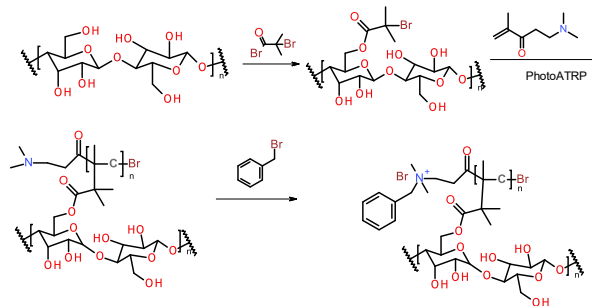
GAMAL ZAIN, JAROSLAV MOSNÁČEK

Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava 45, Slovakia upolgaza@savba.sk

Graft polymerization of cellulosic fabrics has several potential applications in textile industry such as reduction of hydrophilicity, flame retardancy<sup>1</sup>, antibacterial activity. Cellulose modification was mainly carried out using conventional free radical polymerizations which are accompanied with low control over molecular weight and polydispersity of the grafted chains.

Recently surface-initiated reversible deactivation radical polymerizations such SI-ATRP have been successfully employed for cellulose modifications<sup>2–4</sup>. Focusing on PhotoATRP, a polymerization technique which presents several advantages with respect to other ATRP processes. These include the possibility of excellent control over polymer chain growth, enhanced tolerance toward oxygen, and the reduction in the amount of catalyst necessary to attain a controlled polymerization<sup>5–7</sup>.

There are only few reports on the grafting onto cellulose utilizing SI-PhotoATRP<sup>8</sup> but, no reports on modification of cellulose fabrics using SI-PhotoATRP so far. This work is focusing on using SI-PhotoATRP for modification of cellulosic fabric. The study included grafting of (2-dimethylamino) ethyl methacrylate (DMAEMA) onto the surface of the fabric to impart antimicrobial properties. Firstly, PhotoATRP of DMAEMA was optimized by studying the effect of solvent, effect of ligand and its concentration, effect of light intensity, effect of catalyst type and its concentration and effect of initiator efficiency. Then, the fabric was esterified with  $\alpha$ -bromoisobutyryl bromide to prepare a macroinitiator (fabric-Br). SI-PhotoATRP of DMAEMA onto fabric-Br was then investigated at different monomer concentrations, liquor ratios and time. Finally, the grafted fabric was quaternized using benzylbromide (Scheme 1) for preparation of antimicrobial surfaces. The fabric was characterized by FTIR, TGA, XPS and SEM. The antimicrobial property also will be tested.



Scheme 1. SI-PhotoATRP chemical processes for cotton fabric surface modification with quaternized P(DMAEMA).

*This work was supported by projects APP0073, APVV-15-0545 and VEGA 2/0158/17.*

## REFERENCES

1. Yang Z., Peng H., Wang W., Liu T.: *J. Appl. Polym. Sci.* **116**, 2658 (2010).
2. Roy D., Semsarilar M., Guthrie J. T., Perrier S.: *Chem. Soc. Rev.* **38**, 2046 (2009).
3. Princi E., Vicini S., Proietti N., Capitani D.: *Eur. Polym. J.* **41**, 1196 (2005).
4. Roy D., Knapp J. S., Guthrie J. T., Perrier S.: *Biomacromolecules* **9**, 91 (2008).
5. Zain G., Bondarev D., Doháňošová J., Mosnáček J.: *ChemPhotoChem.* **3**, 1138 (2019).
6. Mosnáček J., Ilčíková M.: *Macromolecules* **45**, 5859 (2012).
7. Borská K., Moravčíková D., Mosnáček J.: *Macromol. Rapid Commun.* **38**, (2017).
8. Hatton F. L., Kedzior S. A., Cranston E. D., Carlmark A.: *Carbohydr. Polym.* **157**, 1033 (2017).

## 9P-16

### VYUŽITÍ BIODEGRADABILNÍHO KOPOLYMERU JAKO POJIVA PRO 3D TISK KOMPOZITNÍCH KOSTNÍCH NÁHRAD

**KRISTÝNA VALOVÁ<sup>\*,a</sup>, EGDAR B. MONTUFAR<sup>a</sup>, KLÁRA LYSÁKOVÁ<sup>a</sup>, PETR POLÁČEK<sup>a</sup>, JOSEF PETRÚŠ<sup>a</sup> MARIA PAU GINEBRA<sup>b</sup>, LADISLAV ČELKO<sup>a</sup>, JOSEF KAISER<sup>a</sup>, LUCY VOJTOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>CEITEC, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 656/123, Brno, CZ, <sup>b</sup>Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, ES  
Kristyna.Valova@ceitec.vutbr.cz

Technologie 3D tisku se stává čím dál častějším způsobem přípravy umělých kostních náhrad, které mají velký potenciál zejména v rekonstrukční medicíně při léčbě komplikovaných a rozsáhlých kostních defektů. V dnešní době jsou pro tuto aplikaci nejpobulárnější biomateriály na bázi fosforečnanu vápenatého v kombinaci s polymerním pojivem zajišťujícím dobrou zpracovatelnost při tisku<sup>1</sup>. Běžně se takto připravené náhrady podrobují slinování. Nedávné studie však prokázaly, že finální produkt, kterým je kalcium deficitní hydroxyapatit (CDHA), lze získat při fyziologické teplotě pomocí hydrolytické reakce fosforečnanu vápenatého ( $\alpha$ -TCP)<sup>2</sup>. Tato nová biomimetická cesta vyžaduje, aby použité polymerní pojivo bylo biokompatibilní a biodegradabilní, protože s absencí slinovacího kroku nedojde k jeho spálení a zůstane stále zabudované ve struktuře náhrady. Toto omezení limituje množství pojiv, která mohou být za tímto účelem použita. Dalším limitem kostních náhrad na bázi fosforečnanu vápenatého jsou jejich mechanické vlastnosti, které výrazně omezují jejich aplikaci v případě kostí nesoucích větší zátěž<sup>1</sup>. Cílem této práce je použití biodegradabilního a biokompatibilního PLGA/PEG/PLGA kopolymeru<sup>2</sup> jako polymerního pojiva pro přípravu CDHA kostních náhrad pomocí technologie 3D tisku. Hlavní důraz byl kladen zejména na studium mechanických vlastností a chemicko-fyzikální charakterizaci a následné

porovnání s již dříve studovaným polymerním pojivem na bázi Pluronicu<sup>1</sup>. Překvapivým zjištěním bylo, že vzorky obsahující PLGA/PEG/PLGA kopolymer vykazovaly téměř dvojnásobnou pevnost v tlaku v porovnání se vzorky obsahující jako pojivo Pluronic. Na základě dosažených výsledků se PLGA/PEG/PLGA jeví jako velice slibné pojivo pro 3D tisk kostních náhrad.

*Tato práce byla uskutečněna díky projektu CEITEC 2020 (LQ1601) s finanční podporou MŠMT ČR v rámci Národního projektu udržitelnosti II a díky projektu NV18-05-0037 zaštitěným Ministerstvem Zdravotnictví ČR.*

## LITERATURA

1. S. Raymond et al. *Acta. Biomater.*, **75**, 451 (2018).
2. Vojtová L., Michlovská L., Valová K. et al.: *Int. J. Mol.* **20**(2), 391 (2019).

## 9P-17

### ŘÍZENÉ UVOLŇOVÁNÍ LÉČBU PODPORUJÍCÍHO PROTEINU Z TERMOCITLIVÉHO HYDROGELOVÉHO NOSIČE

**KLÁRA LYSÁKOVÁ<sup>a</sup>, NIKOLA PTÁČKOVÁ<sup>b</sup>, MARKÉTA ZÁMEČNÍKOVÁ<sup>b</sup>, LUCY VOJTOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>CEITEC, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 656/123, Brno, CZ, <sup>b</sup>Enantis s.r.o., Kamenice 771/34, Brno  
Klara.Lysakova@ceitec.vutbr.cz

Řízené systémy pro dodávání léčiv mají mnoho výhod oproti tradičním lékovým formám. Jedná se hlavně o snížení frekvence a množství podávaného léčiva. V této práci byl jako nosič použit biodegradabilní amfifilní termocitlivý polymer rozpustný ve vodě, který geluje při fyziologické teplotě. Hydrogel ve vodném prostředí a fyziologických podmínkách vykazuje micelární strukturu díky hydrofobnímu jádru a hydrofilnímu obalu.

Hlavním cílem práce byla syntéza hydrogelu a nastavení poměru hydrofilní a hydrofobní složky tak, aby bylo zajištěno kontrolovatelné uvolňování imobilizovaného stabilizovaného proteinu a následně i reprodukovatelné měření uvolněného množství stabilního proteinu při 37 °C. Rovněž byly studovány interakce protein-hydrogel za účelem vyladění proteinu kontrolovaným způsobem pro medicínské aplikace. Uvolněné množství proteinu z hydrogelového nosiče bylo měřeno pomocí UV-Vis spektrofotometrie za pomoci Bradfordova činidla a dále SDS-page elektroforézou. Řízené uvolňování vykazuje kinetiku prvního řádu a závisí pouze na difúzi a koncentraci proteinu.

*Tato práce byla podporována projektem CEITEC 2020 (LQ1601) s finanční podporou MŠMT a Ministerstvem zdravotnictví pod projektem č. NV19-05-00214.*



### 10L-01 CHARAKTERIZACE PORÉZNÍCH MATERIÁLŮ ADSORPCÍ PLYNŮ A AKTUÁLNÍ DOPORUČENÉ POSTUPY

**MICHAL DUDÁK**

*ANAMET s.r.o., Kováků 3210/6, 150 00 Praha 5  
dudak@anamet.cz*

Při adsorpčních měřeních pro charakterizaci velikosti pórů se historicky využívalo dusíku pro jeho dobrou dostupnost. Množství publikovaných dat a pravděpodobně nedostatečná osvěta spolu s možnými technickými omezeními vedou k setrvačnosti používání dusíku i přes jeho nevhodné vlastnosti jak pro měření mikroporézní distribuce velikosti pórů, tak i pro vyhodnocení měrného povrchu metodou BET.

Aktuální technický report IUPAC (2015)<sup>1</sup> doporučuje pro měření distribuce velikosti mikropórů použít argon při teplotě varu argonu (87 K) a nahradit měření dusíkem (77 K). Důvodem je vyhnout se specifické interakci dusíku s různými funkčními skupinami na povrchu adsorbentu plynoucí z kvadrupólového momentu dusíku. Tato interakce vede ke špatně interpretovatelným datům pro póry menší než 0,7 nm a neúměrně dlouhému procesu dosažení rovnováhy.

Při stanovení měrného povrchu metodou BET dochází k podobně nejisté interpretaci dat v důsledku již zmiňované interakce. Mezinárodní norma ISO 9277:2010 o stanovení měrné plochy povrchu pevných látek pomocí adsorpce plynů a metody BET uvádí, že problematické pro dusík jsou zejména polární (oxidické) povrchy a grafitizovaný uhlík; pro vyhodnocení měrného povrchu BET doporučuje Ar při 87 K.

Systematická studie vlivu adsorbujícího se plynu a teploty adsorpce ukazuje až o třetinu zvýšený měrný povrch při měření dusíkem (tab. I) oproti reálné hodnotě naměřené pomocí argonu i dalších symetrických adsorptiv jako jsou krypton, xenon a methan. Některé plyny oproti argonu ukazují plochy menší, což je způsobeno velikostí adsorptivu a tím zmenšenou dostupností nejmenších pórů a povrchových nerovností pro tento plyn. Zároveň je vidět, že objem pórů je téměř identický pro všechny plyny. Využitím Gurvichova pravidla  $D_p = 4V_p/A_p$  u mezoporézního vzorku bychom dospěli k významně menší střední velikosti póru použitím dusíku oproti skutečnosti.

Tabulka I

Měrný povrch  $A_{BET}$  a objem pórů  $V_p$  stejného adsorbentu v závislosti na plynu a teplotě adsorpce

Adsorptiv	$A_{BET} [m^2 g^{-1}]$	$V_p [cm^3 g^{-1}]$
Dusík 77 K	200	0,23
Argon 87 K	150	0,22
Krypton 120 K	140	0,22
Xenon 165 K	120	0,21
Methan 112 K	150	0,22

#### LITERATURA

1. Thommes M., Kaneko K., Neimark A. V., Olivier J. P., Rodriguez-Reinoso F., Rouquerol J., Sing K. W.: *Pure Appl. Chem.* 87, 1051 (2015).

### 10L-02 CHARAKTERIZACE PORÉZNÍCH MATERIÁLŮ FYZISORPCÍ PLYNŮ – PŘÍKLADY CHYBNÉ INTERPRETACE VÝSLEDKŮ

**TOMÁŠ ZELENKA**

*Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská  
univerzita, 30. dubna 22, 702 00 Ostrava  
tomas.zelenka@osu.cz*

Fyzisorpce plynů (např.  $N_2/77$  K,  $Ar/87$  K) je jednou z nejpoužívanějších technik pro texturní charakterizaci zejména mikro- a mezo-porézních materiálů. Navzdory dobré dostupnosti komerčních fyzisorpčních analyzátorů i softwaru pro vyhodnocení fyzisorpčních izoterm, může být interpretace výsledků problematická.

Příspěvek je zaměřen na přehled vybraných příkladů chybných interpretací získaných izotermem a z nich plynoucích výsledků. Např. distribuce velikostí pórů se mohou výrazně lišit v závislosti na tom, zda jsou odvozeny z adsorpční nebo desorpční větve izotermu. Typickým příkladem je hystereze typu H2(a)<sup>1</sup>, která je charakteristickým důsledkem komplexní sítě propojených lahvičkovitých pórů přítomných v testovaném vzorku. Za určitých podmínek může docházet k tzv. kavitaci adsorbátu v porézním systému. Pokud je pro výpočet distribuce vybrána desorpční izoterma, je zde značné riziko její nevhodné interpretace v důsledku přítomnosti artefaktu přibližně při 4 nm (průměr póru). Dalším příkladem, který může vést k nesprávné interpretaci dat je tzv. nízkotlaká hystereze, která se objevuje u zeolitů, např. ZSM-5.

Komerčně dostupné softwary pro výpočet texturních údajů obvykle zahrnují možnost získat z experimentální izotermu distribuci velikostí pórů pomocí metod DFT (cit.<sup>2</sup>). Přestože se jedná o pokročilé přístupy, které (zjednodušeně uvedeno) berou v úvahu vlastnosti adsorbované fáze na molekulární úrovni, je stále potřeba výsledné distribuční křivky posuzovat kriticky. V příspěvku budou prezentovány další artefakty, se kterými se lze běžně setkat, nejenom v souvislosti s DFT.

*Tato práce vznikla za podpory SGS08/PřF/2020.*

#### LITERATURA

1. Thommes M., Kaneko K., Neimark A. V., Olivier J. P., Rodriguez-Reinoso F., Rouquerol J., Sing K. S. W.: *Pure Appl. Chem.* 87, 1051 (2015).
2. Landers J., Gor G. Y., Neimark A. V.: *Colloids Surf., A* 437, 3 (2013).

**10L-03****A FAMILY OF POROUS MOF-76 MATERIALS AND THEIR APPLICATIONS**

**MIROSLAV ALMÁŠI<sup>a</sup>, VLADIMÍR ZELENÁK<sup>a</sup>, NIKOLAS KIRÁLY<sup>a</sup>, DOMINIKA CAPKOVÁ<sup>a</sup>, SANDRINNE BOURRELLY<sup>b</sup>, ANSHU SHARMA<sup>c</sup>, MAKSÝM OPANASENKO<sup>d</sup>, ANDRIANA ZELENÁKOVÁ<sup>a</sup>, ANDREA STRAKOVÁ FEDORKOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Faculty of Science, P.J. Safarik University, Moyzesova 11, 040 01 Kosice, Slovakia, <sup>b</sup> Laboratoire Madirel, Aix Marseille University, 133 97 Marseille, France, <sup>c</sup> Department of Physics, SoET, Central University of Haryana, Mahendergarh, Haryana, India, <sup>d</sup> Faculty of Science, Charles University, Hlavova 8, 128 00 Prague, Czech Republic  
miroslav.almasi@upjs.sk

Microporous isostructural lanthanide-based MOFs of composition  $[\text{Ln}(\text{BTC})(\text{H}_2\text{O})\cdot\text{G}]$  or MOF-76(Ln) (Ln = lanthanide, BTC = benzene-1,3,5-tricarboxylate, G = guest molecules) represents a class of 3D transformable frameworks, which exhibit permanent porosity and high thermal stability. In our study, we have prepared different types of known and novel MOF-76(Ln) compounds and tested them in a variety of applications.

We explored a large and tunable magnetocaloric effect in gadolinium form MOF-76(Gd), where the tuning process was driven by solvent exchange process<sup>1</sup>. This compound has also been used as an additive in Li-S batteries, where it can effectively store sulfur and thus achieve high charge/discharge cycle performances and high efficiency. Lutetium form was tested as a heterogeneous catalyst in Knoevenagel condensation of different bulky aldehydes and active methylene compounds<sup>2</sup>. Novel members of the MOF-76 family, MOF-76(Ho) and MOF-76(Tm) were tested as adsorbents for nitrogen, carbon dioxide, hydrogen and methane at low and high pressures and was shown, that compounds exhibited high affinity to CO<sub>2</sub> (ref.<sup>3</sup>). The humidity sensing was performed using MOF-76(Nd) and the results illustrate that material is suitable for sensing applications. Moreover, MOF-76(Tb) was tested as support for cytostatic agent based on silver complex and used as drug delivery system. The obtained results will be presented more in detail at the conference.

*This work was supported by the UPJS project No. VVGS-2020-1408, VVGS-2019-1033 and VEGA project No. 1/0745/17.*

## REFERENCES

- Zelenák V., Almási M., Zelenáková A., Hrubovčák P., Tarasenko R., Bourrelly S., Llewellyn P.: *Sci. Rep.* 9, 15572 (2019).
- Almási M., Zelenák V., Opanasenko M., Císařová I.: *Cat. Today* 243, 184 (2015).
- Almási M., Zelenák V., Kuchár J., Bourrelly S., Llewellyn P.: *Colloids Surf., A* 496, 114 (2016).

**10L-04****ŠTÚDIUM LÍTIOVO-IÓNOVEJ VÝMENY V MOF PRE ZVÝŠENIE ADSORPČNEJ KAPACITY DIVODÍKA**

**DÁVID PRINCÍK, MIROSLAV ALMÁŠI, VLADIMÍR ZELENÁK**

*Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesová 11, 041 54 Košice  
david.princik@student.upjs.sk*

V posledných desaťročiach nastáva obrovský prielom v návrhoch a prípravách pórovitých kryštalických materiálov typu MOF, ktoré predstavujú obrovskú skupinu tuhých látok s pravidelným usporiadaním. Štruktúra MOF pozostáva z uzlov reprezentovaných kationóm, atómom alebo klastrom kovu, ktoré sú poprepávané viacdonorovými organickými ligandmi do nekonečnej polymérnej mriežky<sup>1</sup>. V dôsledku veľkého vnútorného objemu a veľkosti povrchu nachádzajú uplatnenie ako katalyzátory<sup>2</sup>, iónomeniče<sup>3</sup>, sorpčné materiály<sup>4</sup> a iné.

Prezentovaná práca sa venuje syntéze aniónových skeletov zlúčenín typu MOF, ktorých záporný náboj kompenzujú kationové zvyšky rozpúšťadiel nachádzajúcich sa v dutinách koordinačného polyméru. Tie pre svoju objemnosť znemožňujú následnú sorpčnú aplikáciu, ale dajú sa vymeniť za omnoho menší lítiový kation pomocou roztoku LiNO<sub>3</sub> (Schéma 1.). Na prípravu MOF boli použité ligandy s narastajúcou rozmernosťou a počtom karboxylových skupín, a to kyselina mravčia, kyselina 1,2,3-triazol-4,5-dikarboxylová (H<sub>3</sub>TDA) a kyselina benzén-1,3,5-trikarboxylová (H<sub>3</sub>BTC). Pripravené koordinačné polyméry so vzorcami  $\{(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2[\text{Mg}(\text{HCOO})_3]\cdot 0,5\text{H}_2\text{O}\}_n$  (**I**),  $\{(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2[\text{Zn}(\text{HCOO})_3]\}_n$  (**II**),  $\{(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2[\text{CoTDA}]\cdot 0,5\text{H}_2\text{O}\}_n$  (**III**),  $\{(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2[\text{ZnBTC}]\cdot 2\text{H}_2\text{O}\cdot \text{DMF}\}_n$  (**IV**) boli podrobené IR, TG a SXRD meraniam potvrdzujúcim zloženie. Lítiovo výmenno-dopovacie modifikácie boli uskutočnené sériou 1/2; 1 a 2 molárnymi roztokmi LiNO<sub>3</sub>. Množstvo zachyteného Li<sup>+</sup> kationu v dutinách koordinačnej pórovitej siete bolo určené kalibračnou krivkou pomocou FAAS. Spomedzi série komplexov, komplex **IV** vykazoval najvyššiu stabilitu voči hydrolyze, a boli s ním pripravené dva produkty s rozdielnym množstvom lítia v dutinách. Najvyššie hodnoty adsorpcii plynu H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> a CO<sub>2</sub> boli pozorované pri produkte s vyšším obsahom lítiových kationov. Detailné informácie budú prezentované na konferencii.

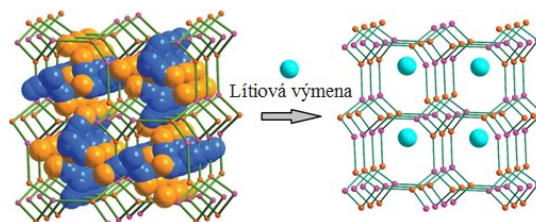


Schéma 1. Lítiova výmena s reálnou veľkosťou atómov v dutinách

## LITERATÚRA

- Li H, Eddaoudi M., O'Keeffe M., Yaghi O. M.: *Nat.* 402, 276 (1999).
- Shen CH., Mao Z., Xu H.: *Carb. Polym.* 213, 184 (2019).



- Qui H., Yang L., Liu F., Zhao Y., Liu L., Zhu J., Song M.: *Environ. Sci. Pollut. Res.* 24, 23694 (2017).
- Molefe L. Y., Musyoka N. M., Ren J., Langmi H. W., Ndungu P. G.: *J. Mater. Sci.* 54, 7078 (2019).

**10L-05****SÉRIA 3-D PÓROVITÝCH ZLÚČENÍN MPF S OBSAHOV H<sub>2</sub>TPPS LIGANDU A IÓNOV LANTANOIDOV**

**NIKOLAS KIRÁLY<sup>a</sup>, NINA LENÁRTOVÁ<sup>a</sup>, VLADIMÍR ZELENÁK<sup>a</sup>, ANDREJ HOVAN<sup>b</sup>, MIROSLAV ALMÁŠI<sup>a</sup>, ROBERT GYEPES<sup>c</sup>**

<sup>a</sup> *Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesová 11, 041 54 Košice,*

<sup>b</sup> *Katedra biofyziky, Ústav fyzikálnych vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Jesenná 5, 041 54 Košice,* <sup>c</sup> *Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta Karlová Univerzita, Hlavova 2030, 128 43 Praha, Česká republika*  
 nikolas.kiraly@student.upjs.sk

MPF (Metal-porphyrin frameworks) je podskupina zlúčenín typu MOF (Metal-organic frameworks), v ktorej prítomné organické ligandy sú deriváty porfyrínov a anorganické časti sú tvorené iónmi kovov alebo klastami kovov<sup>1</sup>. Koordináciou vzniká zlúčenina s otvorenou pórovitou štruktúrou, vysokou termickou a chemickou stabilitou a robustným skeletom, s uplatnením v aplikáciách ako adsorpcia a separácia plynov<sup>2</sup>, heterogénna katalýza<sup>2</sup> a biomedicínske aplikácie<sup>3</sup>.

Prezentovaná práca je zameraná na syntézu troch nových pórovitých koordinačných polymérov s obsahom H<sub>2</sub>TPPS ligandu (H<sub>2</sub>TPPS = 4,4',4'',4'''-(porfyrín-5,10,15,20-tetrayl) tetrakisbenzénsulfónová kyselina). Hydrotermálnou syntézou boli pripravené zlúčeniny {[Pr<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>TPPS)<sub>3</sub>]·nH<sub>2</sub>O}<sub>n</sub> (**1**), {[Eu/Sm(H<sub>2</sub>TPPS)]·nH<sub>3</sub>O<sup>+</sup>}<sub>n</sub> (**2**), {[Ce(H<sub>2</sub>TPPS)]·nH<sub>2</sub>O}<sub>n</sub> (**3**), tieto zlúčeniny boli ďalej charakterizované fyzikálno-chemickými metódami. Monokryštalová štruktúrna analýza preukázala prítomnosť otvorenej pórovitej siete u všetkých troch koordinačných polymérov, na základe čoho boli študované adsorpčné vlastnosti N<sub>2</sub> a CO<sub>2</sub>. Termogravimetrické merania preukázali vysokú teplotnú stabilitu týchto komplexov. Navyše komplex **1** bol študovaný v biomedicínskych aplikáciách ako fotosenzibilizátor pri vývoji reaktívnej formy kyslíka (<sup>1</sup>O<sub>2</sub>). Detailné informácie o dosiahnutých výsledkoch budú prezentované, na konferencii.

*Práca bola finančne podporená grantovou agentúrou VEGA projektom pod číslom 1/0745/17 a agentúrou pre vedu a výskum pod kontraktami APVV-15-0520 a APVV-18-0197.*

**LITERATÚRA**

- Gao W. Y., Chrzanowski M., Ma S.: *Chem. Soc. Rev.* 43, 5841 (2014).
- Burnett B. J., Barron P. M., Choe W.: *Cryst. Eng. Comm.* 14 (2012).
- Zhu Y., Chen J., Kaskel S.: *Angew. Chem.* (2020).

**10L-06****PORÉZNÍ ORGANICKÉ POLYMERY TYPU HYPERSESIŤOVANÝCH POLYACETYLENŮ**

**JAN SEDLÁČEK, BOGDANA BASHTA, ALENA HAŠKOVÁ, LUCIE HAVELKOVÁ, DAVID ŠORM**

*Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8, 128 00 Praha 2*  
 jan.sedlacek@natur.cuni.cz

Vývoj porézních materiálů s mikroporézní a mikro/mesoporézní texturou patří k důležitým směrům současného materiálového výzkumu. Porézní organické polymery (POP) představují relativně nový typ takovýchto materiálů. POP jsou amorfní uhlovodíkové polymery často s heteroatomickými skupinami, u kterých je propojení atomů a skupin realizováno kovalentními vazbami. POP mají kovalentní strukturu polymerních sítí složených z rigidních segmentů (aromatické cykly, nenasyčené řetězce a spojky), které jsou v sítích velmi hustě propojeny. Tato struktura zabraňuje segmentům sítí zaujmout těsnější uspořádání, v důsledku čehož mezi segmenty vznikají permanentní mikropóry. Případná tvorba mesopórů v POP je důsledkem propojování drobných částí mikroporézního polymeru v průběhu přípravy. POP jsou připravovány postupy polymerní a organické syntézy, vyznačují se proto vysokou variabilitou chemického složení. Chemická variabilita spolu s vysokými hodnotami specifických povrchů (stovky až několik tisíc m<sup>2</sup>/g) činí z POP materiály s vysokým aplikačním potenciálem.

V rámci konferenčního příspěvku bude prezentována příprava, modifikace a funkční aplikace hypersesíťovaných substituovaných polyacetylenů, které představují nový typ POP vyvinutý na našem pracovišti. Příprava je založena na řetězové polymerizaci arylacetylenů (Schéma 1), která dovoluje reakčními podmínkami účinně ovlivňovat texturu vznikajících POP. Pro modifikaci chemického složení polyacetylenových POP bylo vyvinuto několik způsobů prepolymerizační a postpolymerizační funkcionálizace včetně metod založených na kovalentním templátování a metod vedoucích k organometalickým POP. Funkcionalizované polyacetylenové POP se ukázaly jako aktivní heterogenní katalyzátory (esterifikace, aldolizace a další) a jako účinné reversibilní fyzisorbenty (CO<sub>2</sub>) a chemisorbenty (aminy, hydraziny).

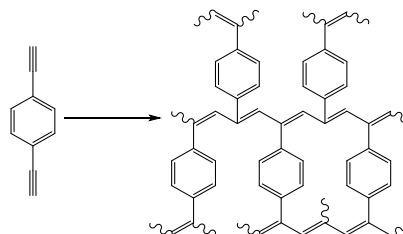


Schéma 1. Syntéza porézního hypersesíťovaného polyacetylenu polymerizací 1,4-diethynylbenzenu

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 20-01233S.*

### 10L-07 HYPERSESÍŤOVANÉ PORÉZNÍ POLYACETYLENY S KOORDINOVANÝMI IONTY $\text{Cu}^{2+}$

**DAVID ŠORM<sup>a</sup>, LUCIE HAVELKOVÁ<sup>a</sup>, BOGDANA  
BASHTA<sup>a</sup>, JAN SEDLÁČEK<sup>a</sup>, LADA SEKEROVÁ<sup>b</sup>,  
ELIŠKA VYSKOČILOVÁ<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Katedra fyzikální a makromolekulární chemie,  
Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8,  
128 00 Praha 2, <sup>b</sup> Ústav organické technologie, Vysoká škola  
chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6  
david.sorm@natru.cuni.cz

Byl připraven nový typ hypersesíťovaných porézních polyacetylenů ( $S_{\text{BET}}$  až 709  $\text{m}^2/\text{g}$ ) s vysokým obsahem koordinovaných iontů  $\text{Cu}^{2+}$  (až 12 hm.%). Příprava spočívala v kombinaci (i) řetězové koordinační polymerizace, při které byly ethynylové skupiny monomerů transformovány na vinylenové jednotky hlavních řetězců sítě a (ii) koordinace iontů  $\text{Cu}^{2+}$  dvěma deprotonovanými ligandy typu *N*-salicylidenanilinu, které tvořily součást dvou různých monomerních jednotek.

Byly použity dva syntetické postupy:

1. Syntéza ethynylovaných měďnatých komplexů a následná polymerizace ethynylových skupin komplexů.
2. Polymerizace ethynylových skupin *N*-salicylidenanilinových proliganů následovaná post-polymerizační metalací proliganů v postranních skupinách polymerů pomocí iontů  $\text{Cu}^{2+}$ .

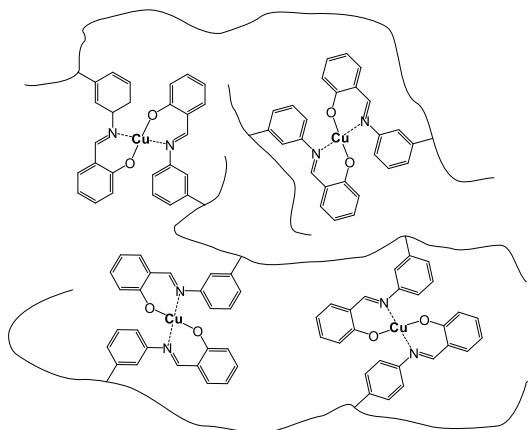


Schéma 1. Struktura hypersesíťovaných porézních polyacetylenů s koordinovanými ionty  $\text{Cu}^{2+}$

Polymerní síť obsahující koordinované ionty  $\text{Cu}^{2+}$  byly testovány jako heterogenní organometalické katalyzátory pro oxidační reakce.

Tato práce vznikla za podpory grantů GAČR 20-01233S a GAUK 210119.

### 10L-08 VLIV AKTIVÁTORU NA VÝVOJ POROZITY ALKALICKY AKTIVOVANÉ STRUSKY BĚHEM JEJÍ DEGRADACE

**JAN HAJZLER, VLASTIMIL BÍLEK, PETR HRUBÝ,  
LIBOR TOPOLÁŘ**

Fakulta chemická, VUT Brno  
xhajzlerj@fch.vut.cz

Alkalicky aktivované systémy patří do skupiny alternativních anorganických pojiv. Pojivovou složkou jsou aluminosilikáty v kombinaci s alkalickými aktivátory. Jednou z výhod těchto pojiv oproti klasickým cementovým pojivům je jejich odolnost vůči působení agresivních látek z vnějšího prostředí. Vedle složení hydratačních produktů k této odolnosti přispívá také nižší a jemnější porozita. Ta je, stejně jako řada dalších vlastností, výrazně ovlivněna typem použitého alkalického aktivátoru. V rámci této práce tedy byly pro aktivaci zvolného aluminosilikátu (vysokopecní granulované strusky) vybrány tři nejběžnější sodné aktivátory: vodní sklo, hydroxid sodný a uhličitán sodný. Jejich dávka odpovídala 6 %  $\text{Na}_2\text{O}$  na hmotnost strusky. Pro srovnání bylo připraveno také pojivo na bázi běžného cementu (CEM III). Připravené vzorky (trámečky o rozměrech 40 mm × 40 mm × 160 mm) byly ošetřovány do 28. dne stáří pod vodou a následně byly přemístěny do roztoků  $\text{CH}_3\text{COOH}$ ,  $\text{MgSO}_4$ ,  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{NaCl}$ ,  $\text{NH}_4\text{NO}_3$  a vody po dobu 84 dní. Jejich pórová struktura před i po vystavení degradačním roztokům byla sledována metodou rtuťové intruzní porozimetrie, a to jak z hlediska celkové porozity, tak i z hlediska distribuce velikosti pórů, resp. jejich ústí. Bylo zjištěno, že na degradaci mají největší vliv roztoky kyseliny octové a dusičnanu amonného, kdy docházelo k výraznému zvýšení průměru ústí pórů i celkové porozity. Vliv ostatních roztoků nebyl výrazný.

### 10L-09 PYROLYSIS OF DIFFERENT WASTE RAW MATERIALS IN THE MICROWAVE FIELD

**MICHAL VAŠTYL\*, ZUZANA JANKOVSKÁ, PAVEL  
LEŠTINSKÝ, LENKA MATĚJOVÁ**

Institute of Environmental Technology, VŠB – Technical  
University of Ostrava, 17. listopadu 15/2172, 708 00 Ostrava-  
Poruba, Czech Republic  
michal.vastyl@vsb.cz

Waste production is constantly growing year by year, both in terms of biowaste and oil waste. Nowadays, waste is mainly recycled, or landfilled or used for energy production. Thanks to pyrolysis, biowaste and plastics are an important source of secondary raw materials in the form of both gases (hydrogen, methane)<sup>1</sup>, liquids (limonen)<sup>2</sup> and carbonaceous materials (activated carbon/biochar)<sup>3</sup>. Pyrolysis of waste raw materials can be done in various ways, but in terms of time, energy and finances, pyrolysis in the microwave field is the most interesting and challenging.

Two types of waste materials have been selected for microwave pyrolysis, differing both in terms of origin and

composition. They are cocoa pod husk CPH (from Peru) and tyres (mixed sample from the Czech Republic). A lab-modified PANASONIC NN-SD271 microwave oven set to 440 W for 30 minutes with a glass reactor inside was used as the microwave source. The pyrolysis process always took place in an inert atmosphere and under the identical conditions.

The parameters investigated on the carbon residue after pyrolysis were surface area (by BET), chemical composition of the material (XRF) and proximate and ultimate analysis. The volume of pyrolysis gas was measured with a gas meter and subsequently analyzed by GC. Condensate was analyzed by GC-MS.

Activated carbon prepared by pyrolysis of cocoa pod husk has a surface area of 397 m<sup>2</sup>/g. This size indicates the great potential of CPH as a promising approach to produce a high grade adsorbent.

*This work was supported from ERDF "Institute of Environmental Technology – Excellent Research" (No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000853). Experimental results were accomplished using Large Research Infrastructure ENREGAT supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic under project No. LM2018098.*

#### REFERENCES

- Zhang Y., Williams P. T.: J. Anal. App. Pyr. 122, 490 (2016).
- Shi K., Yan J., Luo X., Lester E., Wu T.: Ener. Proc. 142, 1640 (2017).
- Yek P. N. Y., Liew R. K., Osman M. S., Lee C. L., Chuah J. H., Park Y.-K. et al.: J. Environ. Manage. 236, 245 (2019).

