

Czech  
Chemical  
Society

Symposium  
Series

4



74. sjezd českých a slovenských  
chemických společností

Olomouc, 4. – 7. září 2022

Sborník příspěvků



# 74. SJEZD ČESKÝCH A SLOVENSKÝCH CHEMICKÝCH SPOLEČNOSTÍ

**OLOMOUC**

**4.–7. září 2022**

Pořádající organizace:

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

Sborník příspěvků

## **ORGANIZAČNÍ VÝBOR SJEZDU**

prof. Ing. Tomáš Navrátil, Ph.D. (předseda ČSCH)  
prof. Ing. Jan John, CSc. (místopředseda ČSCH)  
prof. RNDr. Pavel Drašar, DSc. (místopředseda ČSCH)  
prof. Ing. Petra Šulcová, Ph.D. (hospodář)  
doc. Ing. Monika Jerigová, Ph.D. (vědecký tajemník)  
doc. RNDr. Václav Slovák, Ph.D.  
prof. RNDr. Vlastimil Vyskočil, Ph.D.  
Ing. Peter Barath, Ph.D.  
RNDr. Helena Pokorná  
Ing. Radmila Řápková  
Ing. Alena Vlčková

## **MÍSTNÍ ORGANIZAČNÍ VÝBOR**

doc. RNDr. Jan Petr, Ph.D. (předseda)  
doc. RNDr. Bohuslav Drahoš, Ph.D.  
Mgr. Pavel Kosina, Ph.D.  
Mgr. David Novák  
doc. RNDr. Aleš Panáček, Ph.D.  
RNDr. Jana Skopalová, Ph.D.  
doc. RNDr. Miroslav Sural, Ph.D.  
doc. RNDr. Petr Tarkowski, Ph.D.  
RNDr. Kateřina Vítková, Ph.D., MBA  
Denisa Vlčková

## **VĚDECKÝ VÝBOR SJEZDU**

prof. Ing. Jan Vacek, Ph.D. (předseda)  
prof. Ing. Vladimír Adamec, CSc.  
prof. RNDr. Hana Čtrnáctová, CSc.  
doc. RNDr. Miroslav Fojta, Ph.D.  
doc. RNDr. Martin Kabeláč, Ph.D.  
doc. Ing. Pavel Klouček, Ph.D.  
prof. RNDr. Martin Kotora, CSc.  
doc. Ing. Jaromír Lederer, CSc.  
RNDr. Ivana Lorencová  
prof. Ing. Tomáš Navrátil, Ph.D.  
RNDr. Jana Skopalová, Ph.D.  
doc. RNDr. Václav Slovák, Ph.D.  
prof. Ing. Petra Šulcová, Ph.D.  
prof. Ing. Tomáš Wágner, DrSc.  
Mgr. Tomáš Zelenka, Ph.D.

## SEKCE SJEZDU A JEJICH GARANTI

- 1. Analytická chemie**  
RNDr. Jana Skopalová, Ph.D.
- 2. Elektrochemie**  
prof. Ing. Jan Vacek, Ph.D.
- 3. Anorganická a bioanorganická chemie**  
prof. Ing. Tomáš Wágner, DrSc.
- 4. Organická a bioorganická chemie**  
prof. RNDr. Martin Kotora, CSc.
- 5. Fyzikální chemie a materiálová chemie**  
doc. RNDr. Martin Kabeláč, Ph.D.
- 6. Biochemie**  
doc. RNDr. Miroslav Fojta, Ph.D.
- 7. Chemické vzdělávání a historie chemie**  
prof. RNDr. Hana Čtrnáctová, CSc.; RNDr. Ivana Lorencová
- 8. Termická analýza**  
prof. Ing. Petra Šulcová, Ph.D.; doc. RNDr. Václav Slovák, Ph.D.
- 9. Porézní materiály**  
Mgr. Tomáš Zelenka, Ph.D.
- 10. Průmyslová chemie**  
doc. Ing. Jaromír Lederer, CSc.
- 11. Chemie přírodních látek**  
doc. Ing. Pavel Klouček, Ph.D.
- 12. Chemie životního prostředí**  
prof. Ing. Vladimír Adamec, CSc.

*Milé kolegyně a kolegové, vážení čtenáři,*

*čas běží jako voda a připadá nám to jako nedávno, co jsme se loučili pod úchvatnými vrcholky Vysokých Tater po zakončení „73. zjazdu chemikov“ a především pro nás, kteří jsme opustili prostory našich Alma mater před „déle než nedávnem“, to připadá jako včera, kdy proběhl pražský 72. sjezd chemiků, odvážně konaný mezi dvěma intenzivními covidovými vlnami, a už máme tu čest zahájit další sjezd chemiků, tentokrát s pořadovým číslem 74. Místo stovčezaté Prahy se setkáme v metropoli nádherné a úrodné Hané, v krásném a staroslavném univerzitním městě Olomouci.*

*Jsmo velice potěšeni, že v době, kdy v uvolněné postcovidové atmosféře, kdy se vědečtí pracovníci rozběhli po nejrůznějších konferencích po celém světě a v době napjaté ekonomické situace, více než dvě stovky účastníků z České republiky, Slovenska ale i z dalších méně či více vzdálených zemí našli cestu na 74. sjezd chemiků. Jsmo přesvědčeni, že ať již plenární přednášky, tak přibližně 120 přednášek a téměř 90 plakátových sdělení ve 12 odborných sekcích, stejně jako neformální výměny zkušeností s kolegy a jiné zážitky, jim budu dostatečnou odměnou za jejich účast.*

*Jaká by to byla vědecká událost, kdyby se jí aktivně neúčastnili studenti, ať již formou přednášek nebo plakátových prezentací. A jaká by to byla plakátová sekce, kdyby její součástí nebyly soutěže pro mladé účastníky. Laskavý čtenář promine, že neuvádíme jejich výčet, ale do poslední chvíle probíhají jednání se sponzory těchto cen.*

*Pro publikování nejlepších vybraných příspěvků je připraveno speciální číslo impaktovaného časopisu Monatshefte für Chemie – Chemical Monthly.*

*Tak, jako v minulých letech, připravila Sekce mladých chemiků ČSCH – Asociace mladých chemiků, speciální „předstartovní“ program pro setkání mladých chemiků a vzájemnou výměnu zkušeností.*

*Asi by bylo nemožné připravit celou akci v plánovaném rozsahu, pokud by nebyla podpořena nejen účastnickými poplatky, ale i příspěvky řady firem a institucí. V první řadě je třeba uvést generálního sponzora a partnera 74. sjezdu, firmu Metrohm CZ. Avšak nelze opominout ani další sponzory a partnery (podle seznamu, který je nám k dispozici ve chvílích psaní tohoto textu: HPST, Shimadzu, Anamet, Teva, Trigonplus, Nicolet CZ, Contipro, Optik instruments, Lachner, Phenomenex, 3D wiser, P-lab, Pragolab, EffiChem, Netzsch, Block, Merck, D-Ex, Rigaku, Chromservis, Úsovsko, Chemistry Europe – European Chemical Societies Publishing, Elsevier – Reaxys a město Olomouc). Partnery Sjezdu, spolupřádaného ČSCH, Slovenskou chemickou spoločnosťou a Českou společností průmyslové chemie, jsou Univerzita Palackého v Olomouci, EuChemS – European Chemical Society, ČSVTS, nakladatelství Springer a portál LabRulez.*

*Jsmo velmi potěšeni, že záštitu nad Sjezdem převzal rektor UP Olomouc, prof. MUDr. Martin Procházka, Ph.D.*

*Co říci závěrem? Není to poprvé, kdy se může Olomouc pyšnit pořádáním Sjezdu chemiků (i když od těch přecházejících protéklo koryty řek Moravy a Bystřice mnoho vody). Ovšem i tentokrát si organizátoři dali předsevzetí, že budou dělat vše proto, aby právě ten letošní Sjezd byl ten, který všem účastníkům a jejich kolegům utkví v paměti jako právě ten „nej, nej“.*

*Jan Petr a Tomáš Navrátil*

## PL-01

**ENERGETICKÝ VEKTOR VODÍK A JEHO ROLE V UDRŽITELNÉ ENERGETICE A DEKARBONIZACI PRŮMYSLU****KAREL BOUZEK, MARTIN PAIDAR**

*Ústan anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 16628 Praha 6  
bouzekk@vscht.cz*

Příspěvky spojené s otázkami přechodu vyspělých ekonomik na obnovitelné zdroje energie a omezení využívání fosilních paliv slyšíme ve veřejných sdělovacích prostředcích již řadu let. Původně byla tato snaha motivována snížením emisí CO<sub>2</sub> do atmosféry a omezením procesu globálního oteplování. V posledním období však nabývá na významu původně sekundární aspekt, kterým je omezení energetické a surovinové závislosti na politicky nestabilních regionech. Technických problémů spojených s přechodem na obnovitelné zdroje energie jsme si všichni vědomi, umíme je pojmenovat a vlastně i rámcově vyčíslit. Primárním problémem byly a zůstávají časová stabilita a energetická hustota produkce alternativních zdrojů. Je zřejmé, že v tomto směru lze pouze obtížně konkurovat hustotě energie naakumulované ve fosilních palivech z energie slunečního záření za stovky miliónů let. Je otázka, zda tato skutečnost má být důvodem pro to, aby se Česká republika uvedeného trendu neúčastnila, resp. se zapojila pouze formálně. Jedná se zejména o otázku politickou. I když pro její zodpovědné vyřešení je vhodné získat co nejvíce relevantních podkladů.

Základními znaky obnovitelných zdrojů jsou tedy nízká hustota energie a nestabilita v čase. Primární otázku tak nutně představuje co nejefektivnější využití vyrobené energie a aplikace technologií umožňujících stabilizaci celého systému její distribuce. Klasické zjednodušené schéma tzv. vodíkové ekonomiky mluví o konverzi okamžitých nadbytků produkované elektrické energie do energie chemické nesené vodíkem a její následné konverzi zpět na energii elektrickou v obdobích nedostatečného výkonu dostupných zdrojů. Z pohledu účinnosti celého cyklu lze za vhodnější považovat chemickou cestu konverze (elektrolýza, palivový článěk), než cestu tepelného stroje. Vzhledem k investiční náročnosti použitých technologií se jako nejvhodnější jeví naddimenzování instalovaných obnovitelných zdrojů vedoucí k minimálním obdobím s nedostatkem elektrické energie. Na tomto místě je nutno uvést, že se primárně bavíme o celosvětovém schématu, neboť Evropa jako region tuto nadprodukcí není schopna zajistit. Takové uspořádání omezuje náklady na skladování vodíku jako nosiče energie a zároveň vede ke sníženým nákladům na palivové články jako technologii konverze chemické energie vodíku zpět na elektrickou. Dalším příznivým efektem je vysoký stupeň využití inestické do technologie elektrolýzy vody. Uvedené uspořádání budí dojem významné nadprodukce vodíku. Zde však je nutno brát v úvahu širší možnosti jeho využití v dalších sektorech lidské činnosti.

Výhodu vodíkové ekonomiky představuje široké využití vodíku jako suroviny pro navazující průmysl, zejména pak

chemický. Široce diskutovány jsou však rovněž ocelářství, petrochemie, potravinářství a další sektory. Zvláštní kapitolu představuje doprava. Ve všech uvedených sektorech představuje vodík vyrobený s využitím obnovitelných zdrojů vítaný prostředek ke snížení uhlíkové stopy dané technologie. Může být použit jako přímý reaktant, jako redukční činidlo, nebo opět jako palivo. Uplatnění ve formě paliva pak připadá v úvahu zejména v oblasti mobility, kde v současnosti ve vybraných sektorech (např. nákladní doprava) prakticky neexistují rovnocenné alternativy.

Uvedené schéma sice nastiňuje možnosti praktického uplatnění, ale kritické problémy spojené s postupným přechodem ekonomiky na obnovitelné zdroje energie řeší pouze částečně. Jaké jsou obecné vize dalšího postupu v této oblasti, který by umožnil splnění plánovaných cílů? Základní teze je formulačně velmi jednoduchá. Získat co nejvíce zkušeností z praktického provozu vodíkových technologií tak, aby bylo možno identifikovat slabá místa vyžadující primárně řešení. A dále získat podklady pro návrh a implementaci nezbytné infrastruktury. Tohoto cíle lze dosáhnout minimálně ve dvou dílčích krocích: (i) ověřením funkce jednotlivých technologií zapojených do vodíkové ekonomiky v reálných podmínkách a následně (ii) ověřením funkce celého dotyčného ekosystému. V této etapě se v celosvětovém měřítku momentálně nacházíme a získáváme informace o tom, jak postupovat dále. Zároveň probíhají demonstrační aktivity ověřující zapojení vodíkových technologií do oblastí, které s ní dosud mají velmi omezené zkušenosti (námořní, letecká, či železniční doprava a další).

Trvale však musíme mít na paměti hodnoty energetických toků, ke kterým cílíme. Je zřejmé, že investice spojené s rychlým zavedením vodíkových technologií do praxe jsou enormní a snaží se zreplikovat staletý vývoj stávající infrastruktury v několika málo letech, či malých desítkách let. Je tedy nutno vycházet z realistických předpokladů. Na druhou stranu, právě zkušenosti z praktických implementací umožní jednak získat nezbytné znalosti a zároveň povedou k nárůstu výrobních kapacit nezbytných technologií a tím k poklesu cen jednotlivých produktů.

Ve světle těchto skutečností nelze pominout jeden zásadní aspekt. Více než v kterémkoliv jiném průmyslovém sektoru se právě v tom vodíkovém bude projevat nedostatek kvalifikovaných odborníků. Analýzy Evropské komise hovoří o vzniku až 5 miliónů nových pracovních míst v tomto sektoru v rámci Evropy. Zároveň však již nezdůrazňují zánik adekvátního počtu stávajících pracovních míst v sektorech utlumovaných. Tuto skutečnost je nutné mít trvale na zřeteli. Jak z pohledu vzdělávacích kapacit, tak z pohledu sociální stability a zaměstnanosti.

Tento text představuje pouze rámcový úvod do problematiky jako takové. Díky jejímu rozsahu a komplexnosti nelze uvádět konkrétní technické údaje. Alespoň minimum z nich se však objeví ve vlastní prezentaci.

*Tento výzkum byl financován v rámci projektu „Palivové články s nízkým obsahem platiny“ registrovaným pod číslem CZ.02.2.01/0.0/0.0/16\_025/0007414 financovaného z EFRR.*

## PL-02

**TRENDY VE FARMACEUTICKÉM PRŮMYSLU:  
BUDOUCNOST TERAPIE S VYUŽITÍM MALÝCH  
MOLEKUL**

ALEŠ GAVENDA

*Teva Czech Industries s.r.o., Ostravská 29/305, 725 28  
Opava, Komárov  
ales.gavenda@tevapharm.cz***Biologická versus Chemická léčiva**

V posledních deseti letech zaznamenala ve farmaceutickém průmyslu obrovský rozvoj v léčbě biologická léčba zejména v oblasti monoklonálních protilátek, které nesporně přináší obrovský benefit pro pacienty zejména v léčbě protinádorových onemocnění, ale také chronických onemocnění spojených s poruchami imunity, léčba migrény atd. Dále pak se objevují aplikace využití buněčné terapie, genové terapie nebo nové přístupy v přípravě vakcín (mRNA). Je nesporné, že tyto způsoby léčby budou i nadále rozšiřovány. Po originálních biopreparátech se na trhu začínají objevovat bioekvivalentní generické biologické přípravky, které zpřístupňují léčbu širšímu počtu pacientů. Zdálo by se tedy, že využití malých molekul a menších makromolekul je na ústupu a budoucnost patří výše zmíněným aplikacím.

Avšak oblast malých molekul (Active Pharmaceutical Ingredients, API látek) a menších makromolekul (peptidy, oligonukleotidy) nebo léčba klasickými chemickými léčivy je i nadále v hledáčku vývojových týmů a není zdaleka za zenitem. Ročně je schváleno americkým úřadem pro léčiva a potraviny (FDA) průměrně 46 nových léčiv. Z tohoto počtu je 29 nových chemických molekul, zatímco biologických přípravků je průměrně 12 ročně<sup>1</sup>. Tento příspěvek se zabývá aktuálními trendy v oblasti využití malých molekul (API) ve farmaceutickém průmyslu při léčbě širokého spektra onemocnění a výhledu do budoucna.

Také v oblasti využití malých molekul dochází ke změnám, zejména z pohledu účinnosti - vysoce účinné API látky (Highly-potent API - HP API) vyžadují velmi malou účinnou dávku léčiva při stejném terapeutickém účinku jako klasická léčiva. Tato oblast zažívá výrazný růst (cca 10 % ročně) a přibližně 25 % všech léčiv uvedených na trh je s využitím vysoceúčinných API<sup>2</sup>. Největší procento HP API je v oblasti léčby nádorových onemocnění, podle odhadů je téměř 290 malých molekul ve vývoji pro léčbu rakoviny<sup>3</sup>. V poslední době nachází HP API uplatnění také v dalších terapeutických oblastech (immunosupresiva, hormony, steroidy, respirační léčiva, atd.).

Dalším trendem je vývoj cílené terapie (prekurzory léčiv – tzv. prodrugs nebo antibody-drug conjugates – ADC), která umožňuje pro pacienta bezpečnější a komfortnější léčbu. ADC je speciálním případem využití velmi účinných API látek, které nelze k léčbě využít samostatně z důvodu jejich vysoké toxicity, ve spojení s protilátkou je terapie cílená a zároveň velmi účinná. Momentálně je ve vývoji kolem 200 ADC molekul a od roku 2018 do současnosti bylo schváleno 12 ADC léčiv<sup>4</sup>.

Důraz je také kladen na bezpečnost a snižování rizik spojených s léčbou (nová generace opticky čistých API, riziko mutagenních nečistot – nitrosoaminy). Dochází k aplikacím nových trendů a technologií, které zvyšují efektivitu výroby a zlevňují v důsledku cenu terapie a tím zvyšují dostupnost léčby (kontinuální procesy a průtoková chemie). Dále je ověřováno využití osvědčených molekul pro nové terapeutické využití. V neposlední řadě je důležitý také pohled udržitelnosti průmyslové chemie, snížení energetické náročnosti a jejich dopadů na životní prostředí – netoxických rozpouštědel, biokatalýza, využití udržitelných „zelených“ technologií, snižování množství excipientů v léčivých přípravcích, minimalizace odpadů a recyklace, atd.

V oblasti vývoje malých molekul se kromě využití nových technologií mění zaměření na nové terapeutické oblasti. V minulosti byl vývoj zaměřen zejména na cytostatika, immunosupresiva nebo antibiotika. S lepšími životními podmínkami a dostupnou léčbou základních onemocnění dochází k nárůstu pacientů s chronickými či neurodegenerativními onemocněními (Alzheimerova nebo Parkinsonova choroba). Naopak se zvýšeným znečištěním životního prostředí dochází k silnému nárůstu počtu pacientů např. s respiračními chorobami jako je chronická obstrukční plicní choroba (COPD) nebo astma. Objevují se také nové skupiny molekul jako peptidy či oligonukleotidy, které si také našly využití ve farmakoterapii.

V oblasti formulací jde trend směrem k využití digitálních technologií, které pomáhají monitorovat průběh terapie a umožňují upravovat dávkování (např. léčba respiračních onemocnění<sup>5</sup>), využití dlouhodobého uvolňování léčiv s využitím implantátů nebo prekurzorů léčiv (prodrug). Zajímavé je také využití možností technologie 3-D tisku ve farmaceutických formulacích.

Jak je vidět, oblast výzkumu, vývoje a nových aplikací malých molekul ve farmacii rozhodně není mimo oblast zájmu a lze očekávat nové aplikace a technologie. A zcela nepochybně bude i v budoucnu bude významnou součástí medicínských aplikací.

## LITERATURA

1. New approvals 2015-2020, Food and Drug Administration (FDA), USA, <https://www.fda.gov/>
2. Roots Analysis. “HPAPIs and Cytotoxic Drugs Manufacturing Market, (2nd Edition), 2016–2026.” March 9, 2016
3. Transparency Market Research, “Rising Cost of Drug Development Leads HPAPI Manufacturers to Outsource Production,” March 30, 2016. <http://www.prfree.org/news-rising-cost-of-drug-development-leads-hpapi-manufacturers-to-outsource-production-240256.html>
4. Cowen investor-primer-on-ADCs, drugs@FDA, Food and Drug Administration (FDA), USA, <https://www.fda.gov/>
5. Digihaler® Inhaler System <https://www.digihaler.com/>

## PL-03

SYNTEZA V ROZTOKU ČI NA PEVNÉ FÁZI –  
DILEMA ORGANICKÉHO CHEMIKA

## JAN HLAVÁČ

Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci,  
17. listopadu 12, 77146, Olomouc, Česká republika  
jan.hlavac@upol.cz

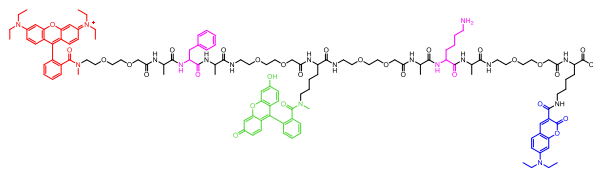
Organická syntéza patří mezi významné nástroje v medicíně, farmaceutické či materiálové chemii, chemické biologii a jiných oblastech experimentálního výzkumu a průmyslové výroby. Metodiky využívané při přípravě nových sloučenin či modifikaci materiálů je proto třeba neustále rozvíjet tak, aby tyto procesy byly schůdné technicky i ekonomicky a byly pak využitelné jak v laboratoři, tak i v průmyslové výrobě.

Syntéza v roztoku, známá po staletí, je neustále obohacována novými metodami umožňujícími jinak obtížnou či neřešitelnou tvorbu vazeb mezi vybranými segmenty, selektivní vedení reakcí z pohledu izomerie či ortogonalit, zjednodušení tvorby relevantních skeletů, apod. Od roku 1963, kdy Bruce Merrifield popsal syntézu peptidů na pevné fázi<sup>1</sup>, je pro celou řadu aplikací spojených s přípravou nových sloučenin nejrůznějšího typu využívána i metoda „solid-phase organic synthesis“ (SPOS).

Výhody a nevýhody přípravy sloučenin v roztoku či na pevné fázi tvoří často dilema organického chemika při plánování syntézy cílových chemických sloučenin. Robustnost chemických transformací, požadavek na případnou resyntézu, schůdnost analytické kontroly meziproduktů, počet cílových sloučenin a jejich strukturní diverzita či způsob purifikace daného počtu finálních látek jsou jen některá kritéria, která musí být při zohledňování výběru syntetického přístupu zvažována.

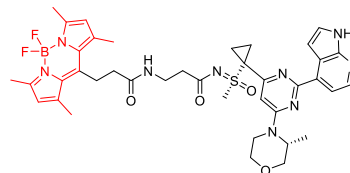
Na roveň syntézy v roztoku se SPOS postavila v době mohutného rozvoje kombinatoriální chemie a dobývání chemického prostoru, kdy se uplatňovala syntéza velkého počtu chemických sloučenin s různým stupněm diverzity. Ačkoli jsou již tyto snahy minulostí, syntéza chemických knihoven různé velikosti stále nachází své místo zejména při optimalizaci biologicky aktivních sloučenin. Příkladem může být optimalizace derivátů 3-hydroxy-4(1*H*)-chinolonu, kde se díky oběma syntetickým přístupům podařilo nalézt sloučeniny s protinádorovou aktivitou a identifikovat u nich různé molekulární cíle<sup>2</sup>. Při vývoji syntetické metodologie *N*-substituovaných derivátů chinolonového typu byla objevena atypická záměna aminoskupiny anilinového typu za vodík, případně deuterium, což vedlo k vývoji snadné deuterační aromatických sloučenin v roztoku či imobilizovaných na pevné matici<sup>3</sup>.

Příkladem výhody syntézy na pevné fázi oproti syntéze v roztoku je pak příprava fluorescenčních sond pro simultánní detekci vybraných proteas. Finální sondu je možné z pevné fáze odštěpit a používat ji jako roztok o dané koncentraci<sup>4</sup> nebo provádět inkubaci s vybranými enzymy přímo se sondou imobilizovanou na nerozpustné matici<sup>5</sup>. V tomto případě je nutné zvážit řadu aspektů, jako typ matrice, stabilita ukotvení, způsob analýzy finálních sond, apod.



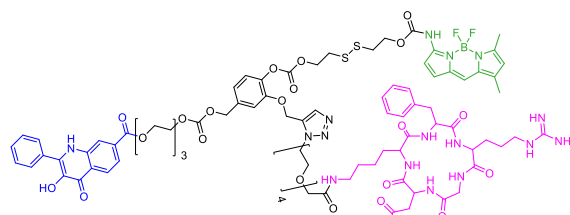
Obr. 1. Příklad fluorescenční sondy pro simultánní detekci trypsinu a chymotrypsinu<sup>4</sup>

Příkladem, kdy se ukázala SPOS jako nevýhodná a bylo nutné uplatnit syntézu v roztoku, je příprava sloučenin pro selektivní detekci autolysosomů vytvářených v procesu autofagie<sup>6</sup>.



Obr. 2. Příklad fluorescenční sondy pro selektivní značení autolysosomů<sup>6</sup>

Příkladem strategie, kdy je vhodné kombinovat roztokovou chemii a syntézu na pevné fázi pro přípravu cílových sloučenin je příprava systémů pro cílovou dopravu léčiv s možností fluorescenčního monitoringu jejich uvolňování<sup>7</sup>.



Obr. 3. Příklad modelového systému pro cílenou dopravu léčiva s možností fluorescenčního monitoringu jeho uvolňování<sup>7</sup>

V přednášce budou prezentovány výhody a nevýhody syntézy na pevné fázi a v roztoku z obecného pohledu a při konkrétních aplikacích směřujících do medicíně a chemické biologie. Diskutováno bude rovněž porovnání některých nových syntetických metodik při aplikaci na pevné fázi a v roztoku.

## LITERATURA

- Merrifield R. B.: *J. Am. Chem. Soc.* **85**, 2149 (1963).
- Rehulka J., et. al.: *Eur. J. Med. Chem.* **192**, 112176 (2020).
- Burglova K., Okoročenkova S., Hlavac J.: *Org. Lett.* **18**, 3342 (2016).
- Okoročenkova Y., Porubsky M., Benicka S., Hlavac J.: *Chem. Commun.* **54**, 7589 (2018).
- Milicevic D., Hlavac J.: *Chemosensors* **9**, 119 (2021).
- Okoročenkova S., et. al.: *Sens. Actuator B-Chem.* **351**, 130941 (2022).
- Porubsky M., et. al.: *Mol. Pharm.* **18**, 2385 (2021).



## PL-04

## ENZYMOVÉ MODIFIKACE PŘÍRODNÍCH LÁTEK

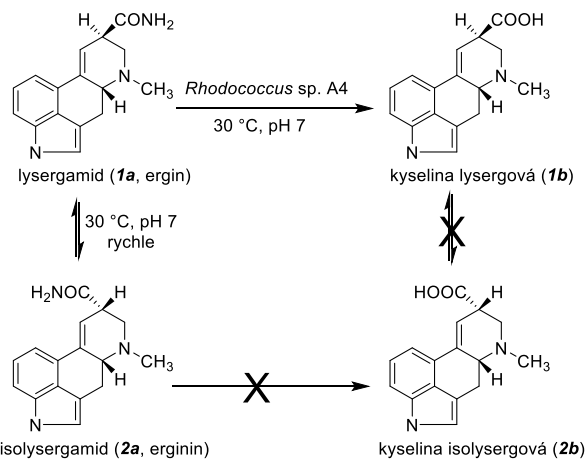
Tento příspěvek je věnován Prof. MUDr. et RNDr. Vilému Šimánkovi, Dr.Sc. k jeho životnímu jubileu.

## VLADIMÍR KŘEN

Mikrobiologický ústav AVČR, Laboratoř biotransformací,  
Vítěnská 1083, 142 20 Praha 4, Česká Republika  
kren@biomed.cas.cz

Přírodní látky jsou většinou složité multifunkční sloučeniny citlivé k mnohým chemickým metodám. Při selektivních modifikacích těchto složitých molekul lze účinně využít biokatalytické metody – často napodobující přírodní enzymatické procesy.

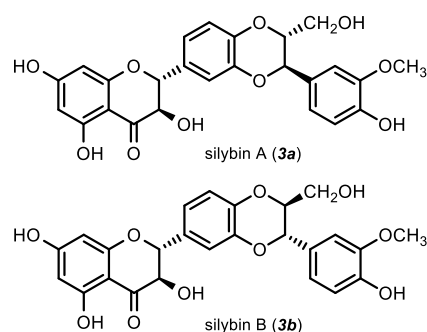
Tento přístup bude demonstrován na dvou skupinách přírodních látek: jedním z nich jsou klasické přírodní produkty – námelové alkaloidy, a druhým je aktuální oblast chemoprotektivních flavonoidů. Glykosylace, zvláště stereo- a regioselektivní glykosylace, bývá značnou „výzvou“ ve farmakochemii. Enzymové glykosylace využívající různé typy enzymů se proto nyní často stávají metodou první volby.



Obr. 1. Enzymová příprava čisté kyseliny lysergové ze směsi erginu a ergininu po hydrolyze ergotaminu

Námelové alkaloidy mají dlouhou a někdy i pitoreskní historii<sup>1</sup>. Prošli dynamickým vývojem a dodnes se používají v mnoha farmaceutických přípravcích. Zahrnují širokou škálu terapeutických použití, např. u děložní atonie, poporodního krvácení, migrén, ortostatických oběhových poruch, senilní mozkové insuficience, hypertenze, hyperprolaktinémie, akromegalie a parkinsonismu. V současnosti však užívání námelových alkaloidů klesá, a to především proto, že nejsou zcela selektivní a jsou považovány za "dirty drugs". Selektivní oxidace prováděné různými biosystémy, jako jsou např. enzymy, mikroorganismy a rostlinné buněčné kultury, poskytly širokou škálu nových sloučenin, z nichž některé mají přímé uplatnění ve farmaceutickém průmyslu. Mikrobiální amidasy umožnily přípravu opticky čisté kyseliny lysergové (**1b**) z ergopeptidů (obr. 1) při zachování vysoké stereoselektivity<sup>2</sup>.

Silybin je hlavní složkou silymarinu – komplexu flavanolignanů z ostropestřce mariánského (*Silybum marianum*). Používá se především jako hepatoprotektivum, ale v poslední době se ukázalo, že je velmi účinný při léčbě rakoviny prostaty<sup>3</sup>. Přírodní silybin je ekvimolární směs dvou obtížně oddělitelných diastereoizomerů (**3a**, **3b**), které mají podstatně odlišnou biologickou aktivitu. Příprava opticky čistých silybinů A a B byla provedena pomocí lipasy. Lipasy sloužily také k selektivním metodám ochrany/deprotektce tohoto polyolu (5 OH skupin). Byla vyvinuta alternativní metoda diastereomerní separace využívající glykosidasy. Budou rovněž představeny multienzymové systémy s integrovanou regenerací kofaktorů pro přípravu metabolitů silybinu – glukuronidů a sulfátů.



Značná část přírodních látek existuje ve formě glykosidů, přičemž glykon je esenciální pro příslušnou biologickou aktivitu – dobrým příkladem jsou glykosidová antibiotika<sup>4</sup>. Enzymové glykosylace jsou většinou katalyzovány glykosyltransferázami nebo glykosidázami. Na příkladech různých typů přírodních látek budou demonstrovány prakticky použitelné metody selektivních glykosylací. Na závěr bude představen nový typ glykosylačního enzymu – rutinosaída, která má zcela unikátní vlastnosti a díky své stabilitě, robustnosti a vysokým výtečkům je velmi praktickým nástrojem pro glykosylace rozličných (též anorganických) sloučenin<sup>5,6</sup>.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 21-01799S a projektu MŠMT Interexcellence LTC20069.

## LITERATURA

1. Křen V., Cvak L. (eds.): *Ergot – Genus Claviceps, Medicinal & Aromatic Plants – Industrial Profiles*, Harwood Academic Publ., London 1999.
2. Martínková L., Křen V., Cvak L., Ovesná M., Přepechalová I.: *J. Biotechnol.* **84**, 63 (2000).
3. Křen V., Valentová K.: *Nat. Prod. Rep.* v tisku (2022).
4. Křen V., Řezanka T.: *FEMS Microbiol. Rev.* **32**, 858 (2008).
5. Šimčíková D., Kotik M., Weignerová L., Halada P., Pelantová H., Adamcová K., Křen V.: *Adv. Synth. Catal.* **357**, 107 (2015).
6. Kotik M., Brodsky K., Halada P., Javůrková H., Pelantová H., Konvalinková D., Bojarová P., Křen V.: *Catal. Commun.* **149**, 106193 (2021).

## PL-05

**KOMPLEXY ŽELEZA A KOBALTU  
S MAGNETICKOU BISTABILITOU – MATERIÁLY  
S LADITEĽNÝMI MAGNETICKÝMI  
VLASTNOSTAMI PRE TECHNOLOGIE  
21. STOROČIA**
**IVAN ŠALITROŠ**

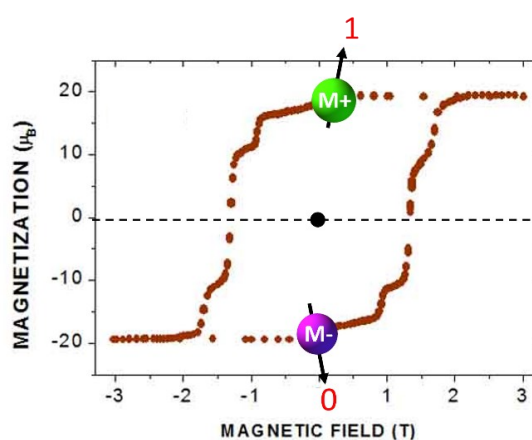
*Oddelenie anorganickej chémie, Fakulta chemickej  
a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita  
v Bratislave, Radlinského 9, Sk-81237 Bratislava  
ivan.salitros@stuba.sk*

Dôležitou vlastnosťou mnohých koordinačných zlúčenín prechodných kovov je ich magnetická aktivita, ktorej nositeľom sú nespárené elektróny centrálnych atómov. Popri rutinne sa správjajúcich paramagnetických komplexoch sa stretávame aj s „kurióznymi“ magnetikami, ktorých magnetické stavy možno meniť a vratne prepínať vonkajšími podnetmi (zmena teploty, tlaku, elektrického alebo magnetického poľa, alebo ožarovanie svetlom), a tak daná zlúčenina vykazuje laditeľnú magnetickú bistabilitu, alebo dokonca multistabilitu<sup>1</sup>. Do tejto skupiny patria napríklad známe koordinačné polyméry s magnetickým usporiadaním ďalekého dosahu (fero- alebo ferimagnety), ktorých oblasť magnetickej bistability je definovaná šírkou hysterézie magnetizácie v magnetickom poli (obr.1). Magnetická bistabilita takýchto komplexov je založená na rozdielnej projekcii magnetizácie, ktorú môže materiál vykazovať pri tej istej intenzite magnetického poľa v oblasti hysterézneho slučky.