#### 10L-10

#### OPTIMALIZACE TRANSPORTNÍCH VLASTNOSTÍ PORÉZNÍ STRUKTURY KATALYTICKÉ VRSTVY POMOCÍ 3D POČÍTAČOVÉ REKONSTRUKCE

**MICHAL DUDÁK**

ANAMET s.r.o., Kováků 3210/6, 150 00 Praha 5  
dudak@anamet.cz

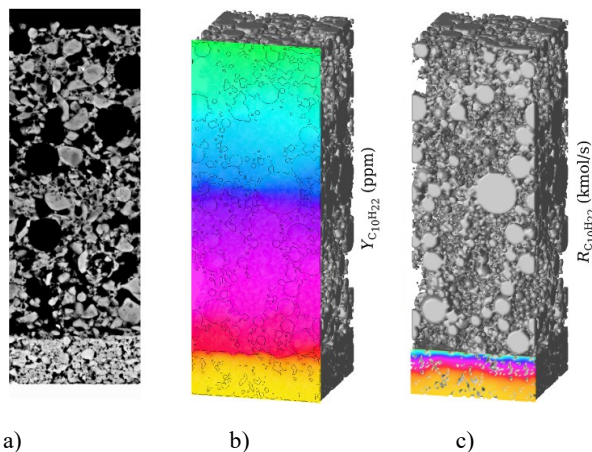
Tato práce se zabývá reakčně-transportními jevy v porézních katalytických vrstvách se zaměřením na vícevrstvé uspořádání. Zkoumá dvouvrstvé katalyzátory na bázi aluminu a zeolitů a jejich použití na příkladech zpracování výfukových plynů a přednostní oxidace CO v petrochemickém průmyslu. Prvním cílem je porozumět dopadu difuzního omezení vrchní vrstvy na účinnost spodní vrstvy a minimalizovat snížení konverze způsobené transportním omezením. Dalším cílem je navrhnout zeolitovou membránu se selektivním omezením transportu uhlovodíků, která by se dala použít na povrchu běžných oxidačních katalyzátorů pro přednostní oxidaci CO.

V práci je zkoumán vliv morfologie porézní vrstvy na účinnost katalytického reaktoru, a to jak experimentálně, tak matematickým modelováním s víceúrovňovým přístupem. Výsledky simulací poskytují zpětnou vazbu pro zlepšení

struktury katalyzátoru. V mikroměřítku je struktura katalytické vrstvy zrekonstruována ve 3D pomocí metody diskretních prvků a reakčně-transportní procesy jsou simulovány s využitím hmotnostních bilancí kontinua včetně difúze a katalytických reakcí. Prostorovým zprůměrováním těchto simulačních výsledků lze předpovědět efektivní difuzivitu či efektivní reakční rychlosti složek v porézní vrstvě a použít je jako vstupní parametry pro celkový model reaktoru. Daný makroskopický model předpokládá 1D pístový tok podél reaktoru a 1D difúzi uvnitř katalytické vrstvy, která je na této úrovni brána jako pseudohomogenní prostředí popsané efektivními transportními vlastnostmi.

Pro pozorování difuzního omezení byly na plechy nanášeny dvouvrstvé katalyzátory s přesně definovanou tloušťkou. Spodní oxidační vrstva sestávala z Pt/ $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nebo Pd/ $\gamma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Poté bylo připraveno a testováno několik vrchních inertních vrstev, které se lišily materiálem ( $\gamma$ -alumina, beta a 4A zeolity), tloušťkou (1–200  $\mu$ m) a makroporozitou (zeolitové membrány s téměř nulovou makroporozitou, standardní vrstvy, vrstvy s přidáním pórtvornými šablonami z polystyrenu či pekařských kvasinek). Techniky přípravy vrchní vrstvy zahrnovaly nanášení tyčemi s vinutým drátem, stlačování, použití šablon, sprejování a přímý růst zeolitu. Vlastnosti vzorků byly popsány elektronovou mikroskopií, XRD a rtuťovou porozimetrií a jejich chování při reakcích bylo testováno v laboratorním reaktoru. Průtok vstupního plynu byl nastaven tak, aby u jednovrstevných katalyzátorů nedocházelo k vnějšímu transportnímu omezení. Vzorky s přidáním inertní vrstvy pak vykazovaly určitý průnik nezeogovaných reaktantů, který poskytl kvantitativní informace o velikosti difuzního omezení a umožnil ověřit předpovědi modelu.

Teplotní závislost efektivní difuzivity CO a *n*-dekanu byla vypočtena pro vrstvy aluminu o makroporozitě 17–54 %. Vyvinutý model poskytl přesnější předpovědi než konvenční random-pore korelace. Hodnoty celkové efektivní difuzivity byly podobné v makroporézní beta zeolitové i aluminové vrstvě, bez ohledu na poměrně rozdílné velikosti jejich



Obr. 1. 3D rekonstrukce struktury katalyzátoru podle snímku ze SEMu (a), ustálený koncentrační (b) a reakční profil (c) *n*-dekanu ve dvouvrstvě katalyzátoru s vrchní inertní vrstvou a spodní oxidační vrstvou platiny na alumině

vnitřních pórů. Ani vyladěný postup přípravy neumožnil získat 4A zeolitové membrány bez trhlin kvůli nesouladu součinitelů tepelné roztažnosti. Ideální membrány bez trhlin pro přednostní oxidaci CO by musely být 2 nm tenké a daným postupem je nelze vyrobit.

Všechny vyvinuté metody a modely byly úspěšně ověřeny experimenty. Představují užitečný nástroj, který může pomoci navrhnout a optimalizovat strukturu nanášených vrstev s ohledem na využití drahých klíčových složek, jako jsou platinové kovy, a maximalizovat faktor účinnosti nebo selektivitu pro konkrétní průmyslové aplikace.

#### LITERATURA

1. Distaso M., Zubiri B. A., Mohtasebi A., Inayat A., Dudák M., Kočí P., Butz B., Taylor R. K., Schwieger W., Spiecker E., Peukert W.: *Microporous Mesoporous Mater.* 246, 207 (2017).
2. Dudák M., Novák V., Kočí P., Marek M., Blanco-García P., Thompsett D.: *Chem. Eng. J.* 301, 178 (2016).
3. Novák V., Dudák M., Kočí P., Marek M.: *Curr. Opin. Chem. Eng.* 9, 16 (2015).
4. Václavík M., Dudák M., Novák V., Medlín R., Štěpánek F., Marek M., Kočí P.: *Chem. Eng. Sci.* 116, 342 (2014).
5. Dudák M., Novák V., Kočí P., Marek M., Blanco-García P., Jones G.: *Appl. Catal., B* 150-151, 446 (2014).

**10P-01****ADSORPTION ON ZINC OXIDE IMPREGNATED BIOCHAR****GERARDO CRUZ, DEBAPRIA MONDAL, JOHN RIMAYCUNA, KAREL SOUKUP, MONIKA GOMEZ, JOSE SOLIS, JAROSLAV LANG**

*Institut environmentálních technologií, VŠB – Technická univerzita Ostrava, 17. listopadu 2172/15, 708 00 Ostrava-Poruba  
jaroslav.lang@vsb.cz*

The climate in South America is suitable for the year-round agricultural production. The great amount of agrowaste material that is a side product can be utilized in the production of materials with added value such as carbonaceous materials – activated carbon and biochar<sup>1</sup>. Although biochar is generally inferior to activated carbon in adsorption capacity it is easier to manufacture and more environmentally friendly<sup>2</sup>. The adsorption capacity of these materials can be further improved by impregnation with ZnO. Although the use of ZnO to improve activated carbon properties has been studied<sup>3</sup>, there is limited knowledge on impregnation of ZnO on biochars.

Biochars derived from corn cob and coffee husk were prepared by carbonization in mild conditions and impregnated with ZnO using precipitation method. Adsorption capacity of the produced materials was tested with As(V) and Pb(II) in kinetic and equilibrium experiments. The equilibrium adsorption uptake  $q_e$  and adsorption capacity  $q_t$  for ZnO impregnated biochars were several times higher than for bare biochars. Based on adsorption tests results it was clear that corncob biochar with ZnO impregnation outperformed the rest.

*The authors would like to thank Newton Paulet Found E009 - Contract 002-FONDECYT (CONCYTEC). The work was supported from ERDF "Institute of Environmental Technology – Excellent Research " (No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/ 0000853) and by the ESF in „Science without borders “project, reg. nr. CZ.02.2.69/0.0/0.0/16\_027/0008463 within the Operational Programme Research, Development and Education. Universidad Nacional de Tumbes supported also this research (CANON Project - Resolution 180-2016/UNT-R). The University of Salford is acknowledged for the ICP-OES analysis in this study.*

**REFERENCES**

1. Park M. H., Jeong S., Kim J. Y. J.: Environ. Chem. Eng. 7 (2019).
2. Zhou Z., Liu Y.-G., Liu S.-B., Liu H.-Y., Zeng G.-M., Tan X.-F., Yang C.-P., Ding Y., Yan Z.-L., Cai X.-X.: Chem. Eng. J. 314 (2017).
3. Kikuchi Y., Qian Q., Machida M., Tatsumoto H.: Carbon 44 (2006).

## 11L-01 CO DĚLAT S CO<sub>2</sub>

KAMIL WICHTERLE

*VŠB-TU Ostrava, Institut environmentálních technologií,  
17. listopadu 15, 708 33 Ostrava-Poruba,  
kamil.wichterle@vsb.cz*

V atmosféře za poslední desetiletí přibývá ročně 14·10<sup>9</sup> t CO<sub>2</sub>, což je nežádoucí. Spalováním fosilních paliv a rozkladem hornin se vytváří ročně 34·10<sup>9</sup> t CO<sub>2</sub> a další 2·10<sup>9</sup> t CO<sub>2</sub> uvolňuje vulkanická činnost; takže se kdesi sekvestruje 22·10<sup>9</sup> t CO<sub>2</sub>. Kde, to se dá obtížně bilancovat, protože se ročně fotosyntézou zachytí do pevninské a mořské biomasy asi 600·10<sup>9</sup> t CO<sub>2</sub>, z čehož se asi polovina rychle vydýchá, avšak druhá polovina se z biomasy v řádu roků uvolňuje zčásti spalováním, zčásti rozkladem, něco se také anaerobně přemění na CH<sub>4</sub>, a něco se uloží na delší dobu v půdě a v mořských sedimentech.

Všechny doložené zásoby fosilních paliv bychom uměli současným tempem spotřebovat za 270 let. Celá spotřeba fosilních paliv a produkce CO<sub>2</sub> razantně roste teprve od roku 1900, kdy začíná doba elektrifikace a automobilů; dnes také s počtem obyvatelstva ve světě. Bez ohledu na katastrofické vize klimatologů má smysl s tím něco dělat.

Lákavě vypadají technologie sekvestrace, u kterých je prvním problémem získání dostatečně koncentrovaného CO<sub>2</sub>. Technologie, kde to jde pohodlně, jsou menší; ze spalín to jde velmi drazě<sup>1</sup>. Pěstování energetické biomasy má své záporné stránky, mikrobiologická přeměna na organické látky s využitím slunce a vody nemá pro velkovýrobu nikde dostatečné prostory. Ukládání do vytěžených podzemních prostor má malou kapacitu a není zcela bezpečné, zachycení do alkalických hornin by potřebovalo drtit celá horstva. Nejlépe snad vychází utopení stlačeného CO<sub>2</sub> do hloubek oceánu přes 3 km. Vceku se zdá, že výzkum sekvestrace CO<sub>2</sub> je jen tunelem do grantových agentur

Inženýr si však musí klást konkrétnější úkol, jak obsah CO<sub>2</sub> v ovzduší omezovat nikoliv budováním chudoby, ale zaváděním lepších technologií.

Elektrárny dnes konzumují asi 55 % těžných paliv, doprava 25 %, průmysl 15 % a bydlení 5 %. Je tedy rozumné sledovat hlavní zdroje.

Standardní tepelná elektrárna využívá teplo jen asi z 35 %. Přípravou čistého plynného paliva je možno zvýšit účinnost v kogeneračním cyklu až na 60 %. I tak, jakýkoliv zdroj elektřiny z obnovitelných zdrojů nebo z jaderné energie je přináší omezení emisí CO<sub>2</sub>. Pokud se zdaří využívat jadernou fúzi, bude elektřiny nadbytek.

Doprava má účinnost využití ušlechtilého paliva pod 30 %. Je však otázkou, zda spolehnout na rozvoj elektromobility nebo měnit životní styl.

Možností úspor je i omezení spalování pro nízkoteplotní ohřev. Využít i v malém nejprve vyšší teploty k výrobě elektřiny a teprve následně ohřívat odpadním teplem.

## 11L-02 PERSPEKTIVY VÝROBY VODÍKU ELEKTROLÝZOU VODY

KAREL BOUZEK, MARTIN PAIDAR

*Ústav anorganické technologie, Vysoká škola  
chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28  
Praha 6  
bouzekk@vscht.cz*

Výroba vodíku elektrolytickým rozkladem vody představuje déle než století zavedený průmyslový proces. Již v roce 1902 bylo celosvětově instalováno více než 400 průmyslových elektrolyzérů pro výrobu vodíku<sup>1</sup>. Ale již v tomto období bylo větší rozšíření uvedené technologie podmíněno dostupností levné elektrické energie. Zejména z tohoto důvodu došlo ve dvacátých a třicátých letech 20. století k rychlému rozvoji elektrolyzy vody zejména v Norsku a Kanadě, kde byl dostupný nadbytek elektrické energie. Produkovaný vodík nalézal uplatnění zejména při syntéze amoniaku. V současnosti elektrolyticky vyrobený vodík představuje zanedbatelný zlomek jeho celosvětové průmyslové produkce dosahující 70 Mt čistého a 45 Mt ve směsích ročně<sup>2</sup>, neboť za obvyklých podmínek nemůže ekonomicky konkurovat technologiím založeným na fosilních palivech. Obvykle uváděný podíl elektrolytické produkce vodíku na jeho výrobě dosahuje 4 %. Toto množství však zahrnuje rovněž vodík vznikající jako vedlejší produkt při výrobě chlóru. Cílená elektrolytická výroba vodíku pak nepředstavuje více, než 1 % celosvětové produkce.

S rostoucí snahou o dekarbonizaci energetiky, a vlastně celé společnosti, dochází k zásadní změně pohledu na otázku průmyslové elektrolytické výroby vodíku. Ten se posouvá od ekonomicky výhodné suroviny k využití environmentálně neutrálních zdrojů energie a k nahrazení tradičních technologií založených na fosilních palivech právě těmito zdroji. Vodíkové procesy se tak staly součástí tzv. „Green Deal“ politiky Evropské komise. Výrazným akceleračním efektem pak zapůsobila koronavirová pandemie, která je v tomto kontextu vnímána jako příležitost pro výraznou restrukturalizaci průmyslu, včetně zavádění vodíkových technologií. Ty jsou založeny právě na elektrolytickém rozkladu vody jako technologii konverze elektrické energie na energii chemickou. Cílem tohoto příspěvku je poskytnout alespoň základní přehled o procesu elektrolyzy vody, jeho technologických variantách a aktuálním stavu jejich rozvoje, stejně tak jako o rámci aktivit plánovaných Evropskou komisí pro nejbližší roky.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 20-06422J.*

### LITERATURA

1. Kreuter W, Hofmann H.: Electrolysis: Int. J. Hydrogen Energy 23, 661 (1998).
2. International Energy Agency: The Future of Hydrogen, 2019, <https://www.iea.org/reports/the-future-of-hydrogen>.

**11L-03**  
**PERSPEKTIVY A SYNERGIE VÝROBY**  
**SYNTÉZNIHO PLYNU A FISCHER-TROPSCHOVY**  
**SYNTÉZY**

**JOSEF ŠIMEK**

*Unipetrol výzkumně vzdělávací centrum a.s., Revoluční  
 1521/84, 400 01 Ústí nad Labem  
 josef.simek@unicre.cz*

Syntézní plyn, směs vodíku a oxidu uhelnatého je vyráběn již po několik desetiletí. Za tuto dobu byla vyvinuta dlouhá řada technologií pro jeho výrobu. Tyto technologie jsou značně flexibilní a dokáží zpracovávat širokou paletu vstupních surovin. Mezi klasické suroviny patří uhlí, dřevní štěpka, ropné zbytky, rašelina a zemní plyn.

Syntézní plyn, který byl původně vyráběn pro potřeby svícení a vytápění, našel za posledních několik desítek let široké uplatnění. Nyní je drtivá většina vyráběného syntézního plynu využívána pro výrobu vodíku, kapalných paliv a petrochemikálií.

Výroba syntézního plynu je neustále předmětem výzkumu. Motivace dalšího rozvoje zplyňovacích technologií je možnost zpracovávat netradiční suroviny, jako jsou biomasa, odpadní plasty a pryže, komunální odpad ale i odpady z pyrolyzy biomasy a plastů. Mezi hlavní trendy ve vývoji těchto technologií jsou pak postupy snižující provozní náklady, jako je využití vzduchu místo čistého kyslíku, a vývoj zaměřený na další zvyšování efektivity procesu zapojením alternativních způsobů dodávky potřebného reakčního tepla.

Jednou z důležitých technologií pro využití syntézního plynu pro výrobu paliv a chemikálií je Fischer-Tropschova syntéza. Tato technologie vyvinutá v roce 1925 nyní zažívá nový rozkvět. Důvodem nastartování výzkumu a dalšího vývoje této technologie je možnost přeměny snadno získatelného syntézního plynu na žádané produkty. Současné výzkumné projekty se zabývají vývojem nových pokročilých katalyzátorů, úpravou procesu takovým způsobem, aby produkoval i jiné než lineární řetězce a zvyšováním selektivity procesu.

Synergie zplyňování a Fischer-Tropschovy syntézy má obrovský potenciál. Tyto dvě technologie je možné již nyní zcela integrovat do současných rafinérsko-petrochemických výrob. Kombinace těchto technologií poskytuje spolehlivou cestu, jak přeměňovat odpady a obnovitelné suroviny na biopaliva a zelené petrochemikálie. Díky nízké citlivosti zplyňování na použitou surovinu a vysoké flexibilitě Fischer-Tropschovy syntézy může tandem těchto technologií produkovat širokou škálu látek z mnoha různých surovin. Výzkum těchto technologií má vysoký potenciál a je vhodné v něm dále pokračovat.

**11L-04**  
**MOŽNOSTI VYUŽITÍ OBNOVITELNÝCH ZDROJŮ**  
**ENERGIE V DOPRAVĚ DO ROKU 2030 Z POHLEDU**  
**CHEMICKÉHO PRŮMYSLU**

**MILAN POSPÍŠIL<sup>a</sup>, IVAN SOUČEK<sup>b</sup>, VOJTĚCH**  
**MÁČA<sup>c</sup>, JAN MACEK<sup>d</sup>, JAN MIKULEC<sup>e</sup>, MARTIN**  
**KUBŮ<sup>f</sup>**

*<sup>a</sup> Ústav technologie ropy a petrochemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6,  
<sup>b</sup> Technopark Kralupy VŠCHT Praha, <sup>c</sup> Centrum pro otázky životního prostředí Univerzity Karlovy, <sup>d</sup> Fakulta strojní ČVUT, <sup>e</sup> Česká asociace petrolejářského průmyslu a obchodu,  
<sup>f</sup> Ethanol Energy, a.s.  
 pospisim@vscht.cz*

Česká republika se intenzivně připravuje na implementaci směrnice Evropského parlamentu a Rady (EU) 2018/2001 ze dne 11. prosince 2018 o podpoře využívání energie z obnovitelných zdrojů (RED II) v odvětvích energetiky a dopravy. Co se týká dopravy, směrnice RED II stanoví v každém členském státě v roce 2030 dosáhnout cílový podíl obnovitelné energie (OZE) na konečné spotřebě energie ve výši minimálně 14 %. Dalším podstatným faktorem je zajištění spotřeby tzv. pokročilých paliv na bázi odpadní biomasy a dalších zemědělských odpadů ve výši minimálně 3,5 %, dále pak omezení podílu biopaliv I. generace na celkové spotřebě energie na maximálně 7 % a konečně biopaliv na bázi vybraných odpadních olejnatých surovin na maximálně 3,4 %. Současně se do r. 2030 v ČR předpokládá významný nárůst elektromobility, vodíkového pohonu i využití plyných paliv v dopravě. To ovšem klade značné nároky na kapacitu a ekonomiku výroby pohonných hmot a energií na bázi OZE, nebo jejich dovozů a rovněž budování potřebné infrastruktury pro jejich skladování a distribuci ke konečným spotřebitelům. Za účelem zmapování spotřeby různých OZE i fosilních pohonných hmot v dopravě v závislosti na předpokládaném vývoji složení vozového parku do r. 2030 byl vytvořen lineární bilanční výpočetní model, který umožňuje rychlé orientační posouzení různých variant druhové skladby pohonných hmot, včetně zastoupení složek OZE různých generací a různé kvality. Diskutovat je potřeba zejména reálnost zajištění objemu dodávek pohonných hmot na bázi OZE, resp. nároků na množství surovin potřebných pro jejich výrobu v ČR (porovnání s možnostmi zemědělské produkce či skutečnou dostupností odpadů), existenci vhodných technologií, dostupnost výrobních kapacit nebo efektivitu dotační politiky spojené s výrobou, distribucí a spotřebou paliv na bázi OZE.

*Tato práce vznikla za podpory grantu TAČR BETA2 „Optimální využití obnovitelných zdrojů energie v dopravě“ (TITSMZP713).*



### 11L-05 LICENSOŘI A TECHNOLOGICKÉ LICENCE PRO ČISTOU MOBILITU A JEJICH MOŽNÉ UPLATNĚNÍ V ČESKÉ REPUBLICĚ

HUGO KITTEL

*VŠCHT, Technická 1905, 166 28 Praha 6  
Hugo.kittel@vscht.cz*

Příspěvek se zabývá přehledem licencí zaměřených na čistou mobilitu, které lze implementovat v rafineriích ropy.

U zpracování ropy a rafinérských technologií je patrná snaha všech renomovaných licensorů optimalizovat tyto technologie v souladu s principy čisté mobility, ale zatím nebylo dosaženo žádného zásadního technologického průlomu. Tudíž, tento vývoj lze označit jako nedostatečně ambiciózní s ohledem na výzvy, kterým zpracovatelé ropy čelí.

Perspektivní technologie a licence založené na zpracování oxidu uhličitého a využití zeleného vodíku v rafineriích jsou prozatím ve fázi pilotního testování.

Všichni renomovaní licensoři se soustředí na nabídku technologií zpracovávajících biosurovinu druhé a vyšších generací. Ty jsou většinou založené na osvědčených chemických postupech – hydrogenaci, hydrokrakování, hydrogenolyze, zplyňování a pyrolýze. Na rostoucí konkurenci elektromobility ropné rafinérie reagují investováním především do těchto technologií, např. v současnosti PKN Orlen do procesu Vegan (Axens). I když v tomto případě jsou licence dostupné, kritický je nedostatek biosurovin pro rafinérie.

O tom, že současné aktivity a nabídka licencí řešících čistou mobilitu jsou málo ambiciózní, svědčí skutečnost, že někteří dřívější kupci licencí nyní sami intenzivně zkoumají a vyvíjejí nové technologie, jako Neste Oy nebo OMV.

Vyvíjet a nabízet licence přispívající k čisté mobilitě není jednoduché. Z tohoto důvodu i významní licensoři velmi úzce spolupracují s univerzitami, výzkumnými organizacemi a s velkými rafinérskými a petrochemickými společnostmi. Konkurenti v minulosti, nyní vytvářejí aliance s cílem vyvíjet a nabízet nové technologie (UOP & ENI, proces Ecofining). Místo jednotlivých technologií nyní licensoři nabízejí technologické programy, např. Axens koncept „Acting Together“ nebo UOP „Refinery of the Future“.

V ČR hlavní problém nepředstavují dostupné licence, ale omezené investiční prostředky, nedostatek surovin, malé kapacity nových jednotek a zpoždění za vývojem v oblasti čisté mobility, protože určitá řešení již nemou být opakovaná.

#### LITERATURA

1. Maillot J.: *Axens Biobased Technologies on the Road for Biofuels and Biochemicals*. Proceedings of the 2nd EU-India conference on Advanced Biofuels, New Delhi, India 2019.
2. Nexant: Biorenewable Insights. <https://www.nexantsubscriptions.com/node/43504>.

### 11L-06 PARCIÁLNA HYDROGENÁCIA LANIČNÍKOVÉHO OLEJA NA KATALYZÁTOROCH NA BÁZE MEDI

**MARTINA SLEZÁČKOVÁ<sup>a</sup>, JOZEF MIKULEC<sup>a</sup>,  
ELENA HÁJEKOVÁ<sup>b</sup>, ANDRÁS PELLER<sup>b</sup>, JAROSLAV  
BLÁŠKO<sup>c</sup>**

*<sup>a</sup> VÚRUP, a.s., Vlčie Hrdlo, 820 03 Bratislava, <sup>b</sup> Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, <sup>c</sup> Prírodovedecká fakulta UK v Bratislave, Mlynská dolina, Il'kovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovensko  
martina.slezackova@vurup.sk*

Laničnickový olej (LO) patrí do skupiny rastlinných olejov, ktoré obsahujú vysoký podiel polynenasýtených mastných kyselín, a preto sú ich metylestery veľmi oxidačne nestabilné. Podiel oleja v semene laničníka siateho je v rozmedzí 35–42 % hm. Oproti oleju z repky olejnej obsahuje najvyšší podiel nenasýtenej kyseliny linolénovej, čo spôsobuje síce dobré nízkoteplotné vlastnosti, ale aj vysoké jódové číslo nad 150 mg I<sub>2</sub>/g. Jeho vlastnosti sa podobajú viac ľanovému oleju, avšak jeho tepelná stabilita je oveľa vyššia. Je potrebné technologicky znížiť jódové číslo pod normovanú hodnotu 120 mg I<sub>2</sub>/g, ale pritom v maximálnej miere zachovať ostatné priaznivé úžitkové vlastnosti.

Jedným z možných riešení je čiastočná hydrogenácia nenasýtených väzieb s minimálnou skeletálnou izomerizáciou cis-trans. Trans izoméry majú vyššiu teplotu tuhnutia ako cis izoméry. Pri skúškach sme použili laničnickový olej mechanicky lisovaný z *Camelina sativa* (L) Crantz, var. Smilovska degumovaný s kyselinou citrónovou, rafinovaný sa bieliacou hlinkou. Druhou surovinou bol metylester laničnickového oleja z transesterifikácie metanolátom sodným. Katalyzátory na báze Cu boli pripravené ako hydrotalcity, ktoré boli žiháním prevedené na zmesné oxidy (450 °C). Pripravené Cu zmesné oxidy a redukované Cu katalyzátory boli charakterizované vybranými adsorpčnými a spektrálnymi metódami.

Vlastnosti produktov parciálnej hydrogenácie sa hodnotili meraním indexu lomu, jódového čísla a GC (prevedené na metylestery na oleje) a GC-MS. Katalyzátory na báze medi sú vynikajúcimi katalyzátormi parciálnej hydrogenácie olefinov. Katalyzátory s vysokou disperziou Cu sa ukázali ako účinné selektívne katalyzátory pre hydrogenáciu polyénov na monoény pri hydrogenácii LO a jeho metylesteroch. Jódové číslo čiastočne hydrogenovaného laničnickového oleja sa znížilo zo 153 na 101 mg I<sub>2</sub> / 100 g vzorky.

*Táto práca bola podporená z projektov APVV-16-0097 a APVV-16-0051.*

### 11L-07 NÁVRH PROCESU MOKRÉ OXIDACE

**JIRÍ TREJBAL<sup>a</sup>, DAVID LISÝ<sup>b</sup>, DAVID BEK<sup>c</sup>**

<sup>a</sup> VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, <sup>b</sup> Pento spol. s r.o., U průhonu 22/466, 170 00 Praha 7, <sup>c</sup> Messer Technogas s.r.o., Zelený pruh 99, 140 02 Praha 4  
jiri.trejbal@vscht.cz

Mokrý oxidace (wet oxidation) je hydro termický proces, vhodný pro oxidaci organických i anorganických látek obsažených ve vodných roztocích. Proces probíhá za zvýšené teploty a tlaku. Obecně platí, čím je vyšší teplota při reakci, tím je dosaženo vyššího stupně oxidace. Aby mohla reakce probíhat v kapalném stavu, je za potřeby zvýšeného tlaku. Pro stupeň oxidace je rovněž důležitý parciální tlak kyslíku, reakční doba a případná přítomnost katalyzátoru. Reakční doba se může pohybovat od minut až po hodiny, záleží na typu oxidovaného materiálu.

Proces je využíván pro úpravu nebezpečných, nebo neodobratelných látek z odpadních vod z chemických provozů. Upravená voda je vhodná k dočištění v biologické čistírně odpadních vod. Mokrý oxidace vyžaduje méně paliva než jiné tepelné oxidační procesy (např. spalování, při kterém je nutné dodat teplo k vypaření vody). Investice do technologie mokré oxidace záleží především na množství zpracovávaného materiálu (odpadní vody a její chemické spotřebě kyslíku), použitím oxidačním činidlo, na podmínkách reakce a na konstrukci a materiálu zařízení. Průmyslově je proces využíván od 50. let 20. století při využití různých typů reaktorů i aplikací samotného procesu.

Přesto, že proces mokré oxidace je dlouhodobě znám, není v ČR žádná firma schopná potencionálním zákazníkům tuto technologii dodat. Domácí průmysl je tak odkázán na nabídky zahraničních firem. Jak bylo zjištěno, v ČR již několik domácích chemických společností poptávalo tuto technologii u zahraničních dodavatelů, investiční a provozní náklady spojené s těmito nabídkami jsou mimo finanční možnosti domácího průmyslu.

Existují určitá specifika mokré oxidace, která nejsou běžná u jiných procesů. Každá produkovaná odpadní voda má unikátní složení a proto nemůže existovat univerzální podoba technologie, kterou by bylo možné dodat pouze na základě znalosti kapacity a složení. Pro danou odpadní vodu je vždy nutné udělat experimentální a průmyslový vývoj technologie. Potencionální zákazníci očekávají odpověď na poptávku v krátkém čase, a proto je nezbytné mít vybudované zázemí pro rychlé posouzení možnosti využití mokré oxidace pro danou odpadní vodu a prvotní odhad investičních a provozních nákladů.

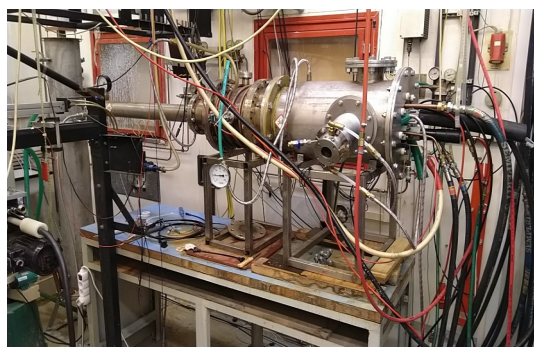
*Tento projekt byl realizován za finanční podpory z prostředků státního rozpočtu prostřednictvím Ministerstva průmyslu a obchodu v programu TRIO č. FV40430.*

### 11L-08 MATERIÁLOVÉ PROBLÉMY PLAZMOCHEMICKÝCH REAKTORŮ NA LIKVIDACI FREONŮ

**VLASTIMIL BROŽEK<sup>a</sup>, LIBOR MASTNÝ<sup>b</sup>, OLDŘICH ŽIVNÝ<sup>a</sup>, RADEK MUŠÁLEK<sup>a</sup>, JAN MEDŘICKÝ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav fyziky plazmatu AVČR, Za Slovankou 3, 182 00 Praha 8, <sup>b</sup> Vysoká škola chemickotechnologická, Technická 8, 166 28 Praha 6  
brozekv@ipp.cas.cz

Jednou z variant ekonomicky efektivní likvidace halogenovaných, především fluorovaných uhlovodíků, je jejich zpracování v termickém plazmatu. Fluorované uhlovodíky, zejména freony a halony, jsou vedeny jako hlavní skleníkové plyny, mající fatální dopad na ozonovou vrstvu Země. Až na výjimky jsou tyto látky zakázané, a navíc je z důvodů jejich dlouhodobé životnosti a vysoké chemické stálosti jejich likvidace velmi náročná. Uplatňují se především fyzikální metody dekompozice, např. pomocí mikrovlnných plazmových hořáků nebo plazmových reaktorů s dielektrickou náplní, nebo metoda klouzavého výboje typu Glid-Arc. Technologickou novinkou je zpracování freonů ve vodou stabilizovaném plazmatu (WSP-H), generovaném v aparatuře, vyvinuté a patentované v Ústavu fyziky plazmatu AVČR<sup>1,2</sup>.



Obr. 1. Plazmochemický reaktor na zpracování a likvidaci freonů

V tomto reaktoru se ve vodou stabilizovaném plazmatu freony termicky rozloží při teplotě 3000 K – 5000 K a jejich radikály ihned reagují s kyslíkovými a vodíkovými ionty plazmatu za vzniku oxidů uhlíku a především fluorovodíku<sup>3,4</sup>. Fluorovodík je na výstupu z reaktoru alkalicky neutralizován. Konstrukčním problémem reaktoru je tedy jeho koroze plyným fluorovodíkem při abnormálně vysokých teplotách. Ve vzdálenější chladnější části reaktoru mimo dosah plazmatu fluorovodík reaguje s kondenzovanou vodní párou na kyselinu fluorovodíkovou. Ocelová konstrukce exponovaných částí reaktoru proto musí být chráněna povlaky odolnými kyselině fluorovodíkové. V první etapě byly studovány a vyzkoušeny materiály z karbidu křemíku a fluoridu vápenatého, který může být připraven i plazmotermickým nástřikem<sup>5</sup>. Fluorid vápenatý vyhovuje z chemického hlediska, ale má nízký bod tání 1418 °C a nevhodné parametry délkové teplotní roztažnosti, takže v kritických místech aparatury dochází k jeho podkorodování. Karbid křemíku s teplotou rozkladu cca 3000 K a s nízkou teplotní roztažností vyhovuje konstrukčním požadavkům i dalšími fyzikálními parametry,

ale problematická je jeho chemická stálosť, spôsobená vysokým obsahom oxidu kremičitého (až 3 %) v komerčných výrobkoch. Téměř absolutní korozní odolnost v kyselině fluorovodíkové byla potvrzena u preparátů SiC, vyrobených přímou syntézou metodou spark plasma sintering (SPS) z polovodičově čistého křemíku kvality 6N a spektrálně čistého uhlíku při teplotě 1600°C. Na rozdíl od průmyslových výrobků karbidu křemičitého s krystalovou strukturou 4H, 6H a 15R, které vždy obsahují mezivrstvy SiO<sub>2</sub> a musejí být sliňovány s keramickým pojivem, atakovatelným i jinými kyselinami, vzniká přímou syntézou z prvků kubický karbid se strukturou F-43m, který s fluorovodíkem nereaguje.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR, Bilaterální projekt GAČR GC17-10246J.*

#### LITERATURA

1. Hrabovský M., Kopecký V., Sember V., Kavka T., Chumak O, Konrád M.: IEEE Transaction on Plasma Science 34, 1566 (2006).
2. Hrabovský M.: J. Fluid. Sci. Technol. 6, 792 (2011).
3. Chen S. H., Živný O., Mašláni A., Chau S.-W.: J. Fluor. Chem. 217, 41 (2019).
4. Živný O., Hlína M., Serov A., Halinowski A., Mašláni A.: Plasma Chem. Plasma Process 40, 309 (2020).
5. Mušálek R., Medřický J., Tesař T., Kotlan J., Pala Z., Lukáč F., Chráška T., Curry N.: J. Therm. Spray Technol. 26, 37 (2017).

#### 11L-09

##### MOŽNOSTI ZVYŠOVANIA STABILITY PRÁŠKOVÉHO ŽELEZANU DRASELNÉHO POMOCOU PRÍRODNÝCH ZEOLITOV

**EMÍLIA MALIŠOVÁ, MICHAELA BENKÖOVÁ, JÁN HÍVEŠ, ANDREA ČERVENKOVÁ, DANIELA PAVŮKOVÁ, LUCIA FAŠKOVÁ**

*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Oddelenie anorganickej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko emilia.malisova@stuba.sk*

Železany (Fe<sup>VI</sup>) patria medzi najsilnejšie oxidačné činidlá spomedzi všetkých bežne používaných oxidantov. Vo vodnom prostredí pôsobia navyše aj ako dezinfekčné a koagulačné činidlo, čím vzrastá ich potenciál najmä pre použitie v oblasti čistenia vôd. Dokážu rýchlo redukovať široké spektrum mikropolutantov, pričom sa samé oxidujú na netoxické a v prírode bežne sa vyskytujúce látky. Kvôli svojej vysokej reaktivite sa však vyznačujú pomerne nízkou stabilitou. Ich dlhodobé skladovanie bez straty požadovanej čistoty predstavuje v reálnych prevádzkach problém.