Paramagnetické koordinačné zlúčeniny, ktoré vykazujú bistabilitu medzi dvoma stabilnými magnetickými stavmi, predstavujú aplikačne atraktívnu skupinu materiálov. No nároky modernej spoločnosti, dožadujúce sa čoraz väčšej miniaturizácie a zvyšovania pamäťovej kapacity zariadení spôsobujú, že materiály s magnetickým usporiadaním ďalekého dosahu budú čoskoro nepostačujúce. Neustále znižovanie magnetických domén v pamäťových nosičoch spôsobuje vymiznutie magnetického usporiadania pri dosiahnutí kritických rozmerov domény. Vzhľadom na túto skutočnosť ponúka koordinačná chémia dve nové triedy magneticky aktívnych komplexov, ktoré vykazujú jav križenia spinových stavov (tzv. „spin crossover“ komplexy)<sup>2</sup> alebo jav pomalej relaxácie magnetizácie (tzv. jednomolekulové magnety)<sup>3</sup>. V oboch triedach látok možno stabilné magnetické stavy vratne prepínať pomocou rôznych externých podnetov (t.j. zmenou teploty, zmenou magnetického poľa, ožiarením charakteristickou vlnovou dĺžkou...). Magnetická bistabilita týchto koordinačných zlúčenín má pôvod len v elektrónovej štruktúre a vlastnostiach komplexov, nevyžaduje prítomnosť medzimolekulových interakcií a existenciu magnetických domén, a preto ju možno pozorovať aj na molekulovej úrovni. Magnetické stavy jednomolekulových magnetov a spin crossover komplexov možno teda vratne prepínať vonkajším zásahom, a to umožňuje ich využitie v rôznych oblastiach nanotechnológií (zaznamenávanie informácií, sensorika, spintronika, nanomechanika...). Avšak ich aplikácii stále bráni viacero prekážok spojených s existenciou magnetickej bistability pri pracovných podmienkach zariadení (napr.

izbová teplota, atmosférický tlak, vlhkosť vzduchu...)<sup>4</sup>, v ktorých by sa tieto magnetické materiály využívali. Preto je potrebné pripravovať nové koordinačné zlúčeniny s magnetickou bistabilitou, študovať ich (nielen) magnetické vlastnosti a lepšie pochopiť vlastnosti pomalej relaxácie magnetizácie a spinového prechodu.

Príspevok sa venuje *i)* železnatým a kobaltnatým koordinačným zlúčeninám s tridentátmi aromatickými N-donorovými ligandmi<sup>4</sup> a *ii)* železitým koordinačným zlúčeninám s pentadentátmi Schiffovými ligandmi<sup>5</sup>. V týchto triedach magneticky aktívnych látok sa pozornosť zameria na molekulový dizajn a racionálnu syntézu organických ligandov, štruktúru a magnetické vlastnosti koordinačných zlúčenín, fotomagnetickú aktivitu a v neposlednom rade možnosť prípravy hybridných systémov – nanopovrchov a nanočastíc, obsahujúcich magneticky aktívne komplexy<sup>6</sup>.



Obr. 1. Znárodnenie hysterézneho slučky v magnetickom poli, ktorá definuje oblasť magnetickej bistability materiálu.<sup>3</sup> Pri rovnakej indukcii magnetického poľa môže magnetická doména (feromagnety), alebo molekula komplexu (jednomolekulové magnety) vykazovať opačnú projekciu magnetizácie M+ resp. M-. Túto vlastnosť možno využiť pri zázname alebo prepisovaní informácií v binárnom kóde (1, resp. 0) v pamäťových nosičoch

## LITERATÚRA

1. Sato O., et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 46, 2152 (2007).
2. *Spin-Crossover Materials: Properties and Applications*; (Halcrow M. A., ed.). John Wiley & Sons Ltd, Chichester 2013.
3. Gatteschi D., Sessoli R., Villain J.: *Molecular Nanomagnets*. Oxford University Press, New York 2006.
4. a) Šalitraš I., et al.: *Inorg. Chem.* 58, 4310 (2019). b) Šalitraš I., et al.: *Inorg. Chem. Front.* 9, 1179 (2022).
5. a) Šalitraš I., et al.: *Inorg. Chem.* 59, 3141 (2020); b) Šalitraš I., et al.: *Chem. Eur. J.* 24, 5191 (2018); c) Šalitraš I., et al.: *Inorg. Chem.* 51, 12755 (2012).
6. a) Kemp N. T., Šalitraš I., et al.: *J. Phys. Chem. C* 124, 13393 (2020); b) van Molen S. J., Šalitraš I., et al.: *ACS Nano* 9, 4496 (2015).

**PL-06  
CHEMICKÉ LISTY – JEJICH SOUČASNOST  
A BUDOUCÍ PERSPEKTIVY****VLASTIMIL VYSKOČIL**

*Vedoucí redaktor časopisu, Chemické listy, Novotného lávka 5, 116 68 Praha 1  
vlastimil.vyskocil@natur.cuni.cz*

V loňském roce jsme si připomněli již 145. výročí založení našeho časopisu (1876) a 155. výročí zřízení Spolku pro vzdělání v oboru chemie a pomocných věd „Isis“ (1866), který byl určitým prapředchůdcem dnešní České společnosti chemické<sup>1</sup>. Chemické listy jsou tedy jedním z vůbec nejdéle vydávaných národních vědeckých časopisů.

Na sklonku roku 2020 mi byla od profesora Bohumila Kratochvíla, který vedl Chemické listy celých dvacet roků (v letech 1997–2012 a 2016–2020), předána symbolická štafeta a já se tak stal již desátým šéfredaktorem našeho časopisu<sup>2</sup>. V redakčním kruhu jsem však začal působit již v roce 2018 – jako redaktor pro příspěvky z oboru analytické chemie a redaktor webových stránek Chemických listů. Tato moje nová role s sebou přinesla především úkol přenést původní internetové stránky časopisu ([www.chemicke-listy.cz](http://www.chemicke-listy.cz)) do nového rozhraní systému Open Journal System (OJS)<sup>3</sup>. Hlavním důvodem pro přechod na nové webové rozhraní byla snaha soustavně zvyšovat atraktivitu časopisu pro čtenáře i autory stávající, a přilákat takto i zájemce budoucí.

Přestože tištěná verze Chemických listů si stále udržuje svoji dnes již tradiční podobu, snažíme se náš časopis postupně formovat tak, aby vyhovoval všem aktuálně běžným mezinárodním časopiseckým standardům<sup>4–6</sup>, což se děje především právě na úrovni elektronické verze našeho časopisu. Mezi takové novinky patří například využívání digitálních identifikátorů autorů (ORCID, [www.orcid.org](http://www.orcid.org)) a jejich příspěvků (DOI, [www.doi.org](http://www.doi.org)), vytvoření šablony pro autory hojně používaný citační program EndNote ([www.endnote.com](http://www.endnote.com))<sup>7</sup>, vystavování grafických abstraktů příspěvků<sup>8</sup> nebo nabízení strojového překladu příspěvků do anglického jazyka<sup>9</sup> a souběžné vystavení původního znění i jeho překladu.

O všech těchto novinkách a změnách, o aktuálním dění v Chemických listech i o našich krátkodobých a dlouhodobých plánech a vizích bych vás moc rád informoval v rámci svého vystoupení.

**LITERATURA**

1. Drašar P.: Chem. Listy 115, 506 (2021).
2. Kratochvíl B., Drašar P.: Chem. Listy 115, 498 (2021).
3. Vyskočil V.: Chem. Listy 112, 270 (2018).
4. Vyskočil V.: Chem. Listy 113, 1 (2019).
5. Vyskočil V.: Chem. Listy 114, 717 (2020).
6. Vyskočil V.: Chem. Listy 115, 497 (2021).
7. <http://www.chemicke-listy.cz/files/Chemicke%20Listy%20&%20CCSSS.ens>, staženo 14. 6. 2022.
8. Jurášek M., Benešová E., Vyskočil V.: Chem. Listy 116, 99 (2022).
9. Kratochvíl B., Bělohav Z.: Chem. Listy 115, 338 (2021).

**PL-07  
VYBRANÉ VYŠETŘOVACÍ ÚKONY U TRESTNÉHO  
ČINU VRAŽDY****JOSEF MAREŠ<sup>a</sup>, LUBOŠ VALERIÁN<sup>b</sup>**

*<sup>a</sup> Policie ČR – SKPV Úřad dokumentace a vyšetřování zločinů komunismu, Praha, <sup>b</sup> Krajské ředitelství policie Moravskoslezského kraje, Ostrava*

V rámci tohoto příspěvku autoři shrnou své zkušenosti z práce u Policie ČR, zejména v oblasti vyšetřování závažných kriminálních činů, jako jsou vraždy. Oba autoři mají s vyšetřováním těchto zločinů více jak dvacetileté zkušenosti. Tento příspěvek bude rovněž zacílen na využití dokumentace úkonů pomocí videa. Budou ukázány průběhy výsledků, konfrontace, rekonstrukce, vyšetřovací pokusy, a to vždy s krátkým komentářem k případu.

## 1L-01

ANALYTICKÁ DERIVATIZACE LÁTEK ANEB  
OBKURNOSTI V PLYNOVÉ CHROMATOGRAPHII

**PETR BARTÁK, PETR BEDNÁŘ, JANA SKOPALOVÁ,  
JANA NÁDVORNÍKOVÁ, RADEK JERGA, DANA  
ŠTOLBOVÁ**

*Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta,  
Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 779 00  
Olomouc  
petr.bartak@upol.cz*

Cílená chemická přeměna zkoumané látky během zpracování a přípravy vzorku k analýze nebo během vlastní analýzy, může být důležitým krokem, který přináší řadu výhod. Tato tzv. analytická derivatizace se uplatňuje univerzálně v různých oblastech analytické chemie. Ve spojení s plynovou chromatografií patří k obvyklým benefitům derivatizace zejména zvýšení těkavosti analytů, zvýšení jejich tepelné stability, snížení polarit, potlačení sorpcí, zlepšení selektivity a limitů detekce, zvýšení výtěžků extrakce, zlepšení separace strukturně blízkých sloučenin, zlepšení podmínek pro identifikaci cílových látek a v některých případech i zrychlení vlastní analýzy<sup>1-3</sup>.

Príspevek v prehľadu shrnuje vybrané postupy derivatizace látek v plynové chromatografii, zahrnuje běžná i některá méně běžná derivatizační činidla, reakce a postupy používané pro chemickou přeměnu analyzovaných látek. Důraz je kladen na příklady konkrétních aplikací derivatizačních postupů při analýze vzorků potravin, léčiv biologických vzorků, vzorků životního prostředí apod. Zmíněny budou i některé méně typické aspekty derivatizace<sup>4,5</sup> a příklady méně obvyklých aplikací derivatizačních postupů zacílených například na chemickou přeměnu matricových komponent, kdy cílem derivatizace není změna vlastností cílového analytu, ale naopak modifikace interferujících složek, potlačení jejich vlivu a zlepšení selektivity, robustnosti, meze detekce a dalších analytických parametrů při analýze některých typů vzorků<sup>6</sup>.

*Tato práce vznikla za podpory grantů GA ČR 20-07350S a IGA\_PrF\_2022\_023.*

## LITERATURA

1. Blau K., Halket J.: *Handbook of Derivatives for Chromatography*. John Wiley & Sons Ltd., Chichester 1993.
2. Drozd J.: *Chemical Derivatization in Gas Chromatography*. Elsevier, Amsterdam 1981.
3. Rocha F. R., Zagatto E. A. G.: *Molecules* 27, 1563 (2022).
4. Sajid M., Plotka-Wasylyk J.: *TrAC, Trends Anal. Chem.* 102, 16 (2018).
5. Lavilla I., Romero V., Costas I., Bendicho C.: *TrAC, Trends Anal. Chem.* 61, 1 (2014).
6. Papoušek R., Žák S., Štverka P., Gavenda A., Borovcová L., Barták P.: *J. Sep. Sci.* 42, 1629 (2019).

## 1L-02

VÝVOJ ELEKTROANALYTICKÝCH METOD PRO  
DETEKCI ŽLUČOVÝCH KYSELIN A JEJICH  
KONJUGÁTŮ

**KRISTÝNA JELŠÍKOVÁ<sup>a</sup>, EVA BLÁHOVÁ<sup>a</sup>,  
KAROLÍNA PETRANOVÁ<sup>a</sup>, JAN KLOUDA<sup>a</sup>, JANA  
SKOPALOVÁ<sup>b</sup>, KAROLÍNA SCHWARZOVÁ-  
PECKOVÁ<sup>b</sup>**

*<sup>a</sup> Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Albertov 6/2030, 128 43 Praha 2,  
<sup>b</sup> Univerzita Palackého, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc  
kristyna.jelsikova@natur.cuni.cz*

Žlučové kyseliny jsou steroidní látky, které vznikají v játrech jako produkt metabolismu cholesterolu. Takto vzniklé žlučové kyseliny se nazývají primární (cholová a chenodeoxycholová kyselina). Tyto metabolity jsou dále konjugovány s taurinem nebo glycinem. Tato konjugace zvyšuje rozpustnost látek ve vodě a usnadňuje jejich vylučování do moči. Tímto způsobem tedy dochází k vlastnímu vylučování metabolitů cholesterolu a tím i ke snížení množství cholesterolu v lidském těle<sup>1</sup>. Žlučové kyseliny ve své struktuře obsahují steroidní jádro, které není elektrochemicky aktivní. Jeho elektrochemická aktivita, a tudíž i elektrochemická aktivita žlučových kyselin závisí na dvojných vazbách, které jsou v steroidním skeletu přítomny a na funkčních skupinách, které jsou na něj navázány<sup>2</sup>.

Tato práce se zabývala studiem elektrochemického chování cholové a chenodeoxycholové kyseliny a jejich konjugátů s taurinem a glycinem pomocí cyklické voltametrie na borem dopované diamantové elektrodě. Konkrétně byl zkoumán rozdíl mezi odezvou žlučových kyselin a jejich konjugátů v oblasti kladných potenciálů v prostředí acetonitril-kyselina chloristá (obsah vody ca 0,55 %). Všechny studované látky obsahují hydroxylovou skupinu 7 $\alpha$ , a mohou tedy podléhat dehydratační reakci, což vede k aktivaci steroidního jádra pro elektrochemickou oxidaci<sup>3</sup>. Výsledkem je anodický ireverzibilní signál při ca +1,2 V (vs. Ag/AgNO<sub>3</sub> v acetonitrilu), který poskytuje základ pro jejich elektrochemickou detekci.

*Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (projekt GAČR 19-11268S), Grantové agentury Univerzity Karlovy (projekt GAUK 362621) a Specifického univerzitního výzkumu (SVV 260560).*

## LITERATURA

1. Haslewood G. A.: *J. Lipid Res.* 8, 535 (1967).
2. Klouda J., Berek J., Nesměrák K., Schwarzová-Pecková K.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 47, 384 (2017).
3. Klouda J., Nesměrák K., Kočovský P., Berek J., Schwarzová-Pecková K.: *Bioelectrochemistry*. 134, 107539 (2020).

## 1L-03

## ISOLATION AND CHARACTERISATION OF EXOSOMES AS A POTENTIAL PROSTATE CANCER BIOMARKER

**NATÁLIA KOŠŤOVÁ<sup>a</sup>, TOMÁŠ BERTÓK<sup>a</sup>, KATARÍNA KOZICS<sup>b</sup>, ALENA GÁBELOVÁ<sup>b</sup>, EDUARD JANÉ<sup>a</sup>, MICHAL HÍREŠ<sup>a</sup>, LUCIA PAŽITNÁ<sup>a</sup>, JAROSLAV KATRLÍK<sup>a</sup>, JÁN TKÁČ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Chemický ústav SAV, v. v. i., Dúbravská cesta 5807/9, Bratislava 845 38, <sup>b</sup> Biomedicínske centrum SAV, v. v. i., Dúbravská cesta 9, Bratislava 845 38  
natalia.svecova@savba.sk

Prostate cancer (PCa) is the most common type of cancer diseases in men and is one of the most frequently diagnosed cancer in more than half of the countries of the world<sup>1</sup>. Prognosis is favorable if the diagnosis is made at an early stage. Most of the cases is diagnosed when the cancer has spread outside of the prostate. Since PCa diagnostics lacks sensitivity and specificity, liquid biopsy is taking on an increasingly important role in early diagnosis research. Only a limited range of cancer biomarkers are currently available for cancer diagnosis. Extracellular vesicles, especially exosomes, are considered as rich source of biomarkers<sup>2</sup>. This work is focused on analysis of two different prostate cell lines, i.e. benign/normal RWPE1 prostate epithelial cells and cancerous 22Rv1 prostate epithelial cells. The performance of four different commercially available kits for exosome isolation based on different principles is compared. Storage conditions and other characteristics of isolated exosomes are investigated in the subsequent experiments.

*The authors wish to acknowledge the support received from the Ministry of Health of the Slovak Republic under project registration no.2019/68-CHÚSAV-1. The authors also wish to acknowledge the financial support received from the Slovak Research and Development Agency APVV 20-0476, APVV 17-0300 and from VEGA 2/0120/22. This publication is the result of the project implementation CEMBAM – Centre for Medical Bio-Additive Manufacturing and Research, ITMS2014+: 313011V358 supported by the Operational Programme Integrated Infrastructure funded by the European Regional Development Fund.*

## REFERENCES

1. Sung H., Ferlay J., Siegel R. L., Laversanne M., Soerjomataram I., Jemal A., Bray F.: *CA. Cancer J. Clin.* 71, 209 (2021).
2. Hanjani N. A., Esmaelizad N., Zanganeh S., Gharavi A. T., Heidarizadeh P., Radfar M., Omid F., MacLoughlin R., Doroudian M.: *Critical Reviews in Oncology/Hematology* 169, 103565 (2022).

## 1L-04

## VOLTAMMETRIC DETERMINATION OF PESTICIDE DICHLOFLUANID ON A BORON-DOPED DIAMOND ELECTRODE

**ZUZANA KRAMPLOVÁ<sup>a</sup>, OLEKSANDR METVIEIEV<sup>b</sup>, RENÁTA ŠELEŠOVSKÁ<sup>b</sup>, ANDREA PURDEŠOVÁ<sup>a</sup>, MARIÁN VOJS<sup>c</sup>**

<sup>a</sup> University of Ss. Cyril and Methodius in Trnava, Faculty of Natural Sciences, Department of Chemistry, Nám. J. Herdu 2, SK-917 01, Trnava, Slovak Republic, <sup>b</sup> University of Pardubice, Faculty of Chemical, Technology, Institute of Environmental and Chemical Engineering, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic, <sup>c</sup> Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Electrical Engineering and Information Technology, Institute of Electronics and Photonics, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovak Republic.  
kramploval@ucm.sk

Dichlofluánid (DFA) is an organofluorine, organochlorine compound and a phenylsulfamide fungicide. Since DFA act as acaricide and an antifungal agrochemical, it is widely used to control many fungal diseases in plants, as well as in wood preservatives. For the determination of DFA and its residues different methods have been developed, including gas chromatography–mass spectrometry, ultra high-performance liquid chromatography–tandem mass spectrometry and so on<sup>1</sup>. Despite great sensitivity and accuracy, they are expensive, time-consuming and do not allow real-time monitoring. Voltammetric methods represent simple, inexpensive, and sensitive alternative suitable for the monitoring of electroactive organic pollutants.

One of the most stable electrode materials that allows electrochemical detection in both the cathodic and anodic areas of the potential window is boron-doped diamond (BDD)<sup>2</sup>. Such electrode provides two oxidation peaks of DFA at +1,28 V and +1,76 V. The less positive peak in lightly acidic pH range (Britton-Robinson buffer, pH 6), where current responds showed good stability, was used for DFA determination. After optimization of DPV and SWV parameters, calibration curves were measured. Best results were achieved with DPV when the LOD was obtained of 0.33 μM. This method was applied in analysis of spiked samples of natural water with very good recovery (98.5–101,7%).

*This research has been supported by KEGA No. 025UCM-4/2021, CEEPUS Network CZ-0212-15-2122, FPV-11-2022, GA CR (No. 20-01589S), and University of Pardubice (No. SGSFChT\_2022\_001).*

## REFERENCES

1. Zhou X., Cao S., Li X., Xi C., Ding X., Xu F., Hu J., Chen Z.: *Journal of Chromatographic Science* 54 (5), 858 (2016).
2. Schwarzova-Peckova K., Vosahlova J., Barek J., Sloufova I., Pavlova E., Petrak V., Zavazalova J.: *Electrochim. Acta* 243, 170 (2017).

**1L-05****STANOVENÍ GLYFOSÁTU A JEHO DERIVÁTU  
AMPA POMOCÍ LC-MS/MS PRÍMÝM NÁSTRÍKEM –  
JE TO VŮBEC MOŽNÉ A SPLNIT LEGISLATIVNÍ  
LIMIT?****SYLVIE KRÍŽENECKÁ, JITKA TOLASZOVÁ, HANA  
ŠAFRANKOVÁ, NIKOLA BARTOŇOVÁ***Fakulta životního prostředí, Univerzita Jana Evangelisty  
Purkyně v Ústí nad Labem, Pastuerova 15, 400 96 Ústí nad  
Labem,  
sylvie.krizenecka@ujep.cz*

Glyfosát má systematický název N-(fosfonomethyl) glycin a patří do chemické skupiny derivátů kyseliny fosforečné. Jedná se o poměrně malou molekulu, která obsahuje ve své vnitřní struktuře tři polární funkční skupiny (karboxylovou, fosfátovou a amino skupinu). Hlavním metabolitem glyfosátu je aminomethyl fosforečná kyselina (AMPA).

Ke stanovení těchto dvou analytů se nejčastěji používá metoda s derivatizací pomocí FMOC-Cl (9-fluorenyl (methyl) chloroformát), následované SPE a zakončené kapalinovou chromatografií s tandemovou hmotnostní spektrometrií (LC-MS/MS)<sup>1</sup>. Pokud se chceme vyhnout zdlouhavému derivatizačnímu kroku, lze použít metody s využitím iontové chromatografie (IC) s použitím vodivostního detektoru<sup>2</sup> nebo s integrovanou pulsní ampérometrickou detekcí<sup>3</sup>, s mezí detekce v rozmezí 42–53  $\mu\text{g l}^{-1}$ . Lepší citlivostí bylo pro stanovení glyfosátu a AMPA v podzemní a povrchové vodě dosaženo s využitím IC – s tandemovou hmotnostní spektrometrií (ESI-MS)<sup>4</sup>. Pro zvýšení odezvy signálu je možné použít i přídavek EDTA (ethyldiamintetraoctovou kyselinu) pro tvrdé vody, kdy autoři uvádějí limit stanovitelnosti 1  $\mu\text{g l}^{-1}$  pro glyfosát a 1,75  $\mu\text{g l}^{-1}$  pro AMPA<sup>5</sup>. Bohužel podle legislativního limitu v ČR je v pitných vodách přípustná koncentrace glyfosátu nebo jeho derivátu pouze 0,1  $\mu\text{g l}^{-1}$ . Při použití podmínek uváděných v literatuře bylo možné pomocí LC-MS/MS stanovit tyto analyty pouze v pitné vodě. U vod s obsahem iontů ( $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$  nebo  $\text{Fe}^{3+}$ ) dochází k ovlivnění separace a ztráty citlivosti.

*Autor děkuje pomoci poskytnuté Výzkumnou infrastrukturou NanoEnvicZ, podporovanou Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky v rámci projektu č. LM2018124.*

**LITERATURA**

- Hanke I., Singer H., Hollender J.: *Anal. Bioanal. Chem.* **391**, 2265 (2008).
- Zhu Y., Zhang F., Tong C. W.: *J. Chromatography A* **850**, 297 (1999).
- Sato K., Jin J., Takeuchi T., Miwa T., Suenami K., Takekoshi Y., Kanno S.: *J. Chromatography A* **919**, 313 (2001).
- Bauer K., Knepper T. P., Maes A., Schatz V., Voihsel M.: *J. Chromatography A* **837**, 117 (1999).
- Ulrich J. C., Ferguson P. L.: *Anal. Bioanal. Chem.* **413**, 3763 (2021).

**1L-06****IONTOVÁ MOBILITA: Z LETIŠTĚ  
K HMOTNOSTNÍMU SPEKTROMETRU****KAREL LEMR, MARIANNA NYTKA***Univerzita Palackého v Olomouci, Katedra analytické  
chemie, Přírodovědecká fakulta, 17. listopadu 12, 779 00  
Olomouc  
karel.lemr@upol.cz; marianna.nytka@upol.cz*

Iontově mobilní spektrometrie je samostatně využívána v řadě oblastí, od kontroly čistících operací výrobního zařízení ve farmaceutickém průmyslu po bezpečnostní kontroly na letištích<sup>1–3</sup>. Stále častěji se však s ní můžeme setkat v kombinaci s hmotnostní spektrometrií (IM-MS). Iontově mobilní separace závisí na hmotnosti a náboji iontů, podobně jako je tomu u hmotnostní spektrometrie, ale navíc také na jejich tvaru. Tím přispívá ke zlepšení selektivity měření. Ačkoli spojení IM-MS bylo realizováno již v šedesátých letech minulého století, jeho významné rozšíření nastává v souvislosti s dostupností komerčních přístrojů zhruba v posledních 15 letech<sup>4,5</sup>.

Možnosti iontové mobility lze demonstrovat na vybraných příkladech z našeho pracoviště, a to separaci oligosacharidů odvozených od kyseliny hyaluronové<sup>6,7</sup>, studiu interakce adrenalinu s peptidy reprezentujícími vazebná místa  $\beta_2$ -adrenoreceptoru<sup>8</sup>, zkoumání původu indiga<sup>9</sup> nebo na analýze isomerních syntetických kationů. V posledním případě sehrála významnou roli vyšší rozlišovací schopnost cyklické iontové mobility. Zlepšování tohoto parametru je jedním ze současných trendů vývoje instrumentace pro iontově mobilní separace.

Spojení IM-MS umožňuje zlepšit poměr signálu k šumu, separovat třídy iontů (např. ionty s různým počtem nábojů), odlišit konformery nebo isomery. Měření srážkových průřezů přispívá k identifikaci látek a studiu prostorového uspořádání iontů (např. nekovalentních komplexů). Zvažovat je však třeba pokles transmise iontů a pracovní cyklus přístroje.

*Poděkování patří kolegům, kteří se podíleli na vzniku společných publikací<sup>6–9</sup>, a za finanční podporu grantům OA ITI – ARTECA, CZ.02.1.01/0.0/0.0/17\_048/0007378, MŠMT ČR, IGA\_PrF 2022\_023, Univerzita Palackého v Olomouci.*

**LITERATURA**

- Armenta S., Alcalá M., Blanco M.: *Anal. Chim. Acta* **703**, 114 (2011).
- Armenta S., Esteve-Turrillasa F. A., Alcalá M.: *Anal. Methods* **12**, 1163 (2020).
- Eiceman G. A.: *Trends Anal. Chem.* **21**, 259 (2002).
- May J. C., McLean J. A.: *Anal. Chem.* **87**, 1422 (2015).
- Dodds J. N., Baker E. S.: *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **30**, 2185 (2019).
- Hermannová M., Iordache A.-M., Slovák K., Havlíček V., Pelantová H., Lemr K.: *J. Mass Spectrom.* **50**, 854 (2015).
- Borovcová L., Hermannová M., Pauk V., Šímek M., Havlíček V., Lemr K.: *Anal. Chim. Acta* **981**, 71 (2017).
- Liu Y., Liu Y., Nytká M., Huang S. R., Lemr K., Tureček F.: *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* **32**, 1041 (2021).
- Pauk V., Michalčáková J., Jagošová K., Lemr K.: *Dyes Pigm.* **197**, 109943 (2022).

**1L-07  
VOLTAMETRICKÉ TECHNIKY PŘI MONITORINGU  
FARMAKOLOGICKÝ VÝZNAMNÝCH LÉČIV  
NERVOVÉHO SYSTÉMU**

**VOJTĚCH HRDLIČKA<sup>a</sup>, CHOÍNSKA-  
MLYNARCZYK<sup>a,b</sup>, JANA SKOPALOVÁ<sup>c</sup>, VILIAM  
KOLIVOŠKA<sup>a</sup>, RENÁTA ŠELEŠOVSKÁ<sup>d</sup>, JAN  
LANGMAIER<sup>a</sup>, TOMÁŠ NAVRÁTIL<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.,  
Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, <sup>b</sup> Karlova Univerzita,  
Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO  
laboratoř elektrochemie, životního prostředí, Albertov 6,  
128 00 Praha 2, <sup>c</sup> Univerzita Palackého v Olomouci,  
Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie,  
17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, <sup>d</sup> Univerzita Pardubice,  
Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního  
a chemického inženýrství, Studentská 573, 532 10 Pardubice.  
tomas.navratil@jh-inst.cas.cz

Léky (léčiva) nervového systému patří obecně nejen v České republice, ale i v drtivé většině vyspělých zemí k velmi často (zne)užívaným látkám. Proto stanovení nejen samotných účinných látek v procesu výroby, ale jejich analýza a sledování jejich metabolitů v tělních tekutinách stejně jako v environmentálně významných matricích představuje důležitý úkol pro soudobou analytickou chemii. Výzkum realizovaný našimi skupinami je zacílen na využití voltametrických metod při sledování nejčastěji předepisovaných, zneužívaných a též nově zaváděných léků přesně specifikovaných struktur a/nebo definovaných vlastností určených k léčbě nervového systému. V jeho rámci jsou vyvíjeny nové nebo alternativní metody k běžně používaným voltametrickým metodám použitelným k charakterizaci cílových sloučenin<sup>1</sup>. Za účelem zlepšení charakteristik stanovení a chemometrických parametrů je naše pozornost též věnována konstrukci nových elektrochemických senzorů, detektorů (např. SPE<sup>2</sup>, 3D tištěných elektrod<sup>3</sup>) a elektrochemických cel na bázi modifikovaných/nemodifikovaných tradičních i netradičních materiálů, pokud možno použitelných v místě péče o pacienta.

*Tuto práci podpořily granty GA ČR 20-07350S, Specifický vysokoškolský výzkum (projekt SVV260560) a GA UK (projekt 373521).*

**LITERATURA**

- Langmaier J., Maier V., Samec Z.: ChemElectroChem 8, 2519 (2021).
- Matvieiev O., Selesovska R., Vojs M., Marton M., Michniak P., Hrdlicka V., Hatala M., Janiková L., Chylková J., Skopalova J., Cankar P., Navratil T.: Biosensors 12, 241 (2022).
- Choinska M., Hrdlicka V., Fischer J., Dejmekova H., Míka L., Vaneckova E., Kolivoska V., Navratil T.: Biosensors 12, 308 (2022).

**1L-08  
KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZA: „-OLMICS“  
EXPERIMENTY**

**JAN PETR, DANIEL BARON, PETRA ŠVECŮVÁ,  
NAVID NIAEI, SOODABEH HASSANPOUR, THUY  
DUONG NGUYENOVÁ, TOMÁŠ PLUHÁČEK**

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

Rozvoj tzv. „-omics“ technik v posledním desetiletí přinesl nové možnosti v řadě odvětví od vlastní analytické chemie, přes např. potravinářskou chemii, po medicínu. Rozeznáváme mnoho oborů s názvem se stejnou koncovkou dokládající využití zmíněných „-omics“ přístupů, např. proteomika, genomika, transkriptomika, metabolomika, lipidomika nebo interaktomika. „-Omics“ techniky pak většinou představují kombinaci vysoce účinné separace ve spojení s hmotnostní spektrometrií, případně další vysoce citlivou detekcí, často s využitím pokročilých statistických přístupů.

V našem příspěvku si dovolueme shrnout přístupy kapilární elektroforézy, včetně jejího spojení s hmotnostní spektrometrií, k různým praktickým problémům, které byly řešeny v naší laboratoři. Tento „Olomoucký mix“ („-OLmics“) pak bude představovat zejména:

- stanovení karnosinu a  $\beta$ -alaninu v tělních tekutinách pomocí derivatizace AccQ a CE ve spojení s tandemovou MS,
- online prekoncentraci pomocí nametání („sweeping“) pro stanovení ultrastopových koncentrací nečistot oxaliplatinu pomocí CE ve spojení s ICP-MS<sup>1</sup>,
- charakterizaci syntetického bioléciva, glatiramer acetátu, pomocí CE v kyselém pH s využitím PEG8000 jako aditivita pro dělení jednotlivých polypeptidů<sup>2</sup>,
- stanovení enantiomerů tamsulosinu pomocí CE-ESI-MS s migrací chirálního selektoru v opačném směru, než je migrace analytů<sup>3</sup>, a
- charakterizaci sulfatovaných  $\beta$ -cyclodextrinů od různých výrobců pomocí CE-ESI-MS a dalších technik (IR, NMR).

*Tato práce vznikla za podpory projektu IGA\_PrF\_2022\_023.*

**LITERATURA**

- Švecová P., Baron D., Schug, K.A., Pluháček T., Petr J.: Microchem. J. 172, 106967 (2022).
- Niaei N., Baron D., Vališ M., Petr J.: v přípravě.
- Konderlová K., Šebestová A., Baron D., Petr J.: v přípravě.

## 1L-09

**HLADKÉ POVRCHY BOREM DOPOVANÝCH DIAMANTOVÝCH ELEKTROD A JEJICH VYUŽITÍ PRO ELEKTROANALÝZU****KAROLINA SCHWARZOVÁ-PECKOVÁ<sup>a</sup>, MICHAL ZELENÝ<sup>a</sup>, PETER CĀMBAL<sup>a</sup>, JAN FISCHER<sup>a</sup>, SOUMEN MANDAL<sup>b</sup>, OLIVER WILLIAMS<sup>b</sup>, ANDREW TAYLOR<sup>c</sup>, SIMONA BALUCHOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Albertov 6, 128 43 Praha 2, Česká republika, <sup>b</sup> Cardiff University, School of Physics and Astronomy, Queen's Buildings, The Parade, Cardiff, CF24 3AA, Velká Británie, <sup>c</sup> Fyzikální ústav Akademie věd České republiky, v.v.i., Na Slovance 1999/2, 182 21 Praha 8, Česká republika  
michal.zelensky@natur.cuni.cz

Polykrystalické filmy borem dopovaného diamantu (BDD) se staly oblíbeným elektrodoým materiálem díky širokému oknu obzvláště v anodické oblasti, nízkému kapacitnímu proudu a odolnosti vůči pasivaci. Jejich vlastnosti a struktura jsou určeny podmínkami při přípravě metodou chemické depozice par na nukleační diamantová centra a následnou úpravou povrchu vedoucí k různému obsahu kyslíkatých funkčních skupin na povrchu BDD. Heterogenní charakter polykrystalických BDD filmů je dán množstvím krystalických rovin a hran a variabilitě ve velikosti krystalů, které ovlivňují inkorporaci bóru, množství sp<sup>2</sup> uhlíkových nečistot a možnosti terminace povrchu<sup>1</sup>.

V tomto příspěvku budou představeny dva typy BDD elektrod s relativně hladkými povrchy v porovnání s polykrystalickými filmy: Monokrystalické (single-crystal) BDD filmy (SC BDD) připravené depozicí na nedopované monokrystalové diamantu s krystalovou orientací {113}, {115} a {118}) a polykrystalické BDD vyleštěné kombinací chemického a mechanického působení<sup>2</sup> (chemical-mechanical polishing; CM BDD). Byla provedena komplexní spektrální, morfologická a elektrochemická charakterizace těchto filmů a jejich vlastnosti porovnány s polykrystalickými BDD filmy. SC BDD a CM BDD elektrody obecně vykazují rychlejší kinetiku elektronového přenosu než polykrystalické. Tento rozdíl je významnější pro méně dopované filmy a promítá se vyšší citlivosti voltametrických metod pro dopamin použitý jako modelový analyt.

*Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (projekt GAČR 20-03187S) a Specifického univerzitního výzkumu Univerzity Karlovy (SVV 260560).*

## LITERATURA

- Baluchová S., Daňhel A., Dejmková H., Ostatná V., Fojta M., Schwarzová-Pecková K.: *Anal. Chim. Acta* 1077, 30 (2019).
- Thomas E. L. H., Nelson G. W., Mandal S., Foord J. S., Williams O. A.: *Carbon* 68, 473 (2014).

## 1L-10

**EVALUATION OF THE UNCERTAINTY OF QUANTITATIVE AND QUALITATIVE CHEMICAL INFORMATION****RICARDO BETTENCOURT DA SILVA**

*Centro de Química Estrutural, Institute of Molecular Sciences, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade de Lisboa, Campo Grande, 1749-016 Lisboa, Portugal  
rjsilva@fc.ul.pt*

Almost all research on chemistry, environmental sciences, medical sciences, biology and many other scientific areas depends on quantitative or qualitative chemical analysis results. However, the results from these analyses are uncertain due to the heterogeneity and variation of studied systems, and due to random and systematic effects affecting the characterisation of the analysed samples<sup>1,2</sup>.

This communication discusses how the uncertainty of collected information affects their interpretation and presents some user-friendly MS-Excel files that can be used to make qualitative and quantitative analysis objective and adequately interpreted.

It is discussed how to evaluate the uncertainty of quantifications performed by instrumental analysis based on linear unweighted or weighted calibrations<sup>3</sup>, how to estimate the mean value of a parameter from a vast and heterogeneous land or river area<sup>4</sup>, and how to guarantee reliable identifications of trace levels of compounds in complex matrices by GC/MS/MS<sup>5</sup>.

## REFERENCES

- Eurachem/CITAC guide: *Quantifying Uncertainty in Analytical Measurement*, Third Edition, 2012.
- Eurachem/CITAC Guide: *Assessment of performance and uncertainty in qualitative chemical analysis*, First Edition, 2021.
- Pluháček T., Milde D., Součková J., Bettencourt da Silva R.: *Talanta* 225, 122044 (2020).
- Borges C., Palma C., Bettencourt da Silva R.: *Anal. Chem.* 91, 5698 (2019).
- Narciso J., Luz S., Bettencourt da Silva R.: *Anal. Chem.* 91, 6638 (2019).



### 1L-11 ELEKTROLYTICKÉ PŘEMĚNY MORFINU

NIKOLA MIKULOVÁ<sup>a</sup>, RADEK JERGA<sup>a</sup>, MONIKA ZAJACOVÁ CECHOVÁ<sup>a</sup>, PETR BEDNÁŘ<sup>a</sup>, PETR CANKAŘ<sup>b</sup>, JAKUB STÝSKALA<sup>b</sup>, PETR BARTÁK<sup>a</sup>, JANA SKOPALOVÁ<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Katedra analytické chemie, <sup>b</sup> Katedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 77900 Olomouc  
jana.skopalova@upol.cz

Morfin je hlavní alkaloid obsažený v opiu, které se získává z máku setého (*Papaverum somniferum*). Opium bylo tisíce let využíváno pro mírnění bolesti. V roce 1805 byla popsána izolace samotného morfinu, který se stal vhodnou a čistou alternativou pro použití v medicíně<sup>1</sup>. I když v dnešní době existuje celá řada účinnějších syntetických opioidů, přesto je morfin stále používán v lékařství jako silné analgetikum, např. při léčbě pacientů s rakovinou<sup>2</sup>. Nelegálně bývá zneužíván jako droga, zejména pro výrobu heroínu.

Analýza morfinu a jeho metabolitů se provádí v biologických vzorcích s využitím separačních metod, převážně kapalinové chromatografie s různými způsoby detekce. Elektrochemickou aktivitu morfinu lze s výhodou využít k jeho stanovení elektrochemickými metodami, které jsou instrumentálně nenáročné, rychlé a citlivé<sup>3</sup>. Stanovení je založeno na snadné oxidaci fenolové skupiny morfinu. Mechanismus této reakce byl v minulosti podrobně studován a je popisován tvorbou dimerní struktury pseudomorfinu<sup>4</sup>.

V této práci jsme se zabývali studiem elektrolytické oxidace morfinu na Pt elektrodě v kyselých, neutrálních a alkalických vodných roztocích. LC-MS analýzou byl v kyselých roztocích oxidovaných při potenciálech kolem 1 V (vs. SCE) identifikován jako hlavní reakční produkt dihydroxymorfin. V neutrálním a alkalickém prostředí byla sledována převážně tvorba monomerních produktů s chinoidní strukturou.

Tato práce vznikla za podpory grantů GA ČR 20-07350S a IGA\_PrF\_2022\_023.

#### LITERATURA

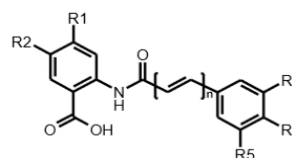
- Kozák J., Lejčko J., Vrba I.: *Opioidy*. Mladá fronta, Praha 2018.
- Lee Y. J., Suh S. Y., Song J., Lee S. S., Seo A. R., Ahn H. Y., Lee M. A., Kim C. M., Klepstad P.: *BMC Palliat. Care* 14, 53 (2015).
- Amini R., Rahimpour E., Jouyban A.: *Bioanalysis* 12, 1161 (2020).
- Garrido J. M. P. J., Delerue-Matos C., Borges F., Macedo T. R. A., Oliveira-Brett A. M.: *Electroanalysis* 16, 1419 (2004).

### 1L-12 STANOVENIE AVENANTRAMIDOV V ODRODÁCH OVSA METÓDOU KVAPALINOVEJ CHROMATOGRRAFIE

JOZEF SOKOL, MÁRIA MALIAROVÁ, TIMOTEJ JANKECH, ANDREA PURDEŠOVÁ

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

Ovos je jedinečná obilovina obsahujúca bioaktívne fotochemikálie, ako sú polyfenolové zlúčeniny avenantramidy. Viac ako 25 jedinečných zlúčenín, avenantramidov, existuje výlučne v ovse. Na obr. 1 sú uvedené štruktúry analyzovaných avenantramidov.



| Avenantr-<br>amidy | n | Substituent |    |                  |    |    |
|--------------------|---|-------------|----|------------------|----|----|
|                    |   | R1          | R2 | R3               | R4 | R5 |
| 2p                 | 1 | H           | OH | H                | OH | H  |
| 2c                 | 1 | H           | OH | OH               | OH | H  |
| 2f                 | 1 | H           | OH | OCH <sub>3</sub> | OH | H  |

Obr. 1. Štruktúra avenantramidov

V našej štúdií bolo analyzovaných 31 rôznych svetových odrôd ovsa (*Avena sativa* L.) pestovaných v dvoch po sebe nasledujúcich rokoch. V extraktoch ovsa boli identifikované a kvantifikované avenantramidy (označené ako avenantramid 2c, 2p, 2f a celkové avenantramidy) metódou HPLC. Rozomleté vzorky ovsa boli zmiešané s v zmesi metanol-voda a následne podrobené extrakcii podporovanej ultrazvukom pri 55 °C. Následne sa vzorky scentrifugovali a odobrala sa alikvotná časť na HPLC analýzu. Analýza sa vykonávala na kolóne s fázou C18, Waters Symmetry. Na gradientovú elúciu boli použité roztoky: fáza A 0,1 % vodný roztok kyseliny mravčej, fáza B 0,1 % metanolickej roztok kyseliny mravčej. Detekcia bola vykonávaná DAD detektorom pri 320 nm. Metóda vykazovala linearitu v koncentračnom rozsahu 0,05–5 ug/ml. Korelačné koeficienty boli okolo 0,9998. Hodnoty LOD/LOQ AVN 2c bola 25/70 ng/ml; LOD/LOQ AVN 2p bola 20/60 ng/ml a LOD/LOQ AVN 2f bola 40/110 ng/ml. V odrodách ovsa boli zaznamenané medziročné výkyvy AVN, ktoré boli spôsobené meteorologickými podmienkami. Najvyšší obsah celkových avenantramidov vykazovali odrody OZÓN (Nemecko, 2014 – 22,26 mg/kg), KENTUCKY (USA, 2014 – 110,70 mg/kg), HUCUL (Slovensko, 2014 – 80,14 mg/kg). Tieto odrody ovsa sú zároveň aj najzaujímavejšie odrody na pestovanie a šľachtenie.

Práca vznikla za podpory grantu Kega 025UCM-4/2021.

### 1L-13 TIŠTĚNÉ SENZORY S BOREM DOPOVANOU DIAMANTOVOU ELEKTRODOU MODIFIKOVANOU ZLATÝMI NANOČÁSTICEMI V ELEKTROANALÝZE

RENÁTA ŠELEŠOVSKÁ<sup>a</sup>, OLEKSANDR MATVIEIEV<sup>a</sup>,  
MARIAN VOJS<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická,  
Ústav environmentálního a chemického inženýrství,  
Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika,

<sup>b</sup> Slovenská technická univerzita v Bratislavě, Fakulta  
elektrotechniky a informatiky, Ústav elektroniky a fotoniky,  
Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovenská republika.  
renata.selesovska@upce.cz

Jedním z hlavních trendů v oblasti elektroanalytické chemie je vývoj nových elektrodových materiálů, senzorů a inovativních uspořádání elektrochemických článků. Cílem je zvýšení citlivosti a selektivity měření. Výhodou je možnost miniaturizace a použití v přenosných analyzátoch, což vede k vývoji nástrojů pro tzv. point-of-care (v místě péče) testování (POCT)<sup>1</sup>. Obecně tento pojem zahrnuje možnost analýzy v místě odběru vzorků bez nutnosti transportu do laboratorů.

Tištěné senzory (SPE) představují jednoduché řešení pro miniaturizaci elektrochemické analýzy. Výhodou je možnost levné výroby velkého množství senzorů různých tvarů a uspořádání a možnost analyzovat velmi malé objemy vzorků<sup>2</sup>. Volba vhodné pracovní elektrody je s ohledem na vlastnosti SPE klíčová. Spojení s výjimečnými elektrochemickými vlastnostmi borem dopované diamantové elektrody (BDDE)<sup>3</sup> představuje perspektivní nástroj pro POCT<sup>4,5</sup>. Další možností, jak zvýšit citlivost či selektivitu elektrochemických metod, je modifikace povrchu běžně používaných pracovních elektrod<sup>11</sup>.

Cílem této práce je studium elektrochemických vlastností nových SPE s BDDE modifikovanou zlatými nanočásticemi a jejich aplikace při stanovení vybraných látek významných z hlediska ochrany životního prostředí a lidského zdraví.

*Tato práce byla financována GA ČR (projekt č. 20-01589S) a Univerzitou Pardubice (projekt č. SGSFChT\_2022\_001).*

#### LITERATURA

1. Crapnell R. D., Dempsey N. C., Sigley E., Tridante A., Banks C. E.: *Microchim. Acta* 189, 142 (2022).
2. Taleat Z., Khoshroo A., Mazloum-Ardakani M.: *Microchim. Acta* 181, 865 (2014).
3. Schwarzova-Peckova K., Vosahlova J., Berek J., Sloufova I., Pavlova E., Petrak V., Zavazalova J.: *Electrochim. Acta* 243, 170 (2017).
4. Selesovska R., Navratil T., Hrdlicka V., Michniak P., Hatala M., Vojs M., Marton M., Matvieiev O., Janikova L., Chylkova J.: *Electrochim. Acta* 403, 139642 (2022).
5. Matvieiev O., Selesovska R., Vojs M., Marton M., Michniak P., Hrdlicka V., Hatala M., Janikova L., Chylkova J., Skopalova J., Cankar P., Navratil T.: *Biosensors* 12, 241 (2022).

### 1L-14 ELEKTROFORETICKÉ SEPARACE S LADITELNÝM ELEKTROOSMOTICKÝM TOKEM

PETR TŮMA

Univerzita Karlova, 3. lékařská fakulta, Ústav hygieny, Ruská  
87, 100 00 Praha 10  
petr.tuma@lf3.cuni.cz

Kovalentní pokrytí křemenné kapiláry směsí neutrálního akrylamidu a kvarterní amoniové soli 3-akrylamidopropyl trimethylamonium chloridu (APTAC) generuje laditelný anodický elektroosmotický tok v rozmezí mobilit  $0-20 \cdot 10^{-9}$  m<sup>2</sup>/V.s, který je nezávislý na pH a složení základního elektrolytu. PAMAPTAC pokryté kapiláry s 0–6 % zastoupením iontové složky APTAC v polymerační směsi jsou použity pro elektroforetické separace ketaminu a jeho metabolitů v krvi potkanů<sup>1</sup> a dále pro stanovení antiepileptik vigabatrin, pregabalín a gabapentin v lidském krevním séru<sup>2</sup>. Separace jsou prováděny v protisměrném elektroforetickém režimu, kdy proti elektroforetické migraci kationtů směřuje anodický elektroosmotický tok. Protisměrný režim prokazatelně zvyšuje elektroforetické rozlišení pík ketaminu a jeho derivátů a zároveň umožňuje aplikaci elektroforetického zaostření antiepileptik pro dosažení limitu detekce na nanomolární koncentrační hladině.

Naopak kovalentní pokrytí křemenné kapiláry kopolymerem akrylamidu s přídavkem aniontové složky 2-akrylamido-2-methyl-1-propansulfonátu sodného (AMPS) generuje katodický elektroosmotický tok, který je opět laditelný a zároveň nezávislý na pH a složení základního elektrolytu. PAMAMPS coating byl použit pro citlivé stanovení 3-hydroxybutyrátu jako indikátoru ketogenéze u člověka. Separace byly opět prováděny v protisměrném režimu za účelem dosažení baseline separace 3-hydroxybutyrátu od ostatních složek lidského séra. Stanovení 3-hydroxybutyrátu je použito pro monitorování ketogenéze v průběhu hladovění a po aplikaci orálního glukózového tolerančního testu.<sup>3</sup>

#### LITERATURA

1. Tůma P., Koval D., Sommerová B., Vaculín S.: *Talanta* 217, 1 (2020).
2. Tůma P., Hložek T., Sommerová B., Koval D.: *Talanta* 221, 1, (2021).
3. Tůma P., Sommerová B., Koval D., Šiklová M., Koc M.: *Talanta* 247, 123582 (2022).

### 1L-15 VZDUCHEM ŘÍZENÉ ROZHRANÍ PRO ON-LINE ELEKTROFRETICKOU ANALÝZU KLINICKÝCH VZORKŮ

**PETR TŮMA<sup>a</sup>, FRANTIŠEK OPEKAR<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Univerzita Karlova, 3. lékařská fakulta, Ústav hygieny, Ruská 87, 100 00 Praha 10, <sup>b</sup> Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Albertov 2030, 128 43 Praha 2  
petr.tuma@lf3.cuni.cz

Laboratorně sestavený mikroinjektor je navržen pro elektroforetickou analýzu submikrolitrových objemů vzorku vytlačených z Hamiltonovy stříkačky.<sup>1</sup> Výstup z jehly Hamiltonky je umístěn přímo proti vstupu do separační elektroforetické kapiláry a dávkovací prostor je vymezen skleněnou trubičkou s vnitřním průměrem 2.8 mm a objemem 160 µl. V průběhu dávkování je nejprve základní elektrolyt vypuzen proudem vzduchu z dávkovacího prostoru, následně je z Hamiltonky vytlačena kapka vzorku o objemu 170 nl, která visí v prostoru mezi výstupem jehly z Hamiltonky a vstupem do separační kapiláry. Z vytlačené kapky je vzorek hydrodynamicky nadávkován do elektroforetické kapiláry, následně je do dávkovacího prostoru přiveden základní elektrolyt a zapnuto separační napětí. Celý proces analýzy včetně ovládání Hamiltonky a přívodu elektrolytu je plně automatizovaný a řízený systémem LabView. Mikroinjektor byl otestován pro stanovení antiparazitika pentamidinu v krvi laboratorních potkanů s LOD 8 µM a dobou separace 45 s. V inovované verzi je mikroinjektor realizován prostřednictvím mikrofluidního mikročipu vyrobeného přímým odléváním z polydimethylsiloxanu (PDMS) bez použití litografie.<sup>2</sup> PDMS mikročip spojuje vstup do separační kapiláry, výstup z mikrodialyzační sondy, vstup vzduchu a základního elektrolytu a výstup do odpadu v integrovaný celek. PDMS mikroinjektor byl použit pro stanovení bazických aminokyselin v lidském séru upraveném mikrodiálýzou kapky krve o objemu 50 µl (cit.<sup>3</sup>).

#### LITERATURA

1. Opekar F., Tůma P.: *Anal. Chim. Acta* 1042, 133 (2018).
2. Opekar F., Tůma P.: *Electrophoresis* 40, 587 (2019).
3. Opekar F., Tůma P.: *Talanta* 219, 7 (2020).

### 1L-16 VÝZKUM BAKTERIOFÁGŮ ANEB PO STOPÁCH REZISTENTNÍCH BAKTERIÁLNÍCH KMENŮ V NEMOCNICI

**KATEŘINA VÍTKOVÁ<sup>a</sup>, ANDREA POLANSKÁ<sup>b</sup>,  
JANA JURČÍKOVÁ<sup>a</sup>, M. BENEŠÍK<sup>c</sup>, K. KRĚSALOVÁ<sup>c</sup>,  
T. ŠOPÍKOVÁ<sup>c</sup>, M. MOŠA<sup>c</sup>**

<sup>a</sup> Fakultní nemocnice Ostrava, Útvar náměstka ředitele pro vědu, výzkum a výuku, 17. listopadu 1790, 708 52 Ostrava-Poruba, <sup>b</sup> Fakultní nemocnice Ostrava, Útvar náměstka ředitele pro ošetrovatelskou péči, 17. listopadu 1790, 708 52 Ostrava-Poruba, <sup>c</sup> FAGOFARMA s.r.o., Londýnská 730/59, 120 00 Praha 2  
katerina.vitkova@fno.cz

Rezistence k antibiotikům patří nesporně k nejzávažnějším medicínským problémům současnosti. Rychlá ztráta účinnosti základních i rezervních antibiotik (ATB) s sebou přináší významné omezení možnosti výběru antiinfektiv s reálným rizikem selhání léčby řady infekcí, a to zejména nemocničních<sup>1</sup>. Právě původci těchto infekčních komplikací většinou patří do kategorie multirezistentních, nebo dokonce panrezistentních mikroorganismů<sup>2,3</sup>. Náš výzkum probíhající ve spolupráci s firmou FAGOFARMA s.r.o., která se dlouhodobě zabývá výzkumem a vývojem fágových lyzátů, je založen na identifikaci, izolaci a charakterizaci bakteriofágů, tj. přirozených nepřátel bakterií, které by mohly pomoci v boji s narůstající antibiotickou rezistencí mikroorganismů.

Od roku 2019 proběhl odběr vzorků povrchových ran pacientů z pěti vybraných klinických pracovišť Fakultní nemocnice Ostrava (FNO). Hlavním cílem bylo identifikovat a zanalyzovat nejčastější druhy rezistentních bakteriálních kmenů. Jako další zdroj pro izolaci fágů posloužily také odpadní vody z FNO, kde se fágy přirozeně vyskytují. Za období 30 měsíců bylo odebráno celkem 571 stěrů povrchových ran pacientů. V těchto vzorcích bylo identifikováno celkem 188 kmenů *Staphylococcus aureus*, *Klebsiella pneumoniae*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Acinetobacter baumannii* a *Acinetobacter Dijkshoorniae*.

Z odebraných vzorků bylo provedeno testování citlivosti bakteriálních kmenů ze vzorků pacientů a ze vzorků odpadních vod. Dále byla provedena analýza, purifikace, kultivace a charakterizace bakteriofágů. V realizaci je příprava funkčního vzorku a ověřené technologie – tvorba fágového lyzátu proti rezistentním kmenům v nemocnicích.

*Podpořeno projektem Ministerstva průmyslu a obchodu z dotačního programu TRIO, číslo projektu FV40027.*

#### LITERATURA

1. Simon C., Stille W., v knize: *Antibiotika v současné lékařské praxi*, kap. 1, s. 25, Grada, Praha 1998.
2. Šrámová H., v knize: *Nozokomiální nákazy*, kap. 5, s. 152, Maxdorf Jessenius, Praha 2013.
3. Maďar R., Podstatová R., Řehořová J., v knize: *Prevence nozokomiálních nákaz v klinické praxi*, kap. 3, s. 43, Grada, Praha 2006.

## 1L-17

**ROLE ELEKTROCHEMICKÝCH DNA BIOSENZORŮ  
PŘI OCHRANĚ LIDSKÉHO ZDRAVÍ****VLASTIMIL VYSKOČIL**

*UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí,  
Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta,  
Univerzita Karlova, Hlavova 8, 128 43 Praha 2  
vlastimil.vyskocil@natur.cuni.cz*

Značná rozmanitost problémů, které v současnosti řeší moderní bioanalytická chemie, vyžaduje velkou škálu přístupů, metod a materiálů používaných k nalezení optimálních řešení. Přestože výhody a možnosti současných spektrometrických a separačních metod jsou fascinující, lze s jistotou prohlásit, že moderní elektrochemické metody mohou představovat velmi konkurenceschopnou alternativu, zejména pokud využívají nové elektrodové materiály a progresivní přístupy<sup>1</sup>. V naší UNESCO laboratoři elektrochemie životního prostředí se v poslední době intenzivně zabýváme novými typy elektrochemických DNA biosenzorů, jež jsou založeny na různých uhlíkových převodnicích (elektrodách), pro detekci poškození DNA. Jmenovitě se jedná o elektrody na bázi skelného uhlíku<sup>2</sup>, pyrolytického grafitu<sup>3</sup>, grafitových kompozitů a sitotiskem nanoseného grafitu<sup>4</sup>.

I když tyto DNA biosenzory prozatím nacházejí využití především v základním výzkumu, který spočívá v optimalizaci podmínek pro jejich rychlou a opakovatelnou přípravu a v jejich dlouhodobém testování na rozmanitých modelových systémech simulujících poškozující faktory přítomné v pracovním a životním prostředí (expozice UV-C záření, působení oxidačního stresu vyvolaného reaktivními radikálovými sloučeninami, interakce s genotoxickými sloučeninami jako např. polutanty životního prostředí, pesticidy a protinádorovými léčivými), snažíme se mít stále na paměti i směřování k jejich budoucímu využití při pasivní či aktivní ochraně lidského zdraví.

Možnosti a omezení těchto nově vyvinutých biosenzorů, jejich výhody a nevýhody, jejich praktické využití i jejich přínos pro současnou bioanalytickou chemii budou představeny s cílem poukázat na naše přístupy ve vývoji moderních elektrochemických biosenzorických systémů.

*Tento příspěvek byl finančně podpořen Grantovou agenturou České republiky (projekt GACR 20-01589S).*

## LITERATURA

1. Fojta M., Daňhel A., Havran L., Vyskočil V.: Trends Anal. Chem. 79, 160 (2016).
2. Hájková-Strejcová A., Augustín M., Barek J., Iffelsberger C., Matysik F.-M., Vyskočil V.: J. Electroanal. Chem. 918, 116430 (2022).
3. Augustín M., Pfeifer R., Barek J., Vyskočil V.: J. Electroanal. Chem. 908, 116095 (2022).
4. Svitková V., Labuda J., Vyskočil V.: Electroanalysis 31, 2001 (2019).

### 1P-01 PROBLEMATIKA KARNOZINU Z POHEADU BIO-ANALYTICKEJ CHÉMIE

**PATRIK BEŇOVÍČ\***, ANDREA PURDEŠOVÁ, JOZEF SOKOL

*Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave, Nám. J. Herdu 2, 917 01 Trnava  
benovic2@ucm.sk*

Oxidačný stres, teda disbalans medzi antioxidantnými a oxidatívnymi látkami v prospech oxidatívnych látok, je asociovaný s nádorovými ako i s neurodegeneratívnymi ochoreniami. Práve z uvedených dôvodov je potrebná suplementácia antioxidantami. Antioxidantom, ktorý disponuje okrem antioxidačného účinku i chelatačným účinkom, účinkom proti pokročilej glykácii a pH tlmivým účinkom, je karnozín<sup>1</sup>. Všetky uvedené účinky karnozínu možno využiť na terapiu nádorových ako i na terapiu neurodegeneratívnych ochorení. Pre terapiu daných ochorení karnozínom je však nutné podávať karnozín spoločne s inhibítormi karnozináz teda s karnostatínom a bestatínom<sup>2,3</sup>.

Pre klinické štúdie zamerané na terapiu spomínaných ochorení karnozínom je však potrebné disponovať validovanou a spoľahlivou metódou stanovenia karnozínu.

Na stanovovanie karnozínu, ako z matrice tkaniva, tak i z matrice séra, sa využívajú najmä separačné techniky reverzne fázovej vysokoúčinnnej kvapalinovej chromatografie ako i chromatografia založená na princípe iónovej výmeny<sup>4,5</sup>. Taktiež sa dá na stanovovanie karnozínu využiť i separačná technika kapilárnej elektroforézy<sup>6</sup>. Dostupná je taktiež komerčná metóda stanovovania karnozínu a to imunochemická metóda ELISA.

*Tato práce vznikla za podpory grantu 025UCM-4/2021.*

#### LITERATÚRA

1. Boldyrev A. A., Aldini G., Derave W.: *Physiol. Rev.* 93 (4), 1803 (2013).
2. Peppers S. C., Lenney J. F.: *Biol. Chem. Hoppe-Seyler* 369(12), 1281 (1988).
3. Qiu J., Hauske S. J., Zhang S., Rodriguez-Niño A., Albrecht T., Pastene D. O., van den Born J., van Goor H., Ruf S., Kohlmann M., Teufel M., Krämer B. K., Hammes H. P., Peters V., Yard B. A., Kannt A.: *Amino Acids* 51(1), 7 (2019).
4. Kumagai M., Kato S., Arakawa N., Otsuka M., Hamano T., Kashiwagi N., Yabuki A., Yamato O.: *Separations* 8, 128 (2021).
5. Uenoyama R., Miyazaki M., Miyazaki T., Shigeno Y., Tokairin Y., Konno H., Yamashita T.: *J. Chromatogr. B* 1132, 121826 (2019).
6. Szerdahelyi E., Csehi B., Takács K., Korompai E., Nagy A., Gelencsér É., Friedrich L. F.: *Czech J. Food Sci.* 38, 36 (2020).

### 1P-02 STUDIUM RADIČNÍ STABILITY EXTRAKČNÍCH SYSTÉMŮ NA BÁZI N-DONOROVÝCH ČINIDEL BTP, BTBP A BTPHEN

**PETR DISTLER<sup>a</sup>, MIRIAM MINDOVÁ<sup>a</sup>, JAN ŠEBESTA<sup>a</sup>, JAN JOHN<sup>a</sup>, BOHUMÍR GRÜNER<sup>b</sup>, DMYTRO BAVOL<sup>b</sup>, RICHARD J. M. EGBERINK<sup>c</sup>, WILLEM VERBOOM<sup>c</sup>, VASILY A. BABAIN<sup>d</sup>**

*<sup>a</sup>Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha 1, <sup>b</sup>Ústav anorganické chemie, AV ČR, Hlavní 1001, 250 68 Rež u Prahy, <sup>c</sup>Laboratory of Molecular Nanofabrication, University of Twente, P. O. Box 217, Enschede, 7500 EA, Nizozemsko, <sup>d</sup>Laboratory of Sensors, ITMO University, Lomonosova St. 9, Saint Petersburg, 191 002, Ruská federace  
petr.distler@fffi.cvut.cz*

Byly testovány extrakční vlastnosti a radiační stabilita systémů s extrakčním činidlem CyMe<sub>4</sub>-BTBP (Schéma 1) a s maskovacími činidly (SO<sub>3</sub>H)<sub>2</sub>-BTP, (SO<sub>3</sub>H)<sub>2</sub>-BTBP a (SO<sub>3</sub>H)<sub>2</sub>-BTPphen. Tato činidla jsou perspektivní pro separaci trojmocných minoritních aktinoidů a lanthanoidů při přepracování ozářeného jaderného paliva. V rámci studie byl zkoumán vliv i) dávky (až do výše 500 kGy při ozařování urychlenými elektrony), ii) přítomnosti druhé fáze během ozařování, iii) koncentrace HNO<sub>3</sub>, iv) teploty na extrakční vlastnosti a radiační stabilitu. Největší pozitivní vliv na studované systémy prokázala přítomnost druhé fáze během ozařování. Metodou HPLC-MS byly určeny hlavní degradační produkty/adykty vznikající během ozařování systémů<sup>1</sup>.

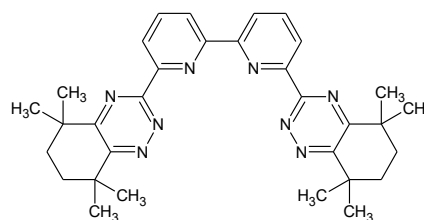


Schéma 1. **Struktura CyMe<sub>4</sub>-BTBP**

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR (Centrum pokročilých aplikovaných přírodních věd, CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000778) a grantů Horizon 2020 Euratom Research and Innovation Programme of the European Union (GENIORS, H2020-755171, a FREDMANS, 101060800).*

#### LITERATURA

1. Distler P., Mindová M., Šebesta J., Gruner B., Baval D., Egberink R. J. M., Verboom W., Babain V. A., John J.: *ACS Omega*. 40(6), 26416 (2021).

**1P-03**  
**NOVÉ METODY URČOVÁNÍ PÁLIVOSTI CHILLI**  
**PAPRIČEK**

**RADEK JERGA, PETR BARTÁK, JANA SKOPALOVÁ**

*Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta,  
 Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12,  
 779 00 Olomouc  
 radek.jerga01@upol.cz*

Kapsaicinoidy, zejména kapsaicin, jsou přírodní alkaloidy produkované rostlinami z rodu *Capsicum*, které se souhrnně označují jako chilli papričky. Tyto papričky se vyznačují různou pálivostí, která je způsobena právě množstvím kapsaicinoidů. Z tohoto důvodu jsou celosvětově používány jako koření do nejrůznějších potravin. Kapsaicinoidy našly uplatnění také v medicíně díky svým analgetickým účinkům, kdy se používají nejčastěji pro léčbu chronických bolestí, například ve formě masť nebo náplastí<sup>1</sup>.

Jednotlivé odrůdy chilli papriček obsahují rozdílné množství kapsaicinoidů, a proto se lze setkat s papričkami s různou pálivostí. Obecně zavedenou stupnicí jsou Scovilleho jednotky pálivosti (SHU)<sup>2</sup>. Ty přiřazují kapsaicinu pálivost 16 000 000 SHU a od jeho obsahu (ale i obsahu dalších kapsaicinoidů) se odvíjí pálivost samotné papričky. Pro objektivní určení pálivosti chilli papriček a kontrolu množství kapsaicinu v léčivých přípravcích jsou vyvíjeny analytické metody, z nichž nejvíce využívanou je HPLC s různými způsoby detekce.

Kvůli eliminaci potřeby drahé instrumentace (zejména u LC-MS systémů) lze jako dobrou alternativu pro stanovení množství kapsaicinoidů použít elektrochemické metody. Pro zjednodušení přípravy vzorku a urychlení analýzy je výhodné použití adsorpčních voltametrických technik<sup>3</sup>. Tato práce se zabývá využitím *ex-situ* metody, kdy se analyt adsorbuje z methanolového extraktu a analyzuje v čistém elektrolytu. Využívána je zde technika cyklické square-wave voltametrie, kdy je kapsaicinoid adsorbovaný na pracovní elektrodě krátkou dobu oxidován při konstantním potenciálu, vzniklý produkt je katodicky redukován a následně anodicky oxidován. Pro srovnání výsledků je použita HPLC metoda s elektrochemickou detekcí.

*Tato práce vznikla za podpory grantu DSGC-2021-0191 New Approaches for Electrochemical Determination of Capsaicinoids, v rámci projektu OP VVV „Zkvalitnění schémat Doktorské studentské grantové soutěže a jejich pilotní implementace“ CZ.02.2.69/0.0/0.0/19\_073/0016716.*

**LITERATURA**

1. Fattori V., Hohmann M. S. N., Rossaneis A. C., Pinho-Ribeiro F. A., Verri Jr. W. A.: *Molecules* 21, 844 (2016).
2. Scoville W. L.: *J. Pharm. Sci.* 1, 453 (1912).
3. Jerga R., Rajcová A., Müllerová V., Barták P., Cankar P., Navrátil T., Skopalová J.: *J. Electroanal. Chem.* 858, 113790 (2020).