Cieľom práce bolo zvýšenie stability elektrochemicky pripravovaných železanov pomocou prírodných zeolitov. Zeolity sú zlúčeniny s poréznuou štruktúrou, ktoré sa aj samostatne používajú pri úprave a čistení vôd ako selektívne adsorpčné činidlá a iónomeniče. Železany a zeolity vytvárajú spolu účinnú zmes pre proces úpravy odpadovej a povrchovej vody. Práškový železan draselný sa enkapsuloval spolu so zeolitom ich vzájomným lisovaním do tabliet rôznych

rozmerov. Pripravili sa série tabliet s rôznymi pomermi medzi železanom a zeolitom. Pre všetky pripravené série vzoriek bola definovaná homogenita tabliet pomocou UV-Vis spektrofotometra. Následne bola časť tabliet z každej série uskladnená v rôznych podmienkach a postupne v zvolených časových intervaloch sa v nich premeriavala koncentrácia železanu. Dlhodobé sledovanie stability bolo realizované aj na nezakapsulovanom železane draselnom, z ktorého boli pôvodne tablety pripravované. Vzájomné porovnanie enkapsulovaného železanu v zeolite a voľného práškového železanu draselného dokázalo dosiahnutie výrazného zvýšenia stability železanu enkapsulovaného pomocou zeolitu. Následná aplikácia železanovo-zeolitových tabliet do vzoriek znečistených vôd potvrdila minimálne rovnako vysokú degradačnú účinnosť pre zvolené mikropolutanty ako po aplikácii samostatného práškového železanu.

*Táto práca vznikla vďaka podpore Ministerstva Školstva, Vedy, Výskumu a Športu SR v rámci projektu VEGA 1/0343/19, Agentúrou pre podporu výskumu a vývoja APVV-17-0183 a vďaka Grantovej schéme na podporu excelentných tímov mladých výskumníkov v podmienkach STU v Bratislave (ElCapFe).*

#### 11L-10

##### APLIKÁCIA ENKAPSULOVANÝCH EKOLOGICKÝCH OXIDAČNÝCH ČINIDIEL ŽELEZANOV DO ODPADOVÝCH VÔD

**MICHAELA BENKÖOVÁ, EMÍLIA MALIŠOVÁ, JÁN HÍVEŠ, ANDREA ČERVENKOVÁ, DANIELA PAVŮKOVÁ, LUCIA FAŠKOVÁ**

*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Oddelenie anorganickej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko michaela.benkoova@stuba.sk*

V súčasnosti sú povrchové a odpadové vody znečistené širokou škálou rôznych, ťažko degradovateľných látok. Odstraňovanie týchto nežiaducich látok z vôd, a teda vo všeobecnosti zo životného prostredia, je aktuálnym problémom, pre ktorý je potrebné nájsť environmentálne prijateľné riešenie. Použitie železanov sa javí ako perspektívna možnosť úpravy odpadových vôd.

Železany sú zlúčeniny, v ktorých sa železo nachádza v oxidačnom stupni +VI. Tieto látky sú nielen silné oxidačné činidlá, ale sú tiež vynikajúcim dezinfekčným a koagulačným činidlom. Dané vlastnosti ich predurčujú na aplikáciu v rôznych oblastiach. Najviac spomínané sú ale železany v oblasti čistenia, resp. dočisťovania odpadových a povrchových vôd. Ich výhodou v porovnaní s inými skúmanými pokročilými oxidačnými procesmi je fakt, že konečné produkty ich rozkladu nie sú karcinogénne alebo toxické produkty. Dôvody, prečo však železany nie sú v súčasnosti používané vo veľkom je ich samotný vysoký redoxný potenciál, ktorý komplikuje ich výrobu a zároveň vysoká reaktivita pripravených produktov súvisí s ich relatívne nízkou stabilitou.

Cieľom tohto výskumu bola aplikácia elektrochemicky

připravovaných železanov draselných do znečištěných modelových vzoriek vôd i do vzoriek odobraných z reálných odpadových vôd. Porovnávala sa degradačná účinnosť samostatného práškového železanu draselného s degradačnou účinnosťou enkapsulovaných železanov. Čistota elektrolyticky vyrábaného železanu bola stanovovaná UV-Vis spektrofotometricky. Účinnosť degradácie vybraných mikropolutantov v modelových roztokoch bola stanovovaná pomocou HPLC. Degradácia účinnosť v reálnej odpadovej vode odobranej z výtoku zo zdravotníckeho zariadenia bola vyhodnocovaná LC-MS analýzou. Na základe výsledkov možno jednoznačne konštatovať, že železany dokážu degradovať veľké množstvo rôznych mikropolutantov.

*Táto práca vznikla vďaka podpore Ministerstva Školstva, Vedy, Výskumu a Športu SR v rámci projektu VEGA 1/0343/19, Agentúrou pre podporu výskumu a vývoja APVV-17-0183 a vďaka Grantovej schéme na podporu excelentných tímov mladých výskumníkov v podmienkach STU v Bratislave (ElCapFe).*

#### 11L-11 VALORIZACE VEDLEJŠÍCH ŽIVOČIŠNÝCH PRODUKTŮ JAKO SUBSTRÁTU PRO PSÍ PROBIOTIKA

**PETRA PATÁKOVÁ<sup>a\*</sup>, DANIELA BASAŘOVÁ<sup>a</sup>,  
MADALENA BRAGA<sup>a</sup>, BARBORA BRANSKÁ<sup>a</sup>, PETR  
KAŠTÁNEK<sup>b</sup>, JAN KOLEK<sup>a</sup>, KAREL MELZŮCH<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav biotechnologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, <sup>b</sup> EcoFuel Laboratories, Ocelářská 9, 190 00 Praha 9  
petra.patakova@vscht.cz

Využití vedlejších živočišných produktů (VŽP) je pro producenty masa účinným způsobem, jak se vyhnout ztrátám způsobeným náklady na likvidaci těchto materiálů. Krmivo pro zvířata se vyrábí z vedlejších produktů živočišného původu, které jsou označeny jako „nestravitelné pro člověka“, což jsou krev, kopyta, rohy, žlázy, kosti, tuky, peří a kůže. VŽP tvoří asi 25–40 % krmiv nebo potravinových doplňků pro psy.

Složení střevní mikroflóry psů je obecně považováno za jeden z nejdůležitějších faktorů ovlivňujících zdraví zvířat. Součástí střevní mikroflóry jsou bakterie kyseliny mléčné, které mají schopnost produkovat více či méně specifické bakteriociny na bázi proteinů, příznivě ovlivňující střevní mikroflóru. Tyto bakterie produkují také organické kyseliny (často označované jako SCFA – short chain fatty acids), jako je kyselina octová a kyselina mléčná, které významně inhibují růst patogenů a naopak poskytují výhodu v růstu přirozené střevní mikroflóry. Aplikace probiotik může také aktivovat a modulovat celkovou imunitní odpověď těla, protože velká část imunitního systému je soustředěna ve střevech a dalších částech zažívacího traktu. Konkrétně se za psí probiotika považují např. bakterie *Enterococcus faecium*, *Lactobacillus* a *Bifidobacterium*.

Z VŽP po zpracování kuřecího masa byl připraven hydrolyzát, který byl testován jako komplexní zdroj dusíku pro výše uvedené bakterie. Kompletní kultivační médium

obsahovalo také zdroj uhlíku, pocházející z vedlejších produktů potravinářského průmyslu. Finální produkt byl získán po zahuštění nebo vysušení, přičemž přežití probiotického mikroorganismu po těchto zásazích bylo testováno po růstu na Petriho misce. Touto zkouškou byl získán ukazatel udávající počet životaschopných mikroorganismů jako tzv. KTJ (kolonie tvořící jednotky) na gram výrobku.

*Tato práce vznikla za podpory grantu TAČR č. TN01000048.*

#### 11L-12 VELKÁ VÝZKUMNÁ INFRASTRUKTURA ENREGAT MÁ ZA SEBOU 1. ROK ČINNOSTI

**BARBORA GRÝCOVÁ, LUCIE OBALOVÁ**

IET, VŠB - TU Ostrava, 17. Listopadu 15/2172, 708 00 Ostrava-Poruba  
barbora.grycova@vsb.cz

ENREGAT umožňuje interdisciplinární výzkum v oblasti energetického využití odpadů včetně redukce vznikajících emisí. Uživatelé infrastruktury mají jedinečnou možnost laboratorně vyvíjený proces demonstrovat rovněž v poloprodučním měřítku. Díky cílené podpoře MŠMT je velká výzkumná infrastruktura ENREGAT k dispozici v režimu otevřeného přístupu pro širokou vědeckou komunitu od ledna 2019. Využití infrastruktury ENREGAT již vedlo k dosažení řady zajímavých výsledků publikovaných ve 12 článcích v odborných impaktovaných časopisech, dále ve sbornících, závěrečných pracích či jiných aplikovaných výsledcích. V loňském roce byla infrastruktura ENREGAT využita formou kolaborativního a smluvního výzkumu pro řešení 42 výzkumných projektů.

### 11P-01 VYUŽITÍ REDUKTIVNÍ DEFLUORACE PRO DEKONTAMINACI TECHNOLOGICKÝCH VOD Z VÝROBY POLYFLUOROVANÝCH SLOUČENIN

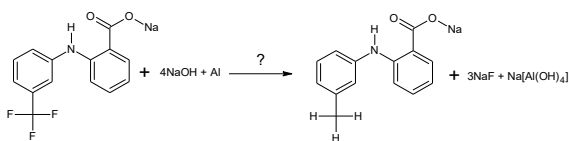
**TOMÁŠ WEIDLICH, BARBORA KAMENICKÁ, VÍT NYDRLE**

Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice  
tomas.weidlich@upce.cz

Vysoká tepelná stabilita, chemická odolnost a fyziologická inertnost umožňují použití polyfluorovaných látek v řadě aplikací, ve kterých často nahradily polychlorované sloučeniny. Polyfluorované sloučeniny lze nalézt v protipožárních pěnách, barvách, pesticidech nebo v léčivech. Díky svojí chemické stálosti jsou tyto látky akumulovány v lidském organismu, zvířatech nebo v životním prostředí<sup>1</sup>.

Polyfluorovanými sloučeninami bývají kontaminované technologické vody a vody vznikající při hasebním zásahu hasičskou пеною. Přitom kontaminace vod polyfluorovanými sloučeninami současná legislativa neřeší (kromě vlivu na nárůst souhrnného parametru chemická spotřeba kyslíku). Přitom v ČR existuje přinejmenším několik chemických firem, které polyfluorované sloučeniny vyrábějí a připouštějí možnou kontaminaci technologických vod těmito sloučeninami.

Cílem příspěvku je prezentovat výsledky výzkumu využití možnosti reduktivní hydrodefluorace pro odstraňování kontaminace vod aromatickými polyfluorovanými sloučeninami. Postup hydrodefluorace využívá reduktivního štěpení vazby C<sub>arom.</sub>-F pro přeměnu biologicky obtížně odbouratelných a někdy i biocidních polyfluorovaných aromatických sloučenin na nehalogenované produkty, přičemž reduktivní přeměna CF<sub>3</sub> na CH<sub>3</sub> vede k odstranění biocidní aktivity a k výraznému zlepšení biodegradovatelnosti vznikajících nehalogenovaných produktů. Popisovaný proces lze ilustrovat na hydrodefluoraci flufenamové kyseliny:



Tato práce vznikla za podpory grantu TA ČR Zeta TJ02000134.

#### LITERATURA

1. Siegemund G.: *Fluorine Compounds, Organic*. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., Weinheim, Germany 2000.

### 11P-02 STUDIUM NÍZKOTEPLTNÍ HOMOGENNÍ OXIDACE DICYKLOHEXYLAMINU VZDUCHEM

**ROMAN VALEŠ\*, ALEXANDRA KUKUČKOVÁ,  
BOHUMÍR DVOŘÁK, JIŘÍ KRUPKA**

Ústav organické technologie, Fakulta chemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6  
Roman.Vales@vscht.cz

Hydrogenací anilinu, nebo disproportionací cyklohexylaminu (CHA) v plynné fázi je na Ni-katalyzátorech vyráběna rovnovážná směs dicyklohexylaminu (DCHA) a cyklohexylaminu. Předním světovým producentem obou aminů je závod BorsodChem MCHZ Ostrava, který má mnohaletou spolupráci s Ústavem organické technologie, Vysoké školy chemicko-technologické v Praze. Při skladování DCHA v ocelových zásobnících dochází, pravděpodobně kontaktem se vzdušnou atmosférou, k poklesu jeho kvality. Dominantním kontaminantem je *N*-cyklohexyliden-cyklohexanamin (NCCHA), jehož vznik je popsán následujícím reakčním schématem (Schéma 1).

Vznikající látka je obtížně odstranitelnou nečistotou ve vyráběném DCHA.

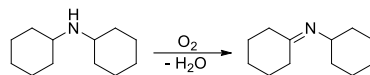


Schéma 1. Reakční schéma oxidativní dehydrogenace dicyklohexylaminu na NCCHA

O této reakci jsou v dostupné literatuře jen velmi omezené informace. Jsou publikovány práce z oblasti malotonážních syntéz, s aplikacemi oxidativní dehydrogenace DCHA na NCCHA, ale v kapalně fázi a za přítomnosti komplexního Co-katalyzátoru<sup>1</sup>, či organického peroxidu<sup>2</sup>. V těchto pracích však nejsou žádná využitelná data pro popis kinetiky reakce. Proto je tato práce, o homogenní, nízkoteplotní (50–100 °C) oxidaci DCHA na NCCHA vzduchem, zaměřena na studium reakční kinetiky.

V práci jsou shrnuty výsledky studia vlivu teploty na rychlost tvorby NCCHA oxidací DCHA, ale také CHA vzduchem. Při teplotách 50–60 °C nebyl po dobu 7 hodin zaznamenán nárůst koncentrace hlavního produktu oxidace, tj. NCCHA. Při teplotách 70–100 °C obsah NCCHA nejprve lineárně rostl, vlivem následné reakce však docházelo k poklesu jeho tvorby. Hydrolyza NCCHA reakční vodou na směs cyklohexanonu a CHA byla příčinou poklesu jeho koncentrace. Jedním z minoritních produktů oxidace CHA vzduchem byl cyklohexanon-oxim. Z kinetických dat oxidace DCHA v teplotním rozmezí 70–100 °C byla vypočtena aktivační energie.

V rámci této práce dále pokračujeme ve studiu možného, promočního vlivu vody na rychlost oxidace obou cykloalifatických aminů, především DCHA.

Tento výstup vznikl v rámci projektu Specifického vysokoškolského výzkumu – projekt A1\_FCHT\_2020\_008

LITERATURA

1. Khatri P. K., Jain S. L., Sivakumar L. N. K., Sain B.:  
Org. Biomol. Chem. 9, 3370 (2011).
2. Hawkins E. G. E.: J. Chem. Soc. 13–16 (1972).

**12L-01****MŮJ ŽIVOT S KALORIMETREM****BOLESLAV TARABA**

*Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, katedra chemie, 30. dubna 22, Ostrava  
Boleslav.taraba@osu.cz*

Príspevek shrnuje základní okruhy otázek, které se autor během své dlouhodobé výzkumné praxe pokusil řešit s využitím kalorimetrických technik. Postupně je pojednáno o kalorimetrických přístupech studia problematiky oxidace a samovznícování (převážně) uhlíkatých látek, o měření tepelných efektů doprovázejících adsorpci plynů/par, respektive adsorpci složek z kapalného prostředí na pevných látkách. Pro adsorpci z vodného prostředí je diskutována shoda/porovnatelnost mezi experimentálně stanovenou adsorpční entalpií a hodnotami entalpie adsorpce zjištěnými termodynamickými výpočty.

**12L-02****VLIV SYNTÉZNÍ PROCEDURY A TEPLoty ŽÍHÁNÍ NA VLASTNOSTI TiO<sub>2</sub>**

**BÁRA KOMÁRKOVÁ<sup>a,b</sup>, MONIKA MOTLOCHOVÁ<sup>a,c</sup>, VÁCLAV SLOVÁK<sup>b</sup>, PETRA EORCHARD<sup>a</sup>, PETR BEZDIČKA<sup>a</sup>, DMYTRO BAVOL<sup>a</sup>, JAN ŠUBRT<sup>a</sup>**

*<sup>a</sup> Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i., Husinec-Řež č.p. 1001, 250 68 Řež, <sup>b</sup> Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, Česká republika, <sup>c</sup> Centrum pro analýzu a syntézu, Lunds Universitet, Naturvetarvägen 14, Lund 221-61, Švédsko  
komarkova@iic.cas.cz*

Vlastnosti nanokrystalického TiO<sub>2</sub> jako alotropická modifikace, velikost a tvar krystalů či měrný povrch jsou ovlivněny především syntézním postupem a následně určují i jeho použití. Cílem této práce tedy bylo sledovat vliv srážecího činidla, peroxidického ošetření a teploty žíhání na hmotnostní poměr anatasu a rutilu (včetně velikosti krystalů) a nastínit tak možnou cestu cílené přípravy TiO<sub>2</sub> s požadovanými krystalografickými parametry.

V připravených sériích amino-titaničitanů a peroxo-amino-titaničitanů byl stanoven obsah organické fáze pomocí CHNS analýzy. Velikost krystalů a zastoupení jednotlivých fází při různých teplotách byla zkoumána pomocí *in situ* HT XRD.

Připravené vzorky byly při pokojové teplotě amorfni. První anatasové zárodky se u všech vzorků začaly vyskytovat mezi 325 °C a 425 °C v závislosti na použitém srážecím činidle bez ohledu na přítomnost nebo absenci peroxidické skupiny. Právě ta ovšem navýšila velikost vznikajících anatasových částic (5,3–40,4 nm) v porovnání s peroxidem neošetřenými (4,7–14,1 nm) vzorky. U vzorků neupravených peroxidem měly vznikající krystaly větší velikost s vyšší teplotou jejich vzniku, opačný trend (klesající počáteční velikost anatasu s vyšší teplotou krystalizace) byl pozorován u peroxotitaničitanů. K transformaci na rutilovou fázi začalo ve vzorcích docházet mezi 800 a 925 °C. U peroxidem neošetřených vzorků byl pozorován trend, že se s vyšším obsahem organické složky a vyšší velikostí původních anatasových krystalů snížila velikost prvotních zárodků

rutilové fáze. Při 1000 °C měly obecně vyšší zastoupení anatasové fáze peroxidem ošetřené vzorky, což může být vhodné z hlediska jejich fotokatalytických aplikací. Kombinace teploty žíhání, zvoleného srážecího činidla a peroxidického ošetření ovlivňuje vlastnosti TiO<sub>2</sub> (poměr anatas:rutil ve vzorku či velikost krystalů) a vhodná kombinace těchto parametrů by mohla sloužit jako cesta k cílené přípravě TiO<sub>2</sub>.

*Tato práce vznikla za podpory výzkumné infrastruktury MŠMT NanoEnvi.cz (LM 2018124).*

**12L-03****EXPERIMENTÁLNÍ A TEORETICKÝ POPIS SOUSTAVY Pb-Se-Sn**

**ONDŘEJ ZOBAC<sup>a</sup>, ALEŠ KROUPA<sup>a</sup>, TSE-YANG HUANG<sup>b</sup>, JAN VŘEŠTÁL<sup>a</sup>, ADÉLA ZEMANOVÁ<sup>a</sup>, SINN-WEN CHEN<sup>b</sup>**

*<sup>a</sup> Institute of Physics of Materials, The Czech Academy of Sciences, Brno, 602 00, Czech Republic, <sup>b</sup> National Tsing Hua University, Department of Chemical Engineering, Hsinchu, Taiwan  
zobac@ipm.cz*

Termoelektrické materiály jsou studovány především pro jejich schopnost přímé přeměny rozdílu teplot na elektrické napětí a obráceně (tzv. Seebeckův jev). Jako jeden z nadějných termoelektrických materiálů s vysokým potenciálem využití pro termoelektrické aplikace byly popsány slitiny a kompozitní materiály na bázi Ag-Pb-Se-Te a jejich různých podsoustav (např. PbTe, Ag<sub>2</sub>Te-PbTe). Fázový diagram soustavy Pb-Se-Sn byl studován v rámci této práce. Teoretický popis soustavy Pb-Se-Sn pomocí metody CALPHAD bude implementován do komplexní termodynamické databáze soustavy Ag-Pb-Se-Sn-Te a jejich podsoustav.

Experimentální část práce je zaměřena na studium fázových rovnováh při teplotách 350 °C a 500 °C. Vzorky byly připraveny z čistých prvků v evakuovaných ampulích z křemenného skla. Dlouhodobě žíhané vzorky slitin byly po zakalení do studené vody charakterizovány kombinací různých analytických metod. Celkové a fázové složení pomocí metod elektronové mikroskopie (SEM-EDX), struktura fází byla stanovena rentgenovou difrakcí (XRD) a teploty fázových transformací byly stanoveny diferenční termickou analýzou (DTA) v uzavřených ampulích z křemenného skla. Na základě experimentálních výsledků byl navržen experimentální fázový diagram Pb-Se-Sn. Pomocí metody CALPHAD byl následně optimalizován termodynamický popis soustavy Pb-Se-Sn s využitím publikovaných dat binárních podsoustav (Se-Sn<sup>1</sup>, Pb-Sn<sup>2</sup>, Pb-Se<sup>3</sup>) a navržen teoretický fázový diagram včetně projekce kapalné fáze (liquidus surface).

V oblasti bohaté na selen byl experimentálně i teoreticky popsán miscibility gap kapalné fáze Liq<sub>1</sub>+Liq<sub>2</sub>. Fáze PbSe a SnSe-α jsou silně stabilizovány třetím prvkem a vykazují jeho vysokou rozpustnost ve své struktuře. Ostatní intermetalické fáze mají rozpustnost zanedbatelnou.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR No. 18-25660J a MOST 107-2923-E-007-005-MY3.

## LITERATURA

1. Feutelais Y., Majid M., Legendre B.: *J. Phase Equilib.* 17, 40 (1996).
2. Ohtani H., Okuda K., Ishida K.: *J. Phase Equilib.* 16, 416 (1995).
3. Liu Y., Kang Z., Sheng G., Zhang L., Wang J., Long Z.: *J. Electron. Mater.* 41, 1915 (2012).

## 12L-04

### TERMOPOROMETRIE: VLIV POVRCHOVÉ CHEMIE UHLÍKU NA MNOŽSTVÍ NEMRZNOUCÍ VODY V PÓRECH

**GABRIELA ZELENKOVÁ, VÁCLAV SLOVÁK, TOMÁŠ ZELENKA**

*Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie, 30. dubna 22, 702 00 Ostrava  
gabriela.zelenkova@osu.cz*

Metoda termoporometrie (TPM) je nadějnou alternativou běžně používaných metod charakterizace porézní struktury. Tato metoda je založena na snížení teploty tání/tuhnutí kapaliny, která je uzavřena v pórech. Informace o distribuci pórů (PSD) a jejich objemu z naměřeného DSC signálu je umožněna za pomoci Gibbs-Thomsonovy rovnice. Jednou z hlavních veličin vyskytujících se v Gibbs-Thomsonové rovnici je tloušťka vrstvy nemrznoucí vody ( $\delta$ ), která je v pórech vždy přítomna a její velikost může ovlivnit výsledné informace zjištěné z TPM. Vliv povrchové chemie uhlíkatých materiálů na velikost této vrstvy je málo prozkoumán, a proto bude předmětem studia tohoto příspěvku.

Pro studium vlivu povrchové chemie na množství nemrznoucí vody bylo připraveno celkem 5 uhlíkatých vzorků lišících se mírou povrchové oxidace. Pro každý vzorek byla provedena sada DSC experimentů s různým poměrem vzorku a vody. DSC experimenty byly provedeny v  $N_2$  atmosféře ( $50 \text{ ml min}^{-1}$ ) ochlazením na  $-90 \text{ }^\circ\text{C}$  ( $1 \text{ }^\circ\text{C min}^{-1}$ ) s následným ohřevem na  $25 \text{ }^\circ\text{C}$  ( $1 \text{ }^\circ\text{C min}^{-1}$ ).

Na základě provedené elementární analýzy bylo zjištěno, že připravené uhlíkaté materiály obsahují 15, 18, 21, 23 a 25 % kyslíku, tudíž lze předpokládat, že s rostoucím množstvím kyslíku budou obsahovat více kyslíkatých povrchových skupin, a tedy i množství nemrznoucí vody. Ze získaných DSC experimentů bylo patrné, že všechny vzorky obsahovaly dva endotermické píky, přičemž jeden odpovídal běžnému tání vody ( $0 \text{ }^\circ\text{C}$ ) a druhý pak tání vody v pórech (nižší teplota tání). Množství nezmrzlé vody bylo následně zjištěno ze závislosti hmotnosti  $H_2O$ , která byla přidána ke vzorku, a celkového tepla tání vody zjištěného z plochy DSC píků. Bylo zjištěno, že s rostoucím množstvím kyslíku na povrchu uhlíku množství nezmrzlé vody roste, což naznačuje, že i samotná  $\delta$  nebude konstantní pro uhlíkaté materiály, jako je doposud v literatuře předpokládáno (teor.  $\delta=0,8 \text{ nm}$ ). Nakonec byly určeny jednotlivé hodnoty  $\delta$  vrstev pro studované materiály podle stávajících přístupů, které byly následně upraveny pro získání reálnějších hodnot. Hodnoty

určených  $\delta$  vrstev závisely na povrchové chemii vzorku, přičemž s rostoucím množstvím kyslíku rostla i tloušťka nemrznoucí vody. Na základě provedených experimentů lze poukázat na to, že používání „univerzální“ hodnoty  $\delta$  vrstvy z literatury není vhodné a nemusí vést ke korektnímu odhadu distribuce pórů z TPM.

Tato práce vznikla za podpory SGS08/PřF/2020.

## 12L-05

### ACTIVATION ENERGY IN THERMOANALYTICAL KINETICS

**PETER ŠIMON, ZUZANA CIBULKOVÁ, TIBOR DUBAJ**

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

Condensed state processes are extensively studied by thermoanalytical methods. Mechanisms of these processes are very often unknown or too complicated to be characterised by a simple kinetic model. They tend to occur in multiple steps that have different rates. To describe their kinetics, the single-step approximation mathematically expressed in the form of general rate equation are mostly applied<sup>1</sup>:

$$\frac{d\alpha}{dt} = k(T)f(\alpha) \quad (1)$$

Among the methods based on Eq. (1), the isoconversional (or model-free) ones are most popular, mainly in evaluation of the experimental results obtained from measurements carried out under linear heating rate.

In papers published, it can be very often encountered that the experimental results are evaluated by several methods and the results are mutually compared. Flynn-Wall-Ozawa<sup>2,3</sup> (FWO), Kissinger-Akahira-Sunose<sup>4</sup> (KAS) and Starink<sup>5</sup> methods belong to this group. All the methods reside in the treatment of kinetic results by the relationship:

$$\ln\left(\frac{\beta}{T^a}\right) = -b\frac{E}{RT} + c \Rightarrow \ln \beta = -b\frac{E}{RT} + a \ln T + c \quad (2)$$

where  $\beta$  is the heating rate,  $T$  is the isoconversional temperature,  $E$  is the activation energy and  $a$ ,  $b$ ,  $c$  are constants. The activation energy is obtained from the slope of the dependence  $\ln(\beta/T^a) = f(1/T)$ . If one takes into account the  $a$  and  $b$  values for individual methods, by differentiation of  $d(\ln \beta)/dT$  can be obtained:

$$1.058E_{\text{FWO}} = E_{\text{KAS}} + 2RT = 1.0037E_{\text{Starink}} + 1.8RT \quad (3)$$

From Eq. (3) it is seen that the activation energies from FWO, KAS and Starink methods are interrelated and it makes no sense to make far-reaching conclusions from their comparison. Moreover, it is to bear in mind that all the three methods are integral and they can be mathematically incorrect in the case of variable activation energy<sup>6</sup>.



This paper was supported by the Slovak Research and Development Agency, project No. APVV-15-0124.

## REFERENCES

1. Šimon P.: J. Therm. Anal. Calorim. 82, 651 (2005).
2. Ozawa T.: Bull. Chem. Soc. Jpn. 38, 1881 (1965).
3. Flynn J. H., Wall L. A.: Polym. Lett. 4, 323 (1966).
4. Akahira T., Sunose T.: Trans. Joint Convention of Four Electrical Institutes 246 (1969).
5. Starink M. J.: Thermichim. Acta 288, 97 (1996).
6. Šimon P., Thomas P., Dubaj T., Cibulková Z., Peller A., Veverka M.: J. Therm. Anal. Calorim. 115, 853 (2014).

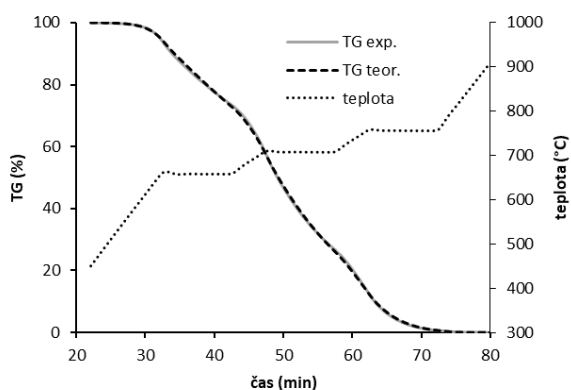
## 12L-06 KINETIKA Z TERMOANALYTICKÝCH DAT NELINEÁRNÍ REGRESÍ

VÁCLAV SLOVÁK

Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, Ostrava  
Vaclav.slovak@osu.cz

Vedle běžných metod určení kinetických parametrů termických reakcí z termoanalytických dat založených vesměs na lineární záznamu základní kinetické rovnice nebo izokonverzním přístupu je možné ke kinetice termických reakcí přistupovat i pomocí numerického řešení kinetické rovnice nelineární regrese. Tento přístup má některé nevýhody především numerického charakteru, na druhou stranu umožňuje stejnou metodikou zpracovávat izotermická i neizotermická data, a to s libovolným teplotním programem. Cílem tohoto příspěvku je ukázat možnosti (i problémy) nelineární regrese řešení kinetiky termických reakcí na příkladu jednoduché oxidace grafitu.

Vzorek grafitu byl ohříván v oxidační atmosféře rychlostmi 2, 10 a 20 K/min do 1000 °C, a dále teplotním programem kombinovaným z ohřevu (20 a 10 K/min) a izotermických kroků při 650, 700 a 750 °C. Ze získaných TG křivek byly vypočteny kinetické parametry isokonverzní Starinkovou metodou nebo lineární regrese (z jednotlivých měření a z jejich kombinace).



Obr. 1. Srovnání teoretické a experimentální křivky oxidace grafitu při kombinovaném ohřevu

Získané výsledky ukazují, že nelineární regrese vede obecně k odlišným výsledkům než Starinkova metoda, poskytuje však lepší shodu experimentálních dat s vypočtenými teoretickými křivkami. Navíc se zdá, že nelineární regrese zpracování jedné TG křivky s kombinovaným teplotním programem (obsahujícím různé rychlosti ohřevu a izotermické kroky, Obr. 1) umožňuje získat kinetická data srovnatelná s výsledky získanými z několika měření s různými rychlostmi ohřevu.

Tato práce vznikla za podpory projektu SGS08/PrF/2020.

## 12L-07 KINETIKA POLYKONDENZACE RESORCINOLU A FORMALDEHYDU POMOCÍ DSC II

EVA KINNERTOVÁ, VÁCLAV SLOVÁK, PETRA ŠRÁMKOVÁ

Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava  
evakinnertova@seznam.cz

Cílem tohoto příspěvku bylo popsat kinetiku polykondenzace resorcinolu a formaldehydu ve vodných roztocích a predikovat průběh reakce pomocí DSC.

Tři odlišné zásaditě katalyzované ( $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ) resorcinol-formaldehydové (RF) polykondenzační směsi byly zkoumány pomocí DSC Q20 (TA Instruments). Polykondenzační směsi se vyznačovaly různým molárním poměrem resorcinolu/katalyzátoru ( $R/C = 25, 50$ ) a různým hmotnostním obsahem reaktantů ( $w = 20, 40\%$ ). Množství 10  $\mu\text{l}$  reakční směsi bylo ohříváno v hermeticky uzavřených hliníkových kelímčích z 10 °C na 100 °C rychlostmi 0,5–2,5  $\text{K min}^{-1}$ . Zdanlivá aktivací energie reakce byla určena pomocí izokonverzní integrální metody dle Starinka<sup>1</sup>. Pro nelineární model-fitting analýzu byl použit zkrácený Šesták-Berggren reakční model  $f(a) = a^m(1-a)^n$  (cit.<sup>2</sup>).

Dle provedených experimentů bylo zjištěno, že polykondenzace resorcinolu a formaldehydu je reakcí dvoukrokovou a celý proces je ovlivněn změnou viskozity RF směsi. V průběhu prvního reakčního kroku dochází k tvorbě mono-, di- a trisubstitovaných hydroxymethylderivátů resorcinolu, které následně v druhém reakčním kroku podléhají polykondenzaci (vznik trojrozměrné struktury – gelu). Výsledky dále ukázaly, že první reakční krok je kineticky řízen chemickou reakcí a mechanismus odpovídá pravděpodobně kinetice druhého řádu, kdežto druhý krok je řízen difúzí a lze jej nejlépe popsat R3 mechanismem (reakce na povrchu sférické částice)<sup>3</sup>. Na základě výsledků kinetické analýzy byl nalezen optimální teplotní program, který umožnil oddělení obou reakčních kroků (DSC piků). Nalezený teplotní program sestával z ohřevu RF směsi z 10 °C na 40 °C (3  $\text{K min}^{-1}$ ), izokroku po dobu 40 min a ohřevu na konečnou teplotu 100 °C (3  $\text{K min}^{-1}$ )<sup>4</sup>. Úspěšné oddělení obou reakčních kroků a analýza vzniklých meziproductů mohou vést k hlubšímu pochopení mechanismu reakce. Predikce průběhu polykondenzace je důležitá z hlediska kontroly porozity studovaných vzorků jakožto jedné z nejdůležitějších vlastností resorcinol-formaldehydových gelů.

## LITERATURA

1. Starink M. J.: *Thermochim. Acta* 404, 163 (2003).
2. Vyazovkin S., Burnham A. K., Criado J. M., Pérez-Maqueda L. A., Popescu C., Sbirrazzuoli N.: *Thermochim. Acta* 520, 1 (2011).
3. Kinnertová E., Slovák V.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 134, 1215 (2018).
4. Šrámková P.: *Kinetika kondenzace resorcinolu s formaldehydem pomocí DSC*. Diplomová práce, Ostravská univerzita 2020.

## REFERENCES

1. Sulakvelidze A., Alavidze Z., Morris J. G.: *Antimicrob. Agents Chemother.* 45, 649 (2001).

## 12L-08

A DSC STUDY OF BINARY POLYSACCHARIDE GELS FOR *S. AUREUS* BACTERIOPHAGE DELIVERY

**TIBOR DUBAJ, MIROSLAV VEVERKA, PETER SIMON**

*Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, Bratislava, Slovakia  
tibor.dubaj@stuba.sk*

The use of bacteriophages to treat bacterial infections is known for more than 100 years and even predates the discovery of penicillin<sup>1</sup>. One of the main obstacles in wider application of bacteriophages resides in their inherent sensitivity to elevated temperature, osmolality, pH, and water activity. This work is focused on thermal characterization of novel binary hydrogels/xerogels which can be used as vehicles for nasal and topical delivery of bacteriophages.