**1P-04**  
**STANOVENIE FOSFORU VYSOKOROZLIŠOVACOU**  
**ELEKTROTERMICKOU MOLEKULOVOU**  
**ABSORPČNOU SPEKTROMETRIOU**

**JAKUB MASÁČ, FRATNIŠEK ČACHO**

*Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta  
 chemickej a potravinárskej technológie, Ústav analytickej  
 chémie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava  
 jakub.masac@stuba.sk*

Táto práca sa zaoberá optimalizáciou a validáciou analytického postupu na stanovenie fosforu vo vzorkách nápojov a hnojív pomocou vysokorozlišovacej molekulovej elektrotermickej absorpčnej spektrometrie s kontinuálnym zdrojom žiarenia. Analýza prebiehala na atómovom absorpčnom spektrometri Analytik Jena contrAA 700 (Analytik Jena AG, Jena, Nemecko). Princíp metódy spočíva vo vytvorení dvojatómovej molekuly PO a následnej absorpcii elektromagnetického žiarenia plynnými molekulami pri vlnovej dĺžke 324,6161 nm (cit.<sup>1</sup>). Molekuly PO boli generované v elektrotermickom atomizátore. V teplotnom programe boli optimalizované dva parametre: teplota pyrolýzy, ktorej hodnota bola 750 °C a teplota tvorby molekuly, ktorá bola 2650 °C. Následne bol skúmaný aj vplyv interferentov. Šesť testovaných iónov (Si, As, NO<sub>2</sub><sup>-</sup>, Mn, Na a Mg) nemalo výrazný vplyv na zmenu signálu, zatiaľ čo ďalších šesť interferentov sa výraznou mierou podieľalo na znížení signálu (Ca, Cu, K, Ni, Cr a Al). Metóda je lineárna v dvoch rozsahoch 1–10 mg l<sup>-1</sup> a 10–50 mg l<sup>-1</sup>. Hodnota LOD bola 0,3 mg l<sup>-1</sup> a hodnota LOQ bola 0,9 mg l<sup>-1</sup>.

*Táto práca bola podporovaná Vedeckou grantovou agentúrou VEGA MŠ SR a SAV (projekt č. 1/0159/20).*

**LITERATÚRA**

1. Welz B., Becker-Ross H., Florek S., et al.: *High-Resolution Continuum Source AAS: The Better Way to Do Atomic Absorption Spectrometry*, s.125–127. 1. vyd. Wiley-VCH, 2005.

**1P-05**  
**DETERMINATION OF NEUROPHARMACEUTICAL**  
**DRUG MEPHENOXALONE IN HUMAN SERUM**  
**USING SCREEN-PRINTED SENSORS WITH BORON**  
**DOPED DIAMOND ELECTRODE**

**OLEKSANDR MATVIEIEV, RENÁTA ŠELEŠOVSKÁ**

*University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology,  
 Institute of Environmental and Chemical Engineering,  
 Studentská 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic  
 oleksandr.matvieiev@student.upce.cz*

The scientific and technological process stimulates the development of new electrode materials to increase the sensitivity and selectivity of electroanalytical methods. Boron-doped diamond (BDD) represents an excellent material with a number of advantages such as: wide usable potential window, low background current, low current noise, chemical resistance, and resistance to passivation<sup>1,2</sup>. BDD has become widely used for the determination of drugs, pesticides, biologically active substances etc.<sup>3</sup> Screen-printed sensors (SPS) are becoming increasingly popular due to its tailored

design, low cost, and easy mass production, thanks to which their can be used as a disposable sensors. The newly introduced sensor combines advantages of SPE and BDDE and enables applications in point-of-care testing<sup>4</sup>.

Mephenoxalone is an active substance in neuropharmaceuticals and tranquilizers that is used to treat anxiety in humans. In this work, the electrochemical oxidation of this drug was studied for the first time and a method for its determination using BDDE was developed. The proposed procedure was transferred to printed sensors and successfully applied in the analysis of model solutions, pharmaceutical preparations, and especially of human serum.

*This work was supported by the grant project of The Czech Science Foundation (project No. 20-01589S) and by The University of Pardubice (projects No. SGSFChT\_2022\_001).*

#### REFERENCES

1. Fujishima A., Einaga Y., Rao T. N., Tryk D. A., in book: *Diamond Electrochemistry*, Elsevier, Amsterdam 2005.
2. Kraft A.: *Int. J. Electrochem. Sci.* 2, 355 (2007).
3. Selesovska R., Navratil T., Hrdlicka V., Michniak P., Hatala M., Vojs M., Marton M., Matvieiev O., Janikova L., Chylkova J.: *Electrochim. Acta* 403, 139642 (2022).
4. Matvieiev O., Selesovska R., Vojs M., Marton M., Michniak P., Hrdlicka V., Hatala M., Janikova L., Chylkova J., Skopalova J., Cankar P., Navratil T.: *Biosensors* 12, 241 (2022).

#### 1P-06

### VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ PSILOCINU A PSILOCYBINU S POUŽITÍM 3D TIŠTĚNÝCH ELEKTROD

MARTA KATARZYNA CHOIŇSKA-MLYNARCZYK<sup>a,b</sup>, JANA SKOPALOVÁ<sup>c</sup>, TOMÁŠ NAVRÁTIL<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, <sup>b</sup> Karlova Univerzita, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie, životního prostředí, Albertov 6, 128 00 Praha 2, <sup>c</sup> Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, [tomas.navratil@jh-inst.cas.cz](mailto:tomas.navratil@jh-inst.cas.cz)

Psilocybin ([3-(2-dimethylaminoethyl)-1*H*-indol-4-yl]-dihydrogen-fosfát) je přírodní alkaloid vyskytující se v různých houbách, např. rodu *Psilocybe* (lysohlávka), používaný pro náboženské i lékařské účely, a také jako halucinogenní droga. Psilocybin je v lidském těle metabolizován na psychoaktivní psilocin, který je agonistou serotoninových receptorů 5-HT<sub>2A</sub>. Je zodpovědný za změny ve vnímání, náladě a myšlení, může způsobit změny v prožívání času, prostoru a sebe sama<sup>1-3</sup>. Vzhledem k používání uvedených látek v psychiatrii a vysokému potenciálu jejich zneužití, musí být psilocin a psilocybin stanovovány nejenom v čistém stavu, ale je potřeba monitorovat i jejich hladiny, případně hladiny jejich metabolitů v tělesných tekutinách (tj. v krvi a moči). Pro tyto účely je nutné vyvíjet rychlé, snadné, selektivní a citlivé analytické metody, mezi něž voltametrické techniky, jakožto alternativa k nejčastěji používaným chromatografickým metodám, bezesporu patří.

Velkým přínosem v rozvoji elektroanalytických technik

mohou být nové elektroodové materiály, k nimž se v poslední době řadí materiály použitelné pro 3D tisk<sup>4,5</sup>. Cílem naší studie bylo vyvinout 3D tištěnou elektrodu, vhodnou pro stanovení psilocinu a psilocybinu, případně jejich metabolitů a derivátů, kterou lze dále podle potřeb modifikovat. Mezi výhody takovýchto elektrod patří nízký proud pozadí, dobře vyvinuté signály analytů, levná, rychlá, snadná výroba a možnost tisku v požadovaném tvaru, ploše atd.

*Tato práce vznikla za podpory grantů GA ČR 20-01589S, Specifického vysokoškolského výzkumu (projekt SVV260560) a GA UK (projekt 373521).*

#### LITERATURA

1. Geiger H. A., Wurst M. G., Daniels R. N.: *ACS Chemical Neuroscience* 9, 2438 (2018).
2. Fradkin D.: *Perspect. Psychiatr. Care* 58, 1200 (2021).
3. Zeiss R., Gahr M., Graf H.: *Pharmaceuticals* 14 (2021).
4. Choinska M., Hrdlicka V., Fischer J., Dejmkova H., Mika L., Vaneckova E., Kolivoska V., Navratil T.: *Biosensors* 12, 308 (2022).
5. Choinska M., Hrdlicka V., Sestakova I., Navratil T.: *Monatsh. Chem.* 152, 35 (2021).

#### 1P-07

### MULTIPLICATION OF UREA SITES - IMPACT ON BINDING PHOSPHATES

KAROLÍNA SALVADORI<sup>a,b,c</sup>, ALENA KRUPKOVÁ<sup>b</sup>, TOMÁŠ STRAŠÁK<sup>b</sup>, LUCIE ŠTĀSTNÁ ČERVENKOVÁ<sup>b</sup>, PAVEL MATĚJKA<sup>a</sup>, PETRA CURÍNOVÁ<sup>b</sup>

<sup>a</sup> University of Chemistry and Technology Prague, Department of Physical Chemistry, Technická 5, 160 00 Prague 6, Czech Republic, <sup>b</sup> Institute of Chemical Process Fundamentals of the CAS, Department of Analytical Chemistry, Rozvojová 2/135, 165 02 Prague 6 - Suchbát, Czech Republic, <sup>c</sup> J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the CAS, Department of Molecular Electrochemistry and Catalysis, Dolejškova 3, 182 23 Prague 8, Czech Republic [salvadok@vscht.cz](mailto:salvadok@vscht.cz)

The formation of supramolecular complexes between ligands and anions is a fundamental process in nature. Consequently, anion recognition represents an attractive research topic important in biological and environmental issues<sup>1</sup>. Chemists have already synthesized a variety of compounds with remarkable efficiency. However, systems offering their real-life application are usually rare.

In our work, we focused on the synthesis of urea-based units suitable for binding phosphates. These units were tested for their selectivity and binding efficiency. Then, were attached to the dendritic carriers. The immobilization of the binding motif to these carriers was done to improve its recycling, which was successfully performed by nanofiltration<sup>2</sup>. Moreover, dendritic receptors in the solution with a low concentration of dihydrogen phosphate offer a cooperative complexation mode, which even amplifies the binding selectivity. For weaker complexes, with chloride, no effects similar can be found (Fig. 1). According to these findings, the anchoring seems to be favourable and provides advantages for phosphate separation.

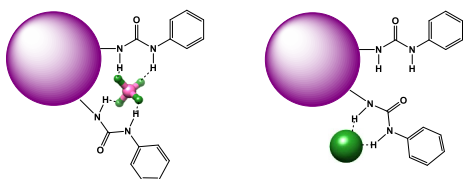


Fig. 1. Cooperative (dendrimer+H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub><sup>3-</sup>) vs. non-cooperative (dendrimer+Cl<sup>-</sup>) binding mode

This work was supported by Czech Science Foundation (GAČR 18-12150S), and by the grant of Specific university research (UCT) A2\_FCHI\_2022\_014.

#### REFERENCES

1. Sessler J. L., Gale P. A., Cho W., v knize: *Anion receptor chemistry*, The Royal Society of Chemistry, UK 2006.
2. Cuřinová P. et al.: ACS Omega 6, 15514 (2021).

#### 1P-08

#### FLUORESCENČNÉ STANOVENIE BI(III) S ASTRAFLOXÍNOM

**ARINA SKOK<sup>a\*</sup>, ANDRIY VISHNIKIN<sup>b</sup>, MEHIEDDINE HEDJAZI<sup>b</sup>, YAROSLAV BAZEL<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Department of Analytical Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovak Republic,

<sup>b</sup>Oles Honchar Dnipro National University, Gagarin Avenue 72, 49010, Dnipro, Ukraine  
arina.skok@student.upjs.sk

Vyvinuté fluorescenčné a extrakčné fluorescenčné metódy na stanovenie Bi (III) sú založené na tvorbe ťažko rozpustného iónového asociátu (IA) medzi jodidovým komplexom Bi (III) a astrafoxínom. V dôsledku tvorby agregátov fluorescencia astrafoxínu klesá. Súčasne s poklesom intenzity hlavného fluorescenčného píku farbiva vzniká rezonančný pík rozptylu svetla, intenzita ktorého sa zvyšuje so zvyšovaním koncentrácie Bi (III) v prípade luminiscenčnej metódy. V prípade extrakčného postupu sa IA extrahuje amlacetátom a ďalej sa rozkladá po pridaní alkoholu.

Vyvinutá nová fluorescenčná metóda stanovenia Bi (III) je založená na vzniku iónového asociátu (IA) Bi (III) s jodidovými iónmi a astrafoxínom. V dôsledku tvorby agregátov IA fluorescencia astrafoxínu v oblasti 583 nm klesá. Súčasne s poklesom intenzity hlavného fluorescenčného píku farbiva vzniká rezonančný pík rozptylu svetla pri 542 nm, intenzita ktorého so zvyšovaním koncentrácie Bi (III) proporcionálne stúpa. V prípade extrakčného postupu sa IA extrahuje ekologicky prijateľným rozpúšťadlom, ktorým je amlacetát, pričom takmer úplná extrakcia IA sa dosahuje pri využití už 0,2 ml amlacetátu.

Optimálne podmienky pre bezextrakčnú metódu sú 0.1 M HCl, 0,013 M KI, 9,5·10<sup>-6</sup> M astrafoxínu. V prípade extrakčnej metódy sú koncentrácie reagentov také isté. Objem roztoku s analytom je 20 ml, objem amlacetátu je 0,2 ml, objem etylalkoholu je 4,5 ml.

LOD bezextrakčnej fluorescenčnej metódy je 6,0·10<sup>-8</sup> M Bi(III), extrakcia zlepšuje citlivosť takmer 8-krát (8,0·10<sup>-9</sup> M). Pri optimálnych podmienkach je kalibračná krivka lineárna v rozsahu od 1·10<sup>-7</sup> M do 1,2·10<sup>-6</sup> M Bi(III), v prípade extrak-

čnej metódy je linearita v rozsahu od 2,0·10<sup>-8</sup> do 2,5·10<sup>-7</sup> M Bi (III).

Extrakčná fluorescenčná metóda s astrafoxínom vykazuje lepšiu citlivosť ako väčšina známych fluorescenčných metód prezentovaných v literatúre, pričom extrakčný postup vyžaduje len minimálne množstvo netoxického rozpúšťadla (0,2 ml amlacetátu). Po validácii bola metóda použitá na stanovenie bizmutu vo farmaceutických prípravkoch.



## 2L-01

**ELEKTROCHEMICKÉ VLASTNOSTI MONOKRYSTALICKÝCH BOREM DOPOVANÝCH DIAMANTOVÝCH ELEKTROD S KRYSTALOVOU ORIENTACÍ {113}, {115} a {118}****PETER ČAMBAL<sup>a</sup>, SIMONA BALUCHOVÁ<sup>a</sup>, ANDREW TAYLOR<sup>b</sup>, KAROLINA SCHWARZOVÁ-PECKOVÁ<sup>a\*</sup>**<sup>a</sup> *Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Albertov 6, 128 00 Praha, Česká republika*  
<sup>b</sup> *Fyzikální ústav Akademie věd České republiky, Na Slovance 2, 182 21 Praha 8, Česká republika*  
cambalp@natur.cuni.cz

Borem dopovaný diamant (BDD) je unikátní elektrodový materiál, protože nabízí mnoho výhodných elektrochemických vlastností. Mezi ty patří široké potenciálové okno, nízký proud pozadí a velké přepětí kyslíku. Krystalová orientace, terminace povrchu a obsah boru mají velký vliv na elektrochemické chování konkrétních BDD elektrod<sup>1</sup>. Monokrystalické BDD elektrody jsou relativně málo studovány kvůli různým výzvám při výrobě, protože je důležité získat dobře definované, dostatečně dopované monokrystalové s vhodnou velikostí pro elektrochemické studie. Při výrobě se používá technika vysokého tlaku a teploty (HPHT) a technika chemické depozice par (CVD). Dosud byly studovány elektrochemické vlastnosti BDD monokrystalických elektrod s orientací {100}, {110} a {111}<sup>2</sup>.

V této práci bylo studováno dvanáct monokrystalických BDD elektrod vyrobených technikou CVD, lišících se krystalovou orientací ({113}, {115} a {118}) a koncentrací boru ( $4 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  až  $1,1 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ ). Studován byl původní „as grown“ (H-terminovaný) povrch a O-terminovaný povrch získaný úpravou v kyselém prostředí (horká  $\text{H}_2\text{SO}_4 + \text{KNO}_3$ ) a pomocí ozonového plazmatu. K úpravě O-terminovaného povrchu byla dále použita i anodická aktivace ( $0,5 \text{ mol dm}^{-3} \text{ H}_2\text{SO}_4$ , +2,4 V, 10 min).

U všech elektrod byla provedena elektrochemická charakterizace povrchu pomocí cyklické voltametrie redoxních markerů vnitřní ( $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-/4-}$  a dopamin/dopamin-*o*-chinon) i vnější ( $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_6]^{3+/2+}$ ,  $[\text{IrCl}_6]^{2-/3-}$  a  $\text{FcMeOH}^{+/0}$ ) sféry. U povrchů s krystalovou orientací {113} a {115} a vyšší koncentrací boru byla pozorována rychlá kinetika elektronového přenosu.

*Tato práce vznikla za podpory grantů Grantové agentury České republiky [projekt 20-03187S] a Specifického vysokoškolského výzkumu UK [SVV 260560].*

## LITERATURA

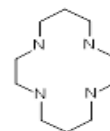
1. Ando T., Asai K., Macpherson J., Einaga Y., Fukuma T., Takahashi Y.: *Anal. Chem.* 93, 5831 (2021).
2. Pleskov Yu. V., Evstefeeva Yu. E., Krotova M. D., Varnin V. P., Teremetskaya I. G.: *J. Electroanal. Chem.* 595, 168 (2006).

## 2L-02

 **$\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$  KOMPLEXY AZAMAKROCYKLŮ – ELEKTROCHEMICKÁ STUDIE****LUCIE KOLÁČNÁ<sup>a</sup>, MILAN MAĐAR<sup>b</sup>, VOJTĚCH KUBÍČEK<sup>b</sup>, JIŘÍ LUDVÍK<sup>a</sup>**<sup>a</sup> *Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy, Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8,* <sup>b</sup> *Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Katedra anorganické chemie, Hlavova 2030, Praha 2*  
lucie.kolacna@jh-inst.cas.cz

Molekulární elektronika je progresivní směr moderní materiálové chemie. Zabývá se vývojem elektronických prvků na úrovni jedné molekuly. Jedním ze směrů výzkumu jsou komplexy různě substituovaných azamakrocyklů. Předností těchto molekul je jejich stabilita a dobře definovaná syntéza<sup>1,2</sup>.

Cílem studie bylo zjištění vztahů mezi strukturou, vlastnostmi a redoxním chováním mononukleárních komplexů derivátů cyklamů (obr. 1). Ligandy byly substituovány skupinami ovlivňujícími elektrochemické chování, hlavním redoxním centrem komplexů byly kovy  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$  a  $\text{Cu}^{2+}$ .



Obr. 1. Cyklam

Proces komplexace a elektrochemické vlastnosti byly studovány ve vodném prostředí pomocí polarografie, cyklické voltametrie na visící rtuťové kapce, stacionární elektrodě ze skelného uhlíku a voltametrie na rotující diskové elektrodě ze skelného uhlíku. Pro sledování procesu komplexace a pro charakterizaci připravených molekul byla použita také UV/VIS spektrometrie.

Základní azamakrocykly prostě jakýchkoli kovů jsou elektrochemicky inertní. Modifikací ligandů dochází ke změně jejich koordinačních případně redoxních vlastností. U vytvořených komplexů zůstává hlavním redoxním centrem vždy kov. Výsledné elektrochemické chování celého systému závisí na intramolekulární komunikaci (modifikovaného) ligandu a koordinovaného kovu. Získané výsledky umožní optimalizaci dalších molekul vhodných pro uvedené využití.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR GA21-23261S a institucionální podpory RVO 61388955.*

## LITERATURA

1. Lukeš I., Kotek J., Vojtíšek P., Hermann P.: *Coord. Chem. Rev.* 216–217, 287 (2001).
2. Kotek J., Lubal P., Hermann P., Císařová I., Lukeš I., Godula T., Svobodová I., Táborský P., Havel J.: *Chem. Eur. J.* 9, 233 (2003).

**2L-03****VYUŽITÍ ENZYMŮ A NANOMATERIÁLŮ JAKO  
SIGNÁL GENERUJÍCÍCH MOLEKUL  
V ELEKTROCHEMICKÝCH IMUNOSENZORECH****LUCIE KORECKÁ, GYLXHANE KASTRATI,  
ZUZANA BÍLKOVÁ***Katedra biologických a biochemických věd, Fakulta chemicko-  
technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10  
Pardubice, ČR  
lucie.korecka@upce.cz*

V klinické laboratorní diagnostice jsou pro kvantifikaci diagnosticky významných biomolekul rutinně využívány imunoanalytické indikátorové metody (ELISA, FIA, CLIA). V principu jsou tyto metody založeny na specifické afinitní izolaci stanoveného analytu protilátkami fixovanými na pevné fázi. Přidání dalších protilátek značených co nejcitlivějším značením (enzymy, fluorofory) je odpovědné za výsledný signál, který je úměrný hladině stanoveného biomarkeru.

Alternativou k těmto metodám jsou elektrochemické biosenzory, které jsou konstruovány jako jednoduchá zařízení, která mohou splňovat kritéria Point-of-care testing (POCT) a fungovat jako screeningové testy. Hlavní výzvou je však nejen výběr vysoce specifických protilátek, ale také typ signál generujících molekul. Mohou tak najít uplatnění v oblasti biochemické diagnostiky pro stanovení nádorových markerů, zánětlivých proteinů, v kontrole kvality potravin pro záchyt případné bakteriální kontaminace, toxinů apod.

Vedle enzymů lze pro značení protilátek využít také různé nanomateriály, např. kvantové tečky (QDs), nanočástice zlata, stříbra či platiny (AuNPs, AgNPs, PtNPs), jedno-nebo vícevláknové uhlíkové nanotrubicce (SWCNTs, MWCNTs), foton-upkonverzní nanočástice (UCNP). Výhodou použití nanomateriálů je vyšší citlivost, stabilita a možnost multiplexní analýzy více stanovených analytů najednou<sup>1-3</sup>.

*Tato práce vznikla za podpory projektu Grantové agentury ČR č. 20-01589S.*

**LITERATURA**

1. Korecka L., Vytras K., Bilkova Z.: *Current Medicinal Chemistry* 24, 1 (2017).
2. Sanchis A., Salvador J. P., Marco M. P.: *Trends Anal. Chem.* 106, 1 (2018).
3. Brandmeier J. C., Raiko K., Farka Z., Peltomaa R., Mickert M. J., Hlaváček A., Skládal P., Soukka T., Gorrís H. H.: *Adv. Healthcare Mater.* 10, 2100506 (2021).

**2L-04****ELEKTROCHEMICKÝ PŘÍSTUP K LADĚNÍ  
VLASTNOSTÍ NOVÝCH FOTOINIČIÁTORŮ  
ZALOŽENÝCH NA ACYLSLOUČENINÁCH  
PRVKŮ 14. SKUPINY****ALAN LIŠKA<sup>\*a</sup>, JIŘÍ LUDVÍK<sup>a</sup>, MICHAEL HAAS<sup>b</sup>***<sup>a</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.,  
Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy,  
Dolejškova 3/2155, 18223 Praha, Česko,**<sup>b</sup> Technische Universität Graz, Institut für Anorganische  
Chemie, Stremayrgasse 9/IV, 8010 Graz, Rakousko  
alan.liska@jh-inst.cas.cz*

Acylgermany se v praxi využívají jako fotoiničiátory radikálových polymerizací v dentální medicíně (preparát Ivocerin) zejména díky nízké toxicitě. Nicméně vzhledem k nezanedbatelné ceně organogermaničitých sloučenin existuje snaha připravit alternativní deriváty, které by byly levnější a zároveň absorbovaly spíše dlouhovlnnější záření (kvůli efektivnějšímu vytváření polymerizační směsi v objemu). Proto se v současnosti věnuje značná pozornost acylstannanům jako nejbližší příbuzné strukturální třídě z hlediska fotochemické reaktivity<sup>1</sup>.

Kromě standardních metod charakterizace nových fotoiničiátorů (UV-VIS spektroskopie, kvantové výtěžky štěpících reakcí) se dá při studiu jejich elektronové struktury s výhodou použít nezávislý přístup založený na voltametrových metodách<sup>2</sup>. Jelikož první reakce přenosu elektronu bývá v aprotickém prostředí u většiny acylderivátů reverzibilní, lze potom získané redukční potenciály přímo korelovat jednak s polohami spektroskopických absorpčních pásů, jednak s teoreticky vypočtenými orbitálními energiemi (SOMO) či přímo porovnávat s hodnotami předpovězených termodynamických redoxních potenciálů.

V rámci příspěvku bude diskutován vliv periferních substituentů na posuny prvního redukčního potenciálu u početné skupiny látek lišících se (a) centrálním atomem (Si, Ge, Sn), (b) počtem centrálních atomů (jedno- až trojjaderné deriváty), (c) počtem acylových skupin (1–4), (d) způsobem propojení u vícejaderných sloučenin. U látek s více redox centry bude zhodnocen pozorovaný rozsah elektronové konjugace / delokalizace. Kromě polyacylderivátů bude okrajově věnována pozornost halogenderivátům a enolátům, které se uplatňují jako důležité meziproducty při syntéze.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 21-23261S, projektu NAWI Graz a institucionální podpory RVO 61388955.*

**LITERATURA**

1. Haas M., Radebner J., Eibel A., Gescheidt, G., Stueger H.: *Chemistry - A European Journal* 24, 8258 (2018).
2. Frühwirt P., Liška A., Wasdin P. T., Kelterer A.-M., Haas M., Ludvík J., Gescheidt G.: *Organometallics* 39, 2257 (2020).

## 2L-05

ELEKTROCHEMICKÁ, EPR A KVANTOVĚ  
CHEMICKÁ STUDIE REDUKTIVNÍHO ŠTĚPENÍ  
AROMATICKÝCH NOSYL ESTERŮ – NOVÁ CESTA  
K PŘÍPRAVĚ ARYLSULFINÁTŮ

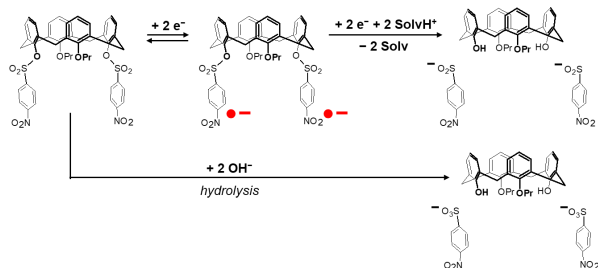
Tento příspěvek je věnován památce prof. P. Zumana, zakladatele organické polarografie a elektroanalýzy.

ALAN LIŠKA<sup>a</sup>, JIŘÍ KLÍMA<sup>a</sup>, JAN BUDKA<sup>b</sup>,  
JIŘÍ LUDVÍK<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Odd. molekulární elektrochemie a katalýzy, Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AVČR, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8,  
<sup>b</sup> Ústav organické chemie, FCHT, VŠCHT Praha, Technická 5 166 28 Praha 6  
jiri.ludvik@jh-inst.cas.cz

Mechanismus elektrochemické redukce série šesti *conexalix*[4]aren-bis nosylátů (aryl esterů 4-nitrofenylsulfonátů) byla studována pomocí DC-polarografie a cyklické voltametrie v bezvodém DMF. EPR spektroelektrochemie umožnila identifikaci produktů, experimentální data byla korelována s kvantovými výpočty. Pro srovnání byly stejným způsobem studovány fragmenty a předpokládané produkty jako modelové látky.

Všechny studované bis-nosyláty se v prvním kroku reverzibilně redukují dvěma elektrony na bis-radikalkationty. Každý z obou nepárových elektronů je tedy lokalizován na jednom z nosylátů. Ve druhém elektroredukčním kroku jsou oba nosyláty současně redukovány dvěma elektrony, přičemž dojde k jejich štěpení na dva 4-nitrosulfonátové ionty a na bis-fenolát kalixarenu. Toto elektroredukční generování arylsulfonátů je významná z elektrosyntetického hlediska. Aktivované aryl sulfonáty, jejichž syntéza a izolace je obtížná, lze takto snadno v roztoku připravit elektrochemickou redukcí nosyl esterů.



Práce byla finančně zajištěna grantem GAČR 21-23261S a institucionální podporou RVO 61388955. Autoři děkují M. Řezankové za syntézu látek a prof. P. Lhotákovi (oba VŠCHT) za cennou diskusi.

## LITERATURA

- Liška A., Řezanková M., Klíma J., Urban J., Budka J., Ludvík J., *Electrochem. Sci. Adv.* 2022, doi:10.1002/elsa.202100221

## 2L-06

ANALÝZA EPR SPEKTRA DERIVÁTŮ  
CIBALACKROTU – ANEB KDYŽ OVĚŘENÝ POSTUP  
SELŽE, NASTUPUJE VYLUČOVACÍ METODA

KAROL LUŠPAJ<sup>a,b</sup>, LUDMILA ŠIMKOVÁ<sup>a</sup>,  
JIŘÍ KLÍMA<sup>a</sup>, ALAN LIŠKA<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 fyzikální chemie a chemické fyziky, Fakulta chemické a potravinářské technologie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovenská republika  
karol.luspaj@jh-inst.cas.cz

Cibalackrotý představují jeden z typů chromoforů studovaných pro singletové štěpení<sup>1,2</sup>. Efekt singletového štěpení je velmi aktuální z důvodu jeho využití pro zvýšení účinnosti solárních článků. Pro další vývoj a aplikaci je studium redoxních vlastností nezbytné.

Pro studované deriváty cibalackrotu je typická redukce ve dvou reverzibilních krocích mechanismem EE a obdobně oxidace ve dvou reverzibilních krocích. První redukční/oxidací krok je spojen s tvorbou stabilního radikálového aniontu/kationtu. EPR spektrum pozorovaného radikálu je velmi úzké, je v něm patrná špatně rozlišená hyperjemná struktura a skládá se z jediné široké čáry Gaussovského tvaru. Pozorování hyperjemné struktury bylo možné pouze výjimečně u některých derivátů a bylo k tomu nutné snížit modulační amplitudu pod 0,1 G, modulační frekvenci na 10 kHz a mikrovlnný výkon na 0,2 mW. Z důvodu příliš velkého množství štěpicích konstant v úzkém spektru, kde mnoho z nich je nerozlišených a skrytých v širší čáře, všechny pokusy o analýzu spekter vedly k mnoha kombinacím štěpicích konstant, pro které simulované spektrum dobře odpovídá naměřenému spektru.

Z hlediska symetrie molekuly jsou v EPR spektru ekvivalentní oba dusíky a 4 dvojice protonů imidazolové části molekuly, a také oba protony v poloze *para*, 4 protony v polohách *orto*- a 4 v polohách *meta*- na fenylech. Výpočty ukazují, že celá molekula s výjimkou fenylů je téměř v rovině. Fenyly jsou oproti zbytku molekuly vytočené o 45° a je na nich lokalizovaná jen malá část spinové hustoty, takže i štěpicí konstanty fenylových protonů jsou malé. Ke zdánlivě beznadějně analýze naměřeného EPR spektra a k přiřazení štěpicích konstant napomohlo změření vybraných deuterovaných cibalackrotů a DFT výpočty.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 21-23261S a institucionální podpory 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).

## 2L-07

**REDOXNÍ VLASTNOSTI A CYTOTOXICKÁ AKTIVITA CYKLOPENTADIENYLOVÝCH TITANOCEN DIHALOGENIDŮ****LUDMILA ŠIMKOVÁ, JAN SVOBODA, DAVID DUNLOP, ALAN LIŠKA, JIŘÍ LUDVÍK**

Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.,  
Dolejškova 3, CZ-18223 Praha 8, Česká republika  
ludmila.simkova@jh-inst.cas.cz

Cyklopentadienylové titanocendihaloogenidy jsou široce používány jako katalyzátory při různých chemických přeměnách. Vedle toho bylo zjištěno jejich potenciální využití jako cytostatik v léčbě onkologických onemocnění. Prvním metalocendihaloogenidem, který prošel klinickými testy jako chemoterapeutický lék, byl titanocendichlorid<sup>1</sup> Cp<sub>2</sub>TiCl<sub>2</sub>. Chemoterapeutika na bázi titanocenu jsou oslavována jako potenciálně velmi významná, avšak dosud neprozkoumaná kategorie cancerostatik, která stojí za další zkoumání.

Nedávné studie<sup>2,3</sup> prokázaly vyšší cytotoxicitu u řady derivátů difluoridů titanocenu ve srovnání s jejich dichloridovými analogy. Rovněž pokud jsou zavedeny vhodné substituenty, cytotoxicita a buněčná specifita nově vytvořených derivátů může být značně zvýšena. Abychom porozuměli molekulárnímu mechanismu účinku a mohli předpovídat děje probíhající během chemických procesů v tkáni, je důležité chování titanocenových halogenidů během redoxních procesů. Proto byly pomocí standardních elektrochemických metod zkoumány redoxní vlastnosti titanocenových difluoridů a dichloridů a získané experimentální výsledky byly porovnány s výpočty DFT. Hlavní důraz byl kladen na vliv substituce cyklopentadienylového kruhu (Cp) a typu halogenidového aniontu na redoxní charakteristiky.

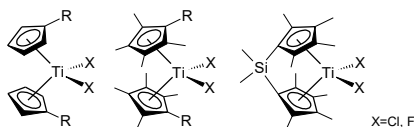


Schéma. Studované struktury cyklopentadienyl titanocen dihalogenidů

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 21-23261S a institucionální podpory RVO: 61388955.

## LITERATURA

1. Köpf H., Köpf-Maier P.: *Angewandte Chemie-International edition in English* 18, 477 (1979).
2. Eger S., Immel T. A., Claffey J., Müller-Bunz H., Tacke M., Groth U., Huhn T.: *Inorg. Chem.* 49, 1292 (2010).
3. Hodík T., Lamač M., Červenková Šťastná L., Karban J., Koubková L., Hrstka R., Císařová I., Pinkas J.: *Organometallics* 33, 2059 (2014).
4. Šimková L., Svoboda J., Pinkas J., Skoupilová H., Hrstka R., Dunlop D., Lamač M., Gyepes R., Ludvík J.: *Electroanalysis* 31, 2067 (2019).