The gels prepared are based on beta-glucan or arabinogalactan with a second gel former Methocel, xanthan, κ-carrageenan, and Carbomer 940. The primary hydrogel is formed by suspending the gel formers (2–10 wt. % in total) in water at 85 °C for 30 min. The hydrogel is then lyophilized yielding a xerogel. Finally, the xerogel is reconstituted into hydrogel with bacteriophage stock solution and lyophilized once again. The thermal behavior of phage-loaded xerogels was studied between –80 °C and 250 °C. The main thermal event in the DSC traces is desorption of residual water above 30 °C followed by thermal degradation of the matrix above ~150 °C. Surprisingly, no glass transition was detected despite the amorphous nature of xerogels confirmed by XRPD; the residual water acts as a plasticizer and shifts the  $T_g$  below –80 °C. Additional DSC measurements of reconstituted hydrogels show that  $10.4 \pm 0.7$  wt. % of the water is present in strongly interacting (non-freezing) form. On the other hand, the only once lyophilized matrices contain significantly less non-freezing water after reconstitution ( $3.9 \pm 0.9$  wt. %). This demonstrates that the second lyophilization step yields matrices which are more strongly interacting with water and thus can be reconstituted into hydrogels at mild conditions (40 °C, 5 min) necessary for preserving the viability of bacteriophages.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency, grant No. APVV-15-0124.*

**12P-01****VLIV POROZITY NA KINETIKU POVRCHOVÉ OXIDACE UHLÍKU****LUCIE KOŘENÁ, VÁCLAV SLOVÁK**

*Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie 30. dubna 22, 701 03 Ostrava  
korena2@seznam.cz*

V rámci této práce byl sledován vliv porozity na kinetiku povrchové oxidace uhlíku. Byly připraveny tři uhlíkaté xerogely s hierarchickou porozitou podle metody navržené P. Bulavovou<sup>1</sup>. První uhlíkatý xerogel obsahoval mikro-, mezo- a makropóry, druhý byl mikro-mezoporézní a třetí uhlíkatý xerogel byl čistě mikroporézní. S každým xerogelem se pracovalo ve dvou variantách lišících se velikostí částic (0–0,15 mm a 0,15–0,75 mm). Jejich porézní vlastnosti byly charakterizovány pomocí skenovací a transmisní elektronové mikroskopie a sorpce N<sub>2</sub> při –196 °C. Kinetika povrchové oxidace byla sledována termogravimetricky v oxidační atmosféře (50 % O<sub>2</sub> a 50 % Ar). Byly provedeny neizotermické experimenty a na jejich základě vytvářeny teploty (240, 260, 280 a 290 °C) pro experimenty izotermické.

Z dat z izotermických experimentů byly pro každý vzorek vypočteny kinetické parametry. Při výpočtech byla využita metoda G. Hotové<sup>2</sup>, která pracuje s předpokladem, že se oxidace uhlíkatých materiálů skládá ze tří reakcí – přímé shoření, vznik kyslíkatých funkčních skupin na povrchu materiálu a jejich zánik.

Analýzou kinetických parametrů bylo zjištěno, že v případě mezoporézních vzorků ani porozita ani velikost částic na kinetiku jejich povrchové oxidace nemají žádný vliv. V případě čistě mikroporézního vzorku byla ovšem pozorována závislost kinetiky jeho oxidace na velikosti částic. Oxidace čistě mikroporézního vzorku o velikosti částic 0,15–0,75 mm je pravděpodobně řízena difuzí v důsledku jeho čistě mikroporézního charakteru v kombinaci s větší velikostí částic.

Dobrá shoda mezi teoretickými a experimentálními daty (kromě čistě mikroporézního vzorku o velikosti částic mezi 0,15–0,75 mm) je důkazem, že použitý kinetický model velmi dobře popisuje oxidaci těchto uhlíkatých xerogelů.

Po určení kinetických parametrů byly také predikovány optimální podmínky pro maximální chemisorpci kyslíku. Predikované teploty byly v rozmezí 245–258 °C a maximální hmotnostní přírůstky dosahovaly 3 až 4 %. Rozdíly mezi predikovanými a experimentálními hmotnostními přírůstky se při daných teplotách lišily jen zanedbatelně (opět s výjimkou čistě mikroporézního vzorku s částicemi od 0,15 do 0,75 mm).

*Tato práce vznikla za podpory projektu SGS08/PřF/2020.*

**LITERATURA**

1. Bulavová P., Parmentier J., Slovák V.: *Microporous Mesoporous Mater.* 272, 155 (2018).
2. Hotová G., Slovák V.: *Thermochim. Acta* 666, 82 (2018).

**12P-02****A NEW CONCEPT FOR LIFETIME PREDICTION OF CABLE INSULATIONS USED IN NUCLEAR POWER PLANTS****ZUZANA CIBULKOVÁ, ANNA VYKYDALOVÁ, PETER ŠIMON, TIBOR DUBAJ**

*Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia  
zuzana.cibulkova@stuba.sk*

Polymers that are used in radiation environments, especially in nuclear power plants degrade gradually with combination of radiation and thermooxidative ageing. These environmental factors alter the physical and mechanical properties of polymers which results in their embrittlement and cracking. Thus, stability of these materials should be tested and reliable prediction of material service lifetime is important to ensure their service life under the specific conditions.

The degradation process usually occurs in two steps. The first one, the induction period (IP), is a preparatory stage where no visible changes are observed. At the end of IP, the main oxidation process starts and the material properties change suddenly. Therefore, the length of IP is often taken as a measure of the material stability<sup>1,2</sup>. As thermooxidative degradation of polymers is accompanied by significant release of heat it can be studied by differential scanning calorimetry (DSC).

In this work, a new approach to lifetime prediction in radiochemical ageing of polymers is proposed. Thermooxidative degradation of cable insulations was studied using non-isothermal DSC measurements. Stability of samples after various periods of thermal, radiation and combined ageing was determined by isoconversional analysis employing a non-Arrhenian temperature function. From the DSC measurements, the kinetic parameters describing the dependence of IP on temperature can be obtained. These parameters enable to calculate the length of IP for any temperature and to evaluate the residual stability of the insulation after an artificial ageing stress. Moreover, a simple predictive model for the degradation in combined radiation and thermal environment was proposed. The model assumes a first-order exponential decay of the residual stability with degradation dose. It allows to predict the degree of insulation damage in wide range of environmental conditions as both temperature and radiation dose effects are considered.

*This paper was supported by the Slovak Research and Development Agency, project No. APVV-15-0124.*

**REFERENCES**

1. Šimon P.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 84, 263 (2006).
2. Pospíšil J., Horák J., Pilař J., Billingham N. C., Zweifel H., Nešpůrek S.: *Polym. Degrad. Stabil.* 82, 145 (2003).

### 13L-01 INTOXIKACE METHANOLEM: MARKERY PROGNÓZY A TRVALÝCH NÁSLEDKŮ

**SERGEJ ZACHAROV<sup>a</sup>, IVAN ŽÁK<sup>a</sup>, TOMÁŠ  
NAVRÁTIL<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> *Klinika pracovního lékařství, 1. lékařská fakulta Univerzity Karlovy a Všeobecné fakultní nemocnice v Praze, Na Bojišti 1, 120 00 Praha 2, <sup>b</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Česká republika stepanka.vlckova@lf1.cuni.cz*

V roce 2012 zažila Česká republika hromadnou otravu methanolem s více než 120 případy. Poškození až kompletní ztráta zraku patří mezi závažné následky akutní otravy methanolem. V prospektivně sledovaném souboru osob přeživších otravu jsme u pacientů prokázali asociaci mezi přítomností alely apolipoproteinu E4 a abnormálním morfologickým nálezem na oční sítnici. Ve sledovaném souboru jsme zaznamenali také vysoký podíl pacientů s toxickým poškozením mozku (52 %). Ve většině případů šlo o hemoragickou nekrózu putamen a globus pallidus. Prokázali jsme, že hemoragický nález souvisel se závažností otravy. Objem poškozených bazálních ganglií byl signifikantně nižší a koreloval s parametry závažnosti metabolické acidózy. Zjistili jsme, že poškození bazálních ganglií methanolem vede k výraznému poklesu funkční aktivity presynaptických dopaminergních receptorů. Přičemž se ukázalo, že v mozku je vůči toxickým účinkům methanolu nejcitlivější strukturou oblast putamen posterior.

Mezi důležité mechanismy v patogenezi toxického poškození mozku methanolem patří neurozánět zprostředkovaný leukotrieny. Za normálních okolností nejsou v mozku detekovatelné, ale trauma, hypoxie, nebo expozice neurotoxickým látkám vedou k aktivaci mikroglie a astrocytů a syntéze leukotrienů, které mají jak neuroprotektivní, tak i negativní účinky. U pacientů s otravou methanolem jsme pozorovali vzestup akutních sérových koncentrací leukotrienů. Tyto koncentrace pozitivně korelovali s akutními koncentracemi markerů lipoperoxidace buněčných membrán MDA, HNE a HHE.

Akutní otrava methanolem negativně ovlivňuje život pacientů i v následujících letech. Následná úmrtnost pacientů ze souboru dosahovala přibližně 20 % v průběhu pěti let. Příčinou skoro poloviny úmrtí ve sledovaném období byla onkologická onemocnění, což ukazuje na možný podíl formaldehydu, metabolitu methanolu, který je známým kancerogenem z první třídy dle klasifikace IARC.

Jedním z praktických dopadů studie toxicity methanolu je změna názoru veřejnosti a politických institucí na jeho bezpečnost pro použití v obchodních přípravcích pro běžného spotřebitele. V roce 2018 Evropská komise rozhodla výrazně omezit využití methanolu v kapalinách do automobilových oštrikovačů a v nemrznoucích směsích. Od května roku 2019 maximální podíl methanolu v podobných směsích nemůže přesahovat půl procenta, což je bezpečná koncentrace. Toto opatření je účinnou prevencí hromadných a sporadických intoxikací methanolem v budoucnu.

*Tato práce vznikla za podpory projektů 1. LF UK PROGRES Q25; PROGRES Q29 a grantu GA ČR 20-01589S.*

### 13L-02 ROLE FORMALDEHYDU PŘI AKUTNÍ OTRAVĚ METHANOLEM

**DAVID SÝKORA<sup>a</sup>, JINDŘICH JINDŘICH<sup>b</sup>, SERGEJ  
ZACHAROV<sup>c</sup>**

<sup>a</sup> *Vysoká škola chemicko-technologická, Ústav analytické chemie, Technická 5, 166 28 Praha 6, <sup>b</sup> Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Katedra organické chemie, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2, <sup>c</sup> 1. Lékařská fakulta Univerzity Karlovy, Kateřinská 1660/32, 121 08 Praha 2 david.sykora@vscht.cz, jindrich.jindrich@natur.cuni.cz sergej.zacharov@lf1.cuni.cz*

Methanol je alifatický alkohol schopný způsobit akutní a chronickou intoxikaci s dlouhodobým negativním dopadem na zdraví člověka včetně poškození zraku a mozku. Zatímco role kyseliny mravenčí je v dané souvislosti dobře prozkoumána, není tomu tak v případě formaldehydu. V předkládané práci byla studována reaktivita formaldehydu s vybranými aminokyselinami a peptidy. Pro identifikaci produktů byla využita hmotnostní spektrometrie s vysokým rozlišením v kombinaci s ionizací elektrosprejem a technika MALDI. Bylo zjištěno, že cystein, homocystein a dva vybrané peptidy, CG a CGAG, poskytují ve velmi vysokém výtěžku cyklické produkty s molekulovou hmotností vyšší přesně o 12 amu než výchozí látky. Byla navržena jejich chemická struktura. Vznik produktů typu +12 amu byl potvrzen také v případě biologicky relevantních peptidů, konkrétně fragmentů ipilimumabu, což je lidská monoklonální protilátka typu IgG1. Experimenty potvrdily, že formaldehyd (i v nízkých koncentracích), reaguje s některými aminokyselinami a peptidy za vzniku kovalentně modifikovaných produktů<sup>1</sup>. Tyto chemické modifikace mohou následně vést k nežádoucím změnám vlastností a funkcí životně důležitých biomolekul, např. hormonů a enzymů, a tím k patogenezi.

*Tato práce vznikla za podpory grantu 1. LF UK PROGRES Q25a Q29.*

#### LITERATURA

1. Sýkora D., Jindřich J., Král V., Jakubek M., Tatar A., Kejik M., Martásek P., Zacharov S.: *J. Anal. Toxicol.*, v tisku, doi: 10.1093/jat/bkaa039 (2020).

### 13L-03 PROTEOMICKÉ BIOMARKERY V DIAGNOSTICE A LÉČBĚ AKUTNÍ OTRAVY METHANOLEM: PROGNÓZA A PREVENCE NEPŘÍZIVÉHO VÝSLEDKU

**IVAN ŽÁK<sup>\*</sup>, SERGEJ ZACHAROV**

*Klinika pracovního lékařství, 1. lékařská fakulta Univerzity Karlovy a Všeobecné fakultní nemocnice v Praze, Na Bojišti 1, 120 00 Praha 2 ivan.zak@vfn.cz*

Dvěma hlavními mechanismy akutní intoxikace methanolem jsou deprese centrálního nervového systému

(CNS) a oxidace methanolu na kyselinu mravenčí, jež svým aniontem působí inhibičně na cytochrom oxidasu *c* a způsobuje buněčnou hypoxii a metabolickou acidózu. Následkem je trvalé poškození sítnice a bazálních ganglií a další závažné klinické komplikace.

Proteomika využívá širokou paletu laboratorních a statistických metod k zhodnocení sérového proteomu pacientů s akutní intoxikací jak kvalitativně, tak kvantitativně. Proteomická analýza může pomoci ve včasné predikci následků, optimalizaci léčebných postupů a posunout možnosti léčby ve prospěch pacienta.

Cílem studie je pomocí proteomické analýzy krevního séra pacientů s akutní otravou methanolem stanovit potenciaální biomarkery závažnosti otravy, časné prognózy přežití a dlouhodobého poškození bazálních ganglií, zrakového nervu a oční sítnice, které by mohly být využity k prevenci trvalých následků otravy methanolem CNS a zraku a k optimalizaci terapie.

Soubor pacientů zahrnoval 47 osob s analyticky potvrzenou akutní otravou methanolem, u kterých byly odebrány a zamrazeny vzorky krevního séra v době hromadné otravy (při příjmu do nemocnice a opakovaně v době hospitalizace). Část pacientů z tohoto souboru zemřela za hospitalizace v nemocnici, přeživší otravu pacienti byli dále dispenzarizováni a sledováni, v rámci tohoto sledování byly odebrány další vzorky krevního séra. Kontrolní soubor tvoří 24 osoby s diagnózou chronického alkoholismu v abstinenci a 6 zdravých osob bez expozice methanolu.

Metody použité pro výzkum jsou hmotnostní spektrometrie MALDI a to Thermo Orbitrap Fusion (Q-OT-qIT, Thermo Scientific). Vyhodnocování naměřených spekter probíhá v programech MaxQuant, R for Windows pro identifikaci a kvantifikaci zjištěných peptidů a proteinů a normalizaci jejich intenzit. Následné změny mezi jednotlivými skupinami jsou detekovány za použití vícedimenzionálních statistických metod – metoda hlavních komponent, diskriminační analýza. Výsledky jsou dále analyzovány pomocí proteomických databází.

Zkoumáno bylo přibližně 1200 proteinů a výsledky měření 20 z nich měly vyšší než 0,8 relativní důležitosti rozdílu, což byl jeden z parametrů pro výběr potenciaálních biomarkerů. V dalších fázích byly identifikovány 3 potenciaální markery akutního poškození oční sítnice a mozku methanolem: retinol binding protein, který funguje jako transmembránový protein sítnice, biotinidáza, jež je součástí mitochondriálního matrixu a hraje roli při vývoji CNS, a alpha-1-microglobulin/bikunin precursor (AMBIP) protein tvořený játry, který normálně neprochází hematoencefalickou bariérou, nicméně při jejím poškození (například methanolem) je prokazován v CNS. Potenciaální význam má gasdermin, který hraje zásadní roli při buněčné apoptóze.

*Tato práce vznikla za podpory projektů PROGRES Q25, Q29 Univerzity Karlovy.*

#### 13L-04

*Účast zrušena*

**13P-01****SUICIDÁLNÍ INTOXIKACE THALLIEM****ŠTĚPÁNKA VLČKOVÁ<sup>a\*</sup>, DANIELA PELCLOVÁ<sup>a</sup>,  
SERGEJ ZACHAROV<sup>a</sup>, TOMÁŠ NAVRÁTIL<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> *Klinika pracovního lékařství, 1. lékařská fakulta Univerzity Karlovy a Všeobecné fakultní nemocnice v Praze, Na Bojišti 1, 120 00 Praha 2, <sup>b</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8 stepanka.vlckova@lf1.cuni.cz*

Thallium je kovový prvek, objevený r. 1861, avšak jeho toxicita byla poznána teprve v r. 1940. Dnes se využívá především v elektronice. Jeho sloučeniny jsou značně toxické a mechanismus toxického účinku je složitý. Ionty thallia se chovají podobně jako ionty draslíku, zasahují do enzymů dýchacího řetězce, blokují využití energie z glukózy a interferují s tvorbou disulfidických vazeb v keratinu. Vzhledem k mimořádné toxicitě bylo v evropských zemích, včetně ČR, v 70. letech 20. století zakázáno použití těchto látek v rodentocidtech. Českému spotřebiteli není dnes thallium dostupné, a i díky tomu jsou otravy thalliem mimořádně vzácné.

Kazuistika popisuje případ slovenského studenta chemie, který se v sebevražděném úmyslu požil bromid thallný (100 mg) společně s alkoholem. Po přijetí byl při vědomí, uváděl jen parestázie končetin. Okamžitě bylo podáváno antidotum Radiogardase (berlínská modř, pruská modř)<sup>1-3</sup> (které bylo poskytnuto ze zásob Toxikologického informačního střediska (TIS) Kliniky pracovního lékařství (KPL)<sup>4</sup>) a Metalcaptase (penicillaminum), dále pak laxancia (lactulosa) a aktivní uhlí<sup>5</sup>. Během několika hodin nastal rychlý rozvoj bolestivých parestezií a toxické encefalopatie s amentně delirantním syndromem, z toho důvodu byla současně podávána analgetika (tramadol, metamizol, mesocain) a psychofarmaka (tiaprid, tianeptin, promethazin). Průběh byl přechodně komplikován paralytickým ileem a také uroinfekcí. Oční vyšetření prokázalo parciální atrofii n. opticus vlevo, bez poruchy vizu<sup>5</sup>.

Analýzy vzorků moče byly prováděny Laboratoří průmyslové toxikologie (LPT), která je součástí (KPL).

Léčba oběma antidoty byla ukončena 22. den a po 30 dnech léčby byl pacient přeložen na psychiatrickou kliniku ve stabilizovaném stavu, s odeznívajícími příznaky toxické polyneuropatie.

*Tato práce vznikla za podpory projektů UK PROGRES Q25; PROGRES Q29 a grantu GA ČR 20-01589S.*

**LITERATURA**

1. Pelcova D., Senholdova Z., Cerna L., Fenclova Z.: *Clin. Toxicol.* 46, 406 (2008).
2. Pelcova D., Urban P., Ridzon P., Senholdova Z., Lukas E., Diblik P., Lacina L.: *Hum. Exp. Toxicol.* 28, 263 (2009).
3. Meggs W. J., CahillMorasco R., Shih R. D., Goldfrank L. R., Hoffman R. S.: *J. Toxicol.-Clin. Toxicol.* 35, 163 (1997).
4. [https://tis-cz.cz/images/stories/PDFs/Antidota\\_Praha.pdf](https://tis-cz.cz/images/stories/PDFs/Antidota_Praha.pdf), Downloaded: 25.6.2020.

5. Pelcova D., Farna H., Vlckova S., Caganova B., Plackova S., Zakharov S.: *Clin. Toxicol.* 50, 300 (2012).

**13P-02****SUICIDÁLNÍ POKUS PŘÍPRAVKEM NA OCHRANU ROSTLIN OBSAHUJÍCÍM MĚĐ****ŠTĚPÁNKA VLČKOVÁ<sup>a\*</sup>, DANIELA PELCLOVÁ<sup>a</sup>,  
SERGEJ ZACHAROV<sup>a</sup>, TOMÁŠ NAVRÁTIL<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> *Klinika pracovního lékařství, 1. lékařská fakulta Univerzity Karlovy a Všeobecné fakultní nemocnice v Praze, Na Bojišti 1, 120 00 Praha 2, <sup>b</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8 stepanka.vlckova@lf1.cuni.cz*

V příspěvku bude popsána kazuistika suicidálního pokusu 48letého muže, který se intoxikoval přípravkem na ochranu rostlin Kuprikol 50 (cit. <sup>1</sup>).

Kuprikol 50 je postřikový fungicid ve formě smáčitelného prášku k ochraně rostlin proti houbovým a bakteriálním chorobám. Obsahuje 50% oxychlorid měďnatý ( $\text{CuCl}_2 \cdot 3\text{CuO} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ), který patří k nejtoxičtějším sloučeninám mědi. Podle účelu použití se ředí vodou.

Měď v rozpustné formě působí jako silné oxidační činidlo – inhibuje SH-skupiny enzymů, uvolňuje produkci volných radikálů a katalyzuje oxidaci lipidů. Rozpustné soli mědi mohou leptat sliznice i kůži, mají i systémový toxický účinek. Letální dávka se odhaduje na 10 g. Otrava má většinou těžký klinický obraz: dehydratace, hemolýza, jaterní a renální selhání.

48letý muž v suicidálním úmyslu požil 20 g přípravku KUPRIKOL 50 (2 sáčky po 10 g), tedy 10 g oxychloridu měďnatého, rozpuštěného v 200 ml vody. Za 30 minut začal zvracet, lékař záchranné služby přesto ještě provedl odsátí žaludečního obsahu. Do 1 hodiny po požití se projevila bolest v epigastriu a průjmy, při přijetí do nemocnice už kontinuálně odcházela vodnatá stolice. V této době byly odebrány první vzorky moče na stanovení koncentrace mědi.

Analýzy prováděla Laboratoř průmyslové toxikologie (TXL) působící v rámci Kliniky pracovního lékařství (KPL) VFN a I. LF UK. Bylo zjištěno 118  $\mu\text{g}$   $\text{Cu}^{2+}$ /g kreatininu (norma do 50  $\mu\text{g}$ /g kreatininu). Proto bylo zahájeno podávání chelátotvorného antidota Succinaptal (sukcimer, DMSA) (které bylo poskytnuto ze zásob Toxikologického informačního střediska (TIS) Kliniky pracovního lékařství (KPL)<sup>2</sup>). Masivní průjmy trvaly 3 dny (asi 12 litrů vodnaté stolice denně), po celou dobu byl pacient intenzivně parenterálně rehydratován. K významnému poleptání kůže a sliznic nedošlo, což potvrdilo i ORL vyšetření.

Díky eliminaci zvracením a odsátí žaludečního obsahu, včasné léčbě antidotem a intenzivní rehydrataci se stav pacienta relativně rychle stabilizoval. Biochemické nálezy neprokázaly výraznější odchylky. 16. den po intoxikaci poklesla koncentrace mědi v moči na 63  $\mu\text{g}$ /g kreatininu a léčba sukci-merem byla ukončena. 17. den byl pacient v dobrém stavu přeložen do psychiatrické léčebny.

*Tato práce vznikla za podpory projektů UK PROGRES Q25; PROGRES Q29 a grantu GA ČR 20-01589S.*

## LITERATURA

1. <https://www.agromanual.cz/cz/pripravky/fungicidy/fungicid/kuprikol-50>, Downloaded: 25.6.2020.
2. [https://tis-cz.cz/images/stories/PDFs/Antidota\\_Praha.pdf](https://tis-cz.cz/images/stories/PDFs/Antidota_Praha.pdf), Downloaded: 25.6.2020.

## 13P-03

### KAZUISTIKY OTRAV TĚŽKÝMI KOVY NA ZÁKLADĚ ANALÝZ LABORATOŘE PRŮMYSLOVÉ TOXIKOLOGIE KLINIKY PRACOVNÍHO LÉKAŘSTVÍ

ŠTĚPÁNKA VLČKOVÁ<sup>a,\*</sup>, DANIELA PELCLOVÁ<sup>a</sup>, SERGEJ ZACHAROV<sup>a</sup>, TOMÁŠ NAVRÁTIL<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Klinika pracovního lékařství, 1. lékařská fakulta Univerzity Karlovy a Všeobecné fakultní nemocnice v Praze, Na Bojišti 1, 120 00 Praha 2*, <sup>b</sup> *Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8*  
stepanka.vlckova@lf1.cuni.cz

Laboratoř průmyslové toxikologie (LPT) je nedílnou součástí (stejně jako např. Toxikologické informační středisko (TIS) aj.) Kliniky pracovního lékařství (KPL) 1. lékařské fakulty Univerzity Karlovy a Všeobecné fakultní nemocnice v Praze. V rámci příspěvku bude představena LPT, náplň její činnosti, a zmíněny některé zajímavé kazuistiky, na jejichž řešení se tato laboratoř podílela. LPT

- provádí vyšetření související s průmyslovou toxikologií, (stanovuje aktivitu acetylcholinesterázy, paraquat-diquat, arzén, thalium, kadmium, olovo, rtuť, kyselinu hippurovou, methemoglobin aj.),
- provádí stanovování látek v rámci biologických expozičních testů včetně vybraných průmyslových nox v biologickém materiálu (moč, krev)<sup>1</sup>,
- podílí se na vyšetření u osob profesionálně neexponovaných,
- účastní se řešení grantů (např. Operační program Praha – Konkurenceschopnost: Materiálně technická základna pro výzkum v oblasti diagnostiky a léčby civilizačních a onkologických onemocnění a jejich závažných rizik ve VFN v Praze<sup>2</sup>) a provádění vědeckých studií na KPL (výzkum různých markerů v kondenzátu vydechaného vzduchu, v moči a v plazmě)<sup>3-5</sup>.

Ze zajímavých kazuistik, na jejichž řešení se LPT podílela, lze zmínit otravy těžkými kovy (např. mědi a thaliumem v rámci suicidálních pokusů (tyto budou rozpracovány v samostatných příspěvcích ve stejné sekci, tj. Toxikologie a lékařská chemie), olovem, suicidální i nesuicidální otravy rtuťí aj.).

*Tato práce vznikla za podpory projektů UK PROGRES Q25; PROGRES Q29 a grantu GA ČR 20-01589S.*

## LITERATURA

1. <https://www.tis-cz.cz/images/stories/PDFs/webtis.pdf>, Downloaded: 25.6.2020.
2. [https://tis-cz.cz/images/stories/PDFs/Antidota\\_Praha.pdf](https://tis-cz.cz/images/stories/PDFs/Antidota_Praha.pdf), Downloaded: 25.6.2020.
3. Pelclova D., Navratil T., Kacerova T., Zamostna B.,

Fenclova Z., Vlckova S., Kacer P.: *Nanomaterials* 9 (2019).

4. Pelclova D., Zdimal V., Schwarz J., Dvorackova S., Komarc M., Ondracek J., Kostejn M., Kacer P., Vlckova S., Fenclova Z., Popov A., Lischkova L., Zakharov S., Bello D.: *Nanomaterials* 8 (2018).
5. Pelclova D., Zdimal V., Kacer P., Zikova N., Komarc M., Fenclova Z., Vlckova S., Schwarz J., Makes O., Syslova K., Navratil T., Turci F., Corazzari I., Zakharov S., Bello D.: *Nanotoxicology* 11, 52 (2017).

## 13P-04

### PRŮKAZ NANOČÁSTIC V BIOLOGICKÝCH VZORCÍCH PRACOVNÍKŮ S NANOMATERIÁLY

LUCIE LISCHKOVÁ<sup>a,b,\*</sup>, ŠTĚPÁNKA VLČKOVÁ<sup>a</sup>, VIKTORIJA KOLESNÍKOVÁ<sup>a,b</sup>, DANIELA PELCLOVÁ<sup>a,b</sup>, ZDENKA FENCLOVÁ<sup>a,b</sup>, ŠTĚPÁNKA DVOŘÁČKOVÁ<sup>c</sup>, ALEXEY POPOV<sup>c</sup>, ALENA MICHALCOVÁ<sup>d</sup>, IVO MAREK<sup>d</sup>, PAVEL MIKUŠKA<sup>c</sup>, VLADIMÍR ŽDÍMAL<sup>f</sup>, MARTIN KOŠTEJN<sup>f</sup>, JAKUB ONDRÁČEK<sup>f</sup>, JAROSLAV SCHWARZ<sup>f</sup>, SERGEJ ZACHAROV<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> *Klinika pracovního lékařství, 1. lékařská fakulta Univerzity Karlovy a Všeobecná fakultní nemocnice v Praze, Na Bojišti 1, 120 00 Praha 2*, <sup>b</sup> *Toxikologické informační středisko, Všeobecná fakultní nemocnice v Praze, Na Bojišti 1, 120 00 Praha 2*, <sup>c</sup> *Technická univerzita v Liberci, Fakulta strojní, Studentská 1402/2, 461 17 Liberec*, <sup>d</sup> *Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství, Technická 5, 166 28 Praha 6*, <sup>e</sup> *Ústav analytické chemie, AV ČR, v.v.i., Veveří 97, 602 00 Brno*, <sup>f</sup> *Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Rozvojová 1/135, 165 02 Praha 6, Česká republika*  
lucie.lischkova@vfjn.cz

Nanotechnologie je obor, který se rozvíjí v posledních letech enormní rychlostí. S produkty, jejichž základem jsou nanočástice, se v současné době můžeme setkat v mnoha oborech průmyslu, od nanomedicíny až po nanoelektroniku. Náš předpoklad je, že v budoucích letech dojde k rozšíření využití i do dalších oborů.

Tato expanze nanočástic ale přináší i otázky možného negativního dopadu na zdraví zaměstnanců nanočásticím při výrobě exponovaných a rovněž i vlivu míry této expozice. V dosud provedených studiích byly u exponovaných pracovníků s nanočásticemi TiO<sub>2</sub> prokázány markery lipidové peroxidace i markery oxidace nukleových kyselin a proteinů<sup>1,2</sup>. I přes rostoucí výrobu a zpracování materiálů s nanočásticemi, nejsou dosud zavedena metodická doporučení k monitoraci exponovaných pracovníků. Možnost detekovat nanočástice v biologických vzorcích včetně její kvantifikace, by měla obrovský význam pro studium míry a doby persistence v dýchacích cestách exponovaných a zachycení časných známek poškození zdraví, které by vedlo k vyřazení zaměstnance z další expozice.

Naše studie byla zaměřena na zjištění možnosti detekce nanočástic z biologických vzorků exponovaných zaměstnanců po směně pomocí transmisní elektronové mikroskopie (TEM; Jeol 2200FS) včetně mapování pomocí metody energiové

disperzní spektroskopie (EDS) ve spolupráci s Ústavem kovových materiálů a korozivního inženýrství na Vysoké škole chemicko-technologické v Praze. U celkem pěti exponovaných pracovníků ze dvou skupin po směně, byly odebrány vzorky moče, krve a kondenzátu vydechovaného vzduchu (celkem 15 biologických vzorků) pomocí systému Eco-Screen (Jaeger Tonnie, SRN).

První skupina byla vystavena nanočásticím obsahujícím převážně železo, mangan a sloučeniny uhlíku a druhá skupina byla vystavena nanočásticím oxidu měďnatého.

Na pracovišti byly odebrány i vzorky z pracovního ovzduší, které byly analyzovány ve spolupráci s AV ČR. Nálezy z pracovního ovzduší a výsledky detekce z biologických vzorků byly poté porovnány. Nanočástice byly nalezeny ve všech biologických vzorcích exponovaných pracovníků. Nejčastěji identifikované chemické prvky byly biogenní (uhlík, draslík, chlor, kyslík), ale nalezeny byly i nanočástice kovů v pracovním ovzduší prokázané. Vedlejším nálezem byla detekce kovů, které se v pracovním prostředí nevyskytovaly (například lanthan, cer či stříbro).

Další studie jsou nezbytné, především zařazení většího počtu analyzovaných vzorků exponovaných pracovníků a porovnání výsledků před směnou a po směně. To od začátku roku 2020 probíhá pomocí metody tzv. povrchové plasmonové resonance (SPR) ve spolupráci s Department of Nanobiotechnology, Brandenburg University of Technology v Cottbus-Seftenberg v Německu.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR č.18-02079S a č. P503/12/G147, projektů PROGRES Q25, Q29 Univerzity Karlovy a projektu GAUK Univerzity Karlovy č.192718.*

#### LITERATURA

1. Pelclova D., Zdimal V., Kacer P., Zikova N., Komarc M., Fenclova Z., Vlcikova S., Schwarz J., Makes O., Syslova K., Navratil T., Turci F., Corazzari I., Zakharov S., Bello D.: *Nanotoxicology* 11, 52 (2017).
2. Pelclova D., Zdimal V., Fenclova Z., Vlcikova S., Turci F., Corazzari I., Kacer P., Schwarz J., Zikova N., Makes O., Syslova K., Komarc M., Belacek J., Navratil T., Machajova M., Zakharov S.: *Occup. Environ. Med.* 73, 110 (2016).



#### 14L-01 NEW ENZYMOLOGY KINETICS AND MICROFLUIDICS

**ZBYNEK PROKOP<sup>a,b</sup>, STAVROS STAVRAKIS<sup>c</sup>,  
VERONIKA DOCKALOVA<sup>a</sup>, DAVID HESS<sup>c</sup>,  
MICHAELA SLANSKA<sup>a</sup>, GASPAR P. PINTO<sup>a</sup>, ESTHER  
M. SÁNCHEZ-CARNERERO<sup>d</sup>, EDUARDO PALAO<sup>d</sup>,  
ANTONIN KUNKA<sup>a</sup>, STANISLAV MAZURENKO<sup>a</sup>,  
DAVID BEDNAR<sup>a</sup>, PETR KLAN<sup>d</sup>, ANDREW  
DEMELLO<sup>c</sup>, JIRI DAMBORSKY<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> Loschmidt Laboratories, Department of Experimental Biology and RECETOX, Masaryk University, Kamenice 5/ A13, 625 00 Brno, Czech Republic, <sup>b</sup> International Clinical Research Centre, St. Anne's University Hospital, Pekarska 53, 656 91 Brno, Czech Republic, <sup>c</sup> Institute for Chemical and Bioengineering, ETH Zürich, Vladimir Prelog Weg 1, 8093 Zürich, Switzerland, <sup>d</sup> Department of Chemistry and RECETOX, Masaryk University, Kamenice 5, 625 00 Brno, Czech Republic  
zbynek@chemi.muni.cz

The use of enzyme catalysts in the industrial and biomedical applications continuously expands. Still, the ability to engineer enzymes to meet the specific requirements of industrial processes is limited, often for lack of mechanistic understanding of their function. Modern kinetic methods coupled with high-resolution structural data and molecular dynamics provide a powerful tool to explore reaction mechanisms and form the basis for what might be called the „new enzymology“<sup>1</sup>.

The presented case studies will show the application of „new enzymology“ kinetics yielding advanced mechanistic insights essential for rational engineering of model enzymes, haloalkane dehalogenases<sup>2,3</sup>. Moreover, we will demonstrate the power of microfluidics for sample-efficient high-throughput collection of required complex kinetic and thermodynamic data<sup>4</sup>. The special attention will be devoted to transient kinetic experiments and global data fitting using numerical integration methods that afford direct analysis of individual steps of complex reaction pathways<sup>5</sup>.

We will show the important role of access pathways, tunnels, connecting the enzyme active site with surrounding media on enzyme specificity and catalytic efficiency<sup>6</sup>. The mechanistic insights into the enzyme function obtained by the combination of advanced kinetics, microfluidics and molecular modelling pointed out the critical importance of conformational dynamics, hydration and associated entropy contribution for enzyme catalytic efficiency. Such a complex understanding of an enzyme mechanism is an important prerequisite for development of novel strategies in protein engineering.

*The authors would like to acknowledge CETOCOEN EXCELLENCE Teaming 2 project supported by Horizon 2020 (857560) and the Czech Ministry of Education, Youth and Sports (02.1.01/0.0/0.0/18\_046/0015975), the RECETOX research infrastructure of the Czech Ministry of Education, Youth and Sports (LM2018121), ETH Research Grants and the Swiss National Science Foundation (Nr. 205321/176011/1).*

#### REFERENCES

1. Johnson K. A.: *The Enzymes*, chapter 1, p. 60, Academic Press, 3<sup>rd</sup> Ed., San Diego, USA 1992.
2. Brezovsky J., Babkova P., Degtjarik O., Fortova A., Gora A., Iermak I., Rezacova P., Dvorak P., Kuta Smatanova I., Prokop Z., Chaloupkova R., Damborsky J.: *ACS Catal.* 6, 7597 (2016).
3. Kokkonen P., Sykora J., Prokop Z., Ghose A., Bednar D., Amaro M., Beerens K., Bidmanova S., Slanska M., Brezovsky J., Damborsky J., Hof M.: *J. Am. Chem. Soc.* 140, 17999 (2018).
4. Hess D., Dockalova V., Kokkonen P., Bednar D., Damborsky J., deMello A., Prokop Z., Stavrakis S. (under review in *Nat. Chem.*).
5. Johnson K. A.: *Kinetic Analysis for the New Enzymology*, KinTek Corporation, PA 16874, United States 2019.
6. Kokkonen P., Bednar D., Pinto G., Prokop Z., Damborsky J.: *Biotechnol. Adv.* 37, 107386 (2019).

#### 14L-02 NEAR-INFRARED LUMINESCENT LABELS FOR IMMUNOCHEMICAL ASSAYS AND IMAGING

**MATĚJ PASTUCHA<sup>a,b,\*</sup>, ZDENĚK FARKA<sup>a</sup>, PETER  
SEBEJ<sup>b</sup>, ANTONIN HLAVÁČEK<sup>c</sup>, PETR SKLÁDAL<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Department of Biochemistry and <sup>b</sup> RECETOX, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5, 625 00 Brno, <sup>c</sup> Institute of Analytical Chemistry of the Czech Academy of Sciences, v. v. i., Veveří 967, 602 00 Brno  
mpastucha@mail.muni.cz

Fluorescent dyes are widely applied in life sciences and medicine as imaging agents, either alone or conjugated with antibodies or other recognition elements to allow targeting. However, when working with tissues, absorption of visible light and autofluorescence is limiting the use of traditional fluorophores. Therefore, probes working in the far-red and near-infrared (NIR) tissue transparent window are preferred.

Among small molecules, polymethine dyes are suitable candidates. Their properties can be tuned by changes in the polymethine chain length and substituents. We chose the indocyanine green (ICG) as an initial model. It is the only NIR fluorophore certified by the FDA for use in clinical medicine. Traditionally, it is used unconjugated as an imaging agent in fluorescence image-guided surgery. Upon coupling with a primary antibody, we have adopted it for specific fluorescent detection of the cancer biomarker CA 19-9.

Nanoparticles are an emerging alternative to conventional fluorophores. Despite several limitations, mainly related to their size and toxicity, the photon-upconversion nanoparticles (UCNPs) are particularly attractive. They can convert absorbed NIR light to shorter wavelengths. Thanks to this anti-Stokes emission, the autofluorescence from the sample is eliminated. In comparison to small fluorophores, the surface of the NPs plays a more critical role. Surface modification becomes a necessity but also an opportunity to tune the nanoparticle stability, anti-fouling properties, and biocompatibility.

We have applied the BSA- and streptavidin-modified UCNPs as labels in a microtiter plate-based immunoassay for the detection of bacterial honeybee pathogens<sup>1</sup>. Furthermore, surface modification by PEG-neridronate made the UCNPs

useful in immunocytochemical staining<sup>2</sup>, which opens the way for their use in more complex biological systems.

*Financial support: GACR (GJ20-30004Y and GJ18-03367Y), MEYS CR (LQ1601 and LTAB19011).*

#### REFERENCES

1. Poláchová V., Pastucha M., Mikušová Z., Mickert M. J., Hlaváček A., Gorris H. H., Skládal P., Farka Z., *Nanoscale* 11, 8343 (2019).
2. Farka Z., Mickert M. J., Mikušová Z., Hlaváček A., Bouchalová P., Xu W., Bouchal P., Skládal P., Gorris H. H.: *Nanoscale* 12, 8303 (2020).

#### 14L-03

### ANALOGIE ELEKTROCHEMICKÉHO CHOVÁNÍ STEROIDŮ V ZÁVISLOSTI NA STRUKTUŘE STEROIDNÍHO SKELETU

**KAROLINA SCHWARZOVÁ<sup>a</sup>, KRISTÝNA JELŠÍKOVÁ<sup>a</sup>, MICHAL ZELENÝ<sup>a</sup>, LENKA BENEŠOVÁ<sup>a</sup>, JAN VESELÝ<sup>b</sup>, JANA SKOPALOVÁ<sup>c</sup>, JAN KLOUDA<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Hlavova 8, 128 43 Praha 2,* <sup>b</sup> *Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra organické chemie, Hlavova 8, 128 43 Praha 2,* <sup>c</sup> *Univerzita Palackého v Olomouci, Katedra analytické chemie, 17. listopadu 2, 771 46 Olomouc*  
karolina.schwarzova@natur.cuni.cz

Steroidní skelet je obsažen v celé řadě biologicky aktivní látek, ať přírodních či syntetizovaných. Podle fyziologického významu a výskytu se dělí na steroidní hormony, soli žlučových kyselin, steroly, vitaminy D, geniny (srdeční jedy, saponiny) a steroidní alkaloidy<sup>1</sup>. Elektrochemická aktivita těchto látek je studována velmi okrajově vzhledem k charakteru steroidního skeletu, který obsahuje u převážné části steroidů maximálně jednu, výjimečně dvě dvojně vazby. Výjimkou jsou mnohé steroidní hormony s fenolickým charakterem kruhu A steroidního skeletu, které se dají snadno elektrochemicky oxidovat<sup>2</sup>.

Tento příspěvek představí analogie elektrochemického chování steroidních sloučenin v závislosti na počtu a pozici dvojných vazeb ve steroidním skeletu. Jejich elektrochemická oxidace byla studována v prostředí acetonitril:voda s přidávkou kyseliny chloristé nebo chloristanu sodného jako základního elektrolytu na nemodifikovaných elektrodách, jako je elektroda ze skelného uhlíku, platinová elektroda nebo borem dopovaná diamantová elektroda (BDD). V prostředí chloristanu lze přímo oxidovat pouze steroly s D5,7 konjugovanou dvojnou vazbou (např. ergosterol, 7-dehydrocholesterol). Přítomnost kyseliny chloristé vede k dehydrataci a zavedení dvojných vazeb do steroidního skeletu a lze oxidovat i steroly s D5 dvojnou vazbou (např. cholesterol, stigmasterol) při potenciálech *ca* +1,5 V - +1,7 V. Žlučové kyseliny lze po dehydrataci v prostředích obsahujících max. 2% vody oxidovat při potenciálu *ca* +1,0 V - 1,3 V C, pokud mají ve své struktuře axiální 7 $\alpha$ -hydroxylovou skupinu v antiperiplanární poloze k 8 $\beta$ -protonu<sup>3</sup>. Tyto elektrochemické oxidační reakce jsou

ireverzibilní a mohou být základem pro vývoj voltametričtých metod pro citlivou detekci těchto látek.

*Tato práce vznikla za podpory grantu Grantové agentury České republiky (projekt GAČR 19-11268S) a Specifického univerzitního výzkumu (SVV 260560).*

#### LITERATURA

1. Kasal A.: *Chem. Listy* 97, 921 (2003).
2. Klouda J., Berek J., Nesmerak K., Schwarzova-Peckova K.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 47, 384 (2017).
3. Klouda J., Nesmerak K., Kocovsky P., Berek J., Schwarzova-Peckova K.: *Bioelectrochemistry* 134, 107539 (2020).

#### 14L-04

### IMPROVING THE POWER OF GWAS FOR GENE DISCOVERY THROUGH REVERSE GWAS APPROACH

**MÁRIA ŠKRABIŠOVÁ<sup>a\*</sup>, NICHOLAS DIETZ<sup>b</sup>, SHUAI ZENG<sup>c,d</sup>, TRUPTI JOSHI<sup>d,e,f</sup>, KRISTIN D. BILYEY<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> *Department of Biochemistry, Faculty of Science, Palacky University in Olomouc, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, Czech Republic,* <sup>b</sup> *Plant Genetics Research Unit, United States Department of Agriculture-Agricultural Research Service, University of Missouri, Columbia MO, USA,* <sup>c</sup> *Department of Electrical Engineering and Computer Science, University of Missouri, Columbia MO, USA,* <sup>d</sup> *Christopher S. Bond Life Sciences Center, University of Missouri, Columbia MO, USA,* <sup>e</sup> *Informatics Institute, University of Missouri, Columbia MO, USA,* <sup>f</sup> *Department of Health Management and Informatics and Office of Research, School of Medicine, University of Missouri, Columbia MO, USA*  
maria.skrabisova@upol.cz

Genome-wide association studies (GWAS) have successfully identified many thousands of genetic associations, but the analysis has been limited by quality and size of input data that impact GWAS prediction potential. Even though current advances in GWAS statistical methodology and post-GWAS data mining strategies aim to increase its prediction potential there is still persistence of cases where GWAS fail to illuminate target genes through causative mutation identification. There are statistical restrictions due to high dimensionality and multicollinearity mainly caused by pleiotropy and/or epistasis that can complicate correct identification of a haplotype-tagging variant. Since the relationship between a haplotype-tagging variant and a phenotype-causing mutation is not known *a priori*, selection of a potential causative mutation in a candidate gene that is currently based on available GWAS descriptors is insufficient. Identification of a sub-optimal haplotype-tagging variant in GWAS can lead to an erroneous conclusion, especially in the widespread practice of low-density genotyping-based GWAS experiments.

Soybean (*Glycine max* [L.] Merr.), with over 1,000 whole-genome-sequenced (WGS) genomes and over 20,000 low density genotyped public accessions serves as an ideal

candidate for strategizing GWAS prediction potential improvement. Further, the USDA Soybean Germplasm Collection (GRIN, Urbana, IL) repository contains over 20,000 accessions where the majority of the soybean accessions were phenotyped for a core selection of phenotypes and genotyped with the low density Illumina SoySNP50K bead chip<sup>1</sup>. This collection serves as an immense pool of available GWAS data<sup>2,3</sup>. An important point here is that the majority of the soybean WGS data set accessions were additionally genotyped with the SoySNP50K array and therefore enable comparison of genotyping-derived and WGS-based GWAS results.

In our GWAS analyses on available soybean data specified above, we described a relationship between a haplotype-tagging variant and a causative mutation based on currently available GWAS descriptors for phenotypes of major agronomically important traits and identified statistical limitations of current GWAS methods<sup>4</sup>. Through our so called “reverse GWAS approach” we introduce an additional GWAS estimate that enables differentiation of genetic variants with similar statistical significance levels in respect to a priori unknown linkage disequilibrium to a causative mutation. This is fundamental in genotyping-based GWAS attempts, where identification of a proper marker fails without such an estimate. Based on our results, we developed a strategy for low-density genotyping-based GWAS-driven identification of causal genes<sup>5</sup> in any organism with limited genotype and/or phenotype data.

*This research has been supported by Missouri Soybean Merchandizing Council project no. 00054564, United Soybean Board project no. 1920-152-0131-C and Palacký University Internal Grant Agency no. IGA-2020-013.*

#### REFERENCES

1. Song Q, Hyten D. L., Jia G., Quigley C. V., Fickus E. W., Nelson R. L., Cregan P. B.: *PLoS One* 8, 1 (2013).
2. Bandillo N. B., Jarquin D., Song Q., Nelson R., Cregan P., Secht J., Lorenz A. J.: *Plant Genome* 8, plantgenome2015.04.0024 (2015).
3. Bandillo N. B., Lorenz A. J., Graef G. L., Jarquin D., Hyten D. L., Nelson R. L., Specht J. E.: *Plant Genome* 10, plantgenome2016.06.0054 (2017).
4. Filho D. F., Filho J. S. d. S. B., Regitano L. C. d. A., Alencar M. M. d., Alves R. R., Meirelles S. L. C.: *PLoS One* 14, e0217283 (2019).
5. Škrabišová M., Dietz N., Zeng S., Miranda C., Culp C., Jo H., Combs R., Kim J.-K., Biova J., Joshi T. et al.: (manuscript in preparation).

#### 14L-05

#### G-KVADRUPEXY JAKO REGULAČNÍ MOTIVY V BIOLOGII STANDARDNÍHO A MUTANTNÍHO PROTEINU P53

MAREK PETR<sup>a,b</sup>, MATEJ ADÁMIK<sup>a</sup>, ROBERT HELMA<sup>a,b</sup>, ZUZANA SOLDÁNOVÁ<sup>a,b</sup>, IVA KEJNOVSKÁ<sup>a</sup>, DANIEL RENČIUK<sup>a</sup>, MICHAELA VORLÍČKOVÁ<sup>a</sup>, MIROSLAV FOJTA<sup>a</sup>, MARIE BRÁZDOVÁ<sup>a,b</sup>

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

<sup>b</sup> *Farmaceutická fakulta, Masarykova univerzita, Palackého třída 1946/1, 612 00 Brno  
maruska@ibp.cz*

Standardní typ p53 (wtp53) je nádorový supresor, ale mutace genu *TP53* je nejčastější genetickou abnormalitou u nádorů. Transkripční regulace cílových genů zahrnující rozpoznávání DNA patří mezi předpokládané heterogenní mechanismy vysvětlující onkogenní chování mutantních proteinů p53.

Naše práce se zaměřuje na strukturně specifickou vazbu standardního i mutantního typu (mutp53) proteinů p53 k DNA obsahující sekvence vytvářející kvadruplexy DNA a na účinek na transkripci řízenou p53. Bioinformatické nástroje byly použity pro systematickou analýzu promotorů cílových genů p53. Pro detekci tvorby G-kvadruplexů ve vybraných sekvencích byly použity biofyzikální techniky. Přímé interakce proteinů wtp53 a mutp53 s různými typy G-kvadruplexů z promotorových oblastí byly analyzovány několika technikami *in vitro* a pomocí techniky ChIP v buňkách U251 (cit.<sup>1-4</sup>). V případě několika G-kvadruplexů analýza CD ukázala, že mutantní p53 R273H se na G-kvadruplexy nejenom váže, ale také je stabilizuje. S využitím linie U251 obsahující R273H bylo zjištěno, že se R273H přednostně váže na DNA bohatou na G/C z oblastí počátku transkripce mnoha aktivních genů<sup>4</sup>.

G-kvadruplexy představují jeden z možných rozpoznávaných motivů non-B DNA pro transkripční regulaci cílových genů p53.

*Tato práce vznikla za podpory GAČR 19-15168S.*

#### LITERATURA

1. Brazdova M. a kol.: *PLoS One* 11, e0167439 (2016).
2. Petr M., Helma R., Polášková A., Krejčí A., Dvořáková Z., Kejnovská I., Navrátilová L., Adámik M., Vorlíčková M., Brázdová M.: *Biosci. Rep.* 36 (2016).
3. Adámik M., Kejnovská I., Bažantová P., Petr M., Renčíuk D., Vorlíčková M., Brázdová M.: *Biochimie* 128 -129, 83 (2016).
4. Quante T., Otto B., Brazdova M., Kejnovska I., Deppert W., Tolstonog G. V.: *Cell Cycle* 11, 3290 (2012).

**14L-06**  
**NOVÉ STUDIE ODHALUJÍ NOVÉ SOUVISLOSTI**  
**MEZI STRUKTUROU NUKLEOVÝCH KYSELIN**  
**A JEJICH ELEKTROCHEMICKÝM CHOVÁNÍM**

**MIROSLAV FOJTA, LUDĚK HAVRAN, ZUZANA**  
**SOLDÁNOVÁ, HANA PIVOŇKOVÁ, MARTINA**  
**OUTLÁ, MONIKA HERMANOVÁ, VLASTIMIL**  
**DORČÁK, JAN ŠPAČEK, STANISLAV HASON, ALEŠ**  
**DAŇHEL, VERONIKA OSTATNÁ**

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

*Věnováno památce profesora Emila Palečka, zakladatele*  
*oboru elektrochemie nukleových kyselin (\*1930 – †2018).*

Elektrochemické vlastnosti nukleových kyselin jsou zkoumány od druhé poloviny 50. let 20. století, kdy byla E. Palečkem objevena polarografická aktivita DNA spočívající v redukci některých nukleobází na rtuťových elektrodách. Později bylo ukázáno, že báze v DNA a RNA lze oxidovat na uhlíkových elektrodách. Kromě oxidace a redukce lze k elektrochemickému výzkumu DNA využít také adsorpčně-desorpční děje, které se projevují vznikem tzv. tensametrických signálů. Dále bylo zjištěno, že elektrochemické odpovědi nukleových kyselin závisí na jejich struktuře, zejména v důsledku změn přístupnosti hydrofobních, redukovatelných nebo oxidovatelných bazí k povrchu elektrody při změnách konformace příslušné nukleové kyseliny (přehledně v<sup>1</sup>).

V posledních letech se však ukazuje, že toto obecně přijímané schéma je příliš zjednodušující. Nové objevy odhalily dříve neznámé nebo opomíjené jevy jako katalytické vylučování vodíku v přítomnosti nemodifikovaných nukleových kyselin (a s tím související objev a aplikace katalytického vylučování deuteria<sup>2</sup>), vliv vylučování vodíku na elektrodové procesy guaninu<sup>3</sup>, specifické adsorpčně-desorpční a elektrochemické vlastnosti homonukleotidových sekvencí na rtuťových elektrodách<sup>4</sup>, vliv nukleotidové sekvence na mechanismus oxidace některých bazí a možnost redukce bazí na uhlíkových elektrodách<sup>5</sup>. V přednášce budou tyto jevy stručně představeny a diskutovány v souvislosti s jejich bioanalytickým využitím.

*Tato práce vznikla za podpory projektu SYMBIT*  
*(č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000477) financovaného*  
*z ERDF.*

**LITERATURA**

1. Paleček E., Bartošík M.: *Chem. Rev.* 112, 3427 (2012).
2. Řimánková L., Ostatná V., Bartošík M.: *Electroanalysis* 31, 1895 (2019).
3. Dorčák V., Paleček E.: *ChemElectroChem* 6, 1032 (2019).
4. Hason S., Pivoňková H., Fojta M.: *J. Electroanal. Chem.* 849, 113364 (2019).
5. Špaček J., Daňhel A., Hason S., Fojta M.: *Electrochem. Commun.* 82, 34 (2017).

**14P-01**  
**VLIV TRANSFEKCE MIR-29B NA CYTOTOXICITU**  
**ETOPOSIDU**

**ZDENĚK DOSTÁL, JANA BUCHTIKOVÁ, MARTIN**  
**MODRIANSKÝ**

*Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta,  
 Univerzita Palackého, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc  
 zdenek.dostal@upol.cz*

Setrvale rostoucí incidence nádorových onemocnění v posledních desetiletích vede k potřebě nalézt účinnou léčbu pro jednotlivé pacienty. Výsledkem je řada výzev spojená se vznikající rezistencí nádorových buněk, vysokou toxicitou léčiv nebo množstvím nežádoucích účinků. Jedním ze studovaných směrů je ovlivňování cytotoxicity pomocí mikroRNA. Tyto molekuly nekódující RNA jsou charakteristické svou velmi krátkou délkou čítající přibližně 22 nukleotidů a schopností regulace exprese cílových genů na posttranskripční úrovni. miR-29b je jednou z potenciálně zajímavých molekul, jejíž tumor supresorová aktivita je často přičítána regulací exprese Mcl-1, DNMT3A/3B nebo Bcl-2 (cit.<sup>1,2</sup>).

Etoposid, který je řazen mezi deriváty podofylotoxinu, je relativně staré léčivo využívané pro léčbu různých nádorových onemocnění. Jeho hlavním účinkem je inhibice topoisomerasy II<sup>3</sup>. Na důležitost etoposidu v léčbě nádorových onemocnění ukazuje skutečnost, že je součástí seznamu základních léčiv vydaného organizací WHO.

V rámci našeho předchozího výzkumu bylo zjištěno, že transfekce prekurzory miR-29b významně navyšuje citlivost buněčné linie HeLa vůči etoposidu. Pozorovaná odezva je pravděpodobně vyvolána změnou poměru exprese krátké a dlouhé isoformy proteinu Mcl-1 (cit.<sup>4</sup>). Získaná data nás dovedla k nové otázce, zda je popsán mechanismus účinku miR-29b univerzální, přenositelný na jiné nádorové modely nebo je jedinečný pouze pro model karcinomu děložního čípku.

Experimenty provedené na buněčných liniích Caco-2 a Hep G2 potvrdily vliv miR-29b na cytotoxicitu etoposidu. Pozorovaný efekt ale nebyl doprovázen změnou poměru isoform Mcl-1, což ukazuje na odlišný mechanismus účinku ve srovnání s původní studií využívající buněčnou linii HeLa. Dalším zajímavým výsledkem bylo zjištění, že transfekce nenádorové buněčné linie H9c2 prekurzory miR-29b neměla žádný vliv na toxicitu etoposidu i přes relativně velkou změnu v expresi isoform proteinu Mcl-1.

*Tato práce vznikla za podpory prostředků RVO 6198952.*

**LITERATURA**

- Jiang H., Zhang G., Wu J. H., Jiang C. P.: *Oncol. Rep.* **31**, 1509 (2014).
- Chou C. H. et al.: *Nucleic Acids Res.* **46**, D296 (2018).
- Hande K. R.: *Eur. J. Cancer.* **34**, 1514 (1998).
- Kollinerová S., Dostál Z., Modrianský M.: *Toxicol. In Vitro* **40**, 289 (2017).

**14P-02**  
**BINDING OF P53 PROTEIN TO G-QUADRUPLEXES:**  
**INFLUENCE OF G-QUADRUPLEX LIGANDS**

**MAREK PETR<sup>a,b</sup>, MATEJ ADÁMIK<sup>a</sup>, ROBERT**  
**HELMA<sup>a,b</sup>, VERONIKA ALEXOVÁ<sup>a</sup>, DANIEL**  
**RENČIUK<sup>a</sup>, IVA KEJNOVSKÁ<sup>a</sup>, MICHAELA**  
**VORLÍČKOVÁ<sup>a</sup>, MIROSLAV FOJTA<sup>a</sup>, MARIE**  
**BRÁZDOVÁ<sup>a,b</sup>**

*<sup>a</sup> Institute of Biophysics, Czech Academy of Sciences,  
 Královopolská 135, 612 65 Brno, <sup>b</sup> Faculty of Pharmacy,  
 Masaryk University, Palackého třída 1946/1, 612 00 Brno  
 zhlavek@ibp.cz*

Tumor suppressor protein p53 plays a critical role in regulation of biological processes including cell cycle arrest, DNA repair and apoptosis. P53 functions mainly as a transcriptional regulator of its target genes via binding to p53 response elements in genomic DNA<sup>1</sup>.

G-quadruplexes are four-stranded nucleic acid secondary structures implicated in regulation of gene expression, replication and senescence. DNA sequences capable of G-quadruplex formation are frequently present in gene promoters, untranslated regions and telomeres<sup>2</sup>.

We have shown that p53 binds to G-quadruplex formed by G-rich sequence from *MYC* gene promoter region with affinity comparable to p53 consensus sequence<sup>3</sup>. Furthermore, we have studied p53 binding to G-quadruplexes formed by human telomeric sequence<sup>4</sup>. Affinity of p53 to telomeric G-quadruplexes was dependent on oligonucleotide length and the binding was increased in the presence of G-quadruplex ligand *N*-methyl mesoporphyrin IX (NMM)<sup>4</sup>. Finally, we have analyzed the impact of several known G-quadruplex ligands, including pyridostatin (PDS) or BRACO-19, on p53 protein interactions with various G-quadruplex structures.

*This work was supported by GAČR (19-15168S and 20-20229S), IGA VFU (319/2019/FaF) and SYMBIT (CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000477).*

**REFERENCES**

- Brázda V., Fojta M.: *Int. J. Mol. Sci.* **20**, 5605 (2019).
- Spiegel J., Adhikari S., Balasubramanian S.: *Trends Chem.* **2**, 123 (2020).
- Petr M., Helma R., Polášková A., Krejčí A., Dvořáková Z., Kejnovská I., Navrátilová L., Adámik M., Vorlíčková M., Brázdová M.: *Biosci. Rep.* **36** (2016).
- Adámik M., Kejnovská I., Bažantová P., Petr M., Renčíuk D., Vorlíčková M., Brázdová M.: *Biochimie* **128** -129, 83 (2016).

## 14P-03

**P53 PREFERENTIAL BINDING TO NON-B DNA STRUCTURES FORMED BY THE PYRIMIDINE-RICH STRANDS OF GAA.TTC TRINUCLEOTIDE REPEATS ASSOCIATED WITH FRIEDREICH'S ATAXIA****ROBERT HELMA<sup>a,b,\*</sup>, MAREK PETR<sup>a,b</sup>, PAVLA BAŽANTOVÁ<sup>c</sup>, MATEJ ADÁMIK<sup>a</sup>, DANIEL RENCÍUK<sup>a</sup>, ZUZANA SOLDÁNOVÁ<sup>a,b</sup>, MIROSLAV FOJTA<sup>a</sup>, MARIE BRÁZDOVÁ<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> Institute of Biophysics, Academy of Sciences of the Czech Republic v.v.i., Královopolská 135, 612 65 Brno, <sup>b</sup> Faculty of Pharmacy, Masaryk University, Palackého 1/3, 612 42 Brno, <sup>c</sup> aculty of Science, University of Ostrava, Chittussiho 10, 701 03 Ostrava  
rhelma@ibp.cz

The tumor suppressor p53 plays a critical role in regulatory pathways leading to cell cycle arrest, DNA repair and apoptosis. Besides the transcriptional regulation mediated via sequence-specific DNA binding, p53 can selectively bind to various non-B DNA structures including DNA quadruplex, triplex and cruciform<sup>1-3</sup>. In this work the binding of full length p53 and several deletion variants to trinucleotide repeats (TNRs) (GAA, TTC, CTG, CAG) and simple repeats (T, A) folded into DNA hairpins or DNA loops was studied. We demonstrate that p53 binds to all studied non-B DNA structures with a preference for non-B DNA structures formed by pyrimidine- (Py-) rich strands. Using deletion mutants we found out that the C-terminal DNA binding domain of p53 was crucial for recognition of such non-B DNA structures.

Expansion of GAA.TTC motif in the first intron of frataxin gene is associated with the development of Friedreich's ataxia. The binding of p53 to this region was confirmed using chromatin immunoprecipitation in human adenocarcinoma and Friedreich's ataxia fibroblast cells. These observations provide further evidence that p53 binds to TNR non-B DNA structures, suggesting it is important to investigate further how p53 influences genetic instabilities of TNR sequences.

*This work was supported by the Czech Science Foundation (19-15168S, 19-17063S, 20-20229S) and SYMBIT (č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000477).*

## REFERENCES

1. Adamik M., Kejnovska I., Bazantova P. et al.: *Biochimie* 128-129, 83 (2016).
2. Brazdova M., Tichy V., Helma R., Bazantova P., Polaskova A., Petr M., Navratilova L. et al.: *PLoS One* 11, e0167439 (2016).
3. Petr M., Helma R., Polaskova A., Krejci A., Dvorakova Z., Kejnovska I., Navratilova L., Adamik M., Vorlickova M., Brazdova M.: *Biosci. Rep.* 36 (2016).

## 14P-04

**INTERAKCIA P53 A SP1 S DNA G-QUADRUPLXMI MODULOVANÁ pH****MATEJ ADÁMIK, BARBORA KRŠKOVÁ, MAREK PETR, TEREZA PAVLICOVÁ, ZUZANA DVOŘÁKOVÁ, DANIEL RENCÍUK, MIROSLAV FOJTA, MARIE BRÁZDOVÁ**

*Biofyzikální ústav AV ČR, Královopolská 135, 612 65 Brno  
matej@ibp.cz*

G-quadruplexy (G4) sú sekundárne štruktúry DNA s potenciálom regulovať molekulárne biologické procesy transkripcie a translácie. U G4 sekvencií sa často vyskytuje štruktúrny polymorfizmus popisujúci tvorbu zmesí hneď niekoľkých G4 štruktúr či ich medzistavov, ktorých zastúpenie v celkovej populácii sa mení v závislosti na externých podmienkach<sup>1</sup>, medziiným aj pH.

Homeostáza vnútrobunecného pH vykazuje za určitých situácií odchýlky. K žiaducej a opakovanej zmene pH bunecného jadra dochádza prirodzene napríklad v priebehu mitózy<sup>2</sup>, patofyziologickým príkladom je nádorové prostredie<sup>3</sup>.

V práci sme skúmali vplyv pH na interakciu izolovaných konštruktov transkripčných faktorov p53 a SP1 s G4 obklopenými duplexovou DNA, a taktiež na samotné duplexy DNA. Obklopenie sekundárnej štruktúry DNA duplexovou DNA pomáha simulovať fyziologické podmienky<sup>4</sup>. Cieľom bolo pozorovať prípadnú zmenu relatívnej afinity vybraných proteínov k G4 pri odlišných podmienkach.

Okrem očakávateľného celkového zlepšenia afinity posunom ku kyslejším hodnotám pH v dôsledku zlepšenia elektrostatických interakcií sme pozorovali aj špecifické vplyvy niektorých substrátov DNA.

*Tato práca vznikla za podpory GAČR 19-15168S, 20-20229S a projektu SYMBIT (č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000477).*

## LITERATURA

1. Zhang S., Wu Y., Zhang W.: *ChemMedChem* 9, 899 (2014).
2. Gagliardi L. J., Shain D. H.: *Theor. Biol. Med. Modell.* 10 (2013).
3. Damaghi M., Wojtkowiak J. W., Gillies R. J.: *Front Physiol.* 4, 370 (2013)
4. Helma R. a kol.: *Molecules* 24, 11 (2019).

**14P-05****OLIGONUKLEOTIDY OBSAHUJÍCÍ G<sub>n</sub> BLOKY:  
TVORBA GUANINOVÝCH KVADRUPLEXŮ *VERSUS*  
VOLTAMERICKÉ CHOVNÍ****ZUZANA SOLDÁNOVÁ, LUDĚK HAVRAN, PAVLÍNA  
HAVRANOVÁ, HANA PIVOŇKOVÁ, MARTINA  
OUTLÁ, ALEŠ DAŇHEL, MARIE BRÁZDOVÁ,  
MIROSLAV FOJTA***Biofyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Královopolská 135, 612 65  
Brno  
babkovaz@ibp.cz*

Guaninové kvadruplexy (G4) patří mezi intenzivně studované alternativní struktury nukleových kyselin vzhledem k jejich předpokládané a postupně prokazované funkci v buněčných regulačních procesech. G4 jsou obvykle tvořeny v úsecích DNA nebo RNA obsahujících opakující se bloky guaninů. Takové uspořádání umožňuje tvorbu hoogsteenovsky propojených guaninových kvartetů a jejich vertikální „stohování“ nad sebe. Jelikož se jedná o relativně stabilní struktury tvořené zbytky guaninu, které mají výhodné vlastnosti z hlediska možnosti jejich zkoumání pomocí elektrochemických metod (guanin lze elektrochemicky oxidovat i redukovat a ve druhém případě výhodně detekovat produkt jeho redukce<sup>1</sup>), věnovali jsme se studiu elektrochemických vlastností oligonukleotidů obsahujících G<sub>n</sub> bloky. V naší první studii<sup>1</sup> jsme ukázali, že schopnost tvorby antiparalelních tetramolekulárních G4 u sekvencí DNA obsahujících delší (n≥5) G<sub>n</sub> bloky korelovala s poklesem signálu oxidace redukčního produktu guaninu (píku G) na rtuťové elektrodě, což jsme diskutovali ve smyslu snížení efektivity redukce guaninu zapojeného v G4 struktuře. V navazující práci (Z. Soldánová, rukopis v přípravě) navíc ukazujeme, že výšku píku G nezávisí jen na samotné tvorbě stabilních G4, ale též na přítomnosti redukovatelných bází adeninu a cytosinu v příslušné sekvenci. To je ve shodě se zjištěním, že redukce guaninu je (přínejméně částečně) závislá na katalytickém vylučování vodíku<sup>2</sup>, které doprovází redukci zmíněných bází<sup>3</sup>. Naše výsledky naznačují, že procesy, ke kterým dochází na negativně nabitěm povrchu rtuťové elektrody v přítomnosti různých sekvencí či konformací DNA, jsou složitější, než jak bylo dosud obecně přijímáno.

*Tato práce vznikla za podpory projektu GAČR 19-15168S a SYMBIT (č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000477) financovaného z ERDF.*

**LITERATURA**

1. Vidláková P., Pivoňková H., Kejnovská I., Trnková L., Vorlíčková M., Fojta M., Havran L.: *Anal. Bioanal. Chem.* 407, 5817 (2015).
2. Daňhel A., Havran L., Trnková L., Fojta M.: *Electroanalysis* 28, 2785 (2016).
3. Římánková L., Ostatná V., Bartošik M.: *Electroanalysis* 31, 1895 (2019).

**14P-06****ROSTLINY REZISTENTNÍ KE STRESU A TOXICITA****JITKA VIKTOROVÁ, KATEŘINA ŘEHOŘOVÁ,  
SIMONA DOBIASOVÁ, TOMÁŠ MACEK***Ústav biochemie a mikrobiologie, FPBT VŠCHT Praha,  
Technická 3, 166 28 Praha  
Tomas.macek@vscht.cz*

Rostliny se setkávají v přírodě během životního cyklu neustále se stresujícími podněty a musí se přizpůsobovat. Příkladem je třeba vodní stres, příliš vysoká nebo příliš nízká teplota, vliv pathogenních nebo býložravých organismů, herbicidy, pesticidy a další chemikálie. Protože rostliny nemohou utéci, došlo ke vzniku různých obranných mechanismů. Jedna z možností je tvorba sloučenin chránících rostlinu, často tzv. sekundárních metabolitů rostlin, z nichž mnohé mohou být jedovaté pro savce.

Naše předběžné výsledky ukazují, že geneticky upravené rostliny se zvýšenou rezistencí vůči stresu akumulují v podmínkách daného stresu menší množství toxických látek než nemodifikované výchozí rostliny. Snažíme se rozšířit spektrum testovaných dvojic rostlin (nezávisle, zda získané genetickou modifikací pomocí *Agrobacteria* či biolistiky, editací genů či jiným způsobem). Cílem je ověření platnosti hypotézy, že zavedení vlastnosti resistance vůči určitému stresu, při testování za podmínek definovaného stresu ve srovnání s nemodifikovanou variantou vede ke snížení toxicity extraktu z rostliny.

Testujeme metanolicke extrakty uvedených dvojic rostlin (obě ve stresované a nestresované variantě) prostřednictvím řady biochemických testů a testů toxicity s využitím robotické platformy umožňující velkokapacitní srovnání na různých liniích savčích buněk dostupných na našem Ústavu biochemie a mikrobiologie VŠCHT Praha, např. HEK293T (buňky epitelu ledvin lidského plodu), HaCat (lidské epidermální keratinocyty), HDF (lidské dermální fibroblasty), MDBK (hovězí ledviny), RAW (myší makrofágy) a další. Rádi uvítáme další modelové rostliny.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR LTC20015 INTERCOST.*

**14P-07****SILYBÍNOVÉ FLAVONOLIGNANY AKO  
MODULÁTORY MNOHONÁSOBNEJ LIEKOVEJ  
REZISTENCIE****SIMONA DOBIASOVÁ<sup>a</sup>, DENISA KUČEROVÁ<sup>a</sup>,  
KATEŘINA ŘEHOŘOVÁ<sup>a</sup>, KRISTÝNA KÁŇOVÁ<sup>a,b</sup>,  
JITKA VIKTOROVÁ<sup>a</sup>, VLADIMÍR KŘEN<sup>b</sup>, TOMÁŠ  
MACEK<sup>a</sup>**<sup>a</sup>Ústav biochemie a mikrobiologie, FPBT VŠCHT Praha,  
Technická 3, 166 28 Praha<sup>b</sup>Laboratoř biotransformací, Mikrobiologický ústav AV ČR,  
Videňská 1083, 14220 Praha  
dobiasoo@vscht.cz

Rezistencia voči liečivám predstavuje problém takmer pri všetkých typoch chemoterapie, čo výrazne znižuje možnosti liečby. So získanou mnohonásobnou rezistenciou (MDR) je spojený mechanizmus, ktorý je výsledkom zvýšenej exprese efluxných púmp, hlavne P-glykoproteínu (P-gp). P-gp zohráva úlohu membránovej transportnej pumpy. Jeho zvýšená aktivita v maligných bunkách je spojená so zníženou citlivosťou na veľkú skupinu cytostatík. Jedna z možností efektívnej modulácie liekovej rezistencie je inhibícia transportu cytostatika z intracelulárneho prostredia. Avšak veľká časť inhibítorov P-gp vykazuje mnoho negatívnych účinkov s použitím vysokých koncentrácií na získanie požadovaného efektu. Profilácia nových látok je v tomto prípade viac než nevyhnutná.

Cieľom tohto projektu je testovanie rastlinných sekundárných metabolitov izolovaných a pripravených zo silymarínu (*Silybum marianum*) ako potenciálnych modulátorov mnohonásobnej liekovej rezistencie spojenej so zvýšenou aktivitou P-gp. Záujmom testovania je najzastúpenejší flavonolignan silymarínového komplexu – silybín a dehydrosilybín, ako jeho oxidovaný produkt.

Spomínané flavonolignany boli prvotne testované na schopnosť modulovať aktivitu P-gp použitím izolovaných membrán. Inhibícia MDR bola následne sledovaná na rezistentnej nádorovej línii A2780 ADR (ľudský karcinóm vaječníka rezistentný na adriamycín). Významný výstup týchto meraní predstavovala senzitivácia rezistentnej línii kombináciou cytostatika s testovanými flavonolignanmi.