## 2L-08

**FROM CYCLIC VOLTAMMETRY TO ELIMINATION VOLTAMMETRY WITH LINEAR SCAN****XIAOCHUN LI, IVETA TRÍSKOVÁ, LIBUŠE TRNKOVÁ**

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

For the study of electrode processes cyclic voltammetry (CV) is one of the most widely used electrochemical methods. It is a versatile technique that allows investigating the redox properties of the electrochemical systems<sup>1–3</sup>. The aim of our electrochemical research is a deeper understanding of the effect of electrode surface morphology and chemistry on the redox and adsorption behavior of the investigated substance. Further information beyond the CV can be provided by elimination voltammetry with linear scan (EVLS)<sup>4–6</sup>, which is most successfully applied to systems of a reversible nature. It is possible to monitor the influence of various experimental parameters on the electron transfer of studied analytes. EVLS answers the question of what processes are hidden under CV curves and how electron transfer works on different electrode surfaces respectively in different electrolyte solutions. Using selected carbon electrodes and chosen EVLS functions we studied CV responses of redox probes [Fe(CN)<sub>6</sub>]<sup>3+/4-</sup> and [Ru(NH<sub>3</sub>)<sub>6</sub>]<sup>3+/2+</sup>, which are very often used as redox probes undergoing electron transfer *via* a simple outer-sphere mechanism. The processing of CV data by the elimination procedure indicated completely new facts, which were discussed with regard to previously published works<sup>7–10</sup>.

The work has been financially supported by the project: MUNI/A/1539/2021.

## REFERENCES

1. Bard A. J., Faulkner L. R.: *Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications* (2<sup>nd</sup> ed.) Wiley (2000).
2. Heineman W. R.: *Laboratory Techniques in Electroanalytical Chemistry*, (2<sup>nd</sup> ed.), CRC (1996).
3. Compton R. G., Banks C. E.: *Understanding Voltammetry* (3<sup>rd</sup> ed.) Oxford (2018).
4. Trnkova L.: *J. Electroanal. Chem.* 905, 115961 (2022).
5. Trnkova L.: *J. Electroanal. Chem.* 582, 258 (2005).
6. Trnkova L.: *Chem. Listy* 112, 802 (2018).
7. McCreery R. L.: *Chem. Rev.* 108, 2646 (2008).
8. Granger M. C. et al.: *J. Electrochem. Soc.* 146, 4551 (1999).
9. Bindra P., et al: *J. Electroanal. Chem.* 57, 435 (1974).
10. Peter L. M., et al: *J. Electroanal. Chem.* 71, 31 (1976).

## 2L-09 STABILIZAČNÍ LIPIDOVÉ MATRICE PRO ELEKTROCHEMICKOU ANALÝZU BIOLOGICKY AKTIVNÍCH LÁTEK

MARTINA ZATLOUKALOVÁ

*Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta,  
Univerzita Palackého v Olomouci  
martina.zatloukalova@seznam.cz*

Biologicky aktivní látky jsou často málo stabilní sloučeniny, mohou být málo rozpustné, nebo dokonce nerozpustné ve vodném prostředí. Začlenění těchto nestabilních molekul do lipidového prostředí nabízí nové možnosti jejich transportu, řízeného a cíleného uvolňování, ale také jejich stabilizaci<sup>1</sup>.

Příspěvek shrnuje poznatky o inkorporaci enzymů<sup>2,3</sup>, signálních molekul<sup>4</sup> či přírodních látek do lipidových matic, které jsou elektrochemicky neaktivní. Na základě výběru lipidů a zvolených podmínek jsme připravili dva typy lipidových matic, a to lipozomy a lyotropní lipidové fáze popř. jejich nanočástice. Mezi nejprozkoumanější lyotropní nanostrukturální nosiče řadíme kubozomy a hexozomy, které jsou definovány jako koloidní nanočástice s vnitřní bikontinuální kubickou a hexagonální strukturou<sup>1</sup>.

Bylo ukázáno, jak v případě biosenzoru založeném na inkorporaci membránového proteinu (sodno/draselná pumpa)<sup>2,3</sup>, nitrovaných alkenů<sup>4</sup> či jiných oxidačních-redukčních aktivních látek, že použité lipidové matrice stabilizují tyto relativně málo rozpustné a nestabilní látky. Nitrované mastné kyseliny degradují ve vodném prostředí relativně rychle, především odštěpením NO radikálu. Jejich inkorporaci do lipidových struktur došlo k jejich stabilizaci až po dobu několika dnů. Sodno/draselná pumpa, jakožto membránový protein, vyžaduje pro výzkum ve vodném prostředí detergent či inkorporaci do lipidových struktur. Přítomnost detergentu zajišťuje rozpustnost membránových proteinů ve vodném prostředí, ale neumožňuje jejich stabilizaci, tedy zachování biologických funkcí na rozdíl od inkorporace do lipidového prostředí.

*Tato práce vznikla za podpory RVO 61989592 a grantu GACR 19-21237Y.*

### LITERATURA

- Zatloukalová M.: Chem. Listy 116, 172 (2022).
- Zatloukalová M., Nazaruk E., Novák D., Vacek J., Bilewicz R.: Biosens. Bioelectron. 100, 437 (2018).
- Vacek J., Zatloukalová M., Geleticová J., Kubala M., Modriansky M., Fekete L., Masek J., Hubatka F., Turanek J.: Anal. Chem. 88, 4548 (2016).
- Zatloukalová M., Jedinák L., Riman D., Franková J., Novák D., Cytryniak A., Nazaruk E., Bilewicz R., Vrba J., Papoušková B., Kabeláč M., Vacek J.: Redox Biol. 46, 102097 (2021).

## 2L-10 KOMPLEXNÍ CHARAKTERIZACE CHEMICKY- MECHANICKY LEŠTĚNÝCH BOREM DOPOVANÝCH DIAMANTOVÝCH ELEKTROD S KONTROLOVANÝM OBSAHEM SP<sup>2</sup> UHLÍKU POMOCÍ LASERU

MICHAL ZELENSKÝ<sup>a</sup>, JAN HRABOVSKÝ<sup>b</sup>, MARTIN  
ZUKERSTEIN<sup>b</sup>, JURAJ SLÁDEK<sup>b,d</sup>, NADEZHDA  
BULGAKOVA<sup>b</sup>, ANDREW TAYLOR<sup>c</sup>, VINCENT  
MORTET<sup>c</sup>, KAROLINA SCHWARZOVÁ-PECKOVÁ<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Albertov 6, 128 43 Praha 2,

<sup>b</sup> HiLASE Centrum, Fyzikální ústav Akademie věd České republiky, v.v.i., Za Radnicí 828, 252 41 Dolní Břežany,

<sup>c</sup> České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Břehová 7, 115 19 Praha 1,

<sup>d</sup> Fyzikální ústav Akademie věd České republiky, v.v.i., Na Slovance 2, 182 21 Praha 8

michal.zelensky@natur.cuni.cz

Kontrolované zavádění sp<sup>2</sup> uhlíku do borem dopovaných diamantových (BDD) elektrod otevírá možnosti navrhování elektrodového povrchu přesně podle potřeby použití. Selektivita a citlivost pro mnoho organických látek může být zvýšena právě díky přítomnosti sp<sup>2</sup> uhlíku, přičemž výhodné vlastnosti BDD elektrod zůstanou zachovány. Jednou z možností zavedení sp<sup>2</sup> uhlíku je ozářování povrchu BDD laserem, které vede ke konverzi sp<sup>3</sup> na sp<sup>2</sup> uhlík.

V této studii byl pro uvedenou konverzi použit IČ laser. Elektrody s obsahem boru 8,7·10<sup>20</sup> cm<sup>-3</sup>, pro které byl tento laser použit, byly před jeho aplikací chemicky-mechanicky leštěny<sup>3</sup>. První byl optimalizován tok energie (laser fluence). Hodnocení limitu poškození BDD vrstvy a míra konverze byla následně charakterizována Ramanovou spektroskopií a konfokální mikroskopií. Optimalizované parametry laseru byly poté použity na konverzi BDD povrchu: 100 %, 47 %, 10 %, 5 %, 1 %, 0,5 % a 0,1 % plochy elektrody. Jako referenční materiál byla použita neozářená BDD elektroda.

Dále byly studovány elektrochemické vlastnosti BDD elektrod po úpravě laserem. Výsledky z cyklické voltametrie v základním elektrolytu (1M KCl) naznačují, že se zvyšujícím se obsahem sp<sup>2</sup> uhlíku stoupá kapacitní proud. Další měření pro redoxní sondy vnitřní sféry ([Fe(CN)<sub>6</sub>]<sup>3-/4-</sup>) jasně ukazují, že s malou konverzí na sp<sup>2</sup> uhlík (0,1–1 %), dochází ke snížení rychlosti přenosu elektronu, ale pokud dochází k vyšší konverzi (47 %) rychlost přenosu elektronu se opět zvyšuje. Na druhou stranu rychlost přenosu elektronu se nemění při použití redoxních sond vnější sféry ([Ru(NH<sub>3</sub>)<sub>6</sub>]<sup>3+/2+</sup>).

*Finanční podpora byla poskytnuta Grantovou agenturou ČR (projekt 20-03187S).*

### LITERATURA

- Thomas E. L. H., Nelson G. W., Mandal S., Foord J. S., Williams O. A.: Carbon 68, 473 (2014).

## 2L-11 ELEKTROCHEMICKÁ CHARAKTERIZACE CHYTRÉHO NANOTRANSPORTÉRU PRO CÍLENOU LÉČBU

LUDEK MELICH<sup>a</sup>, JAKUB PODHÁJKÝ<sup>a</sup>, BOŽENA  
HOSNEDLOVÁ<sup>b</sup>, RICHARD PRŮŠA<sup>a</sup>, RENÉ KIZEK<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Ústav lékařské chemie a klické biochemie, Fakultní nemocnice v Motole, V Úvalu 84, 150 06 Praha 5, <sup>b</sup> BIOCEV – I.LF, Průmyslová 595, 252 50 Vestec

Nádorová onemocnění se v rozvinutých státech stávají nejčastějšími příčinami úmrtí. Nádory slinivky jsou velmi agresivní. Nové způsoby léčby těchto závažných onemocnění mohou být pro pacienty přínosné. Intenzivně jsou hledány molekuly vhodné jak pro diagnostiku, tak i léčbu. Mezi takové lze zařadit i metalothioneiny (MT). MT je skupina proteinů vzájemných ionty těžkých kovů s řadou regulačních funkcí<sup>1</sup>. S ohledem na vysoký obsah volných sulfhydrylových skupin jsou intenzivně studovány elektrochemicky<sup>2</sup>. Průběhy křivek pacientů mohou souviset jak s hladinou thiolových sloučenin, tak dalších elektroaktivních složek a mohou být asociovány s nádorovým onemocněním. V našich předešlých experimentálních pracích byl navržen nanotransportér doxorubicinu (monitorován spektrofotometricky a fluorimetricky) cílený k nádorům slinivky. Základ nanotransportéru byl tvořen uhlíkovými nanotrubicemi (MWCNTs) a superparamagnetickými částicemi oxidů železa (SPION) o velikosti kolem 20–50 nm. Částice SPION byly modifikovány specifickou aptamerovou sekvencí cílenou k metalothioneinu. Aptamer byl ukotven k SPION/Au nanočástici. V přítomnosti heminu dochází k tvorbě kvadruplexové struktury s pseudoenzymatickou aktivitou, která byla sledována přes vhodný indikátorový systém (TMB, ABTS). V přítomnosti iontů kovů dochází k blokování tvorby kvadruplexové struktury a poklesu peroxidázové aktivity. Ta byla sledována jak fotometricky, tak elektrochemicky.

Zvyšující se koncentrace MT tak vede k nárůstu pseudo-peroxidázové aktivity. Navíc byly jednotlivé části nanotransportéru studovány pomocí gelové elektroforézy. Přítomnost MT byla monitorována elektrochemicky Brdičkovou reakcí. Byly sledovány typické signály MT RS2CO (–1,15 V), Cat1 (–1,25 V), Cat2 (–1,45 V) a Cat3 (–1,75 V).

Tato práce byla řešena v rámci projektu CA18122 EURO-CHOLANGIO-NET a evropské platformy pro nanomedicinu.

### LITERATURA

1. Ruttkey-Nedecky B., et al.: *Int. J. Mol. Sci.* 14, 6044 (2013).
2. Petrova J., et al.: *Electrochim. Acta* 51, 5112 (2006).

## 2L-12 KATECHOLÁZOVÁ AKTIVITA VYBRANÝCH BIOMIMETICKÝCH KOMPLEXŮ MĚDI

TOMÁŠ MIKYSEK<sup>a</sup>, MILAN SÝS<sup>a</sup>, ROMANA  
SOKOLOVÁ<sup>b</sup>, MICHAELA BÁRTOVÁ<sup>a</sup>, MIROSLAV  
NOVÁK<sup>c</sup>

<sup>a</sup> Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, <sup>b</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, <sup>c</sup> Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice  
tomas.mikysek@upce.cz

Vývoj umělých enzymů a jejich charakterizace jsou v popředí zájmu v oblasti katalýzy. Jejich možné využití je zkoumáno jak v reakcích při syntéze, tak i v elektroanalýze<sup>1</sup>. Většinou se jedná o jedno nebo vícejaderné komplexy mědi. Tyto nově syntetizované komplexy jsou sice příslibem v této oblasti, avšak jejich problémem je nízká rozpustnost, a tak se celá řada měření popisující jejich katecholázovou odehrává v prostředí methanolu či jiného nevodného rozpouštědla a jako modelový substrát je obvykle použit 3,5-di-*tert*-butylkatechol. Relativní porovnání připravených katalyzátorů, v rámci jejich charakterizace, nabízí parametry, které jsou typické pro popis enzymem katalyzovaných reakcí.

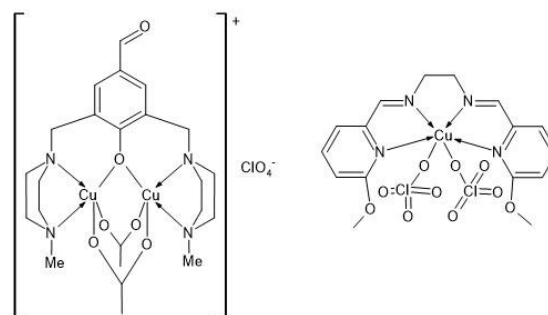


Schéma 1. Struktury vybraných komplexů mědi

Tento příspěvek se týká vlivu struktury u vybraných biomimetických komplexů mědi (viz. schéma 1) na jejich katecholázovou aktivitu vůči výše uvedeným substrátům. K jejich charakterizaci byly využity jak elektrochemické, tak i spektrofotometrické techniky. Tato základní studie poskytuje důležité informace při návrhu nových typů senzorů pro klinické aplikace.

Tato práce vznikla za podpory grantu Grantové agentury České republiky (projekt GAČR 19-03160S)

### LITERATURA

1. Serrano-Plana J., Garcia-Bosch I., Company A., Costas M.: *Acc. Chem. Res.* 48, 2397 (2015).

## 2P-01

**VOLTAMETRIE 6-DIAZO-5-OXO-L-NORLEUCINU (DON): STRUKTURNÍ SUBJEDNOTKY NOVÝCH PROTINÁDOROVÝCH LÉČIV****MAREK ZELINKA<sup>a</sup>, DANIEL DOBROVODSKÝ<sup>a,b</sup>, ALEŠ DAÑHEL<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Biofyzikální ústav, Akademie věd České republiky, v.v.i., Královopolská 135, 612 65 Brno, Česká republika, <sup>b</sup> Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta, Masarykova Univerzita, Kamenice 5, 625 00 Brno, Česká republika  
danhel@ibp.cz

6-diazo-5-oxo-L-norleucine (DON, Schéma 1) je nestandardní aminokyselina, která byla poprvé izolována z mikrobiálních medií neidentifikovaných bakterií nalezených v peruánských půdních vzorcích. Charakterizována byla Dianem a spol. v roce 1956, který již tehdy předpověděl její aplikace při léčbě rakoviny<sup>1</sup>.

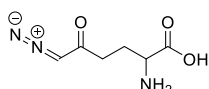


Schéma 1. Chemická struktura 6-diazo-5-oxo-L-norleucinu (DON)

DON v organismech inhibuje enzymy využívající glutamin a reakce spojené s biosyntézou aminokyselin a bázi nukleových kyselin<sup>2</sup>. DON je genotoxický<sup>3</sup>. Slouží však jako základní strukturní jednotka nově syntetizovaných protinádorových léčiv minimalizujících jeho negativní vedlejší účinky<sup>4-6</sup>.

Tato práce je zaměřena na základní elektrochemické studium DON na visící rtuťové kapkové elektrodě a elektrodě z pyrolytického grafitu pomocí cyklické resp. square-wave voltametrie. Byly zkoumány závislosti na pH elektrolytu (2 – 12), rychlosti polarizace i koncentraci. Elektrochemická redukce DONu probíhá difúzně řízeným procesem a koncentrační závislosti jsou lineární v rozsahu 0,6 až 100  $\mu\text{mol}\cdot\text{l}^{-1}$  s limitem detekce (S/N = 3) 0,6  $\mu\text{mol}\cdot\text{l}^{-1}$  resp. 10  $\mu\text{mol}\cdot\text{l}^{-1}$ . Dále byla testována možnost potenciálního využití DON jako elektrochemické sondy pro detekci přechodů/změn sekundárních struktur DNA adsorbovaných na povrchu elektrod.

Tato práce byla podpořena projektem SYMBIT reg. č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000477 financovaného z EFRR.

## LITERATURA

1. Dion H. W., et al.: J. Am. Chem. Soc. 78, 3075 (1956).
2. Terzyan S. S., et al.: Protein Sci. 26, 1196 (2017).
3. Kulkarni R. M., et al.: Toxicol. Mech. Methods 27, 218 (2017).
4. Rais R., et al.: J. Med. Chem. 59, 8621 (2016).
5. Tenora L., et al.: J. Med. Chem. 62, 5324 (2019).
6. Oh M.-H., et al.: J. Clin. Invest. 130, 3865 (2020).

## 2P-02

**PORÉZNÍ STŘÍBRNÉ ELEKTRODY – MOŽNÁ CESTA KE ZLEPŠENÍ DETEKČNÍHO LIMITU PRO URČENÍ ORGANICKÝCH NEČISTOT V ŽIVOTNÍM PROSTŘEDÍ****ALENA MIČALCOVÁ<sup>a</sup>, BOHUMIL KRATOCHVÍL<sup>b</sup>, EVA STRÁNĚLOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, <sup>b</sup> Ústav chemie pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6  
kratochb@vscht.cz

Znečištění životního prostředí organickými polutanty je jedním z nejpálčivějších problémů dneška. Tyto látky mohou být škodlivé již v malých koncentracích, a proto je potřeba posouvat detekční limity jejich stanovení. Jednou z možností zlepšení detekčního limitu při elektrochemickém stanovení látek je použití porézní elektrody, která bude mít větší aktivní povrch. V této práci byly porézní stříbrné elektrody připraveny několikakrokovým postupem zvaným prášková metalurgie. Komerční stříbrný prášek s velikostí částic do 200  $\mu\text{m}$  byl použit jako výchozí materiál. Tento prášek byl slinován několika způsoby. První elektroda byla připravena slinování v plazmatu (SPS-spark plasma sintering) s použitím ochranného okruží tak, aby byl na prášek vyvíjen během slinování minimální tlak. Porozita v takto připraveném stříbrném kompaktním vzorku nebyla distribuována rovnoměrně a byla výrazně vyšší na okrajích vzorku. To by z hlediska použití elektrody mohlo být výhodné. Porézní okraj by zajišťoval velkou aktivní plochu elektrody, zatímco méně porézní jádro by činilo elektrodu odolnější. Další elektrody byly připraveny s využitím tak zvaného space holderu. Jedná se o materiál ( $\text{NH}_4\text{HCO}_3$ ), který byl smíchan s práškovým stříbrem v poměru 1:4, slisován, a tak byly připraveny polotovary pro práškovou metalurgii (green bodies). Space holder byl rozložen v muflové peci při teplotě 80  $^{\circ}\text{C}$  během 4 hodin. Porézní polotovary byly slinovány při teplotě 500  $^{\circ}\text{C}$  a to buď v plazmatu po dobu 10 minut nebo v muflové peci po dobu 20 hodin. Slinování v plazmatu vedlo k uzavření malých pórů. Materiál obsahoval pouze velké póry, které zůstaly po rozložení space holderu. Slinování v muflové peci zachovalo malé póry mezi částicemi i velké póry po částicích space holderu.

Prezentované výsledky ukazují, že zvolenou metodou přípravy lze ovlivnit distribuci pórů v připravených elektrodách. Další výzkum bude zaměřen na otestování jednotlivých materiálů z hlediska elektrochemického chování a vhodnosti použití jako elektrody.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 20-01417J.

## 2P-03

ELEKTROCHEMICKÁ OXIDACE  
METHYLOVANÝCH DERIVÁTŮ GUANINUIVETA TRÍSKOVÁ<sup>a</sup>, ALAN LIŠKA<sup>b</sup>, JIŘÍ LUDVÍK<sup>b</sup>,  
LIBUŠE TRNKOVÁ<sup>a\*</sup>

<sup>a</sup> Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ústav chemie, Kamenice 5, 625 00 Brno, <sup>b</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3/2155, 182 23 Praha 175126@mail.muni.cz

Modifikace nukleových kyselin (epigenetika) jsou spojovány s mnoha nádorovými onemocněními a metabolickými poruchami<sup>1-5</sup>. Jedním z mnoha epigenetických mechanismů, buňkami využívaný k řízení exprese genů, je methylace DNA a právě jeden z methylovaných derivátů guaninu (methylG), N7-methylguanin, je považován za biomarker DNA methylace<sup>1</sup>. I když existuje velmi málo literárních zdrojů týkajících se elektrochemické detekce N-methyl derivátů guaninu, redukční proces již zmíněného N7-methyl derivátu byl studován na rtuťové kapkové elektrodě pomocí DC polarografie, cyklické a diferenční pulzní voltametrie<sup>5,6</sup> a ke zkoumání oxidačních procesů N7-methylguaninu byly využity uhlíkové a borem dopované diamantové elektrody<sup>1</sup>.

V naší práci byla studována elektrochemická oxidace 1N-, 3N-, 7N- a 9N-methylG za účelem objasnění vztahu struktury a funkce tj. mezi polohou methylové skupiny a odpovídajícím oxidačním procesem na polymerní pencil grafitové elektrodě (pPeGE). Z tohoto důvodu byly zkoumány anodické voltametrické signály methylG nejen s ohledem na pH, iontovou sílu roztoku, koncentraci analytu, ale i s ohledem na polohu methylové skupiny v molekule G. Ukázalo se, že methylace G ovlivňuje jeho oxidační procesy a oxidace je snadnější v případě substituce  $-CH_3$  na pyrimidinovém kruhu než na imidazolovém kruhu. Elektrochemické výsledky byly doplněny teoretickými výpočty HOMO energií v programu Spartan<sup>16</sup> a Gaussian<sup>16</sup>. Vzájemné porovnání teoretických a experimentálních dat ukázalo, že potenciálová poloha oxidačních signálů rostoucí v řadě 1N- < G < 7N- < 3N- < 9N-methylG koreluje s teoreticky vypočtenými energiemi HOMO/SOMO a předpovězenými termodynamickými redox potenciály ve vodě (CPCM).

Tato práce vznikla za podpory projektu MUNI/A/1539/2021 (MŠMT ČR). Autoři děkují Mgr. Markétě Bosákové za pomoc při experimentální práci.

## LITERATURA

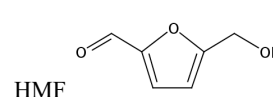
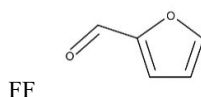
- Sanjuan I., et al.: *Electrochim. Acta.*, 197, 167 (2016).
- Baylin S. B., et al.: *Adv. Cancer Res.* 72, 141 (1998).
- Chen J. J., et al.: *Nat. Rev. Cancer.* 10, 23 (2010).
- Belinsky S.A., et al.: *Proc.Natl.Acad.Sci.* 95, 11891 (1998).
- Brotans A., et al.: *Electroanalysis.* 27, 2766 (2015).
- Bojarska E., et al.: *Nucleosides, Nucleotides Nucleic Acids.* 9, 437 (1990).

## 2P-04

ELEKTROCHEMICKÉ VLASTNOSTI FURFURALU  
A 5-HYDROXYMETHYLFURFURALU A JEJICH  
REAKTIVITA S PRIMÁRNÍMI AMINYJOËL DONKENG DAZIE<sup>a,b</sup>, JIŘÍ URBAN<sup>b</sup>,  
JIŘÍ LUDVÍK<sup>b</sup>

<sup>a</sup> EGCIM, University of Ngaoundere, PO Box 454, Ngaoundere, Cameroon, <sup>b</sup> Odd. molekulární elektrochemie a katalýzy, ÚFCHJH AV ČR, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8 joel.donkeng@yahoo.fr, jiri.ludvik@jh-inst.cas.cz

Furfural (FF) a 5-hydroxymethylfurfural (HMF) mají aldehydickou skupinu v konjugaci s dienem. Oba deriváty se získávají z biomasy, tedy z obnovitelného zdroje, což je významné ekologicky i ekonomicky neboť jde o důležité organické prekurzory, pro které jsou typické reakce s nukleofily (např. jejich kondenzační reakce s aminy za vzniku iminů a jejich další reakce<sup>1,2</sup>). Elektrochemické chování samotných FF a HMF ve vodném prostředí je poměrně dlouho známé, detailní mechanismy jejich reakcí, zejména jejich časový průběh, však nebyly dosud plně objasněny.



Díky tomu, že aldehydická skupina i její dusíkaté deriváty jsou elektrochemicky redukovatelné, monitoring vzniku a přeměn intermediátů a produktů kondenzačních reakcí pomocí elektrochemických metod je vhodný. V této práci byla využita zejména DC-polarografie a cyklická voltametrie nejen ke sledování reakcí FF a HMF s různými primárními aminy, ale i k detailní revizi mechanismu samotné redukce FF a HMF v širokém rozmezí pH (0,17–11,29). Tímto studiem navazuje na naše předešlé práce s fitaldehydem (OPA)<sup>3-5</sup>.

FF se redukuje v jednom kroku při pH 0,17–3,06, v neutrálním a zásaditém prostředí vznikají dvě vlny, přičemž potenciál druhého kroku nezávisí na pH. Chování HMF je podobné. Po přidání vybraných primárních aminů lze pomocí elektrochemické odezvy sledovat časový průběh reakce. Bylo zjištěno, že rychlost a průběh reakce zásadně závisí na substituci na  $\alpha$ -uhlíku použitého aminu.

Poděkování: GAČR, grant 21-23261 S a RVO 61388955.

## LITERATURA

- Machado G., Leon S., Santos F., Lourega R., Dullius J., Mollmann M. E., Eicher P.: *Natural Resources*, 7, 115 (2016).
- Chen S., Wojcieszak R., Dumeignil F., Marceau E., Royer S., *Chem. Rev.* 118, 11023 (2018).
- Donkeng Dazie J., Liška A., Ludvík J.: *J. Electrochem. Soc.* 163, G127, (2016).
- Donkeng Dazie J., Liška A., Urban J., Ludvík J.: *J. Electroanal. Chem.* 821, 131 (2018).
- Donkeng Dazie J., Urban J., Ludvík J.: *Chemistry Select* 6, 4881 (2021).



## 3L-01

**Ce<sup>3+</sup>-DOPED PHOSPHORS PREPARED BY SINTERING OF MICROSPHERES OF YAG-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> GLASS-CERAMIC COMPOSITES****A. AKUSEVICH<sup>a</sup>, I. PARCHOVIANSKÁ<sup>a</sup>,  
M. PARCHOVIANSKÝ<sup>a</sup>, A. PRNOVÁ<sup>b</sup>, R. KLEMENT<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> FunGlass – Centre for Functional and Surface Functionalized Glass, Alexander Dubček University of Trenčín, Študentská 2, 911 50 Trenčín, <sup>b</sup> Joint Glass Centre of the IIC SAS, TnUAD and FChPT STU, Trenčín, Študentská 2, 911 50 Trenčín, Slovakia  
alena.akusevich@tuni.sk

In the present work we report on preparation and characterisation of compact samples prepared by hot pressing of glass microspheres powders in the Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system with eutectic composition doped with various amount of Ce<sup>3+</sup> ions.

The prepared glass microspheres were found to be XRD amorphous. The DSC analysis revealed the two exothermic peaks of yttrium aluminate glasses correspond to the crystallization of the YAG phase in the temperature range from 938 to 1100 °C (ref.<sup>1</sup>).

The bulk glass was prepared at temperature 840 °C with dwell time 0 min, applying the pressure of 40 MPa. The glass-ceramic samples were prepared at temperatures 1000 °C and 1100 °C with the dwell time 30 and 60 min.

Optimization of time-temperature-pressure regime led to successful preparation of translucent bulk glass and YAG:Ce-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> glass-ceramic from the eutectic glass composition with high proportion of crystalline Ce<sup>3+</sup>-doped YAG phase under relatively mild conditions and in a short time. Glass/glass-ceramics emit high intensity blue/green-yellow light when excited in UV or blue region of the spectrum. The decay kinetics of Ce<sup>3+</sup> in glass ceramics obtained by sintering at different temperatures (1000 °C and 1100 °C) was single exponential with a decay time of 65 ns, which is similar to the values reported for YAG:Ce<sup>3+</sup> phosphors<sup>2,3</sup>.

However, further optimization of dopant concentration in YAG host is required to increase the emitted light intensity and material performance as a potential candidate for application in pc-WLED lighting applications.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-17-0049 and by grant VEGA 1/0476/22. This item is a part of dissemination activities of project FunGlass. This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under grant agreement No 739566.*

## REFERENCES

1. Prnová A., Klement R., Bodišová K., Valúchová J., Galusek D., Bruneel E., Driessche I. V.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 128, 1407 (2017).
2. Sontakke A.-D., Ueda J., Xu J., Asami K., Katayama M., Inada Y., et al.: *J. Phys. Chem. C.* 120, 17683 (2016) and references cited therein.
3. Bachmann V., Ronda C., Meijerink A.: *Chem. Mater.* 21, 2077 (2009).

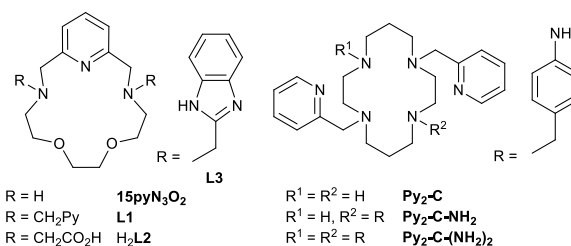
## 3L-02

**ZAJÍMAVÉ MAGNETICKÉ VLASTNOSTI KOMPLEXŮ PŘECHODNÝCH KOVŮ S MAKROCYKlickými LIGANDY****BOHUSLAV DRAHOŠ\***

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

V rámci systematického výzkumu jednomolekulových magnetů (single-molecule magnets – SMMs) byly připraveny Fe(II), Co(II) a Ni(II) komplexy s pyridinovými makrocyclickými ligandy **15pyN<sub>3</sub>O<sub>2</sub>**<sup>1</sup> a **L1–L3**<sup>2</sup> (obr. 1) s koordinančním číslem sedm a pentagonálně bipyramidální geometrií<sup>1,2</sup>. Výměnou axiálních koligandů nebo změnou funkční skupiny v pendantních ramenech bylo možné u těchto komplexů ovlivňovat magnetickou anizotropii, jejíž zvýšení je nezbytné pro přípravu efektivnějších SMMs<sup>1,2</sup>.

Dále byly připraveny a zkoumány oktaedrické Fe(II) komplexy s makrocyclickými ligandy typu **Py<sub>2</sub>-C** (obr. 1) odvozenými od cyklamů (1,4,8,11-tetraazacyklotetradekan) ve snaze o přípravu multifunkčních magnetických materiálů kombinujících tzv. křížení spinových stavů (spin crossover) s jednomolekulovým magnetismem. Tohoto spojení mělo být dosaženo buď zavedením vhodné koordinující se funkční skupiny (*p*-aminobenzyl)<sup>3</sup>, anebo kokrystalizací izostrukturálních komplexů Fe(II) a Co(II) s ligandem **Py<sub>2</sub>-C**<sup>4</sup>.



Obr. 1. Strukturální vzorce studovaných ligandů

*Tato práce vznikla za institucionální podpory Katedry anorganické chemie PFF Univerzity Palackého v Olomouci.*

## LITERATURA

1. Drahoš B., Herchel R., Trávníček Z.: *Inorg. Chem.* 56, 5076 (2017).
2. Drahoš B., Císařová I., Laguta O., Santana V. T., Neugebauer P., Herchel R.: *Dalton Trans.* 49, 4425 (2020).
3. Drahoš B., Antal P., Šalitraš I., Herchel R.: *Metals* 10, 366 (2020).
4. Drahoš B., Šalitraš I., Císařová I., Herchel R.: *Dalton Trans.* 50, 11147 (2021).

### 3L-03 NEW PERSPECTIVES IN CHEMISTRY: ON-SURFACE SYNTHESIS AND SCANNING PROBE MICROSCOPY

**PAVEL JELÍNEK**

*Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences,  
Cukrovarnicka 10, 162 00 Prague  
jelinekp@fzu.cz*

It is a bit of an exaggeration to say that scanning probe microscopy represents our eyes and hands in the nanoworld. The invention of scanning microscopy in the 1980s not only enabled the atomic resolution of individual atoms on solid surfaces, but was also an important factor in the advent of the era of nanotechnology.

The development of scanning microscopy in recent years has brought another important milestone: the possibility of chemical resolution of individual molecules on solid surfaces<sup>1,2</sup>. This technique, combined with recent development of on-surface chemistry, which are not available by traditional methods of chemical synthesis in solutions, opens up completely new possibilities for the preparation and characterization of molecular nanostructures<sup>3</sup>.

In this lecture, we will introduce the basic principles of the high-resolution scanning probe microscopy. We will show several examples of synthesis of new chemical compounds not available by traditional approaches of wet chemistry. Namely, we will discuss on-surface formation of organometallic chains<sup>4</sup> and polyradicaloid carbon-based macrocycles, characterization of their chemical and magnetic structures.

#### REFERENCES

1. Gross L., et al.: *Science* 325, 1110 (2009).
2. Jelinek P.: *J. Phys. Cond. Matt.* 29, 343002 (2017).
3. Clair S., de Oteyza D.: *Chem. Rev.* 119, 4717 (2019).
4. Santhini V. M., et al.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 60, 439 (2021).

### 3L-04 KOBALTNATÉ KOMPLEXY VE TVARU TRIGONÁLNÍ PRIZMY: CESTA K LEPŠÍ MAGNETICKÉ ANIZOTROPII?

**KAMIL KOTRLE<sup>a</sup>, IVAN NEMEC<sup>a</sup>, ERIK ČIŽMÁR<sup>b</sup>,  
PETER ANTAL<sup>a</sup>, RADOVAN HERCHEL<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 779 00 Olomouc, Česká republika, <sup>b</sup> Ústav fyzikálnych vied, Univerzita Pavla Josefa Šafárika v Košiciach, Park Angelinum 9, 040 01 Košice, Slovensko  
kamil.kotrle@upol.cz

Takzvané jedno-molekulové magnety jsou potenciálně velmi zajímavé systémy založené na koordinačních sloučeninách, které vykazují vlastnosti typické pro superparamagnety, jako například magnetická hysterese nebo pomalá relaxace magnetizace pod blokovací teplotou, avšak mají tyto vlastnosti i na molekulární úrovni a bez přispění magnetických výměnných interakcí. Tyto vlastnosti mají potenciálně zajímavé možnosti využití v magnetických paměťových médiích a kvantových počítačích. Mezi prvky třetí periody jsou pro přípravu jedno-molekulových magnetů nejvýznamnější kobaltnaté komplexy.

V této práci byla studována série šesti zajímavých kobaltnatých komplexů s ligandem typu Schiffovy báze, jejichž koordinační polyedr má tvar trigonální prizmy. V minulosti kobaltnaté komplexy tohoto tvaru prokázaly velmi zajímavé vlastnosti<sup>1</sup>. Připravené látky byly studovány pomocí fyzikálně chemický, magnetochemických a výpočetních metod, s cílem prozkoumat jejich magnetické vlastnosti, porovnat je s dosud známými komplexy a nalézt korelace mezi jejich strukturou a magnetickou anizotropií.

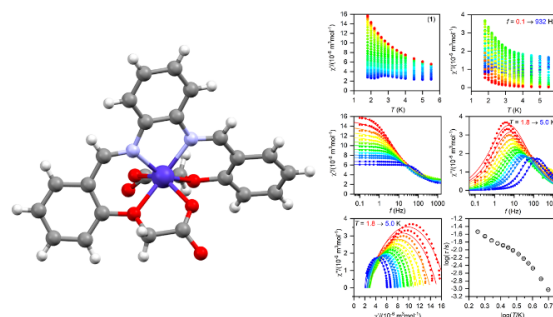


Schéma 1. Struktura prezentovaného Co<sup>II</sup> komplexu a výsledky měření střídavé magnetické susceptibilitity pro týž komplex

*Tato práce vznikla za podpory grantů IGA\_PrF\_2021\_009 a IGA\_PrF\_2022\_006.*

#### LITERATURA

1. Yao B., et al.: *Inorg. Chem.* 57, 14047 (2018).

### 3L-05 STRUKTURA A VLASTNOSTI NIOBÁTO- FOSFÁTOVÝCH SKEL DRASELNÝCH

LADISLAV KOUDELKA<sup>a</sup>, PETR MOŠNER<sup>a</sup>, LIONEL MONTAGNE<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice,

Studentská 573, 53210 Pardubice, Česká republika,

<sup>b</sup> University of Lille, ENSCL, Unité de Catalyse et Chimie du Solide, F-59000 Lille, France

ladislav.koudelka@upce.cz

Fosfátová skla obsahující oxid niobičný se jeví jako perspektivní materiál zejména pro své nelineární optické vlastnosti. Skla ternárního systému  $K_2O-Nb_2O_5-P_2O_5$  byla studována ve třech kompozičních řadách  $(60-x)K_2O-xNb_2O_5-40P_2O_5$  (řada A) s 10–40 mol%  $Nb_2O_5$ ,  $40K_2O-yNb_2O_5-(60-y)P_2O_5$  (řada B) s 10–30 mol%  $Nb_2O_5$  a  $zK_2O-20Nb_2O_5-(80-z)P_2O_5$  (řada C) s 20–50 mol%  $K_2O$ . Byly stanoveny základní fyzikální parametry všech studovaných skel. Téměř všechna skla byla bezbarvá, pouze dvě skla s vyšším obsahem  $Nb_2O_5$  byla zbarvena modře z důvodu přítomnosti malého množství iontů  $Nb^{4+}$ . Teplota skelné transformace,  $T_g$ , u skel řady A a B rostla s růstem obsahu  $Nb_2O_5$  ve sklech, zatímco v řadě C rostla pouze mírně s růstem obsahu  $K_2O$ . Nejvyšší hodnota  $T_g$  757 °C byla naměřena pro sklo z řady A o složení  $20K_2O-40Nb_2O_5-40P_2O_5$ . Chemická odolnost většiny skel byla vysoká, jejich rychlost rozpouštění byla nižší než  $1,5 \cdot 10^{-6} g \cdot cm^{-2} \cdot min^{-1}$ . Index lomu skel výrazně vzrůstal jen ve sklech řad A a B s rostoucím obsahem  $Nb_2O_5$ ; sklo  $20K_2O-40Nb_2O_5-40P_2O_5$  z řady A mělo nejvyšší index lomu 1,809 při vlnové délce 587,6 nm.

Struktura skel byla studována analýzou jejich Ramanových spekter a MAS NMR spekter jader  $^{31}P$ . Na Ramanových spektrech skel řady A  $(60-x)K_2O-xNb_2O_5-40P_2O_5$  už při nízkých obsazích  $Nb_2O_5$  lze pozorovat silný vibrační pás 895  $cm^{-1}$ , který byl přiřazen vibračním koncových vazeb  $Nb-O^-$  v oktaedrech  $NbO_6$ . Tento pás s rostoucím obsahem  $Nb_2O_5$  ve sklech se posouvá až na hodnotu vlnočtu 935  $cm^{-1}$ . Účinnost Ramanova rozptylu na niobátových oktaedrech  $NbO_6$  je vyšší než na fosfátových tetraedrech  $PO_4$ , což má za následek potlačení vibračních pásů fosfátových strukturálních celků na Ramanových spektrech skel s vyšším obsahem  $Nb_2O_5$ . Ve sklech obsahujících 30–40 mol%  $Nb_2O_5$  ukázala Ramanova spektra na přítomnost řetězců  $Nb-O-Nb$ , propojujících oktaedry  $NbO_6$  a dokonce na tvorbu trojrozměrných niobátových klastrů.

Vzorky obsahující méně než 30 mol%  $P_2O_5$  jeví tendenci ke tvorbě sklo-krystalických materiálů obsahujících krystaly niobičnanu draselného. Jejich krystalová struktura nebyla ovšem identifikována. Podle Ramanových spekter obsahují oktaedry  $NbO_6$  obdobné těm, které lze nalézt ve sloučenině  $KNbO_3$ .

### 3L-06 CYKLAM NESOUČÍ BIS(FOSFONÁTOVÉ) PENDANTNÍ RAMENO – NOSIČ IZOTOPŮ MĚDI PRO RADIOMEDICÍNSKÉ APLIKACE

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

<sup>a</sup> Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta,

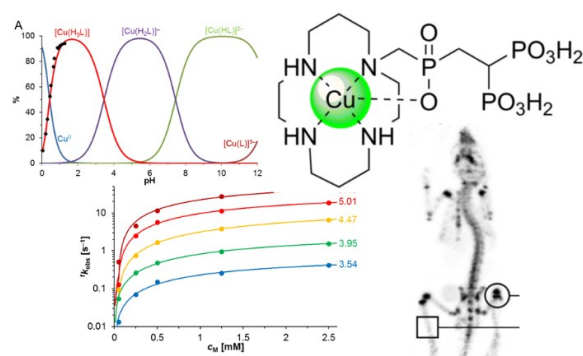
Univerzita Karlova, Hlavova 8, 128 40 Praha 2, <sup>b</sup> Ústav

chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova Univerzita,

Kamenice 5, 625 00 Brno

kubicek@natur.cuni.cz

Izotopy mědi jsou díky vzrůstající dostupnosti perspektivními kandidáty pro radiodiagnostické a radioterapeutické aplikace. Deriváty cyklamu jsou často využívány jako nosiče měďnatých iontů, jelikož jejich komplexy vykazují vysokou termodynamickou stabilitu a kinetickou inertnost. Zde představujeme nový derivát cyklamu nesoucí fosfináto-bis(fosfonátové) pendantní rameno, který je potenciálním nosičem izotopů mědi pro radionuklidové zobrazování a terapii kostních metastáz, které doprovází řadu typů rakovinných onemocnění. Připravený ligand vykazuje vysokou selektivitu pro  $Cu^{II}$  ionty oproti  $Zn^{II}$  a  $Ni^{II}$  iontům. Měďnatý iont je pevně vázán v kavitě makrocyclu, zatímco bis(fosfonátová) skupina není koordinována a může tak interagovat s dalšími ionty kovů v roztoku nebo s povrchem kostí. Kvantitativní komplexace měďnatých iontů při pH 5 je dosaženo během 1 sekundy. Rychlost komplexace se výrazně mění s vzájemným poměrem ligandu a iontu kovu v důsledku tvorby různých intermediátů lišících se poměrem ligand-kov a protonizací ligandu. Měďnatý komplex také vykazuje vysokou odolnost vůči kyselé katalyzované hydrolýze ( $t_{1/2}$  2,7 h; 1 M  $HClO_4$ , 25 °C) a je efektivně adsorbován na povrchu hydroxoapatitu. Radiochemické experimenty ukázaly, že komplexace izotopu  $^{64}Cu$  probíhá rychle a kvantitativně. PET/CT provedené na myši pak potvrdilo vysokou afinitu připraveného komplexu ke kostní tkáni v místech se zvýšenou metabolickou aktivitou.



Tato práce vznikla za podpory GAČR (21-23261S), MŠMT (LTC20044) and Masarykovy Univerzity (MUNI/A/1539/2021).

### 3L-07 HETEROBIMETALICKÉ KOMPLEXY Cu(II)/Mn(II) S TRANS-1,8- DERIVÁTI CYCLAM-U NA ŠTÚDIUM MAGNETOKALORICKÉHO EFEKTU

**JURAJ KUCHAR<sup>a\*</sup>, ERIKA SAMOĽOVÁ<sup>b</sup>, MIRIAM  
ILAVSKÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Katedra anorganickej chémie, PF UPJŠ v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice, SR, <sup>b</sup> Fyzikální ústav AV ČR, Cukrovarnická 10, 162 53 Praha, ČR  
juraj.kuchar@upjs.sk

Magnetické javy spojené s tepelnými efektami sú už istú dobu dôležité nielen z pohľadu riešenia fundamentálnych problémov v magnetizme a fyzike tuhej fázy, ale aj z dôvodu technologických aplikácií<sup>1</sup>. Jedným z takýchto javov je magnetokalorický efekt, ktorý možno využiť pri tepelnom štúdiu magnetických vlastností zlúčenín alebo aj prakticky, napríklad v magnetických chladničkách. Existuje niekoľko ferrimagnetických komplexov, v ktorých bol pozorovaný magnetokalorický efekt<sup>2</sup>. Kahn a kol. uvádzali, že systémy založené na jednorozmerných bimetalických reťazcoch so striedajúcimi sa atómami Cu(II) a Mn(II) zviazanými prostredníctvom antiferomagnetkej (AFM) výmennej interakcie, by mali vykazovať ferrimagnetické správanie<sup>3</sup>. Toto tvrdenie bolo potvrdené vo viacerých koordinačných zlúčeninách<sup>4</sup>.

Náš výskum je zameraný na prípravu a charakterizáciu nízkorozmerných bimetalických zlúčenín Cu(II) s makrocyclickými ligandami na báze 1,4,8,11-tetraaza-cyklotetradekánu (cyclam) a s aniónmi obsahujúcimi Mn(II). Je známe, že Cu(II) vytvára s ligandami tohto typu komplexy s veľkou kinetickou a termodynamickou stabilitou. Komplexy sú tak vhodné ako ligandy pri príprave bimetalických komplexov. Pripravené zlúčeniny možno považovať za reťazcové systémy s alternujúcim spinom. Aj keď základný stav je typu FM, tak excitácie sú typu AFM, čo vedie k vytvoreniu magnetizačných plátó a veľkej zmene magnetickej entropie v poľom indukovaných kritických bodoch<sup>5</sup>. Z tohto dôvodu môžu byť takéto zlúčeniny zaujímavé pre štúdium magnetických javov spojených s magnetokalorickým efektom.

*Táto práca bola finančne podporená grantovou agentúrou APVV (proj. č. APVV-18-0016).*

#### LITERATÚRA

1. Tishin A. M., Spichkin Y. I.: *The Magnetocaloric Effect and its Applications*. Boca Raton: CRC Press 2016.
2. Konieczny P., Pelka R., Czernia D., Podgajny R.: *Inorg. Chem.* **56**, 11971 (2017).
3. Kahn O., Pei Y., Verdaguer M., Renard J. P., Sletten J.: *J. Am. Chem. Soc.* **110**, 782 (1988).
4. Cui L., Ge J.-Y., Leong Ch. F., D'Alessandro D. M., Zuo J.-L.: *Dalt. Trans.* **46**, 3980 (2017).
5. Strečka J., Verkholyak T.: *J. Low Temp. Phys.* **187**, 712 (2017).

### 3L-08 METALLIC GLASSES: STRUCTURAL AND FUNCTIONAL MATERIALS – PRINCIPLES OF MANIPULATING THE ENERGY STATES

**JIRÍ ORAVA**

*Faculty of Environment, J. E. Purkyne University in Usti nad Labem, Pasteurova 3632/15, Usti nad Labem 400 96  
jiri.orava@ujep.cz*

Metallic glasses are essentially frozen metallic liquids formed upon rapid quenching. Unlike the liquids, metallic glasses have resistance to shear deformation and are of fundamental and technological interest because of their large reversible elastic energy storage, high hardness giving good wear resistance, and high toughness, which can be combined with other functionalities such as low-loss soft-magnetic properties and biocompatibility for the applications as (non)-degradable implants.

A range of isoconfigurational glassy states, potential energy, exceeding 17 orders of magnitude can be achieved upon cooling a liquid (Fig. 1)<sup>1</sup>, but a range of about 6–7 orders of magnitude is accessible by conventional melt-quenching techniques. Highly relaxed glassy states, close to that of crystal, are possibly achieved for some thin-film ultra-stable glasses, while highly-unrelaxed states can readily be studied by computer simulations.

Two directions of energy changes without involving the liquid state can be distinguished rejuvenation, which refers to states of higher energy, and the inverse process of relaxation giving states of lower energy. Typically, relaxation gives harder glasses with high resistance to creep and crystallization and having fewer structural defects ensuring long-term structural stability. Rejuvenation gives heterogeneous glassy structure and chemical inhomogeneities on the nanometre length-scale and glasses with greater plasticity and faster crystallization (even without involving the supercooled-liquid state).

In this talk, we will give an overview of how the range of different glassy states can practically be achieved, for example, via i) manipulating the states, switching between the high- and low-energy states, without involving the cycle of glass-to-supercooled liquid<sup>2</sup>; ii) liquid-to-liquid transitions occurring above the liquidus temperature and in the supercooled-liquid state<sup>3</sup>; iii) the existence of a fragile-to-strong crossover upon cooling the liquid<sup>4</sup>; and iv) mechanism (s) of the formation of specific MG—crystal composites<sup>5</sup> via fast ( $\sim 10^2$ – $10^3$  K s<sup>-1</sup>) flash-annealing or laser-induced heating for enhancing plasticity and introducing new functionality inspired by nature.

Different improvements and tuning of the glassy properties will be demonstrated for structural, electronic, and other functional applications.

*Acknowledgement. I am very grateful to my collaborators, namely, X. Han & I. Kaban (IFW Dresden, Germany), A. L. Greer (University of Cambridge, UK), Q. Cheng & Y. H. Sun (Institute of Physics, Beijing) for their support.*

*Part of this work was supported by the research infrastructure NanoEnviCz, which is financed by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (LM2018124).*

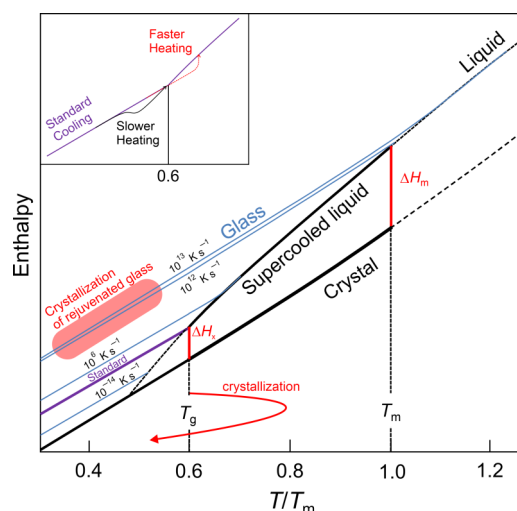


Fig. 1. Schematic showing the representation of the temperature dependence of relative enthalpy  $H$  on cooling a metallic-glass-forming liquid  $Zr_{52.5}Cu_{17.9}Ni_{14.6}Al_{10.0}Ti_{5.0}$ , also known as Vitreloy 105. The inset shows the typical relaxation behaviour near the glass-transition temperature,  $T_g$ , on heating at different rates. Reproduced from Ref.<sup>1</sup>

## REFERENCES

- Orava J., Greer A. L.: *J. Non-Cryst. Solids* 451, 94 (2016).
- Ketov S. V., Trifonov A. S., Ivanov Y. P., Churyumov A. Y., Lubenchenko A. V., Batrakov A. A., Jiang J., Louzguine-Luzgin D. V., Eckert J., Orava J., Greer A. L.: *NPG Asia Materials* 10, 137 (2018).
- Cheng Q., Sun Y. H., Orava J., Bai H., Wang W. H.: *Acta Mater.* 230, 117834 (2022).
- Lucas P.: *J. Non-Cryst. Solids* 557, 119367 (2021).
- Orava J., Balachandran S., Han X., Shuleshova O., Nurouzi E., Soldatov I., Oswald S., Gutowski O., Ivashko O., Dippel A.-C., Zimmermann M., Ivanov Y. P., Greer A. L., Raabe D., Herbig M., Kaban I.: *Nat. Commun.* 12, 2839 (2021).

### 3L-09 NOVÉ POTENCIÁLNÍ KONTRASTNÍ LÁTKY ZALOŽENÉ NA KOMPLEXECH Mn(II) S MAKROCYKlickÝMI LIGANDY

MARIE PRAŽÁKOVÁ<sup>a\*</sup>, BOHUSLAV DRAHOŠ<sup>a</sup>,  
DAOUDA NDYAIÉ<sup>b</sup>, ÉVA TÓTH<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta  
Univerzity Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 77146  
Olomouc, Česká republika, <sup>b</sup> Centre de Biophysique  
Moléculaire, CNRS UPR 4301, Université d'Orléans, rue  
Charles Sadron, 45071 Orléans, France  
marie.prazakova01@upol.cz

Tomografie magnetické rezonance (MRI) je jednou z nejhodnější používaných diagnostických metod. Pro lepší rozlišení MRI snímku jsou využívány tzv. kontrastní látky – v praxi jsou nejhodnější užívané koordinační sloučeniny Gd(III)<sup>1,2</sup>. Vhodná alternativou k těmto sloučeninám se jeví koordinační sloučeniny, kde je centrálním atomem Mn(II), a to především díky jeho elektronové konfiguraci  $3d^5$ , dlouhému elektronickému relaxačnímu času a rychlé výměně koordinovaných molekul vody<sup>3,4</sup>. Návrh vhodného ligandu však může být problematický především z hlediska termodynamické stability a kinetické inertnosti.

Dříve byly studovány 15-členné makrocyclické ligandy obsahující pyridin, ale jejich Mn(II) komplexy však nedosahovaly dostatečné termodynamické stability<sup>4</sup>. Z tohoto důvodu byla navržena jednoduchá modifikace mateřského makrocyclu  $15pyN_3O_2$  s vybranými funkčními skupinami (Schéma 1). Detailní srovnání výsledných vlastností Mn(II) komplexů s připravenými ligandy bude předmětem prezentace.

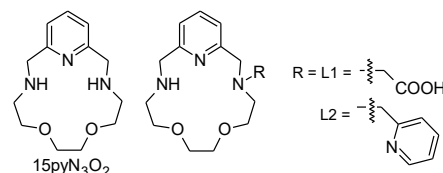


Schéma 1. Strukturní vzorce ligandů  $15pyN_3O_2$ , L1 a L2

Tato práce vznikla za podpory grantu IGA\_PrF\_2022\_006, stipendia Nadačního fondu UP 2020 a projektu Podpora mobility na UP II

## LITERATURA

- Gupta A., Caravan P., Platas-Iglesias C., Gale E. M., *Inorg. Chem.* 59, 6648 (2020).
- Merbach A., Toth E., Helm L., v knize: *The chemistry of Contrast Agents in Medical Magnetic Resonance Imaging*, kap. 1, s. 1–23, Wiley, Chichester (2013).
- Drahoš B., Lukeš I., Tóth É., *Eur. J. Chem.* 2012, 1975 (2012).
- Drahoš B., Kotek J., Hermann P., Lukeš I., Tóth E., *Inorg. Chem.* 49, 3224 (2010).

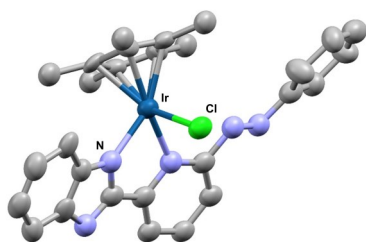
### 3L-10 REAKTIVITA POLOSENDVIČOVÝCH KOMPLEXŮ PLATINOVÝCH KOVŮ VŮČI VYBRANÝM BIOMOLEKULÁM

LUKÁŠ MASARYK, PAVEL ŠTARHA

*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta,  
Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 1192/12,  
779 00 Olomouc, Česká republika  
pavel.starha@upol.cz*

Biologicky aktivní koordinační sloučeniny platinových kovů představují nepřeberně širokou skupinu sloučenin<sup>1</sup>, které mají své zastoupení v klinické praxi (např. protinádorová léčiva na bázi platiny)<sup>2</sup> i mezi perspektivními léčivy jiných platinových kovů, které vstoupily do fáze klinických experimentů<sup>3,4</sup>. Obecně řečeno, změnou centrálního atomu a strukturního typu komplexů je velmi často dosaženo nejen navýšení biologické aktivity, ale především takovéto látky působí jiným mechanismem biologického účinku, než jaký je znám u konvenčních léčiv.

V příspěvku budou diskutovány námi studované protinádorově aktivní komplexy vybraných platinových kovů (např. Ir nebo Ru)<sup>5</sup>, s akcentem na jejich reaktivitu vůči vybraným intracelulárním biomolekulám (např. glutation nebo akorbát), jež mimikují prostředí cílových nádorových buněk.



Obr. 1. Příklad protinádorově aktivního iriditého komplexu

#### LITERATURA

1. Anthony E. J., Bolitho E. M., Bridgewater H. E., Carter O. W. L., Donnelly J. M., Imberti C., Lant E. C., Lermite F., Needham R. J., Palau M., Sadler P. J., Shi H., Wang F.-X., Zhang W.-Y., Zhang Z.: *Chem. Sci.* **11**, 12888 (2020).
2. Kelland L.: *Nat. Rev. Cancer* **7**, 573 (2007).
3. Berger M. R., Garzon F. T., Keppler B. K., Schmahl D.: *Anticancer Res.* **9**, 761 (1989).
4. Monro S., Colón K. L., Yin H., Roque III J., Konda P., Gujar S., Thummel R. P., Lilje L., Cameron C. G., McFarland S. A.: *Chem. Rev.* **119**, 797 (2019).
5. Masaryk L., Orvoš J., Sloczyńska K., Herchel R., Moncol J., Milde D., Halaš P., Křikavová R., Koczurkiewicz-Adamczyk P., Pękala E., Fischer R., Šalitroš I., Nemeč I., Štarha P.: *Inorg. Chem. Front. Advance Article*, DOI: 10.1039/D2QI00535B (2022).

### 3L-11 STRUCTURE AND MAGNETISM OF Co(II) HALIDE/ PSEUDOHALIDE COMPLEXES WITH 17- MEMBERED PYRIDINE-BASED MACROCYCLIC LIGAND

EVA ZAHRADNÍKOVÁ<sup>a</sup>, CÉLINE PICHON<sup>b</sup>,  
JEAN-PASCAL SUTTER<sup>b</sup>, BOHUSLAV DRAHOŠ<sup>a\*</sup>

<sup>a</sup> *Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science,  
Palacky University, 17. listopadu 12, CZ-771 46 Olomouc,  
Czech Republic,* <sup>b</sup> *CNRS Laboratoire de Chimie de  
Coordination (LCC) – UPR 8241, 205 route de Narbonne –  
BP44099, 31077 Toulouse Cedex 4, France  
bohuslav.drahos@upol.cz*

Single-molecule magnets (SMMs) represent a very interesting group of compounds which show slow relaxation of the magnetization under blocking temperature based on the purely molecular origin. Thus, SMMs represent nanomagnets which can be potentially used in ultradense data storage devices, optical imaging devices, or in quantum computing<sup>1</sup>. Nowadays, SMMs are usually based on mononuclear transition metal or lanthanide complexes. Magnetic anisotropy is the key parameter, which has to be increased by appropriate ligand design and geometry of the coordination sphere, to obtain more efficient SMMs.

It turned out previously that the pentagonal bipyramidal seven-coordinate transition metal complexes reveal high magnetic anisotropy<sup>2</sup>. Therefore, Co(II) complexes with pyridine-based 17-membered macrocyclic ligand L with the general formula [CoL(X)<sub>1-2</sub>](X)<sub>0-1</sub>, where X = Cl<sup>-</sup>, Br<sup>-</sup>, I<sup>-</sup>, NCO<sup>-</sup>, NCS<sup>-</sup>, NCSe<sup>-</sup> or ClO<sub>4</sub><sup>-</sup>, were prepared and thoroughly characterized. Effect of different coligand(s) on the molecular structures, which confirmed coordination numbers ranging from 5 to 6 or 6+1, as well as on the magnetic anisotropy and SMM properties will be discussed within the presentation. Comparison with an analogous system with a smaller structurally similar 15-membered macrocyclic ligand will be given as well.

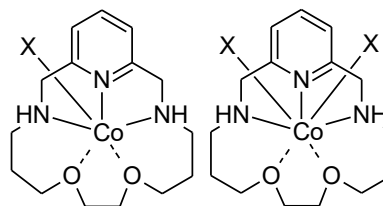


Fig. 1. General structural formulas of [CoL(X)<sub>1-2</sub>]<sup>(0-1)+</sup>

*The financial support was provided from the Palacky University's grant IGA\_PrF\_2022\_006.*

#### REFERENCES

1. Gatteschi D., Sessoli R., Villain J.: *Molecular Nanomagnets*, Oxford University Press, New York (2006).
2. Sutter J.-P., et al.: *Chem. Soc. Rev.* **51**, 3280 (2022).

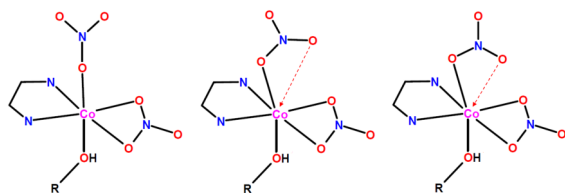
### 3P-01 MAGNETIC ANISOTROPY IN Co(II) SINGLE-ION MAGNETS WITH COORDINATION NUMBER ON THE BORDER BETWEEN SIX AND SEVEN

**ONDŘEJ FRANTIŠEK FELLNER\***, RADOVAN  
HERCHEL, IVAN NEMEC

*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science,  
Palacky University Olomouc, 17. listopadu 12, 771 46  
Olomouc, Czech Republic  
Ondrej.Fellner01@upol.cz*

One of the possibilities to miniaturise magnetic materials lies in coordination compounds called Single Ion Magnets (SIMs) with one paramagnetic centre. The main benefit of these compounds is the exhibition of slow relaxation of magnetisation of purely molecular origin. The research of SIMs is widely focused on finding the magneto-structural correlation in complexes based on 3d and 4f transition metals<sup>1</sup>. Particularly, the great attention is devoted to Co(II) SIMs, whose attractivity lies in magnetic anisotropy easily tuneable by the strength and symmetry of the crystal field<sup>2</sup>.

In this work, we prepared and characterized a new family of Co(II) based SIMs with a general formula [Co(bq)(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(solv)] (bq = 2,2'-biquinoline, solv = e.g. methanol, ethanol, prop-2-en-1-ol, prop-2-yn-1-ol, benzenemethanol, water) with the coordination number on the border between six and seven. We mainly focused our attention on changing the magnetic properties, using different O-donor solvents as a ligand that influences the orientation of the nitrate ligand in the axial position. More specifically, the influence of the distance Co...O on magnetic anisotropy was investigated.



Scheme 1. [Co(bq)(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(solv)] with different orientations of nitrate ligand. 2,2'-biquinoline in equatorial position is simplified for clarity and R are different substituents of O-donor solvents

*Funding for this project was provided by the research grant IGA\_PrF\_2021\_009.*

#### REFERENCES

1. Frost J. M., Harriman K. L. M., Murugesu M.: *Chem. Sci.* 7, 2470 (2016).
2. Nemeč, I., Herchel R., Trávníček Z., *Dalton Trans* 47, 1614 (2018).

### 3P-02 METAL COMPLEXES OF HYDRAZONES AND RELATED LIGANDS AS BIOACTIVE COMPOUNDS

**LADISLAV HABALA**, BIANKA OBOŇOVÁ,  
JINDRA VALENTOVÁ

*Department of Chemical Theory of Drugs, Faculty of  
Pharmacy, Comenius University in Bratislava, Odbojárov 10,  
832 32 Bratislava, Slovakia  
habala@fpharm.uniba.sk*

Hydrazones and related compounds, such as hydrazide-hydrazones and azines, represent a group of compounds with manifold biological activities. Their effects include anticancer, antimicrobial, antioxidant, antiinflammatory, anticonvulsant, and antiviral properties, among others<sup>1</sup>. The coordination of the hydrazone ligand to a central metal atom is known in many cases to enhance the intrinsic bioactivity of the ligand. Several such complexes have been investigated as candidate metallodrugs<sup>2</sup>. Of special interest are the derivatives and metal complexes of isoniazid (pyridine-4-carbohydrazide), a front-line antituberculous drug<sup>3,4</sup>.

In the course of our research at the Department of Chemical Theory of Drugs, we prepared several hydrazone ligands and their metal complexes. Besides copper, the focus of our interest is also on complexes with vanadium as a less investigated yet promising metal with various types of bioactivities. We employ various coligands in an attempt to prepare mixed ligand complexes with modified physicochemical and biological activities. All products were characterized analytically and with selected substances antioxidant activity as well as inhibition of the enzyme urease were measured. The compounds are of interest also because of their potential cytotoxic effect and antimicrobial activity, and are currently under investigation.

*This work was supported by the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic, grant VEGA 1/0145/20.*

#### REFERENCES

1. Narang R., Narasimhan B., Sharma S.: *Curr. Med. Chem.* 19, 569 (2012).
2. Shakhdoša M. M. E., Shtaiwi M. H., Morsy N., Abdell-rassel T. M. A.: *Main Group Chem.* 13, 187 (2014).
3. Vinsova J., Imramovsky A., Jampilek J., Monreal J. F., Dolezal M.: *Antiinfect. Agents Med. Chem.* 7, 12 (2008).
4. Habala L., Varényi S., Bilková A., Herich P., Valentová J., Kožíšek J., Devínsky F.: *Molecules* 21, 1742 (2016).

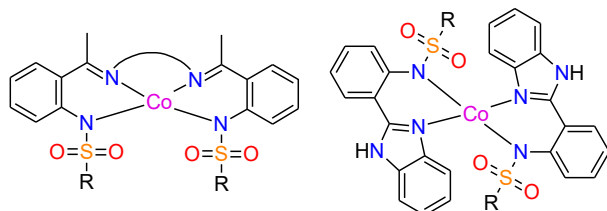
### 3P-03 LARGE MAGNETIC ANISOTROPY IN Co(II) SIMs DERIVED FROM SULFONYLATED LIGANDS

PETR HALAŠ, ONDŘEJ FRANTIŠEK FELLNER,  
IVAN NEMEC, RADOVAN HERCHEL

Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science,  
Palacky University Olomouc, 17. listopadu 12, 771 46  
Olomouc, Czech Republic  
petr.halas01@upol.cz

Single-ion magnets (SIMs) are a group of compounds where each molecule behaves as a single nanomagnet, *i.e.* it exhibits slow magnetic relaxation. This phenomenon exists when a metal ion has large enough magnetic anisotropy of axial type which creates spin reversal barrier that causes slow magnetic relaxation<sup>1</sup>. Four-coordinate Co(II) complexes with shapes close to  $D_{2h}$  symmetry represent one of the most perspective systems as several compounds have already shown to exhibit such behaviour<sup>2</sup>. To achieve such geometries, we sulfonylated amino groups of ligands which created steric hindrance that ensured four-coordination.

Complexes synthesized and characterized in this work can be divided into two groups – **I**) complexes containing salen-type Schiff base ligands with general formula  $[CoL^I]$  and **II**) complexes with bidentate N-sulfonylated ligands with general formula  $[CoL^II]$  (Scheme 1). In order to find out magnetostructural correlation, various types of sulfonyl groups, such as tosyl and mesyl, were incorporated. Following this, different sizes of chelate rings were achieved by introducing diamines with varying lengths (Group **I**) or using different heterocycles (Group **II**). Resulting CASSCF/NEVPT2 calculations of prepared complexes show values of parameter of axial anisotropy  $D$  ranging from  $-56$  to  $-118$   $cm^{-1}$  with very low rhombicity. This indicates that prepared complexes are good candidates for zero-field SIM behaviour.



Scheme 1. Group **I** (left) and **II** (right) complexes

This research was supported by Palacky University's student grant DSGC-2021-0032 financed from the the project Reg. No. CZ.02.2.69/0.0/0.0/19\_073/0016713.