*Táto práca vznikla za podpory grantu GAČR (18-00150S) – Minoritné a neobvyklé flavonolignany, Chemo-enzymatická príprava a farmakologická aktivita.*

**14P-08****BIOPROSPEKCE DOSTUPNÝCH DRUHŮ  
ROSTLINNÉHO RODU *SELAGINELLA*****BÁRA KŘÍŽKOVSKÁ, ROHITESH KUMAR,  
KATEŘINA ŘEHOŘOVÁ, JITKA VIKTOROVÁ,  
JAN LIPOV**Ústav biochemie a mikrobiologie, FPBT VŠCHT Praha,  
Technická 3, 166 28 Praha  
krizkovskab@gmail.com

Rostliny pro svou ochranu syntetizují mnoho chemických sloučenin, které jim pomáhají přežít i v nepříznivých podmínkách. Tyto specifické metabolity bývají součástí různých lidových léčitelství a v některých případech tvoří základní struktury komerčně používaných farmak. Jednou z používaných strategií pro identifikaci těchto biologicky aktivních metabolitů je bioprospekce. Jedná se o komplexní proces, který kombinuje znalosti biochemie, biologie a analytické chemie, jehož cílem je hledání pozitivně působících bioaktivních látek.

Základem této strategie je testování široké škály biologických aktivit s paralelní analýzou chemického složení, které by mělo vést k charakterizaci aktivního metabolitu. Tato strategie se zaměřuje především na rostlinné druhy, které svými vlastnostmi naznačují obsah biologicky aktivních látek případně jsou si s těmito rostlinami podobné.

Cílem této práce bylo zaznamenat *in vitro* biologické aktivity extraktů připravených z osmi zástupců rostlinného rodu *Selaginella* a vzájemně je porovnat. Měřena byla antimikrobiální, antioxidační a cytotoxická aktivita spolu se schopností inhibice acetylcholinesterasy. Zároveň byly extrakty podrobeny analytickému rozboru, který byl využit pro korelaci naměřených biologických aktivit.

U všech testovaných extraktů byla pozorována schopnost absorbovat kyslíkové radikály. Při měření cytotoxické aktivity se extrakty některých zástupců (*S. delicatula*, *S. myosuroides*, *S. ramosii*, *S. apoda* a *S. biformis*) projeví jako schopné selektivně inhibovat růst nádorových tkáňových linií. Acetylcholinesterasa byla inhibována extrakty ze *S. myosuroides* a *S. cupressina*.

*Tato práce vznikla za podpory grantu TAČR-Zéta TJ02000372.*



14P-09

**IMUNOMODULAČNÁ AKTIVITA  
SILYMARINOVÝCH FLAVONOLIGNANOV****DENISA KUČEROVÁ<sup>a</sup>, SIMONA DOBIASOVÁ<sup>a</sup>,  
KATEŘINA ŘEHOŘOVÁ<sup>a</sup>, MARTINA HURTOVÁ<sup>a,b</sup>,  
JITKA VIKTOROVÁ<sup>a</sup>, VLADIMÍR KŘEN<sup>b</sup>, TOMÁŠ  
MACEK<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav biochemie a mikrobiologie, FPBT VŠCHT Praha,  
Technická 3, 166 28 Praha, <sup>b</sup> Laboratoř biotransformací,  
Mikrobiologický ústav AV ČR, Vídeňská 1083, 142 20 Praha  
kuceroad@vscht.cz

Imunitný systém patrí medzi základné mechanizmy regulácie homeostázy v ľudskom tele. Ako súčasť tejto dôležitej funkcie zaisťuje ochranu buniek pred exogénnymi patogénmi, ale aj likvidáciu apoptických či maligných buniek. Makrofágy sú v prípade infekcie súčasťou prvej línie obrany v postihnutom tkanive, kde fagocytujú mikroorganizmy a zároveň iniciujú zápalovú odpoveď pomocou produkcie cytokínou. Cytokíny v tomto prípade predstavujú signálne molekuly, ktoré sprostredkujú komunikáciu medzi bunkami imunitného systému. Regulácia zápalovej odpovede je nevyhnutná v rámci mnohých závažných ochorení vrátane maligných procesov.

Jednou z možností modulácie zápalovej odpovede je aplikácia prírodných látok – flavonoidov a flavonolignanov. Tieto fytoprodukty sú napríklad súčasťou silymarínového komplexu extrahované zo *Silybum marianum* (ostropestrec mariánsky).

Cieľom tohto projektu je sledovanie protizápalových účinkov vybraných flavonolignanov – silybínu a jeho oxidovanej formy dehydrosilybínu. Imunomodulačná aktivita bola sledovaná na bunkovej línii myších makrofágov RAW 264.7 po aktivácii bakteriálnym lipopolysacharidom (LPS). Po indukcii buniek makrofágov dochádza k vyplavovaniu zápalových molekúl ako oxidu dusnatého (NO) a rôznych cytokínov ako tumor nekrotizujúceho faktora (TNF- $\alpha$ ) a interleukínu (IL-6).

Výsledky meraní preukázali výrazný potenciál silymarínových flavonolignanov inhibovať produkciu všetkých signálnych molekúl (NO, TNF- $\alpha$ , IL-6). Najúčinnějšía inhibícia zápalovej odpovede bola sledovaná u dehydrosilybínu a jeho enantiomérov.

*Táto práca vznikla za podpory grantu GAČR (18-00150S) – Minoritné a neobvyklé flavonolignany, Chemo-enzymatická príprava a farmakologická aktivita.*

---

## SEZNAM PLENÁRNÍCH PŘEDNÁŠEK

---

PL-01	<i>R. Šefců</i>	Chemie v národní galerii
PL-02	<i>L. Kavan</i>	Perovskite photovoltaics from the viewpoint of electrochemistry
PL-03	<i>J. Tkáč, T. Bertók, E. Jané, M. Hřeš, L. Lorencová, V. Gajdošová, A. Blšáková, F. Květoň, Š. Hrončeková</i>	Analýza glykánů v diagnostice rakoviny
PL-04	<i>I. Turková*, M. Kotrlý</i>	Forenzní zkoumání textilií a vláken
PL-05	<i>J. Pašek</i>	Můj život s chemickou technologií
PL-06	<i>P. Slaviček</i>	Tak trochu jiná fotochemie: Od UV k rentgenovým fotonům
PL-07	<i>J. Skopalová</i>	Elektrochemie jako nástroj pro zkoumání metabolických přeměn
PL-08	<i>P. Drašar</i>	Vydavatelská asociace Chemistry Europe

---

## SEZNAM PŘÍSPĚVKŮ PODLE SEKČÍ

---

### Sekce 1 – Analytická chemie

#### Přednášky

1L-01	<i>J. Petr, D. Baron, P. Švecová, A. Šebestová, J. Rozsypal, S. Hassanpour, R. Pechancová, T. Pluháček</i>	Spojení kapilární elektroforézy s hmotnostní spektrometrií pro analýzu biologicky aktivních látek
1L-02	<i>V. Kašička, T. Tůmová, L. Monincová, V. Čerňovský</i>	Analysis and characterization of antimicrobial peptides by capillary electromigration methods
1L-03	<i>Z. Kadlecová, P. Kozlík, K. Kalíková</i>	Využití „mix-mode“ chromatografie pro separaci peptidů
1L-04	<i>D. Matoušek*, J. Neuman</i>	Nové technologie v FTIR mikroskopii a ukázka jejich využití při analýze mikroplastů
1L-05	<i>N. Habanová, R. Pohl</i>	Vplyv rozpúšťadla na NMR parametre oktyl D-gluko- a D-galaktopyranozidov
1L-06	<i>M. Obluková, R. Sokolová, I. Degano, R. Čabala, B. Szotáková, L. Skálová</i>	Enzymatické reakce versus elektrochemická transformace naftoyl indolového derivátu
1L-07	<i>L. Arnoštová, I. Jankovská, J. Arnoštová</i>	Monitoring bioakumulace rtuti ve <i>Felis Silvestris Catus</i>
1L-08	<i>K. Kriegerová, J. Tuček, S. Procházková, R. Halko</i>	Stanovenie olova v placente využitím techniky dávkovania jemnej suspenzie v kombinácii s atómovou absorpčnou spektrometriou s elektrotermickou atomizáciou
1L-09	<i>L. Trnková</i>	Eliminační princip v spektrálním experimentu
1L-10	<i>M. Zatloukalova*, J. Vacek</i>	Electroanalytical study of nitro-fatty acids
1L-11	<i>M. Drexler, V. Veverka</i>	Vývoj inhibitorov vírusovej metyltransferázy pomocou NMR
1L-12	<i>L. Pažitná, Z. Pakanová, P. Kundalia, K. Kianičková, M. Nemčovič, P. Baráth, J. Katrlík</i>	Glycan analysis of the sars-cov-2 spike glycoprotein s1: lectin-based microarray and mass spectrometry approaches
1L-13	<i>P. H. Kundalia, L. Pažitná, K. Kianičková, J. Katrlík</i>	Affinity-based method using glycoprotein microarray with lectin recognition for high throughput determination of glycosylation in cancer

**Sekce 1 – Analytická chemie**

## Postery

- 1P-01 *V. Hrdlička\**, J. Barek, T. Navrátil Využití mikroextrakce do dutého vlákna pro voltametrické stanovení kyseliny homovanilové
- 1P-02 *V. Pínková Gajdošová*, L. Lorencová, J. Tkáč Pokročilé metody na diagnostikovanie rakoviny prsníka pomocou glykoprolifácie proteínov
- 1P-03 *L. Pažitná*, M. Nemčovič, Z. Pakanová, P. Baráth, T. Aliev, D. Dolgikh, V. Argentova, J. Katrlík Aplikácia na lektínoch založenej microarray a MALDI-MS metódy pri analýze glykozylácie rekombinantných monoklonálnych IgA protilátok
- 1P-04 *J. Aguedo\**, Z. Pakanova, J. Tkac MALDI-MS method for discovery of glycan biomarkers in colorectal cancer
- 1P-05 *A. Blšáková*, F. Květoň, L. Lorencová, J. Tkáč Příprava glykánových povrchov a ich aplikácie v biosenzoroch
- 1P-06 *K. Kianičková*, L. Pažitná, P. Kundalia, Z. Pakanová, M. Nemčovič, P. Baráth, E. Katrlíková, J. Šuba, J. Trebatická, S. Kim, J. Katrlík Glykomická analýza vzoriek sér detí s ochorením ADHA lektínovou microarray metódou a hmotnostnou spektrometriou
- 1P-07 *F. Květoň\**, A. Blšáková, J. Tkáč Modifikované glykánové povrchy a ich využitie
- 1P-08 *D. Baron*, P. Švecová, R. Pechancová, T. Pluháček, J. Petr Ultracitlivé stanovení nečistot oxaliplatiny pomocí „sweeping“ MEKC-ICP-MS
- 1P-09 *D. Banáš*, S. Salmistraro, M. Krzyžánková, B. Hosnedlová, R. Kizek\* Elektrochemická charakterizace interakce mezi oligonukleotidy specifickými pro DNA viru afrického moru prasat a CdTe kvantovými tečkami
- 1P-10 *D. Folprechtová*, M. G. Schmid, E. Tesařová, D. W. Armstrong, Enantioseparace nových psychoaktivních látek v superkritické fluidní chromatografii
- 1P-11 *B. Mužíková* Stanovení hlavních složek ve vzorcích omamných a psychotropních látek pomocí NMR spektroskopie
- 1P-12 *M. Choińska\**, V. Hrdlička, B. Ruiz Redondo, J. Barek, T. Navrátil Using of silver solid amalgam electrodes for determination of heavy metal poisoning antidote 2,3-dimercapto-1-propanesulfonic acid
- 1P-13 *Z. Kadlecová*, M. Gilar, E. Tesařová, K. Kalíková Porovnání stacionárních fází s různým typem částic a ligandu v HPLC
- 1P-14 *L. Lorencová\**, V. Gajdošová, P. Kasák, J. Tkáč Aplikácie pokročilých 2D nanomateriálov "MXénov" ako perspektívnych platforiem pri návrhu (bio)senzorov
- 1P-15 *V. Richterová\**, F. Mravec, M. Pekař Inverzní fluorescenční korelační spektroskopie
- 1P-16 *P. Sázelová*, D. Koval, L. Severa, F. Teplý, G. Vigh, V. Kašička Determination of binding constants of cyclodextrin complexes with metal polypyridyl species by affinity ce using their ionic strength corrected and uncorrected actual mobilities
- 1P-17 *F. Smrčka*, P. Lubal Ethanol biosensor based on Eu(III) ternary complex
- 1P-18 *V. Šolínová*, L. Žáková, J. Jiráček, V. Kašička Partial filling affinity capillary electrophoresis applied to the study of noncovalent interactions of human insulin with biologically relevant ligands
- 1P-19 *S. Štěpánová*, E. Procházková, L. Čechová, Z. Janeba, V. Kašička Determination of binding constants of 5-phenylazopyrimidines with  $\beta$ -cyclodextrin by affinity capillary electrophoresis
- 1P-20 *P. Švecová*, J.-M. Siaugue, J. Petr Syntéza a charakterizace magnetických „core-shell“ nanočástic s karboxylovými skupinami na povrchu
- 1P-21 *A. Šebestová*, J. Petr Chirální separace enantiomerů tamsulosinu pomocí CE-ESI-MS
- 1P-22 *L. Benešová*, E. Bláhová, J. Klouda, K. Nesměrák, J. Skopalová, K. Schwarzová Stanovení cholesterolu v mléčných výrobcích s využitím elektrochemických a spektrofotometrických metod
- 1P-23 *R. Jerga*, V. Müllerová, V. Talášková, P. Barták, J. Skopalová Stanovení rozdělovacích koeficientů v systému liposom-voda
- 1P-24 *Š. Adamec* Studium falzifikátů anabolických androgenních steroidů v olejové matrici metodou GC-MS
- 1P-25 *T. Maříková* Vývoj metody preparativní enantioseparace syntetických kationů

**Sekce 2 – Anorganická a materiálová chemie****Přednášky**

2L-01	<u>K. Lang</u> , K. Kirakci	Molybdenové klastrové komplexy: Fotofyzikální vlastnosti a nové aplikace
2L-02	<u>J. Demel</u> , J. Hynek, S. Ondrušová, P. Brázda, J. Rohlíček, K. Lang	Metal-organické sítě vzniklé z fosfinátových ligandů
2L-03	<u>D. Bůžek</u> , S. Adamec, K. Lang, J. Demel	Stabilita zirkoničité metal-organické sítě UiO-66 v pufrech
2L-04	<u>N. Bugárová*</u> , A. Annušová, M. Bodík, P. Šiffalovič, M. Labudová, I. Kajanová, M. Zatovičová, S. Pastoreková, M. Omastová	Konfokální Ramanova mikroskopie biokonjugovaného grafén-oxidového nosiča v bunkách
2L-05	<u>D. Sedmidubský</u> , Z. Sofer	Vrstevnaté nanomateriály pro (foto)-elektrokatalýzu rozkladu vody – teorie a experiment
2L-06	<u>J. Leitner</u> , D. Sedmidubský, O. Jankovský	Zvýšená rozpustnost nanočástic oxidů kovů ve vodě
2L-07	<u>D. Zákatná</u> , D. Honecker, S. Disch	Spatially resolved magnetic disorder in nanoparticles
2L-08	Účast zrušena	
2L-09	P. Hermann	Polyazamakrocykly s fosforovými pendantními rameny jako ligandy pro dvojmocnou měď
2L-10	<u>P. Urbanovský</u> , P. Hermann	Syntéza makrocyclických derivátů aminofosforových kyselin pre koordináciu Ln <sup>3+</sup> iónov
2L-11	<u>L. Pazderová</u> , J. Kotek, P. Lubal, V. Kubíček, P. Hermann	Cyklové chelátory s fosforovými pendantmi pre komplexáciu rádioizotopov medi
2L-12	F. Koucký	Paramagnetické komplexy makrocyclických ligandů jako kontrastní látky pro <sup>19</sup> F MRI
2L-13	<u>Z. Vargová</u> , M. Rendošová, M. Almáši, G. Kuzderová, R. Gyepes, D. Sabolová, P. Olejníková	Komplexy iónov kovov na báze striebra a zinku a ich biologické aplikácie
2L-14	<u>P. Zoufalý</u> , J. Moncol, R. Herchel	Strukturální a magnetické vlastnosti koordinačních sloučenin Fe(II)/Co(II) s 1,3,4-thiadiazoly
2L-15	<u>I. Šalitraš</u>	Magnetic bistability in cobalt(II) and iron(II) complexes
2L-16	<u>B. Brachňaková</u> , I. Šalitraš, J. Moncol, J. Kožíšek	Molecular magnetism of new coordination compounds with pyridyl-benzimidazole ligands
2L-17	<u>B. Drahoš*</u> , R. Herchel, P. Antal	Jednomolekulové magnety založené na komplexech přechodných kovů s koordinačním číslem 7
2L-18	<u>A. Šagátová</u> , J. Orvoš, I. Šalitraš	Ferrous complexes with photoactive pyridil-benzimidazole ligands
2L-19	<u>A. Svítok</u> , Z. Tošner, J. Blahut, P. Hermann	Rotácia fosfonátovej skupiny v komplexoch Ln(III) s makrocyclickými ligandami sledovaná metódou <sup>17</sup> O NMR
2L-20	Účast zrušena	
2L-21	P. Štěpnička	Funkční ferrocenové ligandy
2L-22	<u>F. Horký</u> , J. Schulz, I. Císařová, P. Štěpnička*	Izolovatelné primární fosfinochalkogenidy
2L-23	<u>I. Němec</u> , I. Matulková, I. Císařová, P. Němec	Nové materiály s nelineárními optickými vlastnostmi – anorganické soli guanidinu
2L-24	<u>V. Tyrpekl*</u> , T. Wangle, A. Alemaehu, M. Nižňanský	Příprava a slinování materiálů za asistence elektrického pole
2L-25	<u>D. Valdés</u> , S. Martinková, J. Málek, J. Barták	Crystal growth in (GeSe <sub>2</sub> ) <sub>x</sub> (Sb <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> ) <sub>1-x</sub> materials
2L-26	<u>J. Záchenská</u> , T. Galicová, J. Lokaj, M. Zemanová	3D elektrody na báze niklu pre zero-gap alkalické elektrolyzy vody

**Sekce 2 – Anorganická a materiálová chemie**

## Postery

- 2P-01 O. Bárta, I. Císařová, P. Štěpnička\* Koordinační variabilita donorově nesymetrických fosfinoferrocenových guanidinů
- 2P-02 E. Stehliková, P. Lubal, J. Hodačová Kinetic study of Cu(II) complexes of mono- and bis-tetraazamacrocyclic ligands
- 2P-03 M. Puchoňová, F. Jozefíková, J. Moncol' Structural and spectral properties of benzoatocopper(II) complexes with potential bioactivity
- 2P-04 J. Kubinec, V. Kubiček, P. Lubal, V. Reichová, F. Koucký, P. Hermann Koordinační vlastnosti monoamidů ligandu NOTA
- 2P-05 L. Krešáková, J. Černák, J. Kuchár Příprava a spektrální vlastnosti komplexů niklu s *o*-fenyléndiacetátovým ligandem. Kryštalová struktura kyseliny *o*-fenyléndioctovéj
- 2P-06 J. Kuchár, E. Samol'ová Novel complexes based on copper(II) and manganese(II) with trans-1,8-cyclam derivatives for the study of the magnetocaloric effect
- 2P-07 M. Maďar, V. Kubiček, A. Liška, J. Kotek, J. Ludvík, P. Hermann Redox-active complexes of cyclam ligands with first-row transition metal ions
- 2P-08 P. Henke, J. Dolanský, P. Kubát, J. Mosinger Multifunkční fotoaktivní nanovlákněné membrány
- 2P-09 F. Jozefíková\*, G. Psomas, J. Moncol' Biological activity of novel Cu(II)-fenamate complexes with nicotinamide – interaction with DNA and BSA
- 2P-10 M. Kloda, A. Polívková, E. Skořepová, J. Demel, K. Lang Bisfosfinátové dvojmočných kovů
- 2P-11 S. Kohúteková, I. Císařová, I. Němec Synthesis, vibrational spectroscopic and crystallographic study of *N*-guanidyl-formamide salts as potential nonlinear optical materials
- 2P-12 S. Šterbinská, J. Černák, J. Kuchár, M. Holub, E. Čížmár Koordinačné zlúčeniny niklu(II) s vybranými ligandmi na báze derivátov pyridínu
- 2P-13 M. Zábranský, I. Císařová, P. Štěpnička\* Ferrocenové fosfinosulfonáty s methylenovými spojkami
- 2P-14 M. Navrátil, I. Císařová, A. Alemayehu, K. Škoch, P. Štěpnička\* Syntéza a koordinační vlastnosti ferrocenového *N*-fosfinoamidu
- 2P-15 P. Vosáhlo, M. Franc, I. Císařová, P. Štěpnička\* Isokyanoferrocen a jeho karbenové komplexy
- 2P-16 M. Matíková Malárová, M. Matík, J. Briančin, J. Kuchár, J. Černák Cd-Fe komplexy s dietyléntriámínom ako prekurzory na prípravu oxidov
- 2P-17 D. Bůžek, S. Ondrušová, J. Hynek, P. Kovář, K. Lang, J. Rohlíček, J. Demel Fosfinátové metalloorganické sítě: příprava, charakterizace a sorpce bisfenolu A
- 2P-18 J. Pavlík, I. Nemeč, I. Šalitroš Two novel iron(III) complexes: on the quest to understand the governing factors of spin crossover
- 2P-19 L. Pogány\*, J. Pavlík, M. Mazúr, J. Moncol', I. Šalitroš Miscellaneous magnetic properties in iron(III) complexes with hexadentate schiff base ligands
- 2P-20 Š. Sovová, B. V. Parakhonskiy, M. Pekar, A. Skirtach Instable vaterite microparticles – the effect of temperature on particles size and shape
- 2P-21 *Účast zrušena*
- 2P-22 M. Ábel, J. Záchenská, M. Zemanová Vplyv tvaru substrátu pre zero-gap alkalickú elektrolyzu vody

**Sekce 3 – Ekonomika a řízení chemického průmyslu**

## Přednášky

3L-01	<i><u>I. Souček</u>, M. Špaček</i>	Vývoj chemického průmyslu v ČR a EU
3L-02	<i>J. Klečka*, <u>D. Čámská</u></i>	Analýza vybraných ekonomických efektů substituce práce technikou v podnicích chemie v éře nástupu inovací 4.0
3L-03	<i>D. Strachotová</i>	Indikátory konkurenceschopnosti v chemickém průmyslu
3L-04	<i><u>V. Vlčková</u>, L. Podškubková</i>	Důvody k servitizaci v chemickém průmyslu
3L-05	<i>M. Botek, <u>I. Gros</u>, S. Grosová, O. Kutnohorská, D. Strachotová, J. Rančák</i>	Návrh distribučního systému pneumatik
3L-06	<i>M. Pospíšil*, V. Máca, <u>I. Souček</u></i>	Predikce skladby motorových paliv v ČR v roce 2030
3L-07	<i><u>A. Mittererová*</u>, A. Trášková, I. Moudrá, A. Kernová</i>	Problematika internacionalizace lidských zdrojů ve vědě a výzkumu z pohledu evropské a zahraniční legislativy
3L-08	<i><u>M. Botek</u></i>	Kompetence pracovníků v bio-based ekonomice
3L-09	<i><u>J. Chocholáč</u>, J. Hyršlová, L. Špaček, V. Živec</i>	The chemmultimodal project as a tool to make multimodal transport planning in the chemical industry more efficient

**Sekce 3 – Ekonomika a řízení chemického průmyslu**

## Postery

3P-01	<i><u>J. Vávra</u>, O. Bakeš</i>	Průmysl 4.0 v podnicích chemického průmyslu
3P-02	<i><u>J. Košťálová</u>, O. Táborský</i>	Organizační zajištění řízení vývojových projektů v chemickém podniku
3P-03	<i><u>O. Kutnohorská</u></i>	Ideální chléb z pohledu českých a německých spotřebitelů

**Sekce 4 – Elektrochemie a další oblasti fyzikální chemie**

## Přednášky

4L-01	<i><u>J. Ludvík</u></i>	Singletové štěpení (singlet fission) a elektrochemie
4L-02	<i><u>I. Ivanko*</u>, E. Tomšík</i>	Effect of hydrogen bonding on a value of an open circuit potential of poly-(3,4-ethylenedioxythiophene) as a beneficial mode for energy storage devices
4L-03	<i><u>E. Tomšík*</u>, S. Laishevkina, N. Shevchenko</i>	Electrochemical performance of PEDOT
4L-04	<i><u>R. Oriňáková</u>, R. Gorejová, Z. Orságová Králová, M. Petráková, A. Oriňák</i>	Improvement of corrosion properties of degradable iron-based biomaterials
4L-05	<i><u>J. Hrbáč</u></i>	Modifikace elektrod nanočásticemi generovanými jiskrovými výboji
4L-06	<i><u>L. Koláčná</u>, P. Polák, T. Tobrman, J. Ludvík</i>	Elektrochemické studium redoxních vlastností fosfolů a jejich konjugovaných derivátů
4L-07	<i><u>A. Liška</u>, P. Frühwirt, M. Haas, J. Ludvík, G. Gescheidt-Demner</i>	Elektrochemické studium acylgermanů
4L-08	<i><u>D. Novák</u>, M. Zatloukalová, K. Stolarczyk, J. Vrba, J. Vacek</i>	Cysteaminový test
4L-09	<i><u>M. Šimunková</u>, K. Jomová, P. Lauro, M. Malček, L. Bučinský, M. Valko</i>	Cu(II) ako spínač pro-oxidačnej aktivity polyfenolových zlúčenín
4L-10	<i>D. Dobrovodský, A. Daňhel, M. Fojta</i>	Rozpoznanie štruktúry DNA pomocou elektrochemickej detekcie jej interakcie s G-kvadruplexovým ligandom

**Sekce 4 – Elektrochemie a další oblasti fyzikální chemie**

## Postery

- 4P-01 L. Šimková, K. Lušpai, J. Klíma, J. Ludvík  
Elektrochemická studie derivátů cibalackrotu – potenciálních chromoforů pro singletové štěpení
- 4P-02 M. Hricovíni\*, J. Asher, M. Hricovíni  
Photochemistry of *anti-syn* isomerization around the –N–N= bond
- 4P-03 K. Kulpová\*, M. Jerigová, D. Velič  
Hmotnostá spektrometrie sekundárních iónov: od forenzej analýzy po meteoritické vzorky
- 4P-04 D. Riman, J. Rozsypal, V. Halouzka, J. Hrbáč, D. Jirovský\*  
Využití uhlíkových mikrotuh jako elektrod pro citlivé stanovení vybraných antipsychotických léčiv technikou HPLC-ED
- 4P-05 K. Salvadori, L. Šimková, P. Matějka, P. Cuřínová, J. Ludvík  
Elektrochemické studium substituovaných nosylamidů – prekurzorů pro přípravu nových receptorů aniontů
- 4P-06 M. Šimunková, M. Valko, L. Bučinský, M. Malček\*  
Cu(II) binding in flavonoids: a DFT study
- 4P-07 E. Melniková, M. Gál  
Protein's electrochemical observation: the role of electroactive amino acids
- 4P-08 V. Skoták, K. Sehnal, D. Banáš, M. Staňková, B. Hosnedlová, B. Ruttkay-Nedecký, M. Kepínska, T. Parák, R. Kizek\*  
Využití Brdičkovy reakce pro detekci metalothioneinu v moči
- 4P-09 E. Orłowska, M. Zalibera, P. Rapta, L. Bučinský, M. Malček, V. B. Arion\*  
Octahedral ruthenium-nitrosyl complexes with equatorial 1H-indazole ligands: Insights into the redox chemistry and NO release
- 4P-10 D. Darvasiová, P. Rapta, M. Breza, A. Dobrov, V. B. Arion  
Redox noninnocent behavior of nickel(II), copper(II) and palladium(II) complexes with bis-semicarbazide hexaazamacrocycles
- 4P-11 K. Lušpai\*, J. Klíma, L. Šimková  
Vplyv dynamiky molekúl na EPR spektrá, alebo prečo sa simulácie EPR spektier niekedy nezhodujú s experimentom

**Sekce 5 – Chemické vzdělávání a historie chemie**

## Přednášky

- 5L-01 P. Zachař\*, D. Sýkora  
Století hmotnostní spektrometrie – od izotopů k proteomice
- 5L-02 Účast zrušena
- 5L-03 I. Lorencová  
Jan (Johann) Böhm – chemik a fotograf
- 5L-04 M. Krátký  
Příběh sulfonamidů – zachránců životů: od infekcí přes diabetes po hypertenzi
- 5L-05 H. Čtrnáctová, V. Martínek, E. Stratilová Urválková, P. Šmejkal, M. Teplá, P. Teplý  
Doplňkové pedagogické studium pro učitele chemie – současnost a budoucnost
- 5L-06 P. A. Skřehot, J. Marek, V. Ptáčková, M. Bílek, P. Beneš, M. Rusek, K. Chroustová, Z. Hon, M. Melicharová  
Kritéria a požadavky na bezpečné a didakticky ověřené postupy pro provádění chemických pokusů ve školách a při mimoškolní činnosti
- 5L-07 M. Bílek, K. Chroustová, M. Rusek, P. Skřehot, Z. Hon, M. Melicharová  
Experimentální činnosti a jejich bezpečnost ve všeobecném chemickém vzdělávání pohledem učitelů
- 5L-08 P. Šmejkal, M. Teplá, L. Míka, H. Čtrnáctová  
Další vzdělávání pedagogických pracovníků na PŘF UK jako nástroj zvyšování kvality učitelů chemie
- 5L-09 V. Milanović, M. Bílek  
History of chemistry as part of the pre-service teacher education curriculum
- 5L-10 B. Kamenická, T. Weidlich  
Příprava studijního kurzu „udržitelná chemie“ pro studenty Fakulty chemicko-technologické, Univerzity Pardubice
- 5L-11 J. Pavlík, J. Švorec, P. Segľa  
Modernizácia výučby teórie chemickej väzby v kurze anorganickej chémie na FCHPT STU v Bratislave
- 5L-12 P. Segľa, J. Pavlík, M. Tatarko  
Projekty skvalitnenia výučby anorganickej chémie na vysokých školách: kyseliny a zásady
- 5L-13 P. Pařík  
Pojízdná laboratoř

**Sekce 5 – Chemické vzdělávání a historie chemie**

## Postery

- 5P-01 *M. Harok, D. Kričfaluši, T. Zelenka* Problematika porézních látek jako nadstavbový materiál pro vzdělávání na středních školách
- 5P-02 *M. Harok, K. Trčková, K. Farmačková, M. Dostálková* Jak rozvíjet u žáků badatelské dovednosti?
- 5P-03 *Z. Vargová, M. Almáši, R. Oriňaková, M. Rendošová, R. Serbin, R. Varhač, M. Ganajová, J. Dinajová, P. Chovan, M. Dzura, Š. Bova* Chemical laboratory practices supplemented by the direct participation of experts from practice in the teaching process

**Sekce 6 – Chemie životního prostředí**

## Přednášky

- 6L-01 *J. Jaklová Dyrtrtová\*, M. Jakl* What brings the complex view to triazole fungicides impact
- 6L-02 *M. Jakl, J. Jaklová Dyrtrtová\** Changes in the activities of selected enzymes in soil after the addition
- 6L-03 *I. Kovač, M. Jakl, R. Konášová, J. Jaklová Dyrtrtová\** Triazole fungicides separation using CD-MEKC
- 6L-04 *S. Baluchová, M. Brycht, M. Nedvěd, A. Taylor, S. Sedláková, V. Mortet, K. Schwarzová-Pecková* Enhanced electrochemical performance of structured boron doped diamond electrodes by increasing the number of deposited porous layers
- 6L-05 *L. Novotný, A. Karásková* Kontrola úpravy speciálních vod s využitím měření potenciálu pevné stříbrné amalgámové elektrody

**Sekce 6 – Chemie životního prostředí**

## Postery

- 6P-01 *L. Fašková, D. Pavúková, E. Mališová, L. Štibrányi, J. Híveš* Photochemical degradation of toluene and chlorobenzene
- 6P-02 *J. Híveš, E. Mališová, M. Benkőová, A. Červenková, D. Pavúková, L. Fašková* Odstraňovanie mikrobiálneho znečistenie z povrchových vôd pomocou železanov
- 6P-03 *A. Karásková, L. Novotný\*, J. Ouhřabková* Netradiční způsob uplatnění potenciometrie pro kontrolu technologického čištění speciálních vod
- 6P-04 *E. Alwin, K. Kočí, R. Wojcieszak, M. Zieliński, M. Edelmannová, M. Pietrowski\** The influence of high temperature synthesis on the structure of graphitic carbon nitride and its hydrogen generation ability
- 6P-05 *D. Pavúková, L. Fašková, E. Mališová, L. Štibrányi, J. Híveš* Activated charcoal and ferrates for pharmaceuticals removal
- 6P-06 *K. Komínková, G. Vítková, D. Kahoun, P. Fojtíková, V. Hanuš, J. Tříška, I. Holoubek* Využití vstupních filtrů kontinuálního monitoringu troposférického ozonu ke stanovení PAU
- 6P-07 *T. Navrátil\*, J. Skopalová, M. Chojińska, J. Langmaier, J. Albrecht* Elektrochemická analýza nových syntetických drog na bázi fentanylu
- 6P-08 *M. Urbaniak, E. Mierzejewska, T. Macek* Effects of syringic acid on degradation potential of soil microbiota against MCPA and the condition of soil and plants



**Sekce 7 – Jaderná chemie****Přednášky**

- |       |  |  |
|-------|--|--|
| 7L-01 | <i>P. Bartl*</i> , <i>M. Němec</i> , <i>J. John</i> ,<br><i>J. P. Omtvedt</i> , <i>J. Štursa</i>   | Rychlá kapalinová extrakce homologů seaborgia  |
| 7L-02 | <i>T. Prášek*</i> , <i>M. Němec</i> , <i>P. Steier</i> ,<br><i>M. Kern</i> , <i>M. Honda</i> , <i>K. Hain</i>  | Vývoj fluoridových terčových matric pro stanovení <sup>236</sup> U a dalších aktinoidů metodou AMS |
| 7L-03 | <i>K. Urbanová</i> , <i>D. Seifert</i> , <i>M. Vlk</i> ,<br><i>O. Lebeda</i>   | Nová metoda značení PSMA-11 pomocí <sup>68</sup> Ga v NaHCO <sub>3</sub>                           |
| 7L-04 | <i>V. Havlová*</i> , <i>M. Zuna</i> , <i>T. Rosendorf</i> ,<br><i>E. Galeková</i> , <i>K. Kolomá</i> ,<br><i>F. Jankovský</i> , <i>E. Hofmanová</i>  | Vliv vlastností horninového prostředí na migraci radionuklidů                                      |
| 7L-05 | <i>J. Mizera</i> , <i>V. Suchý</i> , <i>J. Kameník</i> ,<br><i>I. Krausová</i> , <i>V. Strunga</i>   | Geochemická charakterizace kvartérních čínských spraší s využitím metod aktivační analýzy          |
| 7L-06 | <i>V. Strunga</i> , <i>M. Havelcová</i> ,<br><i>J. Lorinčík</i> , <i>K. Sihelská</i> ,<br><i>K. Řezanková</i> , <i>P. Kůs</i> , <i>Do Thi Minh</i> ,<br><i>V. Machovič</i> , <i>M. Holá</i> , <i>V. Havránek</i> ,<br><i>J. Mizera</i> | Radiogenic system and radiation effects of U-decay chains in natural pyrobitumen                   |
| 7L-07 | <i>M. Straka</i> , <i>L. Szatmáry</i> , <i>M. Šuhájek</i>  | Použití grafenové analytické elektrody pro analýzu uranu ve vodných systémech                      |

**Sekce 7 – Jaderná chemie****Postery**

- |       |  |   |
|-------|--|---|
| 7P-01 | <i>M. Daňo*</i> , <i>K. Štamberg</i> ,<br><i>E. Viglašová</i> , <i>M. Galamboš</i>   | Povrchovo-komplexačné modely technecistanu na kompozite biouhlie/montmorillonit – vsádzkové a dynamické sorpčné štúdium                             |
| 7P-02 | <i>J. Kittnerová</i> , <i>B. Drtinová</i> ,<br><i>K. Štamberg</i> , <i>D. Vopálka</i> ,<br><i>G. Deissmann</i> , <i>S. Lange</i> | Sorpce vybraných radionuklidů na cementové materiály  |
| 7P-03 | <i>K. Kočan*</i> , <i>E. Hofmanová</i>   | The assessment of nickel migration in the barrier materials of a deep geological repository   |
| 7P-04 | <i>J. Kameník*</i> , <i>J. Kučera</i> , <i>M. Kuchař</i>   | Optimalizace INAA pro stanovení prvkových příměsí ve vzorcích heroínu a kokainu   |
| 7P-05 | <i>M. Mindová</i> , <i>P. Distler</i> , <i>J. John</i> ,<br><i>D. Baval</i> , <i>B. Grüner</i>                                   | Charakteristika extrakčných vlastností CHALMEX procesu pre separáciu Am(III) a Eu(III)  |
| 7P-06 | <i>J. Šebesta</i> , <i>P. Distler</i> , <i>J. John</i> ,<br><i>D. Baval</i> , <i>B. Grüner</i>                                   | Charakteristika vlastností extrakčních systémů využívajících hydrofilní maskovací činidla při extrakci minoritních aktinoidů a lanthanoidů do TODGA |
| 7P-07 | <i>M. Galamboš</i> , <i>E. Viglašová</i> ,<br><i>J. Šmelková</i> , <i>M. Michalovič</i> ,<br><i>M. Dufala</i>                    | Vyhotené jadrové palivo: právna úprava nakladania v podmienkach Slovenskej republiky  |
| 7P-08 | <i>E. Viglašová</i> , <i>M. Galamboš</i> ,<br><i>M. Daňo</i> , <i>V. Kusumkar</i> , <i>D. Diviš</i>                              | Engineered biochar from agricultural bamboo waste for removal of nitrogen pollutants  |

**Sekce 8 – Organické materiály**

## Přednášky

8L-01	<u>M. Klikar*</u> , K. Rak, Z. Burešová	Organické elektrolyty pro redoxní průtočné baterie
8L-02	<u>M. Fecková</u> , F. Bureš, S. Achelle, Pascal-Le Poul, F. Robin-Le Guen	Deriváty pyrimidinu pro aplikaci v OLED
8L-03	<u>J. Tydlitát*</u> , S. Achelle	Lineární, kvadrupolární a tripodální trifenylaminy: strukturní aspekty
8L-04	<u>L. Marek*</u> , J. Hamusek	Syntéza inhibitorů kinas s využitím Eschenmoserovy reakce
8L-05	<u>J. Charvot</u> , D. Pokorný, R. Zazpe, J. Macák, F. Bureš	Organické selenidy pro depozice atomárních vrstev
8L-06	<u>J. Orvoš</u> , R. Fischer, I. Šalitroš, B. Brachňaková	Synthesis of novel photoisomerisable pyridine ligands for spin-crossover complexes
8L-07	Účast zrušena	
8L-08	<u>E. Pilařová</u> , A. Imramovský, K. Pauk, R. Jorda, V. Kryštof	Syntéza potencionálních inhibitorů proteasomu založených na salicylamidech s aldehydickou nebo vinylsulfonovou funkční skupinou
8L-09	<u>J. Pflöger</u> , Y. R. Panthi, D. Výprachtický	Organic materials for electronic memory devices
8L-10	<u>P. Šimon</u> , J. Kulhánek, J. Zelenka	Syntéza fluorovaných diaminů a jejich využití v přípravě polyimidů
8L-11	<u>F. Bureš</u> , Z. Burešová	Fotoredoxní transformace v organické chemii zprostředkované dikyanpyrazinem

**Sekce 8 – Organické materiály**

## Postery

8P-01	<u>L. Dikošová</u> , R. Fischer	Synthesis of polyhydroxylated pyrrolizidine alkaloids by olefination reactions of isoxazolidine diols
8P-02	<u>J. Fojtášková*</u> , L. Obalová, P. Pánek	Preparation of selected mono- and di-cationic ionic liquids derived from 1-methylimidazole, pyridine, 3-methylpyridine, 4-benzylpyridine and their antimicrobial properties
8P-03	<u>M. Grygarová</u> , Z. Burešová, F. Bureš	Příprava a využití konjugovaných derivátů pyridylaminu
8P-04	<u>M. Chrtková</u> , P. Pařík, F. Bureš	Iontové push-pull deriváty imidazolu
8P-05	<u>M. Marčecová</u> , B. Ferko, P. Jakubec	Denitračné kros-kaplingy nitrostyrénov
8P-06	<u>G. Perglová</u> , M. Fecková, F. Bureš	Push-pull deriváty pyrimidinu a jejich vlastnosti
8P-07	<u>V. Pflöger</u> , M. Krátký, J. Stolaříková, J. Vinšová	Studium antimykobakteriální aktivity halogenovaných derivátů ( <i>E</i> )-2-(2-iso-nikotinoylhydrazinyliden)- <i>N</i> -fenyl-propanamidu
8P-08	<u>D. Pokorný</u> , J. Charvot, R. Zazpe, M. Klikar, J. Macak, F. Bureš	Cyklické silylselenidy: organické sloučeniny selenu jako prekurzory pro depozice atomárních vrstev
8P-09	<u>R. Štadániová</u> , R. Fischer	Synthesis of new isoxazolidinyl epoxides – useful precursors for preparing isoxazolidinyl 1,2,3-triazoles
8P-10	<u>K. Štursová*</u> , M. Klikar, J. Kulhánek	<i>N,N</i> -difenylthiofen-2-amin jako donorní jednotka pro push-pull chromofory
8P-11	Účast zrušena	
8P-12	<u>R. Antal</u> , Z. Brůža, O. Kratochvíl, M. Pour	Syntéza a reaktivita substituovaných [3]dendralénov s vyladenými elektronovými vlastnostmi
8P-13	<u>M. Marčecová</u> , B. Ferko, <u>P. Jakubec</u>	Synthetic chameleon and its transformations

**Sekce 9 – Polymery****Přednášky**

- 9L-01 *P. Sysel* Polyimidové separační membrány
- 9L-02 *P. Štěpánek, J. Pánek, M. Hrubý* Multiresponsivní polymery
- 9L-03 *A. Hašková, Š. Titlová, B. Bashta, J. Sedláček, E. Vrbková, E. Vyskočilová* Porézní hypersesíťované polyacetyleny s pyridinovými a *N*-ethylpyridiniovými segmenty
- 9L-04 *J. Jiřza, I. Fortelný* Kompatibilizace polymerních směsí blokovými kopolymery se zřetelem na asymetrii kopolymery
- 9L-05 *M. Šlouf\*, V. Gajdošová, H. Vlková, P. Němeček, S. Krejčíková, J. Hromádková* Vztah mezi molekulární strukturou, nadmolekulární strukturou a mikromechanickými vlastnostmi polymerů
- 9L-06 *T.-M. Durďáková, Z. Hrdlička, M. Dendisová, M. Švecová, O. Vopička* Botnání a plastifikace polydimethylsiloxanu a poly(trimethylsilyl)propynu v methanolu a dimethylkarbonátu: DMA filmů v prostředí par
- 9L-07 *A. Štuncová, N. Kotov, V. Raus, A. Zhigunov* Dissolution of cellulose, a semi-crystalline polymer
- 9L-08 *M. Mičušík, E. Ovodok, M. Ivanovskaya, S. Poznyak, M. Procházka, A. Stepura, Y. Soyka, M. Omastová* Polymérne kompozity na báze 2-D MXénu a polymérnej matrice
- 9L-09 *A. Stepura, M. Procházka, A. Aniskevich, M. Omastova\** Polymeric nanocomposites with epoxy matrix and 2D nanofillers MXenes
- 9L-10 *J. Brožek* Polyamidy, polyesteramidy a nanomateriály
- 9L-11 *P. Vávrová, J. Neoralová, D. Hřebecká, N. Šipošová, H. Sharai, J. Komárek, J. Brožek, R. Kalousková, L. Malinová* Syntetické materiály v knihovních fondech – představení projektu
- 9L-12 *J. Jurišová, M. Králik, K. Vizárová, V. Danielík, I. Vajová* Degradation and preservation of cellulosic objects of cultural heritage
- 9L-13 *J. Brožek, V. Benešová, L. Malinová, R. Kalousková* Hodnocení stability knižních desek z polyvinylchloridu
- 9L-14 *D. Měřínská, A. Tesaříková* Možnosti využití PVB recyklátu ve směsích s PVC
- 9L-15 *J. Pánek, V. Lobaz, Z. Sedláková, M. Šlouf, M. Lukešová, N. Kotov, M. Konefal, J. Hromádková, M. Hrubý, T. Chmela, P. Krupička* Antikoroziční ochrana konstrukčních dílů z ochuzeného uranu: organické polymery i nízkotající smalty
- 9L-16 *M. Hrubý* Polymerní kontrastní činidla pro zobrazování magnetickou rezonancí
- 9L-17 *L. Malinová, M. Vondráková* Příprava kopolymerů poly(propylenfumarát-co-ε-kaprolakton) pro medicínské aplikace
- 9L-18 *J. Dvořáková, K. Neubauerová, O. Janoušková, V. Proks* Enzyme-mediated injectable poly(amino acid)s based hydrogels modified with biomimetic peptides for cartilage tissue engineering
- 9L-19 *A. Braunová\*, M. Kaňa, J. Kudláčová, M. Šírová, L. Kostka* Polymerní inhibitory vícečetné lékové rezistence pro léčbu pevných nádorů
- 9L-20 *J. Kousalová, L. Sivák, M. Kovář, T. Etrych* Biodegradovatelné polymerní konjugáty s inhibitory MMP pro cílenou inhibici metastatických procesů
- 9L-21 *A. Libánská, E. Randárová, F. Lager, G. Renault, D. Scherman, T. Etrych* Polymerní nanoléčiva s pH-sensitivním uvolňováním dexamethasonu pro lokalizovanou léčbu revmatoidní artritidy
- 9L-22 *V. Proks\*, J. Jaroš, I. Kotelčnikov, P. Šálek, J. Lavický, J. Pospíšil* Peptide-modified polymer surfaces for human embryonal stem cells cultivation
- 9L-23 *V. Sincari\*, E. Jäger, A. Jäger, M. Hrubý* Reactive oxygen species (ROS)-responsive polymersomes with site-specific chemotherapeutic delivery into ROS-rich tumor *in vivo*

**Sekce 9 – Polymery**

## Postery

- 9P-01 *L. Havelková, B. Bashta, J. Sedláček* Porézní organické polymery s karbaldehydovými skupinami a laditelnou texturou
- 9P-02 *K. Hložeková, A. Kvasničáková, J. Kruželák, M. Gořalík* Reologické vlastnosti elastomérnych kompozitných materiálov
- 9P-03 *P. Jurkovič, I. Novák\*, I. Chodák, J. Sedláčik, J. Matyašovský* Investigation of radio-frequency plasma modified oak wood
- 9P-04 *S. Krkoška, P. Sysel, A. Edr, T. Strašák* Aniontové dendrimery s karbosilanovým jádrem a polyamidoaminovou vnější vrstvou
- 9P-05 *J. Kruželák, A. Kvasničáková, R. Dosoudil, I. Hudec* Kombinované sírne a peroxidové vulkanizačné systémy aplikované pri sieťovaní elastomérnych materiálov
- 9P-06 *A. Kvasničáková, J. Kruželák, J. Vilčáková, I. Hudec, P. Macúrik* Polymérne kompozity schopné tieniť elektromagnetické žiarenie
- 9P-07 *H. Macková, M. Vetrík, M. Dušková-Smrčková, D. Horák* Syntéza thiomérů pro přípravu degradovatelných hydrogelů
- 9P-08 *J. Matyašovský\*, P. Jurkovič, P. Duchovič, I. Novák* Keratin – natural polymer for reducing formaldehyde emissions from wood-based panels
- 9P-09 *I. Novák\*, J. Pavlinec, I. Chodák, J. Rychlý, A. Kleinová, Z. Nógellová, J. Preto, V. Vanko* Investigation of hot-melt adhesives based on selected metallocene copolymers
- 9P-10 *I. Novák\*, A. Popelka, I. Chodák, M. Lehocký, J. Matyašovský, P. Jurkovič* Antibacterial treatment of polyethylene with halogen compounds and low-temperature plasma
- 9P-11 *Y. Soyka, M. Prochazka, M. Micusik, D. Zeleniakiene, M. Omastova\** Properties of MXene layers
- 9P-12 *H. Studenovská\*, J. Nováčková, L. Machová, O. Janoušková, D. Rais, V. Proks* Comparison of nanofibrous membranes with commercial culturing membranes for retinal tissue engineering
- 9P-13 *J. Uříčář, J. Minář, M. Raihane, J. Brožek* Nanokompozity na bázi funkcionalizovaného oxidu železitého a poly(2,2,2-trifluorethyl methakrylátu)
- 9P-14 *V. Neubertová, V. Švorčík, Z. Kolská* Modifikace polymerů UV zářením a následným chemickým roubováním
- 9P-15 *G. Zain, J. Mosnáček* Antimicrobial cotton fabric via surface-initiated photoATRP of (2-dimethylamino)ethyl methacrylate
- 9P-16 *K. Valová\*, E. B. Montufar, K. Lysáková, P. Poláček, J. Petruš, M. P. Ginebra, L. Čelko, J. Kaiser, L. Vojtová* Využití biodegradabilního kopolymeru jako pojiva pro 3D tisk kompozitních kostních náhrad
- 9P-17 *K. Lysáková, N. Ptáčková, M. Zámečníková, L. Vojtová* Řízené uvolňování léčbu podporujícího proteinu z termocitlivého hydrogelového nosiče

**Sekce 10 – Porézní materiály**

## Přednášky

- 10L-01 *M. Dudák* Charakterizace porézních materiálů adsorpcí plynů a aktuální doporučené postupy
- 10L-02 *T. Zelenka* Charakterizace porézních materiálů fyzisorpcí plynů – příklady chybné interpretace výsledků
- 10L-03 *M. Almáši, V. Zelenák, N. Király, D. Capková, S. Bourrelly, A. Sharma, M. Opanasenko, A. Zeleňáková, A. Straková Fedorková* A family of porous MOF-76 materials and their applications
- 10L-04 *D. Princík, M. Almáši, V. Zelenák* Štúdium lítiovo-iónovej výmeny v MOF pre zvýšenie adsorpčnej kapacity divodíka

10L-05	<i>N. Király, N. Lenártová, V. Zelenák, A. Hovan, M. Almáši, R. Gyepes</i>	Séria 3-D pórovitých zlúčenín MPF s obsahom H <sub>2</sub> TPPS ligandu a iónov lantanoidov
10L-06	<i>J. Sedláček, B. Bashta, A. Hašková, L. Havelková, D. Šorm</i>	Porézní organické polymery typu hypersesitovaných polyacetylenů
10L-07	<i>D. Šorm, L. Havelková, B. Bashta, J. Sedláček, L. Sekerová, E. Vyskočilová</i>	Hypersesitované porézní polyacetyleny s koordinovanými ionty Cu <sup>2+</sup>
10L-08	<i>J. Hajzler, V. Bílek, P. Hrubý, L. Topolář</i>	Vliv aktivátoru na vývoj porozity alkalicky aktivované strusky během její degradace
10L-09	<i>M. Vaštyl*, Z. Jankovská, P. Leštinský, L. Matějová</i>	Pyrolysis of different waste raw materials in the microwave field
10L-10	<i>M. Dudák</i>	Optimalizace transportních vlastností porézní struktury katalytické vrstvy pomocí 3D počítačové rekonstrukce

## Sekce 10 – Porézní materiály

### Postery

10P-01	<i>G. Cruz, D. Mondal, J. Rimaycuna, K. Soukup, M. Gomez, J. Solis, J. Lang</i>	Adsorption on zinc oxide impregnated biochar
--------	---	--

## Sekce 11 – Průmyslová chemie

### Přednášky

11L-01	<i>K. Wichterle</i>	Co dělat s CO <sub>2</sub>
11L-02	<i>K. Bouzek, M. Paidar</i>	Perspektivy výroby vodíku elektrolýzou vody
11L-03	<i>J. Šimek</i>	Perspektivy a synergie výroby syntézního plynu a Fischer-Tropschovy syntézy
11L-04	<i>M. Pospíšil, I. Souček, V. Máca, J. Macek, J. Mikulec, M. Kubů</i>	Možnosti využití obnovitelných zdrojů energie v dopravě do roku 2030 z pohledu chemického průmyslu
11L-05	<i>H. Kittel</i>	Licensoři a technologické licence pro čistou mobilitu a jejich možné uplatnění v České republice
11L-06	<i>M. Slezáčková, J. Mikulec, E. Hájeková, A. Peller, J. Blaško</i>	Parciální hydrogenácia laničnickového oleja na katalyzátoroch na báze medi
11L-07	<i>J. Trejbal, D. Lisý, D. Bek</i>	Návrh procesu mokré oxidace
11L-08	<i>V. Brožek, L. Mastný, O. Živný, R. Mušálek, J. Medřický</i>	Materiálové problémy plazmochemických reaktorů na likvidaci freonů
11L-09	<i>E. Mališová, M. Benkšová, J. Híveš, A. Červenková, D. Pavůvková, L. Fašková</i>	Možnosti zvyšovania stability práškoveho železanu draselného pomocou prírodných zeolitov
11L-10	<i>M. Benkšová, E. Mališová, J. Híveš, A. Červenková, D. Pavůvková, L. Fašková</i>	Aplikácia enkapsulovaných ekologických oxidačných činidiel železanov do odpadových vôd
11L-11	<i>P. Patáková*, D. Basařová<sup>a</sup>, M. Braga, B. Branská, P. Kaštánek, J. Kolek, K. Melzoch</i>	Valorizace vedlejších živočišných produktů jako substrátu pro psí probiotika
11L-12	<i>B. Grycová, L. Obalová</i>	Velká výzkumná infrastruktura ENREGAT má za sebou 1. rok činnosti

**Sekce 11 – Průmyslová chemie**

## Postery

- 11P-01 *T. Weidlich, B. Kamenická, V. Nýdrle* Využití reduktivní defluorace pro dekontaminaci technologických vod z výroby polyfluorovaných sloučenin
- 11P-02 *R. Valeš\*, A. Kukučková, B. Dvořák, J. Krupka* Studium nízkoteplotní homogenní oxidace dicyklohexylaminu vzduchem

**Sekce 12 – Termická analýza**

## Přednášky

- 12L-01 *B. Taraba* Můj život s kalorimetrem
- 12L-02 *B. Komárková, M. Motlochová, V. Slovák, P. Ecorchard, P. Bezdička, D. Bovol, J. Šubrt* Vliv syntézní procedury a teploty žhání na vlastnosti TiO<sub>2</sub>
- 12L-03 *O. Zobač, A. Kroupa, T.-Y. Huang, J. Vřešťál, A. Zemanová, S.-W. Chen* Experimentální a teoretický popis soustavy Pb-Se-Sn
- 12L-04 *G. Zelenková, V. Slovák, T. Zelenka* Termoporometrie: vliv povrchové chemie uhlíku na množství nemrznoucí vody v pórech
- 12L-05 *P. Šimon, Z. Cibulková, T. Dubaj* Activation energy in thermoanalytical kinetics
- 12L-06 *V. Slovák* Kinetika z termoanalytických dat nelineární regresí
- 12L-07 *E. Kinnertová, V. Slovák, P. Šrámková* Kinetika polykondenzace resorcinolu a formaldehydu pomocí DSC II
- 12L-08 *T. Dubaj, M. Veverka, P. Šimon* A DSC study of binary polysaccharide gels for *S. aureus* bacteriophage delivery

**Sekce 12 – Termická analýza**

## Postery

- 12P-01 *L. Kořená, V. Slovák* Vliv porozity na kinetiku povrchové oxidace uhlíku
- 12P-02 *Z. Cibulková, A. Vykýdalová, P. Šimon, T. Dubaj* A new concept for lifetime prediction of cable insulations used in nuclear power plants

**Sekce 13 – Toxikologie a lékařská chemie**

## Přednášky

- 13L-01 *S. Zacharov, I. Žák, T. Navrátil* Intoxikace methanolem: markery prognózy a trvalých následků
- 13L-02 *D. Sýkora, J. Jindřich, S. Zacharov* Role formaldehydu při akutní otravě methanolem
- 13L-03 *I. Žák\*, S. Zacharov* Proteomické biomarkery v diagnostice a léčbě akutní otravy methanolem: prognóza a prevence nepříznivého výsledku
- 13L-04 *Účast zrušena*

**Sekce 13 – Toxikologie a lékařská chemie**

## Postery

- |        |   |  |
|--------|---|--|
| 13P-01 | <u>Š. Vlčková*</u> , D. Pelclová,<br>S. Zacharov, T. Navrátil   | Suicidální intoxikace thalliem   |
| 13P-02 | <u>Š. Vlčková*</u> , D. Pelclová,<br>S. Zacharov, T. Navrátil   | Suicidální pokus přípravkem na ochranu rostlin obsahujícím měď   |
| 13P-03 | <u>Š. Vlčková*</u> , D. Pelclová,<br>S. Zacharov, T. Navrátil   | Kazuistiky otrav těžkými kovy na základě analýz laboratoře průmyslové toxikologie kliniky pracovního lékařství |
| 13P-04 | <u>L. Lischková*</u> , Š. Vlčková,<br>V. Kolesníková, D. Pelclová,<br>Z. Fenclová, Š. Dvořáčková,<br>A. Popov, A. Michalcová, I. Marek,<br>P. Mikuška, V. Ždimal, M. Koštejn,<br>J. Ondráček, J. Schwarz, S. Zacharov | Průkaz nanočástic v biologických vzorcích pracovníků s nanomateriály   |

**Sekce 14 – Biochemie**

## Přednášky

- |        |  |   |
|--------|--|---|
| 14L-01 | <u>Z. Prokop</u> , S. Stavrakis,<br>V. Dockalova, D. Hess, M. Slanska,<br>G. P. Pinto, E. M. Sánchez-<br>Carnerero, E. Palao, A. Kunka,<br>S. Mazurenko, D. Bednar, P. Klan,<br>A. Demello, J. Damborsky | New enzymology kinetics and microfluidics   |
| 14L-02 | <u>M. Pastucha*</u> , Z. Farka, P. Šebej,<br>A. Hlaváček, P. Skládal   | Near-infrared luminescent labels for immunochemical assays and imaging                                      |
| 14L-03 | <u>K. Schwarzová</u> , K. Jelšíková,<br>M. Zelenský, L. Benešová, J. Veselý,<br>J. Skopalová, J. Klouda  | Analogie elektrochemického chování steroidů v závislosti na struktuře steroidního skeletu                   |
| 14L-04 | <u>M. Škrabišová*</u> , N. Dietz, S. Zeng,<br>T. Joshi, K. D. Bilyeu   | Improving the power of gwas for gene discovery through reverse gwas approach                                |
| 14L-05 | M. Petr, M. Adámik, R. Helma,<br>Z. Soldánová, I. Kejnovská,<br>D. Renčiuk, M. Vorlíčková, M. Fojta,<br><u>M. Brázdová</u>   | G-kvadruplexy jako regulační motivy v biologii standardního a mutantního proteinu p53                       |
| 14L-06 | <u>M. Fojta</u> , L. Havran, Z. Soldánová,<br>H. Pivoňková, M. Outlá,<br>M. Hermanová, V. Dorčák, J. Špaček,<br>S. Hasoň, A. Daňhel, V. Ostatná  | Nové studie odhalují nové souvislosti mezi strukturou nukleových kyselin a jejich elektrochemickým chováním |

**Sekce 14 – Biochemie**

## Postery

- |        |   |   |
|--------|---|---|
| 14P-01 | <u>Z. Dostál</u> , J. Buchtíková,<br>M. Modrianský  | Vliv transfekce miR-29b na cytotoxicitu etoposidu   |
| 14P-02 | <u>M. Petr</u> , M. Adámik, R. Helma,<br>V. Alexová, D. Renčiuk, I. Kejnovská,<br>M. Vorlíčková, M. Fojta,<br>M. Brázdová | Binding of p53 protein to G-quadruplexes: influence of G-quadruplex ligands   |
| 14P-03 | <u>R. Helma*</u> , M. Petr, P. Bažantová,<br>M. Adámik, D. Renčiuk,<br>Z. Soldánová, M. Fojta, M. Brázdová                | p53 preferential binding to non-B DNA structures formed by the pyrimidine-rich strands of GAA.TTC trinucleotide repeats associated with friedreich's ataxia |

- 14P-04 M. Adámik, B. Krsková, M. Petr,  
T. Pavlicová, Z. Dvořáková,  
D. Renčiuk, M. Fojta, M. Brázdová  
Interakcia p53 a SP1 s DNA G-quadruplexmi modulovaná pH
- 14P-05 Z. Soldánová, L. Havran,  
P. Havranová, H. Pivoňková,  
M. Outlá, A. Daňhel, M. Brázdová,  
M. Fojta  
Oligonukleotidy obsahující G<sub>n</sub> bloky: tvorba guaninových kvadruplexů  
versus voltamerické chování
- 14P-06 J. Viktorová, K. Řehořová,  
S. Dobiasová, T. Macek  
Rostliny rezistentní ke stresu a toxicita
- 14P-07 S. Dobiasová, D. Kučerová,  
K. Řehořová, K. Káňová,  
J. Viktorová, V. Křen, T. Macek  
Silybínové flavonolignany ako modulátory mnohonásobnej liekovej  
rezistencie
- 14P-08 B. Křížkovská, R. Kumar,  
K. Řehořová, J. Viktorová,  
J. Lipov  
Bioprospekce dostupných druhů rostlinného rodu *Selaginella*
- 14P-09 D. Kučerová, S. Dobiasová,  
K. Řehořová, M. Hurtová,  
J. Viktorová, V. Křen, T. Macek  
Imunomodulačná aktivita silymarínových flavonolignanov



---

**AUTORSKÝ REJSTŘÍK**

---

- Ábel M. 2P-22  
Adamec S. 2L-03  
Adamec Š. 1P-24  
Adámik M. 14L-05, 14P-02, 14P-03, 14P-04  
Aguedo J. 1P-04  
Achelle S. 8L-02, 8L-03  
Albrecht J. 6P-07  
Alemachu A. 2L-24  
Alemayehu A. 2P-14  
Alexová V. 14P-02  
Aliiev T. 1P-03  
Almáši M. 2L-13, 5P-03, 10L-03, 10L-04, 10L-05  
Alwin E. 6P-04  
Aniskevich A. 9L-09  
Annušová A. 2L-04  
Antal P. 2L-17  
Antal R. 8P-12  
Argentova V. 1P-03  
Arion V. B. 4P-09, 4P-10  
Armstrong D. W. 1P-10  
Arnoštová J. 1L-07  
Arnoštová L. 1L-07  
Asher J. 4P-02
- Bakeš O. 3P-01  
Baluchová S. 6L-04  
Banáš D. 1P-09, 4P-08  
Baráth P. 1L-12, 1P-03, 1P-06  
Barek J. 1P-01, 1P-12  
Baron D. 1L-01, 1P-08  
Bárta O. 2P-01  
Barták J. 2L-25  
Barták P. 1P-23  
Bartl P. 7L-01  
Basařová D. 11L-11  
Bashta B. 9L-03, 9P-01, 10L-06, 10L-07  
Bavol D. 7P-05, 7P-06, 12L-02  
Bažantová P. 14P-03  
Bednar D. 14L-01  
Bek D. 11L-07  
Beneš P. 5L-06  
Benešová L. 1P-22, 14L-03  
Benešová V. 9L-13  
Benkšová M. 6P-02, 11L-09, 11L-10  
Bertók T. PL-03  
Bezdička P. 12L-02  
Bílek M. 5L-06, 5L-07, 5L-09  
Bílek V. 10L-08  
Bilyeu K. D. 14L-04  
Bláhová E. 1P-22  
Blahut J. 2L-19  
Blaško J. 11L-06  
Blšáková A. PL-03, 1P-05, 1P-07  
Bodík M. 2L-04  
Botek M. 3L-05, 3L-08
- Bourrelly S. 10L-03  
Bouzek K. 11L-02  
Bova Š. 5P-03  
Braga M. 11L-11  
Brachňáková B. 2L-16, 8L-06  
Branská B. 11L-11  
Braunová A. 9L-19  
Brázda P. 2L-02  
Brázdová M. 14L-05, 14P-02, 14P-03, 14P-04, 14P-05  
Breza M. 4P-10  
Briančin J. 2P-16  
Brožek J. 9L-10, 9L-11, 9L-13, 9P-13  
Brožek V. 11L-08  
Brůža Z. 8P-12  
Brycht M. 6L-04  
Bučinský L. 4L-09, 4P-06, 4P-09  
Bugárová N. 2L-04  
Buchčíková J. 14P-01  
Bureš F. 8L-02, 8L-05, 8L-11, 8P-03, 8P-04, 8P-06, 8P-08  
Burešová Z. 8L-01, 8L-11, 8P-03  
Bůžek D. 2L-03, 2P-17
- Capková D. 10L-03  
Cibulková Z. 12L-05, 12P-02  
Císařová I. 2L-22, 2L-23, 2P-01, 2P-11, 2P-13, 2P-14, 2P-15  
Cruz G. 10P-01  
Cuřínová P. 4P-05
- Čabala R. 1L-06  
Čámská D. 3L-02  
Čechová L. 1P-19  
Čelko L. 9P-16  
Černák J. 2P-05, 2P-12, 2P-16  
Červenková A. 11L-09, 11L-10, 6P-02  
Čerovský V. 1L-02  
Čížmár E. 2P-12  
Čtrnáctová H. 5L-05, 5L-08
- Damborsky J. 14L-01  
Daňhel A. 4L-10, 14L-06, 14P-05  
Danielik V. 9L-12  
Daňo M. 7P-01, 7P-08  
Darvasiová D. 4P-10  
Degano I. 1L-06  
Deissmann G. 7P-02  
Demel J. 2L-02, 2L-03, 2P-10, 2P-17  
Demello A. 14L-01  
Dendisová M. 9L-06  
Dietz N. 14L-04  
Dikošová L. 8P-01  
Dinajová J. 5P-03  
Disch S. 2L-07  
Distler P. 7P-05, 7P-06  
Diviš D. 7P-08
- Do Thi Minh 7L-06  
Dobiasová S. 14P-06, 14P-07, 14P-09  
Dobrov A. 4P-10  
Dobrovodský D. 4L-10  
Dockalova V. 14L-01  
Dolanský J. 2P-08  
Dolgikh D. 1P-03  
Dorčák V. 14L-06  
Dorchei F. 9P-16  
Dosoudil R. 9P-05  
Dostál Z. 14P-01  
Dostalíková M. 5P-02  
Drahoš B. 2L-17  
Drašar P. PL-08  
Drexler M. 1L-11  
Drtinová B. 7P-02  
Dubaj T. 12L-05, 12L-08, 12P-02  
Dudák M. 10L-01, 10L-10  
Dufala M. 7P-07  
Duchovič P. 9P-08  
Durdáková T.-M. 9L-06  
Dušková-Smrčková M. 9P-07  
Dvořáčková Š. 13P-04  
Dvořák B. 11P-02  
Dvořáčková J. 9L-18  
Dvořáčková Z. 14P-04  
Dzura M. 5P-03
- Ecorchard P. 12L-02  
Edelmannová M. 6P-04  
Edr A. 9P-04  
Etrych T. 9L-19, 9L-20, 9L-21
- Farka Z. 14L-02  
Farmačková K. 5P-02  
Fašková L 11L-09, 11L-10, 6P-01, 6P-02, 6P-05  
Fecková M. 8L-02, 8P-06  
Fenclová Z. 13P-04  
Ferko B. 8P-05, 8P-13  
Fischer R. 8L-06, 8P-01, 8P-09  
Fojta M. 4L-10, 14L-05, 14L-06, 14P-02, 14P-03, 14P-04, 14P-05  
Fojtášková J. 8P-02  
Fojtíková P. 6P-06  
Folprechtová D. 1P-10  
Fortelný I. 9L-04  
Franc M. 2P-15  
Frühwirt P. 4L-07
- Gajdošová V. PL-03, 1P-14, 9L-05  
Gál M. 4P-07  
Galamboš M. 7P-01, 7P-07, 7P-08  
Galeková E. 7L-04  
Galicová T. 2L-26  
Ganajová M. 5P-03  
Gescheidt-Demner G. 4L-07

- Gilar M. 1P-13  
 Ginebra M. P. 9P-16  
 Gomez M. 10P-01  
 Gorejová R. 4L-04  
 Gořalík M. 9P-02  
 Gros I. 3L-05  
 Grosová S. 3L-05  
 Grüner B. 7P-05, 7P-06  
 Grycová B. 11L-12  
 Grygarová M. 8P-03  
 Gyepes R. 2L-13, 10L-05
- Haas M. 4L-07  
 Habanová N. 1L-05  
 Hain K. 7L-02  
 Hájeková E. 11L-06  
 Hajzler J. 10L-08  
 Halko R. 1L-08  
 Halouzka V. 4P-04  
 Hampl A. 9L-22  
 Hanusek J. 8L-04  
 Hanuš V. 6P-06  
 Harok M. 5P-01, 5P-02  
 Hasoň S. 14L-06  
 Hassanpour S. 1L-01  
 Hašková A. 9L-03, 10L-06  
 Havelcová M. 7L-06  
 Havelková L. 9P-01, 10L-06, 10L-07  
 Havlová V. 7L-04  
 Havran L. 14L-06, 14P-05  
 Havránek V. 7L-06  
 Havranová P. 14P-05  
 Helma R. 14L-05, 14P-02, 14P-03  
 Henke P. 2P-08  
 Herchel R. 2L-14, 2L-17  
 Hermann P. 2L-09, 2L-10, 2L-11, 2L-19, 2P-04, 2P-07  
 Hermanová M. 14L-06  
 Hess D. 14L-01  
 Híreš M. PL-03  
 Híveš J. 6P-01, 6P-02, 6P-05, 11L-09, 11L-10  
 Hlaváček A. 14L-02  
 Hložeková K. 9P-02  
 Hodačová J. 2P-02  
 Hofmanová E. 7L-04, 7P-03  
 Holá M. 7L-06  
 Holoubek I. 6P-06  
 Holub M. 2P-12  
 Hon Z. 5L-06, 5L-07  
 Honda M. 7L-02  
 Honecker D. 2L-07  
 Horák D. 9P-07  
 Horký F. 2L-22  
 Hosnedlová B. 1P-09, 4P-08  
 Hovan A. 10L-05  
 Hrbáč J. 4L-05, 4P-04  
 Hrdlička V. 1P-01, 1P-12  
 Hrdlička Z. 9L-06  
 Hricovíni M. 4P-02  
 Hromádková J. 9L-05, 9L-15  
 Hrončeková Š. PL-03
- Hrubý M. 9L-02, 9L-15, 9L-16, 9L-23  
 Hrubý P. 10L-08  
 Hřebecká D. 9L-11  
 Huang T.-Y. 12L-03  
 Hudec I. 9P-05, 9P-06  
 Hurtová M. 14P-09  
 Hynek J. 2L-02, 2P-17  
 Hyršlová J. 3L-09
- Charvot J. 8L-05, 8P-08  
 Chen S.-W. 12L-03  
 Chmela T. 9L-15  
 Chodák I. 9P-03, 9P-09, 9P-10  
 Chocholáč J. 3L-09  
 Choińska M. 1P-12, 6P-07  
 Chovan P. 5P-03  
 Chroustová K. 5L-06, 5L-07  
 Chrtková M. 8P-04
- Imramovský A. 8L-08  
 Ivanko I. 4L-02  
 Ivanovskaya M. 9L-08
- Jakl M. 6L-01, 6L-02, 6L-03  
 Jaklová Dytřtová J. 6L-01, 6L-02, 6L-03  
 Jakubec P. 8P-05, 8P-13  
 Jané E. PL-03  
 Janeba Z. 1P-19  
 Jankovská I. 1L-07  
 Jankovská Z. 10L-09  
 Jankovský F. 7L-04  
 Jankovský O. 2L-06  
 Janoušková O. 9L-18, 9P-12  
 Jaroš J. 9L-22  
 Jäger A. 9L-23  
 Jäger E. 9L-23  
 Jelšíková K. 14L-03  
 Jerga R. 1P-23  
 Jerigová M. 4P-03  
 Jindřich J. 13L-02  
 Jiráček J. 1P-18  
 Jirovský D. 4P-04  
 John J. 7L-01, 7P-05, 7P-06  
 Jomová K. 4L-09  
 Jorda R. 8L-08  
 Joshi T. 14L-04  
 Jozefíková F. 2P-03, 2P-09  
 Jurišová J. 9L-12  
 Jurkovič P. 9P-03, 9P-08, 9P-10  
 Jůza J. 9L-04
- Kadlecová Z. 1L-03, 1P-13  
 Kahoun D. 6P-06  
 Kaiser J. 9P-16  
 Kajanová I. 2L-04  
 Kalíková K. 1L-03, 1P-10, 1P-13  
 Kalousková R. 9L-11, 9L-13  
 Kamenická B. 5L-10, 11P-01  
 Kameník J. 7L-05, 7P-04  
 Kaňa M. 9L-19  
 Káňová K. 14P-07
- Karásková A. 6L-05, 6P-03  
 Kasák P. 1P-14  
 Kašička V. 1L-02, 1P-16, 1P-18, 1P-19  
 Kaštánek P. 11L-11  
 Katrlík J. 1L-12, 1L-13, 1P-03, 1P-06  
 Katrlíková E. 1P-06  
 Kavan L. PL-02  
 Kejnovská I. 14L-05, 14P-02  
 Kepinska M. 4P-08  
 Kern M. 7L-02  
 Kernová A. 3L-07  
 Kianičková K. 1L-12, 1L-13, 1P-06  
 Kim S. 1P-06  
 Kinnertová E. 12L-07  
 Kiráci K. 2L-01  
 Király N. 10L-03, 10L-05  
 Kittel H. 11L-05  
 Kittnerová J. 7P-02  
 Kizek R. 1P-09, 4P-08  
 Klan P. 14L-01  
 Klečka J. 3L-02  
 Kleinová A. 9P-09  
 Klikar M. 8L-01, 8P-08, 8P-10  
 Klíma J. 4P-01, 4P-11  
 Kloda M. 2P-10  
 Klouda J. 1P-22, 14L-03  
 Kočan K. 7P-03  
 Kočí K. 6P-04  
 Kohúteková S. 2P-11  
 Koláčná L. 4L-06  
 Kolek J. 11L-11  
 Kolesníková V. 13P-04  
 Kolomá K. 7L-04  
 Kolská Z. 9P-14  
 Komárek J. 9L-11  
 Komárková B. 12L-02  
 Komínková K. 6P-06  
 Konášová R. 6L-03  
 Konefař M. 9L-15  
 Kořená L. 12P-01  
 Kostka L. 9L-19  
 Košťálová J. 3P-02  
 Koštejn M. 13P-04  
 Kotek J. 2L-11, 2P-07  
 Kotelnikov I. 9L-22  
 Kotov N. 9L-07, 9L-15  
 Kotrlý M. PL-04  
 Koucký F. 2L-12, 2P-04  
 Kousalová J. 9L-20  
 Kovač I. 6L-03  
 Koval D. 1P-16  
 Kovář M. 9L-20  
 Kovář P. 2P-17  
 Kozlík P. 1L-03  
 Kožíšek J. 2L-16  
 Králik M. 9L-12  
 Krátký M. 5L-04, 8P-07  
 Kratochvíl O. 8P-12  
 Krausová I. 7L-05  
 Krejčíková S. 9L-05  
 Krešáková L. 2P-05  
 Kričfaluši D. 5P-01