#### REFERENCES

1. Frost J. M., Harriman K. L., Murugesu M.: Chem. Sci. 7(4), 2470 (2016).
2. Bamberger H. *et al.*: Inorg. Chem. 60(5), 2953 (2021).

### 3P-04 BIOLOGICALLY ACTIVE ZN(II) COMPLEXES WITH 5-CHLORO-7-NITRO-8-HYDROXYQUINOLINE

MICHAELA HARMOŠOVÁ<sup>a</sup>, MARTIN KELLO<sup>b</sup>,  
ERIKA SAMOEVOVÁ<sup>c</sup>, IVAN POTOČNÁK<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Institute of Chemistry, P. J. Šafárik University in Košice,  
Moyzesova 11, SK-04154 Košice, Slovakia, <sup>b</sup> Department of  
Pharmacology, P. J. Šafárik University, Trieda SNP 1, SK-  
04011 Kosice, Slovakia, <sup>c</sup> Institute of Physics of the Czech  
Academy of Science, Na Slovance 2, CZ-18221 Prague, Czech  
Republic  
michaela.krescankova@student.upjs.sk

We present four new zinc(II) complexes containing molecules of 5-chloro-7-nitro-8-hydroxyquinoline (HCINQ),  $NH_2(CH_3)_2[Zn(CINQ)_3] \cdot DMF$  (**I**),  $K[Zn(CINQ)_3] \cdot 2DMF$  (**II**),  $[Zn(CINQ)_2(H_2O)_2]$  (**III**), and  $\{Na[Zn(CINQ)(SO_4)(H_2O)]\}_n$  (**IV**). The complexes were characterized by infrared and NMR spectroscopy, elemental analysis and single crystal X-ray analysis.

Ionic complexes **I** and **II** have similar structures, in which Zn(II) atom is coordinated by three chelate molecules of CINQ via oxygen and nitrogen donor atoms. The negative charge of the complex anions is balanced by uncoordinated  $NH_2(CH_3)_2^+$  (**I**) and  $K^+$  cations (**II**).

In molecular complex **III**, Zn(II) atom is coordinated by two chelate CINQ molecules and axial positions of a distorted octahedron occupy two aqua ligands.

Complex **IV** has a polymeric structure in which Zn(II) atom is penta-coordinated by one chelate molecule of CINQ, one molecule of water and a pair of crystallographically equivalent sulfate anions, which interconnect adjacent zinc atoms to form a *zig-zag* chain. Negative charge of the chain is balanced by sodium cations.

Complexes **I**, **III** and **IV**, were tested for their antiproliferative activity against HeLa, A549, MCF-7, MDA-MB-231, HCT-116 and Caco-2 cancer cell lines and against Cos-7 non-cancerous cell line. The results showed that the complexes exhibited poor antiproliferative activity.

This work was supported by VEGA 1/0148/19, VEGA 1/0653/19, APVV-18-0016, VVGS-PF-2021-1772 and VVGS-PF-2022-2134.



**3P-05****THE SYNTHESIS METHOD INFLUENCE ON THE CeF<sub>3</sub> NANOCRYSTAL'S SHAPE AND SIZE****MAKSYM CHYLII<sup>\*</sup>, LIUDMILA LOGHINA, ANASTASIA KADERAVKOVA, MIROSLAV VLCEK**

*Center of Materials and Nanotechnologies, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, nam. Cs. legii 565, 530 02 Pardubice, Czech Republic  
Maksym.Chylii@upce.cz*

In recent decades, the scientific community has paid great attention to the study of nanoscale materials due to their unique properties. Particular attention is given to fluorescent materials based on rare earth elements (REE). Undoped and doped REE nanocrystals (NCs) are widely used in medicine as biomarkers<sup>1</sup>, in high-energy physics as converters of high-energy radiation to the visible region, as components of polymer-inorganic composites<sup>2</sup> and as individual scintillators<sup>3</sup>.

The properties of NCs strongly depend on morphology, which depends on the synthesis method. Here we report on the study of a new approach to the synthesis of CeF<sub>3</sub> NCs, based on a selection of different fluorine sources. As a source of fluorine, we used three fluorides – NH<sub>4</sub>HF<sub>2</sub>, NaF, and KF. The interaction proceeded on the surface of the solid and liquid phases, with sequential nucleation and growth of NCs. The growth of NCs in each of the syntheses was monitored by the measurements of absorbance (ABS) and photoluminescence (PL). It should be noted that in each synthesis, the growth of NCs proceeded according to an individual scheme due to the different interactions of cerium oleate with each of the selected fluorides. In the case of using NH<sub>4</sub>HF<sub>2</sub>, NaF, and KF as fluorine sources, sphere-shaped NCs with an average size of ≈4 nm (NH<sub>4</sub>HF<sub>2</sub>) and plate-like shaped NCs with an average diameter of ≈10 nm (Na<sup>+</sup> salt), and ≈20 nm (K<sup>+</sup> salt) were produced. The structure and morphology of the obtained NCs were investigated by XRD and STEM analysis. The optical properties were studied by the ABS and PL measurements.

The observed effect of fluorine sources on the size and shape of CeF<sub>3</sub> NCs, allows us to predict the results of synthesis for a big class of REE NCs.

*This work was supported by the project „High-sensitive and low-density materials based on polymeric nanocomposites” – NANOMAT (No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/17\_048/0007376) and grant LM2018103 from the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic.*

## REFERENCES

1. Kong D., Wang Z., Lin C., Quan Z., Li Y., Li C., Lin J.: *Nanotechnology* 18, 075601 (2007).
2. Karimi M., Raeisi M., Bagherzadeh M., Payami F.: *SN Appl. Sci.* 1, 635 (2019).
3. Milbrath B., Peurrung A., Bliss M., Weber W.: *J. Mater. Res.* 23, 2561 (2008).

**3P-06****ENZYME-MIMETIC PROPERTIES OF CERIUM- AND IRON-OXIDES AND THEIR COMPOSITES****PAVEL JANOŠ<sup>a</sup>, JAKUB EDERER<sup>a</sup>, ONDŘEJ ZIVOTSKÝ<sup>b</sup>, JIRÍ LUŇÁČEK<sup>b</sup>, IVO ŠAFAŘÍK<sup>c,d</sup>**

*<sup>a</sup> Faculty of Environment, University of J. E. Purkyně, Pasteurova 3632/15, 400 96 Ústí nad Labem, <sup>b</sup> Department of Physics, VŠB – Technical University of Ostrava, 17. listopadu 2172/15, 708 00 Ostrava-Poruba, <sup>c</sup> Department of Nanobiotechnology, Biology Centre, ISBB, CAS, Na Sádkách 7, 370 05 České Budějovice; <sup>d</sup> RCPTM/CATRIN, Palacký University, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc  
pavel.janos@ujep.cz*

At the turn of the century, prof. Klabunde from the University of Texas introduced (and successfully commercialized) nanocrystalline metal oxides as so-called reactive sorbents (RSs) for the removal of toxic chemicals from the environment<sup>1</sup>. The family of RSs was extended substantially by Štengl et al.<sup>2</sup>, who prepared several new RSs by the simple and easily scalable synthetic routes.

Similar materials are increasingly used also in bio-sciences and biotechnology; the term *nanozymes* is now commonly used for the inorganic substances (mostly metal oxides) capable to accelerate biologically and environmentally relevant reactions in a similar way as the „conventional“ (protein-based) enzymes.

In our earlier works, we demonstrated the ability of nanocrystalline cerium oxide to decompose toxic organic substances including organophosphate pesticides and chemical warfare agents<sup>3,4</sup>. We suppose that both the surface chemistry (presence of the OH-groups, the Ce<sup>3+</sup>/Ce<sup>4+</sup> ratio) and crystalline structure of cerium oxide play a decisive role in the cleavage of not only the non-stable phosphodiester bonds in toxic organophosphates or easily cleavable phosphomonoesters but also the phosphodiester bonds in the highly resistant molecules, such as in cATP<sup>6-8</sup>.

To extend an applicability of cerium oxide we developed the magnetically separable composite consisting of the ferromagnetic core covered with CeO<sub>2</sub><sup>9</sup>.

*This work was supported by GA ČR grant 19-07460S and MŠMT LM 2018124 (NanoEnviCz research infrastructure).*

## REFERENCES

1. Khaleel A., Li W. F., Klabunde K. J.: *Nanostruct. Mater.* 12, 464 (1999).
2. Štengl V., Henych J., Janoš P., Skoumal M.: *Rev. Environ. Contam. Toxicol.* 236, 239 (2016).
3. Janoš P., et al.: *J. Rare Earth* 32, 360 (2014).
4. Janoš P., Ederer J., Došek M.: *Nov. Biotechnol. Chim.* 13, 2, (2014).
6. Janoš P., et al.: *Environ. Sci.: Nano* 3, 847 (2016).
7. Janoš P., et al.: *Environ. Sci.: Nano* 4, 1283 (2017).
8. Janoš P., et al.: *Environ. Sci.: Nano* 6, 3684 (2019).
9. Janoš P., et al.: *Chem. Eng. J.* 262, 747 (2015).

**3P-07**  
**ANTIPROLIFERATIVE ACTIVE Cu(II) COMPLEXES**  
**WITH NITRODERIVATIVES**  
**OF 8-HYDROXYQUINOLINE**

**MARTINA KEPEŇOVÁ<sup>a</sup>, MARTIN KELLO<sup>b</sup>,**  
**MIROSLAVA LITEČKÁ<sup>c</sup>, IVAN POTOČŇÁK<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Institute of Chemistry, P. J. Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, SK-04154 Košice, Slovakia, <sup>b</sup> Department of Pharmacology, P. J. Šafárik University, Trieda SNP 1, SK-04011 Košice, Slovakia, <sup>c</sup> Centre of Instrumental Techniques, Institute of Inorganic Chemistry of the CAS, Husinec-Rež č.p. 1001, CZ-25068 Rež, Czech Republic  
 martina.kepenova@upjs.student.sk

Broad spectrum of biological activity, including antitumor activity, of 8-hydroxyquinoline and its derivatives as heterocyclic pharmacophore was described<sup>1,2</sup>. Coordination of these derivatives on central atoms can positively influence the activity of the prepared complexes<sup>3</sup>.

Therefore, we have prepared four new copper(II) complexes with 5-chloro-7-nitro-8-hydroxyquinoline (HCINQ), 5,7-dinitro-8-hydroxyquinoline (HdNQ), 5-nitro-7-bromo-8-hydroxyquinoline (HNBrQ) and 5-nitro-7-iodo-8-hydroxyquinoline (HNIQ) ligands. X-ray structural analysis revealed square planar coordination in [Cu(CINQ)<sub>2</sub>] (**1**), and tetragonal bipyramidal coordination of a copper atom in [Cu(dNQ)<sub>2</sub>(DMF)<sub>2</sub>] (**2**) complex. Presence of hydrogen bonds, which stabilize the structure, was observed in both complexes. Composition of the remaining two complexes, [Cu(NBrQ)<sub>2</sub>(DMF)<sub>2</sub>] (**3**) and [Cu(NIQ)<sub>2</sub>(DMF)<sub>2</sub>] (**4**), was proposed based on elemental analysis, known structure of **2** and comparison of their IR spectra with the IR spectrum of **2**. Absorption spectra of **1** – **4** in DMSO, DMSO:H<sub>2</sub>O (1:1) and spectra taken in Nujol suspension were used to determine their stability in solutions.

Antiproliferative activity and selectivity of all complexes and ligands was tested on one noncancerous and seven cancer cell lines. Complex **3** showed interesting activity with the highest selectivity.

*This work was supported by VEGA 1/0148/19, VEGA 1/0653/19, APVV-18-0016 and VVGS-PF-2022-2134.*

REFERENCES

1. Song Y., Xu H., Chen W., Zhan P., Liu X: *Med. Chem. Com.* 6, 61 (2015).
2. Saadeh H. A., Sweidan K. A., Mubarak M. S.: *Molecules*. 25, 1 (2020).
3. Tardito S., Barilli A., Bassanetti I., Tegoni M., Bussolati O., Franchi-Gazzola R., Mucchino C., Marchio L.: *J. Med. Chem.* 55, 1044 (2002).

**3P-08**  
**KOORDINAČNÉ ZLÚČENINY STRIEBRA**  
**S POTENCIÁLNE TERAPEUTICKÝMI**  
**BIOAKTÍVNÝMI LIGANDAMI**

**GABRIELA KUZDEROVÁ<sup>a</sup>, ZUZANA VARGOVÁ<sup>a</sup>,**  
**MICHAELA RENDOŠOVÁ<sup>a</sup>, RÓBERT GYEPES<sup>b</sup>,**  
**PETRA OLEJNÍKOVÁ<sup>c</sup>, DANICA SABOLOVÁ<sup>d</sup>,**  
**MARTIN KELLO<sup>e</sup>**

<sup>a</sup> Katedra anorganickej chémie, Univerzita P.J. Šafárika, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovenská republika, <sup>b</sup> Katedra anorganickej chémie, Univerzita Karlova, Hlavova 2030, 128 00 Praha, Česká republika., <sup>c</sup> Ústav biochémie a mikrobiológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika, <sup>d</sup> Katedra biochémie, Univerzita P.J. Šafárika, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovenská republika, <sup>e</sup> Ústav farmakológie, Univerzita P.J. Šafárika, Trieda SNP 1, 040 01 Košice, Slovenská republika  
 gabriela.kuzderova@student.upjs.sk

Pandemické ochorenie COVID-19 zmenilo spôsob existencie ľudí vo viacerých smeroch. Kým sa zdravotníctvo zameriavalo na riešenie tejto situácie, veľa liečebných postupov bolo posunutých do úzadia. V dôsledku toho v nemocniciach pribúdajú pacienti s rôznymi pokročilými infekčnými a rakovinovými ochoreniami.

V súčasnosti existuje mnoho spôsobov ako pomôcť imunitnému systému pri akútnych stavoch spôsobených bakteriálnou infekciou. Účinnou alternatívou je aj príprava koordinačných zlúčenín na báze strieborných iónov, ktoré efektívne narúšajú bakteriálnu integritu<sup>1</sup>. Výber vhodného ligandu hrá kľúčovú úlohu pri príprave a aktivite výsledných zlúčenín. Ideálnou voľbou sú aminokyseliny a peptidy, ktoré pôsobia ako obrana proti širokému spektru patogénov<sup>2</sup>.

Cieľom štúdie je charakterizácia strieborných komplexov na báze aminokyseliny L-Pro a jej derivátov a dipeptidových ligandov GlyGly, GlyAla a LeuGly. V príspevku budú prezentované aj výsledky testovania biologickej aktivity vybraných komplexov<sup>3</sup>.

*Práca bola finančne podporená slovenskými grantovými agentúrami VEGA 1/0016/18, 1/0138/20, 1/0653/19, 1/0697/1 a KEGA 006UPJŠ-4/2021. Táto štúdia bola vykonaná v rámci projektu COST ACTION 18202.*

LITERATÚRA

1. Rendošová M., Gyepes R., Cingelová Maruščáková I., Mudroňová D., Sabolová D., Kello M., Vilková M., Almáši M., Huntošová V., Zemek O., Vargová Z. *Dalton Trans.* 50, 936 (2021).
2. Di Natale C., De Benedictis I., De Benedictis A., Marasco D. *Antibiotics* 9, 337 (2020).
3. Kuzderová G., Rendošová M., Gyepes R., Sovová S., Sabolová D., Vilková M., Olejníková P., Bačová I., Stokič S., Kello M., Vargová Z.: *Molecules* 26, 6335 (2021).

**3P-09**  
**SYNTHESIS, SOD MIMETIC AND DNA CLEAVING**  
**PROPERTIES OF COPPER(II) COMPLEXES**  
**DERIVED FROM METHOXYBENZYLAMINES**

**LUCIA LINTNEROVÁ\***, JANA KORCOVÁ, PETER  
 HERICH, JINDRA VALENTOVÁ

*Department of Chemical Theory of Drugs, Faculty  
 of Pharmacy, Comenius University in Bratislava,  
 Kalinčiakova 8, 831 04 Bratislava, Slovakia  
 lintnerova@fpharm.uniba.sk*

A series of six copper(II) complexes were prepared from Schiff base and reduced Schiff base type of ligands (Figure 1). The synthesis of Schiff base ligands **I** was a condensation reaction of salicylaldehyde and 2-, 3- and 4-methoxybenzylamine and a reduction reaction produced the reduced Schiff base ligands **II**. Copper(II) complexes were prepared using of copper(II) chloride or acetate.

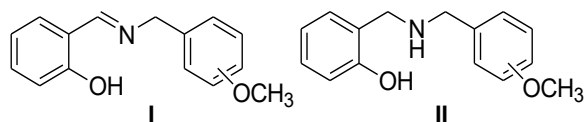


Fig. 1. Structure of ligands used to prepare copper(II) complexes

The SOD mimetic activity (radical scavenging) was determined using the INT method<sup>1,2</sup>. Complexes able to scavenge radicals decrease the amount of formazane dye formed which was detected as decrease of light absorption. The prepared complexes were able to inhibit formazane formation from 12,67 to 98,93% at  $1,43 \cdot 10^{-4}$  to  $5,72 \cdot 10^{-4}$  M concentrations.

The gel electrophoresis separation<sup>3</sup> of cleaved supercoiled DNA plasmid pBR322 induced by the prepared copper(II) complexes showed complete cleavage or partial cleavage to open-circular partly cleaved at  $1 \cdot 10^{-3}$  to  $5 \cdot 10^{-3}$  M concentrations. We also performed the reaction in the presence of DMSO and no appreciable inhibition of cleavage was observed; this indicates that the reaction pathway takes place by the hydrolytic cleavage pathway.

*This work was funded by the grant VEGA 1/1045/20 of Ministry of education, science, research, and sport of the Slovak republic.*

REFERENCES

1. Vančo J., Švajlenová O., Račanská E., Muselík J., Valentová J.: *J. Trace Elem. Med. Biol.* 18, 155 (2004).
2. Lintnerová L., Valentová J., Herich P., Kožíšek J., Devínsky F.: *Monats. Chem. (Chem. Month.)* 149, 901 (2018).
3. Cole K. D., Tellez C. M.: *Biotechnol. Prog.* 18, 82 (2002).

**3P-10**  
**SUBSTITUTED THIOUREA AS AN**  
**COMPREHENSIVE AGENT IN HIGH-PRECISION**  
**METHOD FOR THE QUANTUM DOTS SHELL**  
**INCREMENT**

**LIUDMILA LOGHINA\***, MAKSYM CHYLII,  
 ANASTASIA KADERAVKOVA, MIROSLAV VLCEK

*Center of Materials and Nanotechnologies, Faculty of  
 Chemical Technology, University of Pardubice, nam. Cs. legii  
 565, 530 02 Pardubice, Czech Republic  
 Liudmila.Loghina@upce.cz*

Presently chalcogenide quantum dots (QDs) can be synthesized by an impressive number of methods, determining their structure and properties in advance, thereby ensuring their application in the creation of biological labels<sup>1</sup>, light emitting diodes (LEDs)<sup>2</sup> etc.

The presented method is based on the calculated ratio of the volume and mass of the core to the 1–5 monolayers shell (1–5 MLs). Sources of chalcogens in the synthesis of Cd<sub>0.25</sub>Zn<sub>0.75</sub>Se/ZnS core/shell QDs are substituted seleno – and thioureas, which are capable not only to supplant modern toxic sources of sulfur and selenium but allow to carried out the controlled synthesis of highly photoluminescent QDs with a low number of surface defects, as well. Gramm scale synthesis of Cd<sub>0.25</sub>Zn<sub>0.75</sub>Se core, was carried out by a hot-injection method followed by the reaction with a calculated amount of cadmium and zinc linoleates with trisubstituted selenourea.

The shell, consisting of 1–5 monolayers of zinc sulfide, grew on the core upon precisely dosed injection of a calculated amount of substituted thiourea dissolved in a mixture of oleylamine and octadecene, to a diluted solution of half-fold excess of zinc linoleate and core at 240 °C. Investigation of the PL properties of Cd<sub>0.25</sub>Zn<sub>0.75</sub>Se /ZnS 1–5 MLs core/shell QDs revealed the PL quantum yield considerable magnification (up to 83 %) with the increment of 1 and 2 MLs of ZnS, which indicates the inhibition of nanocrystal's surface defects.

The method presented here certainly contributes to the development of further research and, due to its simplicity and accuracy, can be transferred to an industrial scale.

*This work was supported by the project „High-sensitive and low-density materials based on polymeric nanocomposites” – NANOMAT (No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/17\_048/0007376) and grant LM2018103 from the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic.*

REFERENCES

1. Medintz I. L., Uyeda H. T., Goldman E. R., Mattoussi H.: *Nat. Mater.* 4, 435 (2005).
2. Han C. Y., Yang H.: *J. Korean Ceram. Soc.* 54, 449 (2017).

### 3P-11 VANADIUM(V) COMPLEXES WITH QUINOLINE DERIVATIVES

**MIROSLAVA MATIKOVÁ MALAROVÁ<sup>a</sup>, ERIKA  
SAMOLOVÁ<sup>b,c</sup>, PATRÍCIA CMOREJOVÁ, MÁRIA  
VILKOVÁ<sup>d</sup>**

<sup>a</sup> Department of inorganic chemistry, Institute of Chemistry  
UPJŠ, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovakia, <sup>b</sup> X-ray  
Crystallography Facility, UC San Diego, 5128 Urey Hall MC  
0358, 9500 Gilman Drive, <sup>c</sup> Institute of Physics of the ČAV,  
Na Slovance 2, 182 21 Prague 8, Czech Republic, <sup>d</sup> NMR  
Laboratory, Institute of Chemistry, Moyzesova 11, 041 54  
Košice, Slovakia  
miroslava.matikova.malarova@upjs.sk

Vanadium is an essential bio-metal which shows remarkable activities such as insulin mimetic agent, anticancer activity and catalytic activity in haloperoxidase. The coordination chemistry of vanadium (IV or V), with bidentate ligand, as quinoline-8-ol derivatives, has considered the great attention of many researchers for decades<sup>1,2</sup>. Quinoline-8-ol (8-QH) and its derivatives are known to form an important class of monoanionic N, O-binding ligands, which display extraordinary complexation abilities, accompanied with promising biological and pharmacological properties. Interesting biological properties of halogenated derivatives of 8-QH motivated us to prepare series of dimeric  $[V_2O_3(XQ)_4]$  vanadium (V) complexes and neutral  $[VO(XQ)_2OR]$  complexes (XQ = dClQ, 5,7-dichloroquinoline-8-ol (dClQ); and 5,7-dibrom-quinoline-8-ol (dBrQ); 5-chlor-7-iod-quinoline-8-ol (CQ) and 5-chlor-quinoline-8-ol (5ClQ)). These complexes were characterized by elemental analyses, IR and UV-Vis spectrometry, X-ray structure analyses and the stability were tested by NMR spectroscopy.

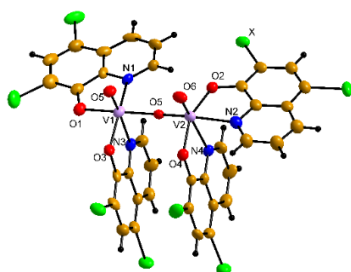


Fig. 1. The crystal structure of dimeric complexes

This work was supported by the Slovak Grant Agencies project VEGA 1/0148/19.

#### REFERENCES

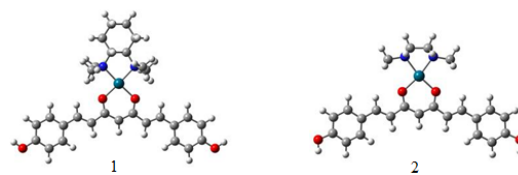
1. Potočník I., Vranec P., Farkasová V., et al.: J. Inorg. Biochem. 54, 67 (2016).
2. Choroba K., Raposob L. R., et.al.: Dalton Trans. 49, 20 (2020).

### 3P-12 PALLADIUM(II) COMPLEXES WITH BIOACTIVE BISDEMETHOXYCURCUMIN: CYTOTOXICITY, DNA AND HSA-BINDING

**NATALIA MIKLÁŠOVÁ<sup>a\*</sup>, PETER HERICH<sup>a</sup>,  
JOAQUÍN BARROSO-FLORES<sup>b</sup>, JANA KORCOVÁ<sup>a</sup>,  
JANKA LESKOVSKÁ<sup>a</sup>, PETER TAKÁČ<sup>c</sup>, JINDRA  
VALENTOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Department of Chemical Theory of Drugs, Faculty of  
Pharmacy, Comenius University in Bratislava, Kalinčiakova  
8, 83104 Bratislava, Slovakia, <sup>b</sup> Instituto de Química  
Universidad Nacional Autónoma de México Circuito Exterior  
s/n Ciudad Universitaria, 04510 Ciudad de México, México,  
<sup>c</sup> Department of Pharmacology and Toxicology, University of  
Veterinary Medicine and Pharmacy, Komenského 73, 04181  
Košice, Slovakia  
miklasova@fpharm.uniba.sk

Bisdemethoxycurcumin (BDMC) proved significant anti-cancer properties in several human carcinomas<sup>1</sup>. The coordination of BDMC to palladium increased its cytotoxicity in human adenocarcinomas<sup>2</sup>. The aims of our research are the synthesis and biological activity of Pd(II) complexes containing curcuminoids with potential antiproliferative activity. The synthesized Pd(II) complexes were characterized by spectral methods (NMR, IR, MS) and the structures were determined by X-ray diffraction.



*In vitro* attempts on human cancer cell lines (Jurkat, HCT-116, HeLa, MCF-7, MDA-MB-231, A549, Caco-2) and on 3T3 non-cancerous cells, revealed significant cytotoxicity of complexes **1** and **2** comparable to that of cisplatin. Pd(II) complexes **1** and **2** exhibited an enhanced activity, especially for Jurkat cell line. Studies of molecular docking on HSA and DNA were also performed<sup>3</sup>. Complex **2** showed a higher affinity than **1** towards a specific DNA sequence, stacking to a cytosine base. According to *in silico* studies, **1** proved a better binding capacity to asparagine amino acid of HSA.

This work was funded by the Grant VEGA 1/1045/20 of Ministry of education, science, research, and sport of the Slovak republic.

#### REFERENCES

1. Qiu C., Liu K., Zhang S., Gao S., Chen W., Li D., Huang Y.: Drug Des. Dev. Ther. 14, 993 (2020).
2. Li Y., Zhang C., Li S., Zhang L., Zhou G., Wang S., Zhang J.: Eur. J. Med. Chem. 144, 662 (2018).
3. Miklášová N., Herich P., Dávila-Becerril J. C., Barroso-Flores J., Fischer-Fodor E., Valentová J., Leskovská J., Kožíšek J., Takáč P., Mojžiš J.: Molecules 26, 4369 (2021).

## 3P-13

**SYNTEZA A ŠTÚDIUM ANTIRADIKÁLOVÝCH VLASTNOSTÍ KOMPLEXNÝCH ZLÚČENÍN MEDI A REDUKOVANÝCH SCHIFFOVÝCH ZÁSAD****BIANKA OBOŇOVÁ, LADISLAV HABALA***Katedra chemickej teorie liečiv, Farmaceutická fakulta, Univerzita Komenského, Kalinčiakova 8, 832 32 Bratislava, obonova@fpharm.uniba.sk*

Meď patrí medzi esenciálne biogénne prvky, ktoré sú nevyhnutnou súčasťou mnohých biochemických procesov. Zlúčeniny, ktoré majú vo svojej štruktúre tento prechodný kov, sú známe svojou biologickou aktivitou, dokázané boli ich antimikróbne, antiproliferačné, antiradikálové vlastnosti. Meďnatý kation ako redoxne aktívny ión môže katalyzovať vznik reaktívnych foriem kyslíka, čím dochádza k poškodeniu bunkových štruktúr a následnej možnej bunkovej smrti, alebo pôsobí ako vychytávač voľných radikálov. Tieto pro- a antiradikálové vlastnosti medi môžu súvisieť s reakčnými podmienkami a prostredím, v ktorom sa komplex nachádza, ale aj s typom ligandu, na ktorý je atóm kovu v komplexnej zlúčenine viazaný<sup>1</sup>.

Oxidačný stres, ktorý vzniká nadprodukciou reaktívnych foriem kyslíka, je častou príčinou mnohých ochorení. Napriek tomu, že existujú prirodzené ochranné enzýmy, napr. superoxidizmutázy, ktoré znižujú množstvo voľných radikálov, ich terapeutické využitie je príliš komplikované. Ich náhradou môžu byť jednoduché molekuly a komplexy schopné vychytávať voľné radikály.

Súčasťou našej práce bola syntéza meďnatých komplexov redukovaných bidentálnych Schiffových zásad, pripravených reakciou cyklohexán-1,2-diamínu a rôzne substituovaných benzaldehydov. Totožnosť a čistota pripravených ligandov aj komplexov bola potvrdená spektrálnymi metódami a elementárnou analýzou.

Antiradikálová aktivita meďnatých komplexov bola meraná metódou INT<sup>2</sup>, založenou na schopnosti testovanej látky inhibovať redukciu jódtriazoliového farbiva superoxidovým radikálom. Stanovením hodnoty IC<sub>50</sub> bola porovnaná aktivita jednotlivých komplexov a meraných štandardov.

*Táto práca vznikla za finančnej podpory grantu FaF/41/2022 a grantu VEGA 1/0145/20.*

## LITERATÚRA

- Halliwell B., Gutteridge J. M. C.: *Free Radicals in Biology and Medicine*. 5. vyd. Oxford University Press, 2015.
- Lintnerová L., Valentová J., Herich P.: *Monatsh Chem.* 5, 149 (2018).

## 3P-14

**PHOTOINDUCED EXPANSION AND MICROLENS FORMATION OF Ge-As-S GLASS SURFACE****EKATERINA SAMSONOVA<sup>a</sup>, PETR KUTÁLEK<sup>b</sup>, PETR KNOTEK<sup>a</sup>, EVA ČERNOŠKOVÁ<sup>b</sup>, JIŘÍ SCHWARZ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Department of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice,* <sup>b</sup> *Joint Laboratory of Solid State Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 84, 532 10 Pardubice, Czech Republic ekaterina.samsonova@student.upce.cz*

It is known that illumination of glasses surfaces causes many effects depending on the structure and composition of glass and on the wavelength/penetration depth of used illumination mainly. The oxide glasses generally have the high glass transition temperature, a wide bandgap (4–9 eV) and the structure is rigid<sup>1</sup>. So, the intense pulsed lasers or ultra-violet illumination are needed for inducing of these phenomena. On the other hand, the chalcogenide glasses have bandgaps lower than 4 eV and more flexible structures<sup>2</sup>. It is why the photoinduced effects can be created by using lower energy.

We are focused here upon photoinduced volume changes on the surface of stoichiometric (GeS<sub>2</sub>)<sub>x</sub> (As<sub>2</sub>S<sub>3</sub>)<sub>(1-x)</sub> bulk glasses (x = 0, 27, 35, 59, 73, 82 and 95). These glasses were chosen because of their unique properties i.e., wide IR transparency, low phonon energy, good photosensitivity and optical nonlinearity. The glasses were prepared by a melt quenching method from pure elements (5N). The surface was polished to the optical quality (*root means square* < 5nm). For the illumination was used CW laser (λ = 532 nm, the maximum laser power density up to 2000 W/cm<sup>2</sup>). The role of the chemical composition and exposition conditions (spot diameter ≈ 40, 60, 120 μm and time illumination 2, 5, 10 min) on microlens formation was investigated. The illumination led to the surface volume expansion and so to the microlenses formation. The highest microlenses ≈ 5,6 μm were obtained on the surface of glass with 59 mol % of GeS<sub>2</sub>.

Created microlenses were characterized by the Digital Holographic Microscope, Raman Spectroscopy, Atomic Force Microscopy, Energy-dispersive X-ray spectroscopy, Force Spectroscopy and obtained properties with non-illuminated surface were compared. From the dependence of the microlenses height on the illumination intensity the minimal energy of microlenses formation was also found.

## REFERENCES

- Jha A.: *Inorganic Glasses for Photonics: Fundamentals, Engineering, and Applications*; John Wiley & Sons, 2016.
- Tanaka K., Saitoh A., Terakado N. J.: *J. Optoelectron. Adv. Mater.* 8, 2058 (2006).

### 3P-15 DERIVÁTY 1,10-FENANTROLINU PRO PŘÍPRAVU FOTOAKTIVNÍCH KOORDINAČNÍCH SLOUČENIN

**ADAM SZTULA**

*Katedra anorganické chemie, Univerzita Palackého  
v Olomouci, 17. listopadu 1192/12, 779 00 Olomouc*

1,10-Fenantrolin je jeden z nejvýznamějších ligandů pro přípravu koordinačních sloučenin, a to především s kovy bloku d a f. Jedná se o heterocyklický chelátující bidentátní ligand schopný vázat převážnou většinu kovů. Energeticky nízko ležící protivazebné  $\pi^*$  orbitály fenantrolinu (a jeho derivátů) mu dovolují vystupovat jako akceptor elektronů, což dává možnost vzniku celé řady koordinačních sloučenin se zajímavými fotofyzikálními vlastnostmi. Komplexace fenantrolinu s redukujícími kationty Cu(I), Ru(II) nebo Os(II), vede ke vzniku luminiscenčních molekul díky elektronovým MLCT hladinám. V jiných koordinačních sloučeninách mohou tyto ligandy vystupovat také jako absorbery světla a přenosem energie zesilovat optické vlastnosti centrálních atomů jako jsou Eu(III), Tb(III), Yb(III) nebo Nd(III)<sup>1</sup>. Koordinační sloučeniny fenantrolinů mají díky své unikátní elektronové struktuře potenciál tvořit širokou škálu látek s praktickým využitím při světle aktivovaných podmínkách. Jedná se zejména o aplikace v biomedicině jako luminiscenční sondy anebo léčiva<sup>2</sup>, dále ve fotokatalýze<sup>3</sup>, optice<sup>4</sup>, při výzkumu solárních článků a dalších příbuzných odvětvích.