- Kriegerová K. 1L-08  
 Krkoška S. 9P-04  
 Kroupa A. 12L-03  
 Krsková B. 14P-04  
 Krupička P. 9L-15  
 Krupka J. 11P-02  
 Kruželák J. 9P-02, 9P-05, 9P-06  
 Kryštof V. 8L-08  
 Krzyžánková M. 1P-09  
 Křen V. 14P-07, 14P-09  
 Křížkovská B. 14P-08  
 Kubát P. 2P-08  
 Kubíček V. 2L-11, 2P-04, 2P-07  
 Kubinec J. 2P-04  
 Kubů M. 11L-04  
 Kučera J. 7P-04  
 Kučerová D. 14P-07, 14P-09  
 Kudláčková J. 9L-19  
 Kuchár J. 2P-05, 2P-06, 2P-12, 2P-16  
 Kuchař M. 7P-04  
 Kukučková A. 11P-02  
 Kulhánek J. 8L-10, 8P-10  
 Kulpová K. 4P-03  
 Kumar R. 14P-08  
 Kundalia P. 1L-12, 1P-06  
 Kundalia P. H. 1L-13  
 Kunka A. 14L-01  
 Kůs P. 7L-06  
 Kusumkar V. 7P-08  
 Kutnohroská O. 3L-05, 3P-03  
 Kuzderová G. 2L-13  
 Kvasničáková A. 9P-02, 9P-05, 9P-06  
 Květoň F. PL-03, 1P-05, 1P-07
- Labudová M. 2L-04  
 Lager F. 9L-21  
 Laishevskina S. 4L-03  
 Lang J. 10P-01  
 Lang K. 2L-01, 2L-02, 2L-03, 2P-10, 2P-17  
 Lange S. 7P-02  
 Langmaier J. 6P-07  
 Lauro P. 4L-09  
 Lavický J. 9L-22  
 Lebeda O. 7L-03  
 Lehocký M. 9P-10  
 Leitner J. 2L-06  
 Lenártová N. 10L-05  
 Leštinský P. 10L-09  
 Libánská A. 9L-21  
 Lipov J. 14P-08  
 Lischková L. 13P-04  
 Lisý D. 11L-07  
 Liška A. 2P-07, 4L-07  
 Lobaz V. 9L-15  
 Lokaj J. 2L-26  
 Lorencová I. 5L-03  
 Lorencová L. PL-03, 1P-02, 1P-05, 1P-14  
 Lorinčík J. 7L-06  
 Lubal P. 1P-17, 2L-11, 2P-02, 2P-04  
 Ludvík J. 2P-07, 4L-01, 4L-06, 4L-07, 4P-01, 4P-05
- Lukešová M. 9L-15  
 Lušpai K. 4P-01, 4P-11  
 Lysáková K. 9P-16, 9P-17
- Máca V. 3L-06, 11L-04  
 Macák J. 8L-05, 8P-08  
 Macek J. 11L-04  
 Macek T. 6P-08, 14P-06, 14P-07, 14P-09  
 Macková H. 9P-07  
 Macúrik P. 9P-06  
 Maďar M. 2P-07  
 Machová L. 9P-12  
 Machovič V. 7L-06  
 Malček M. 4L-09, 4P-06, 4P-09  
 Málek J. 2L-25  
 Malinová L. 9L-11, 9L-13, 9L-17  
 Mališová E. 6P-01, 6P-02, 6P-05, 11L-09, 11L-10  
 Marčeková M. 8P-05, 8P-13  
 Marek I. 13P-04  
 Marek J. 5L-06  
 Marek L. 8L-04  
 Martínek V. 5L-05  
 Martinková S. 2L-25  
 Maříková T. 1P-25  
 Mastný L. 11L-08  
 Matějka P. 4P-05  
 Matějová L. 10L-09  
 Matík M. 2P-16  
 Matiková Mařarová M. 2P-16  
 Matoušek D. 1L-04  
 Matulková I. 2L-23  
 Matyašovský J. 9P-03, 9P-08, 9P-10  
 Mazúr M. 2P-19  
 Mazurenko S. 14L-01  
 Medřický J. 11L-08  
 Melicharová M. 5L-06, 5L-07  
 Melníková E. 4P-07  
 Melzoch K. 11L-11  
 Měřínská D. 9L-14  
 Mičušík M. 9L-08, 9P-11  
 Michalcová A. 13P-04  
 Michalovič M. 7P-07  
 Mierzejewska E. 6P-08  
 Míka L. 5L-08  
 Mikulec J. 11L-04, 11L-06  
 Mikuška P. 13P-04  
 Milanović V. 5L-09  
 Minář J. 9P-13  
 Mindová M. 7P-05  
 Mittnerová A. 3L-07  
 Mizera J. 7L-05, 7L-06  
 Modrianský M. 14P-01  
 Moncol J. 2L-14, 2L-16, 2P-03, 2P-09, 2P-19  
 Mondal D. 10P-01  
 Monincová L. 1L-02  
 Montufar E. B. 9P-16  
 Mortet V. 6L-04  
 Mosinger J. 2P-08
- Mosnáček J. 9P-15  
 Motlochová M. 12L-02  
 Moudrá I. 3L-07  
 Mravec F. 1P-15  
 Müllerová V. 1P-23  
 Mušálek R. 11L-08  
 Mužíková B. 1P-11
- Navrátil M. 2P-14  
 Navrátil T. 1P-01, 1P-12, 6P-07, 13L-01, 13P-01, 13P-02, 13P-03  
 Nedvěd M. 6L-04  
 Nemčovič M. 1L-12, 1P-03, 1P-06  
 Němec I. 2L-23, 2P-11, 2P-18  
 Němec M. 7L-01, 7L-02  
 Němec P. 2L-23  
 Němeček P. 9L-05  
 Neoralová J. 9L-11  
 Nesměrák K. 1P-22  
 Neubauerová K. 9L-18  
 Neubertová V. 9P-14  
 Neuman J. 1L-04  
 Nižňanský M. 2L-24  
 Nógellová Z. 9P-09  
 Nováčková J. 9P-12  
 Novák D. 4L-08  
 Novák I. 9P-03, 9P-08, 9P-09, 9P-10  
 Novotný L. 6L-05, 6P-03  
 Nýdrle V. 11P-01
- Obalová L. 8P-02, 11L-12  
 Obluková M. 1L-06  
 Olejníková P. 2L-13  
 Omastová M. 2L-04, 9L-08, 9L-09, 9P-11  
 Omtvedt J. P. 7L-01  
 Ondráček J. 13P-04  
 Ondrušová S. 2L-02, 2P-17  
 Opanasenko M. 10L-03  
 Oriňák A. 4L-04  
 Oriňáková R. 4L-04, 5P-03  
 Orłowska E. 4P-09  
 Orságová Králová Z. 4L-04  
 Orvoš J. 2L-18, 8L-06  
 Ostatná V. 14L-06  
 Ouhrabková J. 6P-03  
 Outlá M. 14L-06, 14P-05  
 Ovodok E. 9L-08
- Paidar M. 11L-02  
 Pakanová Z. 1L-12, 1P-03, 1P-04, 1P-06  
 Palao E. 14L-01  
 Pánek J. 9L-02, 9L-15  
 Pánek P. 8P-02  
 Panthi Y. R. 8L-09  
 Parák T. 4P-08  
 Parakhonskiy B. V. 2P-20  
 Pařík P. 5L-13, 8P-04  
 Pascal-Le Poul 8L-02  
 Pastoreková S. 2L-04  
 Pastucha M. 14L-02  
 Pašek J. PL-05

- Patáková P. 11L-11  
 Pauk K. 8L-08  
 Pavlicová T. 14P-04  
 Pavlík J. 2P-18, 2P-19, 5L-11, 5L-12  
 Pavlinec J. 9P-09  
 Pavúková D. 6P-01, 6P-02, 6P-05, 11L-09, 11L-10  
 Pazderová L. 2L-11  
 Pažitná L. 1L-12, 1L-13, 1P-03, 1P-06  
 Pechancová R. 1L-01, 1P-08  
 Pekar M. 2P-20  
 Pekař M. 1P-15  
 Pelclová D. 13P-01, 13P-02, 13P-03  
 Pelclova D. 13P-04  
 Peller A. 11L-06  
 Perglová G. 8P-06  
 Petr J. 1L-01, 1P-08, 1P-20, 1P-21  
 Petr M. 14L-05, 14P-02, 14P-03, 14P-04  
 Petráková M. 4L-04  
 Petruš J. 9P-16  
 Pflieger J. 8L-09  
 Pflégr V. 8P-07  
 Pietrowski M. 6P-04  
 Pilařová E. 8L-08  
 Pinková Gajdošová V. 1P-02  
 Pinto G. P. 14L-01  
 Pivoňková H. 14L-06, 14P-05  
 Pluháček T. 1L-01, 1P-08  
 Podškubková L. 3L-04  
 Pogány L. 2P-19  
 Pohl R. 1L-05  
 Pokorný D. 8L-05, 8P-08  
 Poláček P. 9P-16  
 Polák P. 4L-06  
 Polívková A. 2P-10  
 Popelka A. 9P-10  
 Popov A. 13P-04  
 Pospíšil J. 9L-22  
 Pospíšil M. 3L-06, 11L-04  
 Pour M. 8P-12  
 Poznyak S. 9L-08  
 Prášek T. 7L-02  
 Preťo J. 9P-09  
 Princík D. 10L-04  
 Procházková M. 9L-08, 9L-09, 9P-11  
 Procházková E. 1P-19  
 Procházková S. 1L-08  
 Prokop Z. 14L-01  
 Proks V. 9L-18, 9L-22, 9P-12  
 Psoimas G. 2P-09  
 Ptáčková N. 9P-17  
 Ptáčková V. 5L-06  
 Puchoňová M. 2P-03  
  
 Raihane M. 9P-13  
 Rais D. 9P-12  
 Rak K. 8L-01  
 Rančák J. 3L-05  
 Randárová E. 9L-21  
 Rapta P. 4P-09, 4P-10  
 Raus V. 9L-07  
 Reichová V. 2P-04  
  
 Renault G. 9L-21  
 Renčiuk D. 14L-05, 14P-02, 14P-03, 14P-04  
 Rendošová M. 2L-13, 5P-03  
 Richterová V. 1P-15  
 Riman D. 4P-04  
 Rimaycuna J. 10P-01  
 Robin-Le Guen F. 8L-02  
 Rohlíček J. 2L-02, 2P-17  
 Rosendorf T. 7L-04  
 Rozsypal J. 1L-01, 4P-04  
 Ruiz Redondo B. 1P-12  
 Rusek M. 5L-06, 5L-07  
 Ruttkay-Nedecký B. 4P-08  
 Rychlý J. 9P-09  
  
 Řehořová K. 14P-06, 14P-07, 14P-08, 14P-09  
 Řezanková K. 7L-06  
  
 Sabolová D. 2L-13  
 Salmistraro S. 1P-09  
 Salvadori K. 4P-05  
 Samořová E. 2P-06  
 Sánchez-Carnerero E. M. 14L-01  
 Sázelová P. 1P-16  
 Sedláček J. 9L-03, 9P-01, 10L-06, 10L-07  
 Sedláková S. 6L-04  
 Sedláková Z. 9L-15  
 Sedlička J. 9P-03  
 Sedmidubský D. 2L-05, 2L-06  
 Segľa P. 5L-11, 5L-12  
 Sehnal K. 4P-08  
 Seifert D. 7L-03  
 Sekerová L. 10L-07  
 Serbin R. 5P-03  
 Severa L. 1P-16  
 Sharai H. 9L-11  
 Sharma A. 10L-03  
 Shevchenko N. 4L-03  
 Scherman D. 9L-21  
 Schmid M. G. 1P-10  
 Schulz J. 2L-22  
 Schwarz J. 13P-04  
 Schwarzová K. 1P-22, 6L-04, 14L-03  
 Siaugue J.-M. 1P-20  
 Sihelská K. 7L-06  
 Sincari V. 9L-23  
 Sivák L. 9L-20  
 Skálová L. 1L-06  
 Skirtach A. 2P-20  
 Skládal P. 14L-02  
 Skopalová J. PL-07, 1P-22, 1P-23, 6P-07, 14L-03  
 Skořepová E. 2P-10  
 Skoták V. 4P-08  
 Skřehot P. A. 5L-06, 5L-07  
 Slanska M. 14L-01  
 Slavíček P. PL-06  
 Slezáčková M. 11L-06  
 Slovák V. 12L-02, 12L-04, 12L-06, 12L-07, 12P-01  
 Smrčka F. 1P-17  
 Sofer Z. 2L-05  
 Sokolová R. 1L-06  
 Soldánová Z. 14L-05, 14L-06, 14P-03, 14P-05  
 Solis J. 10P-01  
 Souček I. 3L-01, 3L-06, 11L-04  
 Soukup K. 10P-01  
 Sovová Š. 2P-20  
 Soyka Y. 9L-08, 9P-11  
 Staňková M. 4P-08  
 Stavrakis S. 14L-01  
 Stehlíková E. 2P-02  
 Steier P. 7L-02  
 Stepura A. 9L-08, 9L-09  
 Stolarczyk K. 4L-08  
 Stolaříková J. 8P-07  
 Strachotová D. 3L-03, 3L-05  
 Straka M. 7L-07  
 Straková Fedorková A. 10L-03  
 Strašák T. 9P-04  
 Stratilová Urválková E. 5L-05  
 Strunga V. 7L-05, 7L-06  
 Studenovská H. 9P-12  
 Suchý V. 7L-05  
 Svítok A. 2L-19  
 Sýkora D. 5L-01, 13L-02  
 Sysel P. 9L-01, 9P-04  
 Szatmáry L. 7L-07  
 Szotáková B. 1L-06  
  
 Šagátová A. 2L-18  
 Šálek P. 9L-22  
 Šalitrš I. 2L-15, 2L-16, 2L-18, 2P-18, 2P-19, 8L-06  
 Šebej P. 14L-02  
 Šebesta J. 7P-06  
 Šebestová A. 1L-01, 1P-21  
 Šefců R. PL-01  
 Šiffalovič P. 2L-04  
 Šimek J. 11L-03  
 Šimková L. 4P-01, 4P-05, 4P-11  
 Šimon P. 8L-10, 12L-05, 12L-08, 12P-02  
 Šimunková M. 4L-09, 4P-06  
 Šipošová N. 9L-11  
 Šírová M. 9L-19  
 Škoch K. 2P-14  
 Škrabišová M. 14L-04  
 Šlouf M. 9L-05, 9L-15  
 Šmejkal P. 5L-05, 5L-08  
 Šmelková J. 7P-07  
 Šolínová V. 1P-18  
 Šorm D. 10L-06, 10L-07  
 Špaček J. 14L-06  
 Špaček L. 3L-09  
 Špaček M. 3L-01  
 Šrámková P. 12L-07  
 Štadániová R. 8P-09  
 Štamberg K. 7P-01, 7P-02  
 Štěpánek P. 9L-02

- Štěpánová S. 1P-19  
Štěpnička P. 2L-21, 2L-22, 2P-01,  
2P-13, 2P-14, 2P-15  
Šterbinská S. 2P-12  
Štibrányi L. 6P-01, 6P-05  
Šturcová A. 9L-07  
Štursa J. 7L-01  
Štursová K. 8P-10  
Šuba J. 1P-06  
Šubrt J. 12L-02  
Šuhájek M. 7L-07  
Švecová M. 9L-06  
Švecová P. 1L-01, 1P-08, 1P-20  
Švorčík V. 9P-14  
Švorec J. 5L-11
- Táborský O. 3P-02  
Talášková V. 1P-23  
Taraba B. 12L-01  
Tatarko M. 5L-12  
Taylor A. 6L-04  
Teplá M. 5L-05, 5L-08  
Teplý F. 1P-16  
Teplý P. 5L-05  
Tesaříková A. 9L-14  
Tesařová E. 1P-10, 1P-13  
Titlová Š. 9L-03  
Tkáč J. 1P-03, 1P-02, 1P-04, 1P-05,  
1P-07, 1P-14  
Tobrman T. 4L-06  
Tomšík E. 4L-02, 4L-03  
Topolář L. 10L-08  
Tošner Z. 2L-19  
Trčková K. 5P-02  
Třebatická J. 1P-06  
Třebal J. 11L-07  
Trnková L. 1L-09  
Tříška J. 6P-06  
Tříšková A. 3L-07  
Tuček J. 1L-08  
Tůmová T. 1L-02  
Turková I. 1P-04  
Tydlitát J. 8L-03  
Tyrpekl V. 2L-24
- Urbaniak M. 6P-08  
Urbanová K. 7L-03  
Urbanovský P. 2L-10  
Uříčář J. 9P-13
- Vacek J. 1L-10, 4L-08  
Vajová I. 9L-12  
Valdés D. 2L-25  
Valeš R. 11P-02  
Valko M. 4L-09, 4P-06  
Valová K. 9P-16  
Vanko V. 9P-09  
Vargová Z. 2L-13, 5P-03  
Varhač R. 5P-03  
Vaštyl M. 10L-09  
Vávra J. 3P-01  
Vávrová P. 9L-11  
Velič D. 4P-03  
Veselý J. 14L-03  
Vetřík M. 9P-07  
Veverka M. 12L-08  
Veverka V. 1L-11  
Vigh G. 1P-16  
Viglašová E. 7P-01, 7P-07, 7P-08  
Viktorová J. 14P-06, 14P-07, 14P-08,  
14P-09  
Vilčáková J. 9P-06  
Vinšová J. 8P-07  
Vítková G. 6P-06  
Vizárová K. 9L-12  
Vlčková Š. 13P-01, 13P-02, 13P-03,  
13P-04  
Vlčková V. 3L-04  
Vlk M. 7L-03  
Vlková H. 9L-05  
Vojtová L. 9P-16, 9P-17  
Vondráková M. 9L-17  
Vopálka D. 7P-02  
Vopička O. 9L-06  
Vorlíčková M. 14L-05, 14P-02  
Vosáhl P. 2P-15  
Vrba J. 4L-08  
Vrbková E. 9L-03  
Vřešťál J. 12L-03
- Vykydalová A. 12P-02  
Výprachtický D. 8L-09  
Vyskočilová E. 9L-03, 10L-07
- Wangle T. 2L-24  
Weidlich T. 5L-10, 11P-01  
Wichterle K. 11L-01  
Wojcieszak R. 6P-04
- Zábranský M. 2P-13  
Zacharov S. 13L-01, 13L-02, 13L-03,  
13P-01, 13P-02, 13P-03, 13P-04  
Zachař P. 5L-01  
Záchenská J. 2L-26, 2P-22  
Zain G. 9P-15  
Zácutná D. 2L-07  
Zalibera M. 4P-09  
Zámečníková M. 9P-17  
Zatloukalova M. 1L-10, 4L-08  
Zaťovičová M. 2L-04  
Zazpe R. 8L-05, 8P-08  
Zeleňák V. 10L-03, 10L-04, 10L-05  
Zeleňáková A. 10L-03  
Zeleniakiene D. 9P-11  
Zelenka J. 8L-10  
Zelenka T. 5P-01, 10L-02, 12L-04  
Zelenková G. 12L-04  
Zelenský M. 14L-03  
Zemanová A. 12L-03  
Zemanová M. 2L-26, 2P-22  
Zeng S. 14L-04  
Zhigunov A. 9L-07  
Zieliński M. 6P-04  
Zobač O. 12L-03  
Zoufalý P. 2L-14  
Zuna M. 7L-04
- Žák I. 13L-01, 13L-03  
Žáková L. 1P-18  
Ždímal V. 13P-04  
Živec V. 3L-09  
Živný O. 11L-08

**OBSAH**

Úvodník	60
Plenární přednášky	61
Sekce 1 – přednášky	68
Sekce 1 – postery	75
Sekce 2 – přednášky	87
Sekce 2 – postery	101
Sekce 3 – přednášky	112
Sekce 3 – postery	119
Sekce 4 – přednášky	121
Sekce 4 – postery	127
Sekce 5 – přednášky	133
Sekce 5 – postery	141
Sekce 6 – přednášky	143
Sekce 6 – postery	146
Sekce 7 – přednášky	150
Sekce 7 – postery	155
Sekce 8 – přednášky	160
Sekce 8 – postery	166
Sekce 9 – přednášky	173
Sekce 9 – postery	185
Sekce 10 – přednášky	194
Sekce 10 – postery	200
Sekce 11 – přednášky	201
Sekce 11 – postery	207
Sekce 12 – přednášky	209
Sekce 12 – postery	213
Sekce 13 – přednášky	214
Sekce 13 – postery	216
Sekce 14 – přednášky	219
Sekce 14 – postery	223
Seznam příspěvků	228
Autorský rejstřík	243

**CONTENTS**

Editorial	60
Plenary Lectures	61
Section 1 – Lectures	68
Section 1 – Posters	75
Section 2 – Lectures	87
Section 2 – Posters	101
Section 3 – Lectures	112
Section 3 – Posters	119
Section 4 – Lectures	121
Section 4 – Posters	127
Section 5 – Lectures	133
Section 5 – Posters	141
Section 6 – Lectures	143
Section 6 – Posters	146
Section 7 – Lectures	150
Section 7 – Posters	155
Section 8 – Lectures	160
Section 8 – Posters	166
Section 9 – Lectures	173
Section 9 – Posters	185
Section 10 – Lectures	194
Section 10 – Posters	200
Section 11 – Lectures	201
Section 11 – Posters	207
Section 12 – Lectures	209
Section 12 – Posters	213
Section 13 – Lectures	214
Section 13 – Posters	216
Section 14 – Lectures	219
Section 14 – Posters	223
Contents	228
Author's Index	243

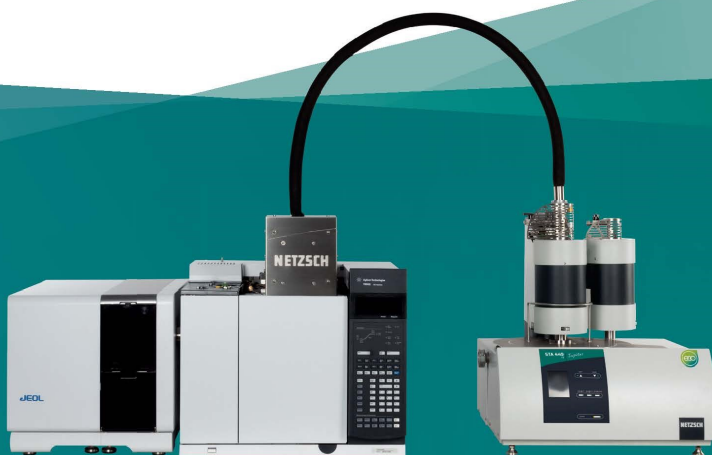
**CZECH CHEMICAL SOCIETY SYMPOSIUM SERIES • ročník/volume 18 (2020), čís./no. 3 • ISSN 2336-7202 (Print), ISSN 2336-7210 (On-line) • ISSN 2336-7229 (CD-ROM) • evidenční číslo MK ČR E 21999 • Vydává Česká společnost chemická jako časopis Asociace českých chemických společností ve spolupráci s VŠCHT Praha, 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 • REDAKTORI/ EDITORS: J. Barek, Z. Bělohav, E. Benešová, P. Drašar, P. Holý, P. Chuchvalec, Z. Kolská, J. Masák, J. Podešva, V. Vyskočil; Webové stránky: V. Vyskočil • TECHNICKÁ REDAKTORKA/EDITORIAL ASSISTANT: R. Rápková • Redakce čísla (ISSUE EDITOR) R. Rápková, V. Slovák • 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., Wolkova 432, 500 02 Hradec Králové • SAZBA, ZLOM: ČSCH, Chemické listy • Copyright © 2020 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 28.8.2020.**



# 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, stále vyvíjený a zdokonalovaný široký sortiment, pokrývající rozsah teplot  $-260\text{ }^{\circ}\text{C}$  až  $2800\text{ }^{\circ}\text{C}$ , 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  
Mob.: +420 608 701 537  
[www.netzsch.com](http://www.netzsch.com)

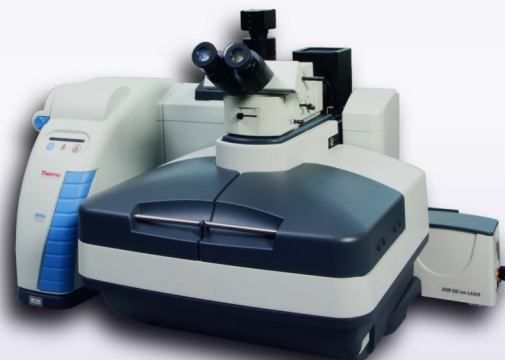
# Molekulová spektroskopie



*FT-IR spektrometr Nicolet iS50 Thermo Scientific a Ramanovy spektrometry BWTek*

Společnost Nicolet CZ s.r.o. dodává Ramanovy a FT-IR spektrometry a mikroskopy Thermo Scientific, přenosné i ruční disperzní Ramanovy, UV-VIS-NIR a LIBS spektrometry BWTek, vědecké Ramanovy spektrometry S&I, vědecké infračervené SNOM mikroskopy NeaSpec a příslušenství k nim. Nabízí rovněž vývoj analytických metod na zakázku, servis přístrojů, individuální i skupinová školení a každý rok pořádá několik kurzů Ramanovy a infračervené spektroskopie, z nichž některé jsou ve spolupráci se spektroskopickou společností J. M. Marci.

*NeaSpec SNOM*



*Ramanův mikroskop DXR3xi Thermo Scientific*



*FT-IR spektrometr Nicolet Summit Thermo Scientific*



**NICOLET CZ**  
MOLECULAR SPECTROSCOPY

[www.nicoletcz.cz](http://www.nicoletcz.cz)

+420 272 760 432



# FTIR A RAMANOVY SPEKTROMETRY A MIKROSKOPY



DLOUHÁ ŽIVOTNOST | VÝKONNOST | ŠIROKÁ NABÍDKA PŘÍSLUŠENSTVÍ | JEDNODUCHÁ OBSLUHA

## Nové přístroje z portfolia:

### INVENIO

#### Perfektní volba pro rutinní i pokročilé výzkumné aplikace

- Moderní FTIR spektrometr pro farmaceutiku, průmysl i výzkum
- Možnost přesné konfigurace s ohledem na využití
- Možnost automatizovaného multispektrálního měření (FIR, MIR, NIR, VIS)

INVENIO



### LUMOS II

#### Revoluce v infračervené mikroskopii

- Extrémně rychlý chemický imaging (900 spekter/s)
- Unikátní prostorové rozlišení až 1,25  $\mu\text{m}$
- Citlivé detektory bez nutnosti chlazení kapalným dusíkem
- Plně automatizované měření

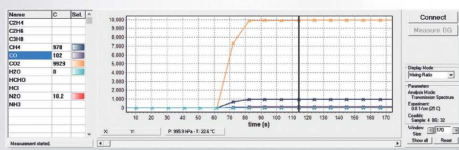


LUMOS II

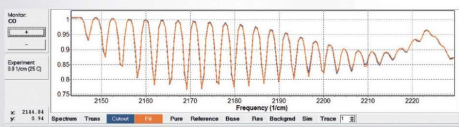
### OMEGA 5

#### Automatizovaný FTIR analyzátor plynů

- Rychlé kontinuální měření v reálném čase
- Hotové kalibrace pro více než 400 plynů
- Příprava kalibrací na míru
- Kompaktní design a malé rozměry
- Nízké provozní náklady, žádný spotřební materiál



Online měření višesložkových směsí



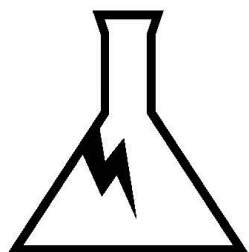
Přesný výpočet koncentrací ze spektra



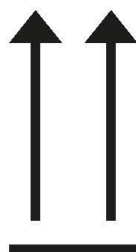
OMEGA 5



[www.optikinstruments.cz](http://www.optikinstruments.cz)



**KŘEHKÉ**

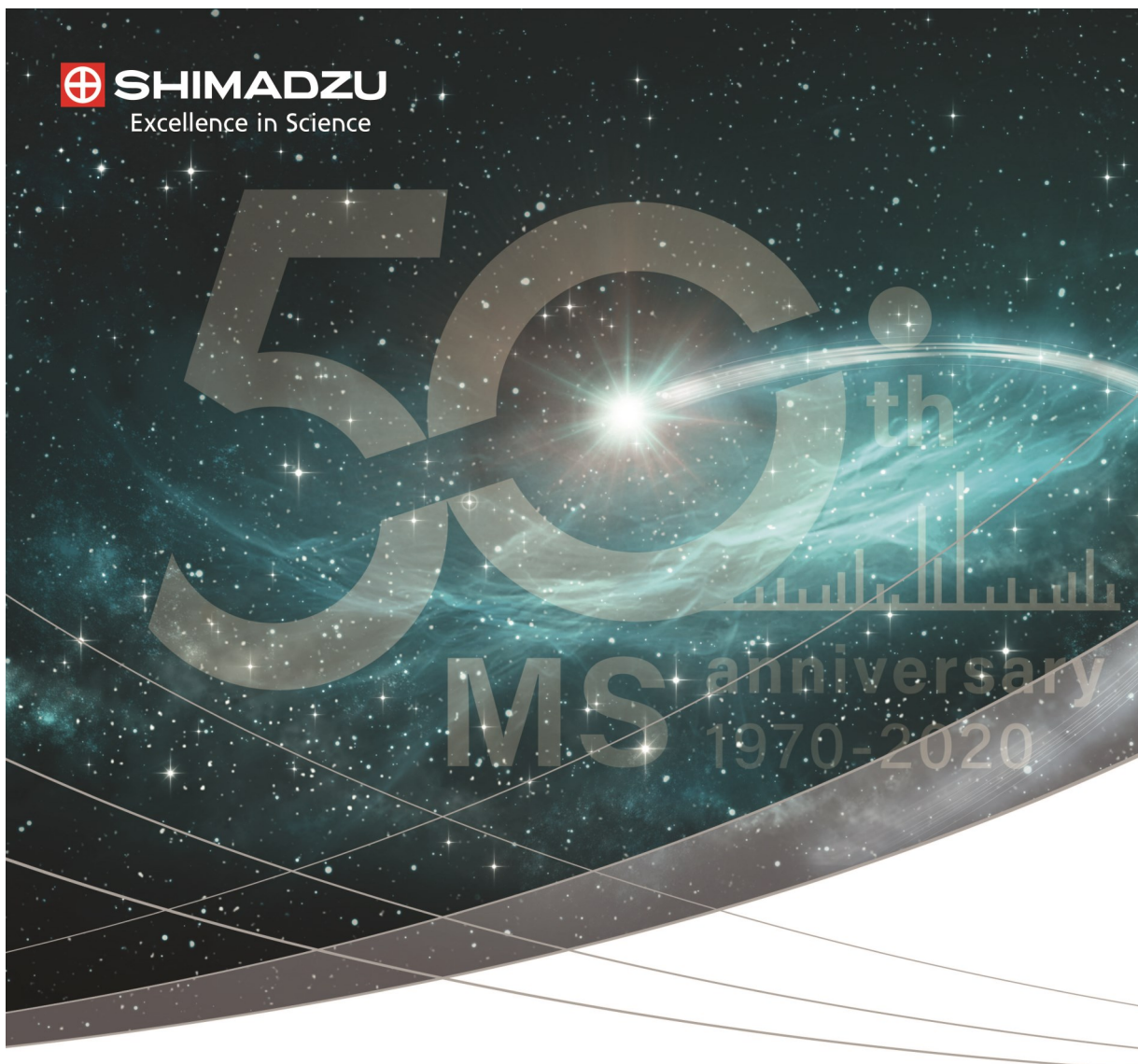


**NEKLOPIT**

**CHEMIKÁLIE | LIFE SCIENCE | LABORATORNÍ SKLO  
PLASTIK | POMŮCKY | PŘÍSTROJE | NÁBYTEK**

**[p-lab.cz](http://p-lab.cz)**

U Pekáren 1645/1 | 102 00 | Praha 15 | T: +420 271 730 800 | [info@p-lab.cz](mailto:info@p-lab.cz)



## Milestones to celebrate. Futures to build.

It is an event to celebrate, but even more the chance to shape the future: Shimadzu's 50<sup>th</sup> anniversary of mass spectrometry solutions. Based on its benchmarks of novelties and milestones in the past, Shimadzu is now driving progressive technological and operational opportunities in the high-sensitivity MS analysis of unknown substances. Users benefit from the company's high-tech capabilities combined with scientific and innovative capacities.

**The full range of solutions for R&D and routine applications labs**

using quadrupole systems and hi-res TOF instruments for GC-MS, LC-MS, MALDI-MS and ICP-MS methods

**Next-generation higher sensitivity, efficiency and accuracy** based on the combination of miniaturization, automation and coupling technologies

**Ahead-of-the-art and visionary applications**

merging MS and medical technologies, and envisioning currently unimaginable onsite applications, e.g. in food retail and private homes

[www.shimadzu.eu/celebrating\\_50\\_years](http://www.shimadzu.eu/celebrating_50_years)







## 3P Micro

### Automatický analyzátor adsorpce

- BET a velikost pórů 0,4-400 nm
- Až 3 nezávislé měřicí a 4 odplyň. stanice
- Sorpční kinetika pro kontrolu rovnováhy
- Sorpce plynů, par a měření hustoty

### + 3x cryoTune

- Ekonomický kryostat pro 82-323 K
- Kompatibilní s většinou analyzátorů adsorpce
- Tichý, nízká spotřeba, kapalný dusík jako chladivo

**= až 3 zcela nezávislá měření - různé plyny i teploty sorpce**

## 3P Instruments

výrobce s 30letou historií



Altamira Instruments

## AMI-300

### Automatická průtočná chemisorpce

- Charakterizace katalyzátorů
- Vlastní příprava směsí plynů a par
- Analýza reakcí a vazeb na povrchu katalyzátoru pomocí FTIR
- Mnoho variant, intuitivní SW

reaktorová řešení na míru