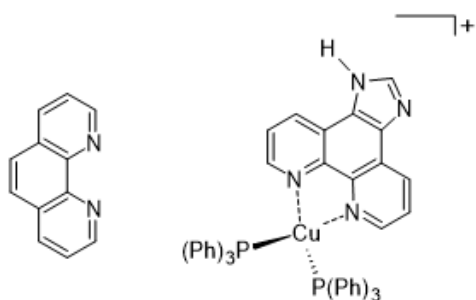


Schéma 1. Strukturní vzorec 1,10-fenantrolinu (vlevo). Strukturní vzorec komplexního kationtu Cu(I) s derivátem 1,10-fenantrolinu, P(Ph)<sub>3</sub>: trifenylofosfin (vpravo)

#### LITERATURA

1. Accrosi G., Andrea L., Yoosaf K., Armaroli N.: *Chem. Soc. Rev.* 38, 1690 (2009).
2. Liu J., Jin C., Yuan B., Chen Y., Liu X., Ji L., Chao H.: *Chem. Commun.* 53, 9878 (2017).
3. López A. M., Natali M., Pizzolato E., Chiorboli C., Bonchino M., Sartorel A., Scandola F.: *Phys. Chem. Chem. Phys.* 16, 12000 (2014).
4. Cai Z., Zhou M., Xu J.: *J. Mol. Struct.* 1006, 282 (2011).

### 3P-16 INTERAKCIE ŽELEZA S AMINOKYSELINAMI AKO BIOMOLEKULAMI

**BEATA VRANOVIČOVÁ, KATARÍNA MITAĽOVÁ**

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

Železo je esenciálnym bioprivkom, podieľa sa na mnohých biochemických reakciách v ľudskom tele, vrátane transportu kyslíka, tvorby energie a mnohých ďalších pre život dôležitých procesoch. Dôležitosť železa ako prvku nevyhnutného pre život vyplýva z jeho redoxnej reaktivity<sup>1</sup>. Správna hladina železa je v živých organizmoch nevyhnutná a je prísne regulovaná procesmi absorpcie železa, uvoľňovania prebytočného železa a procesmi recyklácie železa. Výkyvy obsahu železa, jeho deficit a prebytok dokážu spôsobiť organizmu veľké problémy a vyústiť do závažných ochorení.

V súčasnosti je veľmi závažným výživovým problémom nedostatok železa v tele. Tento nedostatok spôsobuje rôzne chorobné stavy a preto sa v súčasnosti štúdie zaoberajú vhodnou suplementáciou a obohacovaním potravín o železo použitím rôznych zlúčenín železa. Taktiež prebytok železa, je problémom, pretože je možnou predispozíciou tvorby kryštálov železa nájdených v ľudskom mozgu pacientov, ktorí podľahli neurodegeneratívnym ochoreniam. Tieto kryštály sú hydroxy-oxidmi a oxidmi železa a mechanizmus ich tvorby nie je známy.

Predmetom nášho skúmania je vzťah komplexov železa k procesu biomineralizácie a interakcie železa s aminokyselinami ako biomolekulami<sup>2</sup>. V realizovaných experimentoch sme sledovali interakcie železa s vybranými aminokyselinami vo fyziologických podmienkach. Priebeh reakcií sme ovplyvňovali pridaním kyseliny citrónovej/ askorbovej, čo malo vplyv aj na výsledné zloženie produktov. Reakcie s glycinom v prostredí kyseliny citrónovej pravdepodobne naštartovali aj proces biomineralizácie, čo sa prejavilo hnedým sfarbením niektorých vzoriek<sup>3</sup>. Výsledky analýz viedli k záveru, že všetky produkty obsahovali ako majoritnú zložku glycinát železnatý čiastočne znečistený použitou kyselinou askorbovou alebo citrónovou.

*Táto práca bola podporená grantom APVV-18-0016.*

#### LITERATÚRA

1. Gibney M. a kol., v knihe: *Introduction to Human Nutrition*. ISBN 978-1-4051-6807-6, s. 205–209. Veľká Británia 2009.
2. Ghasemi S., a kol.: *J. Plant Growth Regul.* 2012, 498–508.
3. Mitaľová K.: *Komplexy železa s aminokyselinami a ich derivátmi ako ligandami. Rigorózna práca*. Trnava UCM, 2018.

## 4L-01

## NEW AGENTS FOR THE TREATMENT OF DRUG-RESISTANT MYCOBACTERIUM TUBERCULOSIS

**LUCIE BRULÍKOVÁ<sup>a</sup>, JAN CHASÁK<sup>a</sup>, MILAN DAK<sup>a</sup>, VERÓNKA ŠLACHTOVÁ<sup>a</sup>, DAVIE CAPPOEN<sup>b</sup>, MAREK ŠEBELA<sup>c</sup>, KAREL BERKA<sup>d</sup>, VÁCLAV BAZGIER<sup>d</sup>**

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

<sup>b</sup> Laboratory of Microbiology, Parasitology and Hygiene (LMPH), S7, Faculty of Pharmaceutical, Biomedical and Veterinary Sciences, University of Antwerp, Wilrijk, Belgium,

<sup>c</sup> Department of Biochemistry, Faculty of Science, Palacký University, Šlechtitelů 27, 783 71, Olomouc, Czech Republic,

<sup>d</sup> Department of Physical Chemistry, Palacký University, 17. listopadu 12, Olomouc, 771 46  
lucie.brulikova@upol.cz

Tuberculosis (TB), caused primarily by the pathogen *Mycobacterium tuberculosis* (*Mtb*), remains a global health problem. According to the 2021 World Health Organization (WHO) report, TB is currently the 13th leading cause of death worldwide<sup>1</sup>. TB claims more than a million lives every year and is the world's leading cause of death from a single infectious agent, the leading killer of people with HIV, and a leading cause of deaths related to antimicrobial resistance.

On that account, we aimed at developing new drugs highly active against drug-resistant TB strains. We focused mainly on developing novel mycobacterial ATP synthase inhibitors (Fig. 1) and developing novel mycobacterial Zmp1 inhibitors.

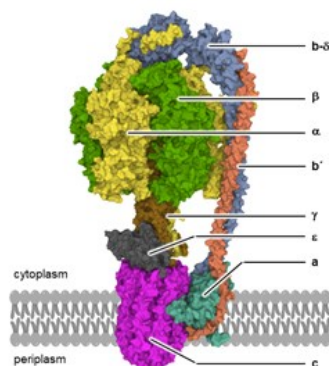


Fig. 1. Structure of mycobacterial ATP synthase (figure created using Mol\* Viewer and PDB: 7NJP)

This work was supported by grant no. JG\_2019\_002 from Palacký University in Olomouc and internal grants IGA\_PrF\_2021\_024 and IGA\_PrF\_2022\_022.

## REFERENCE

1. World Health Organization (WHO). Global Tuberculosis report 2021.

## 4L-02

## SYNTEZA A ANTIPROLIFERAČNÝ POTENCIÁL BIS-INDOLOVÝCH SUBSTANCIÍ

**MARIANA BUDOVSKÁ<sup>a</sup>, RADKA MICHALKOVÁ<sup>b</sup>, JÁN MOJŽIS<sup>b</sup>, VIKTOR VÍGLASKÝ<sup>c</sup>**

<sup>a</sup> Univerzita P.J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, Košice, 040 01, <sup>b</sup> Univerzita P.J. Šafárika v Košiciach, Lekárska fakulta, Ústav farmakológie, SNP 1, Košice, 040 11, <sup>c</sup> Univerzita P.J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra biochémie, Moyzesova 11, Košice, 040 01  
mariana.budovska@upjs.sk

Bis-indolové alkaloidy disponujú pestrou paletou biologickú účinnosti vrátane antibakteriálnej, antifungálnej, protivírusovej, protizápalovej, protinádorovej a cytotoxickéj<sup>1</sup>.

Táto práca sa zaoberá štúdiom syntézy bis-indolových zlúčenín odvodených od indolových fytoalexínov. Výskum bol zameraný na syntézu bis-indolových tiomočovín **1** s rôznou kombináciou substituentov na indolovom dusíku, bis-indolového homodiméru prepojeného fenylovým **2** a akridínovým linkerom **3**. Ďalej bola študovaná príprava močovín, kde bola síra v tiomočovinovom skelete nahradená kyslíkom. Cyklizačnými reakciami bis-indolových tiomočovín **1-3** účinkom rôznych cyklizačných činidiel (brómoctan metylový, fenytrimetylamóniumtribromid, oxid chrómový, bróm) boli pripravené deriváty tiazolidín-4-ónu, spirobrasinínu, 1,3-tiazino[6,5-*b*]indolu a 1-metoxyspirobrasinolmetyléteru. U pripravených zlúčenín bol evaluovaný ich antiproliferačný potenciál.

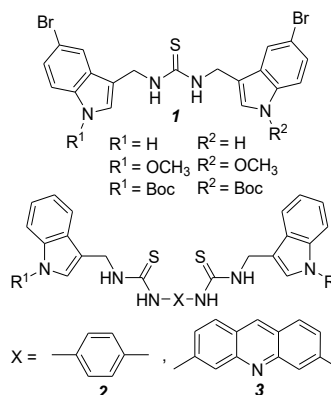


Schéma 1.

Táto práca vznikla za podpory VEGA grantu č. 1/0138/20.

## LITERATÚRA

1. Wibowo J. T., Ahmadi P., Rahmawati S. I., Bayu A., Putra M. Y., Kijjoa A.: Mar Drugs. 20, 3 (2022).

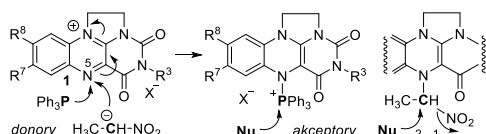
#### 4L-03 PŘEPÓLOVÁNÍ POMOCÍ FLAVINŮ: OD INSPIRACE PŘÍRODOU K APLIKACÍM V ORGANICKÉ SYNTÉZE

**RADEK CIBULKA\***, ADAM POKLUDA, EKATERINA  
ZUBOVA, MICHAL MÄRZ, MARTIN KRUPÍČKA

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

Umpolung – přepólování je obecný koncept v organické syntéze, který představuje změnu přirozené polarity organických látek na opačnou<sup>1</sup>. Klasickým příkladem přepólování je přeměna halogenalkanů, reagujících jako elektrofilů (akceptory = **a**), na Grignardova činidla vystupujících jako nukleofily (donory = **d**). V současné době jsou v popředí zájmu organokatalytické přístupy k přepólování, zejména ty, které obrací reaktivitu enolátů a enaminů<sup>2</sup>.

Flavinové kofaktory, FMN či FAD, mají v biologických systémech rozličné funkce. Vystupují například jako jedno- či dvouelektronová oxidační i redukční činidla, účastní se fotochemických dějů. Řada z těchto schopností již byla využita i v umělých organo- a fotokatalytických systémech<sup>3</sup>. V nedávné době byla popsána významná role flavinových kofaktorů při přepólování molekul<sup>4</sup>. Ukázalo se, že v enzymatických reakcích flaviny při přepólování využívají zejména polohu N(5), prostřednictvím které tvoří relativně stabilní adukty s měkkými nukleofily. Zjistili jsme, že podobné chování vykazují flaviny a některé jejich deriváty, například flaviniové soli **1** i v umělých systémech. V přednášce bude ukázáno možné využití takového přepólování v organické syntéze, například přepólování trifenylfosfinu tvorbou aduktu se solí **1** a aplikace této aktivity při katalytické Mitsunobuově reakci. Dalším příkladem je přepólování nitroalkanů, které je využitelné při jejich transformaci na aldehydy a následných reakcích s nukleofily. Tato reakce přímo napodobuje účinek flavinového kofaktoru v nitroalkanoxidacích<sup>5</sup>.



Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky, grantu č. 21-14179S.

#### LITERATURA

1. Seebach D.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 18, 239 (1979).
2. Zhu L., Wang D., Jia Z., Lin Q., Huang M., Luo S.: *ACS Catalysis* 8, 5466 (2018).
3. Cibulka R., Fraaije M. (Ed.): *Flavin-based catalysis*, Wiley-VCH Verlag (2021).
4. Piano V., Palfey B. A., Mattevi A.: *Trends Biochem. Sci.* 42, 457 (2017).
5. Fitzpatrick P. F.: *Arch. Biochem. Biophys.* 632, 41 (2017).

#### 4L-04 FOTOCHEMICKÁ PŘÍPRAVA HELICENŮ VLADIMÍR CÍRKVA

Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i., Rozvojová 135,  
165 02 Praha 6  
cirkva@icpf.cas.cz

Heliceny jsou 3D polyaromatické organické látky, které se skládají z *ortho*-kondenzovaných benzenových kruhů. Vlivem sterického bránění jsou nuceny zaujmout neplanární uspořádání ve tvaru šroubovice (pravotočivá a levotočivá). Tento vysoce delokalizovaný  $\pi$ -elektronový systém vede spolu s inherentní chiralitou k unikátním optickým a elektronickým vlastnostem (lepší rozpustnost, vysoká optická otáčivost). Struktura helicenu může být modifikována zavedením heteroatomu (N, S, P, Si, O) do helicenuvého kruhu (např. aza[*n*]heliceny).

Heliceny lze připravit několika různými metodami, z nichž nejrozšířenější jsou fotochemické cyklizační reakce<sup>1</sup>. Tyto jsou založeny na *cis/trans* fotoizomeraci derivátů stilbenů a následně konotační elektrocyklizaci *cis* izomeru na dihydrohelicenuvé meziproduct, který se okamžitě mění v přítomnosti vzduchu a katalytického množství jódu na plně aromatický helicen<sup>2</sup>.

Fotochemické přípravy helicenuvé, které byly studovány v naší skupině, jsou založené jak na fotocyklizaci iminů, která vede k přípravě nových diazahelicenuvé<sup>3</sup>, tak na neoxidativní dehydrofluoraci či dehydrochloraci, která poskytuje fluorované [6]heliceny<sup>4</sup> či aza[*n*]heliceny<sup>5</sup> ( $n = 4 - 7$ ).

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 20-19353S.

#### LITERATURA

1. Storch J., Žádný J., Církva V., Jakubec M., Hrbáč J., Vacek J. v knize: *Helicenes: Synthesis, Properties and Applications, Photochemistry Approach to Helicenes*, kap. 1, Wiley-VCH, Weinheim 2022.
2. Mallory F. B., Mallory C. W.: *Org. React.*, 30, 1 (1984).
3. Kos M., Rodríguez R., Storch J., Sýkora J., Caytan E., Cordier M., Císařová I., Williams J. A. G., Žádný J., Církva V., Crassous J.: *Inorg. Chem.* 60, 11838 (2021).
4. Církva V., Jakubík P., Strašák T., Hrbáč J., Sýkora J., Císařová I., Vacek J., Žádný J., Storch J.: *J. Org. Chem.* 84, 1980 (2019).
5. Váňa L., Jakubec M., Sýkora J., Císařová I., Storch J., Církva V.: *J. Org. Chem.* 86, 13252 (2022).



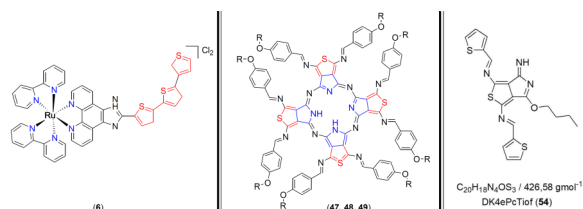
#### 4L-05 CYKLIZÁCIA TIOFÉN DIKYANONITRILOV NA ZLÚČENINY FTALOKYANINOVÉHO TYPU

**MARCELA GAŠPAROVÁ, DOMINIKA KENDROVÁ,  
ZITA TOKÁROVÁ**

*Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita sv.  
Cyrila a Metoda v Trnave, Nám. J. Herdu 2, 91701 Trnava,  
Slovenská republika  
gasparova2@ucm.sk*

Návrh a syntéza nových typov fotosenzibilátorov pre účely fotodynamickéj terapie (PDT) je prezentovaná.

Zamerali sme sa na syntézu a identifikáciu chemickej štruktúry série azamakrocyklov, ktoré do istej miery vykazujú štruktúru podobnosť s fotosenzibilátorom označeným ako TLD 1433, ktorý je prvým klinicky uznaným terapeutikom pre potreby PDT v Kanade. V štruktúre TLD 1433 nájdeme systém bipyridínových jadier, ktoré slúžia ako ligand pre atóm Ru<sup>2+</sup> a komplex je ešte premostený na tritiofénový fragment (obr. 1, vľavo). Štruktúra nami očakávaných zlúčenín z triedy ftalokyanínov je zhodná počtu dusíkových atómov a tiofénových jadier, avšak bez nutnosti koordinácie centrálnim atómom (obr. 1, stred). Napriek snahám a dosiaľ jedinému literárne popísanému derivátu sa v našich syntetických postupoch nepodarilo izolovať azamakrocyklus so systémom thieno[5,4-c]pyrolov, ktorá reprezentuje izostérnu zmenu za bežný štruktúrny izoindolový motív. Izolované a identifikované však boli nové deriváty (obr. 1, vpravo), ktoré dokumentujú priebeh reakcie v prospech tvorby ftalokyanínov, ktorá prebieha ako niekoľkostupňová autoadícia substrátov zakončená cyklizáciou. Navyše, nami pripravené deriváty je možné využiť ako substráty syntéz v prospech tvorby nesymetrických ftalokyanínov.



Obr. 1. TLD 1433 (vľavo), očakávané azamakrocykly (stred), reálne izolované zlúčeniny (vpravo)

*Realizácia výskumu je financovaná z grantových úloh podpora VEGA 2/0055/21 a VEGA 1/0086/21.*

#### LITERATÚRA

1. Monro S., et al.: Chem. Rev. 119, 2, 797 (2019).
2. Végh D., et al.: Chem. Heterocycl. Comp. 31, 10, 1238 (1995).

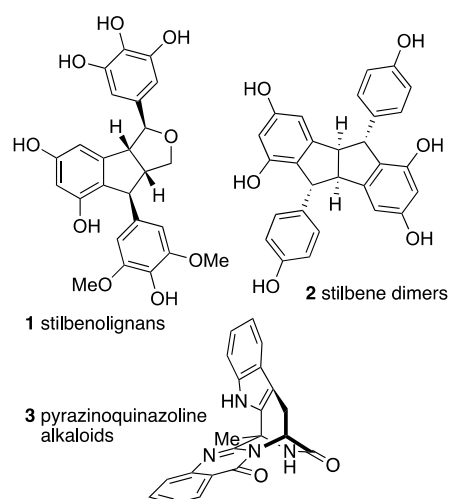
#### 4L-06 FROM PHENOLICS TO ALKALOIDS – ADVENTURES IN TOTAL SYNTHESIS

**TOMÁŠ MAŠEK, VÁCLAV CHMELA, LADISLAV  
PRENER, SARAH DEKOUNE, ULLRICH JAHN**

*Ústav organické chémie a biochémie AV ČR, Flemingovo  
náměstí 2, 166 10 Praha 6  
ullrich.jahn@uochb.cas.cz*

Phenolic natural products and alkaloids are major natural product classes, which display rich and important biological activities. A common feature, which is however not well understood, is that they are often formed by oxidative processes, which results in large structural diversity. This provides inspiration to synthetically approach the complex skeletons of such natural products, which are isolated often only in minute quantities, by similar oxidative tandem processes.

We illustrate this concept by short asymmetric total syntheses of members of the stilbenolignan<sup>1</sup>, stilbene dimer<sup>2</sup> and fumiquinazoline<sup>3</sup> families of natural products 1-3.



Scheme 1. Oxidatively formed phenolic and alkaloid natural products

*Generous financial support by the Czech Science Foundation (19-22085S and 21-30730S) and IOCB Prague is gratefully acknowledged.*

#### REFERENCES

1. Begum S. A., Sahai M., Ray A. B.: Prog. Chem. Nat. Prod. 93, 1 (2010).
2. Keylor M. H., Matsuura B. S., Stephenson C. R. J.: Chem. Rev. 115, 8976 (2015).
3. Resende D., Boonpothong P., Sousa E., Kijjoa A., Pinto M. M. M.: Nat. Prod. Rep. 36, 7 (2019).

#### 4L-07 DIVERGENTNĚ ORIENTOVANÁ SYNTÉZA VYCHÁZEJÍCÍ Z 2/4-NITROBENZENSULFONAMIDŮ JAKO KLÍČOVÝCH INTERMEDIÁTŮ

**PETRA KRÁLOVÁ, MIROSLAV SOURAL**

*Katedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity  
Palackého v Olomouci, 17. listopadu 1192/12, 771 46  
Olomouc  
petra.kralova@upol.cz*

Divergentně orientovaná syntéza (DOS) představuje jednu z metod organické syntézy využitelnou pro rychlou přípravu strukturně odlišných chemických knihoven. Tzv. reagent-based přístup DOS umožňuje syntézu rozmanitých látek z jednoho společného intermediátu a různých činidel<sup>1</sup>.

V posledních letech byla diskutovaná metoda aplikována pro syntézu rozmanitých heterocyklů připravovaných z variabilních 2/4-nitrobenzonsulfonamidů pomocí syntézy na pevné fázi<sup>2</sup>. Tato přednáška je zaměřena na přípravu nových derivátů pyrrolidin-3-onu<sup>3</sup>, 1,4-oxazepanu a jejich derivátů<sup>4</sup>, fúzaných derivátů triazolo[1,5-*a*][1,4]diazepinu<sup>5</sup>, tetrahydro-isochinolinu a tetrahydrobenzo[*d*]azepinu<sup>6</sup> (Schéma 1).

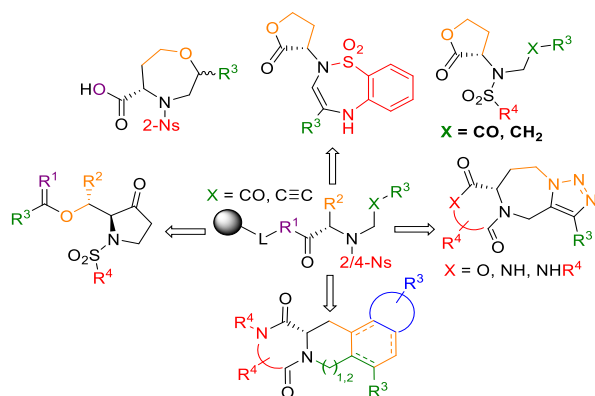


Schéma 1. DOS vybraných heterocyklických sloučenin

*Tato práce vznikla za podpory grantů IGA PŘF UPOL, AZV (17-31834A) a GAČR (21-06553S).*

#### LITERATURA

- Galloway W. R. J. D., et al.: *Nat. Commun.* 1, 80, (2010).
- Králová P., Ručilová V., Soral M.: *ACS Comb. Sci.* 20 (9), 529 (2018).
- Králová P., Maloň M., Pospíšil J., Soral M.: *J. Org. Chem.* 85 (2), 985 (2020).
- Králová P., Lemrová B., Maloň M., Soral M.: *RSC Adv.* 10 (59), 35906 (2020).
- Králová P., Soral M.: *J. Org. Chem.* 86 (12), 7963 (2021).
- Králová P., Soral M.: *J. Org. Chem.* 87 (8), 5242 (2022).

#### 4L-08 NEW METHODS FOR SYNTHESIS OF SULFONIMIDAMIDES AND RELATED COMPOUNDS

**MILOŠ JABCZUN, VLADIMÍR NOSEK, JIŘÍ MÍŠEK**

*Department of Organic Chemistry, Faculty of Science,  
Charles University, Hlavova 8, Prague, 128 43, Czech  
Republic  
misek@natur.cuni.cz*

Sulfonimidamides are a class of compounds that is gaining popularity in medicinal chemistry and drug discovery<sup>1</sup>. They are bioisosteric to popular sulfonamides and offer a unique scaffold for 3-D display of up to four different substituents (Scheme 1). Nevertheless, sulfonimidamides remain underexplored in discovery chemistry due to the lack of broadly general and efficient methods for their preparation. The aim of the presentation is to summarize current approaches for synthesis of this class of compounds and show our strategy for the preparation of sulfonimidamides. Our approach relies on two complementary two-step procedures that provide sulfonimidamides with a broad spectrum of substituents and functional groups.



- Underexplored chemotype in drug discovery
- 3D display of four substituents

Scheme 1. A general structure of sulfonimidamides

*This work was supported by the Czech Science Foundation (GACR 20-26798S).*

#### REFERENCE

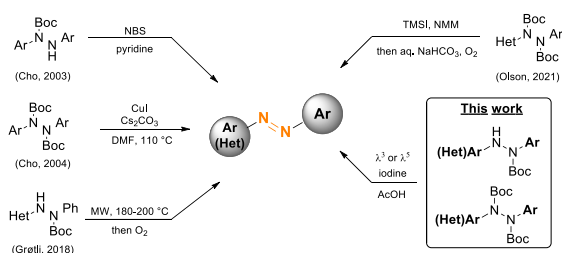
- Chinthakindi P. K., Naicker T., Thota N., et al.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 15, 56 (2017).

#### 4L-09 STUDY OF A NEW APPROACH TO BIS(HETERO) ARYL DIAZENES

**JAKUB ORVOŠ, RÓBERT FISCHER**

*Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry  
STU in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava  
jakuborvos@gmail.com*

Due to their specific colour and optical properties, aryl diazenes are very useful compounds for advanced material technology and pharmacological research. The introduction of the aryl diazenyl moiety using conventional methods (diazonium coupling, Baeyer-Mills reaction) has recently become cumbersome<sup>1</sup>, by reason of the preparation of more structurally complex molecules with diverse functional groups. In 2003, Lim and co-workers published an inspiring work on the synthesis of azobenzenes *via* Buchwald-Hartwig coupling reaction of *N*-Boc aryl hydrazines, followed by oxidations of the corresponding hydrazo intermediates<sup>2</sup>. This methodology was further modified by Cho<sup>3</sup>, Grötl<sup>4</sup> and Olson<sup>5</sup> (Scheme 1). Mild reaction conditions and the possibility of using electronically various substrates predetermine this transformation to be a valuable tool for late-stage derivatization of highly functionalized structures, such as drugs. In effort to improve yield and selectivity of this sequence, we focused on optimizing the oxidation step. Using hypervalent iodine reagents, desired bis(hetero)aryl diazenes were produced from *N*-Boc and *N,N'*-bis-Boc aryl hydrazines in more than 80 % average yields.



Scheme 1. Previously described conditions for *N*-Boc and *N,N'*-bis-Boc aryl hydrazines oxidations in comparison with our work

*Grant agencies (APVV-18-0197, APVV-18-0087, VEGA 1/0029/22, GAČR 22-23760S) are acknowledged for the financial support.*

#### REFERENCES

- Bellotto, S.; Reuter, R.; Heinis, C.; Wegner, H. A.: *J. Org. Chem.* 76, 9826 (2011).
- Lim, Y. K.; Lee, K. S.; Cho, C. G.: *Org. Lett.* 5, 979 (2003).
- Kim, K.-Y.; Shin, J.-T.; Lee, K.-S.; Cho, C.-G.: *Tetrahedron Lett.* 1, 117 (2004).
- Xu, Y.; Gao, C.; Andréasson, J.; Grötl, M.: *Org. Lett.* 16, 4875 (2018).
- Tuck, J. R.; Tombari, R. J.; Yardeny, N.; Olson, D. E.: *Org. Lett.* 11, 4305 (2021).

#### 4L-10 ELEKTRONDEFICITNÍ DENDRALENY: SYNTÉZA A REAKTIVITA

**RASTISLAV AŇTAL, ZBYNĚK BRŮŽA, STEFANIE  
PERDOMO, JIŘÍ KUNEŠ, MILAN POUR\***

*Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové,  
Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové  
pour@faf.cuni.cz*

Dendraleny jsou donedávna opomíjenou podmožinou konjugovaných polyenů s unikátní schopností podstupovat kaskádové, tzv. dien-transmisivní Diels-Alderovy reakce, ve kterých se dvojná vazba, vzniklá v jedné DA reakci stává součástí nového dienového fragmentu, jenž může podlehnout další cykloadici<sup>1</sup> (Schéma 1).

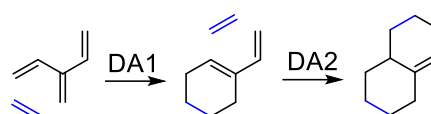


Schéma 1. Archetypální DA reakce [3]dendralenu

Vzhledem ke značnému vzrůstu strukturní složitosti v jediné operaci tak má chemie dendralenů nesporný syntetický potenciál. Většina dosud připravených látek byla omezena na látky s jednoduchými substituenty (převážně alkyly) s minimálním elektronovým vlivem<sup>1</sup>. V rámci této práce jsme proto připravili dendraleny, substituované funkčními skupinami s výraznými elektronakceptorními efekty (Schéma 2) s cílem prozkoumat jejich reaktivitu.

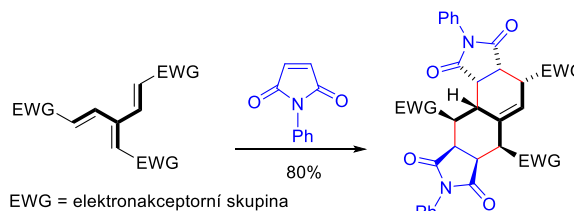


Schéma 2. DA reakce elektrondeficitních dendralenů

V rámci přednášky bude diskutována příprava i reaktivita připravených dendralenů, které poskytovaly jak DA reakce s elektronově chudými (!) dienofily, tak kaskádové Michaelovy i anti-Michaelovy adice.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR číslo 18-17868S.*

#### LITERATURA

- Hopf H., Sherburn M. S.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 51, 2298 (2012).

#### 4L-11 PENTACYCLIC TRITERPENES WITH STRONG NEUROPROTECTIVE ACTIVITY IN SH-SY5Y CELLS IN TWO NEURODEGENERATION MODELS

MILAN URBAN<sup>\*a</sup>, GABRIEL GONZALEZ<sup>b,c</sup>, JIŘÍ HODOŇ<sup>d</sup>, MIROSLAV STRNAD<sup>b,c</sup>

<sup>a</sup> IMTM, Faculty of Medicine and Dentistry, Palacky

University in Olomouc, Hnevotinska 5, 779 00 Olomouc,

<sup>b</sup> Department of Experimental Biology, Palacky University,

Slechtitelu 27, 78371, Olomouc, <sup>c</sup> Department of Neurology,

University Hospital in Olomouc, I. P. Pavlova 6, 775 20

Olomouc, <sup>d</sup> Department of Organic Chemistry, Faculty of

Science, Palacky University, 17. listopadu 1192/12, 771 46

Olomouc, Czech Republic

milan.urban@upol.cz

Triterpenoids are natural compounds with interesting biological activities<sup>1</sup>. Recently, we found a set of pentacyclic triterpenoids with low cytotoxicity and high neuroprotective activity. A set of new compounds was synthesized and evaluated in salsolinol (SAL)- and glutamate (Glu)-induced models of neurodegeneration in neuron-like SH-SY5Y cells.

Among the tested compounds, betulin triazole **I** bearing a tetraacetyl- $\beta$ -D-glucose substituent showed a highly potent neuroprotective effect. To better understand which parts of the molecule is responsible for the activity, substructures of compound **I** were prepared (compounds **II**, **III**, **IV** in Figure 1), and evaluated independently. Synthesis, activity, and detailed mechanism of action will be discussed<sup>2,3</sup>.

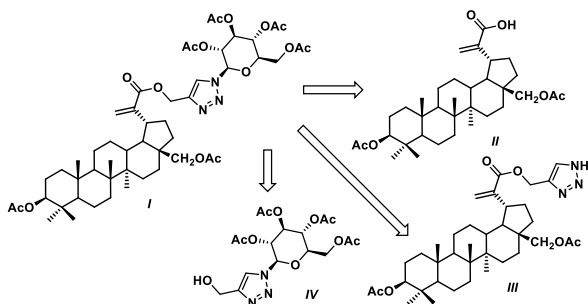


Fig. 1. Compound **I**

This work was supported by the grant of Ministry of Health of the Czech Republic (AZV No NV19-03-00107).

#### REFERENCES

1. Dzubak P., Hajduch M., Urban M., Sarek J., et al.: Nat. Prod. Rep. 23, 394 (2006).
2. PV 2020-651, PCT/CZ2021/050146.
3. Gonzalez G., Hodoň J., Kazakova A., D'Acunto C. W., Kaňovský P., Urban M., Strnad M.: Eur. J. Med. Chem. 213, 113168 (2021).

#### 4L-12 ENANTIOSELECTIVE DESYMMETRIZATION OF 3-SUBSTITUTED OXETANES

VIRAJ A. BHOSALE<sup>a</sup>, MARTIN NIGRINI<sup>a</sup>, MARTIN DRAČÍNSKÝ<sup>b</sup>, IVANA ČISAŘOVÁ<sup>c</sup>, JAN VESELY<sup>a\*</sup>

<sup>a</sup> Department of Organic Chemistry, Faculty of Science,

Charles University, Hlavova 2030, 128 43 Prague, <sup>b</sup> Institute

of Organic Chemistry and Biochemistry, Czech Academy of

Sciences, Flemingovo nám. 2, 160 00 Prague, <sup>c</sup> Department of

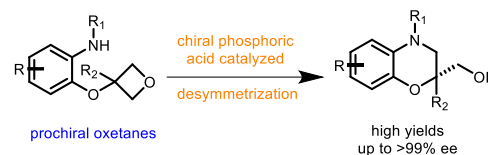
Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Charles University,

Hlavova 2030, 128 43 Prague, Czech Republic

jan.vesely@natur.cuni.cz

Enantiomerically enriched 3,4-dihydro-2*H*-1,4-benzoxazines stand out as key *N*, *O*-containing six-membered heterocyclic scaffolds found in bioactive natural products, pharmaceutical drugs and leading bioactive candidates. Following the clinical trials validating their therapeutic potential, chiral 2*H*-1,4-benzoxazines have been extensively researched in recent years towards developing efficient protocols for their enantioselective synthesis.

Herein, we describe a versatile transition metal/oxidant free synthesis of the chiral 2*H*-1,4-benzoxazines through chiral phosphoric acid (CPA) catalyzed enantioselective desymmetrization of prochiral oxetanes, in up to 99% yield and 99% enantioselectivity, under mild reaction conditions (Scheme 1)<sup>1</sup>. The reported strategy not only complements the conventional 2*H*-1,4-benzoxazine synthetic strategies, but also provides access to key intermediates of therapeutic candidates i.e., prostaglandin D2 receptor antagonist and M1 positive allosteric modulator (PAM) compound VU0486846<sup>2</sup>.



Scheme 1. Enantioselective desymmetrization of prochiral oxetanes

The authors gratefully acknowledges the Czech Science Foundation (20-29336S) for financial support.

#### REFERENCES

1. Bhosale V. A., Nigrini M., Dračínský M., Čisařová I., Veselý J.: J. Org. Lett. 23, 9376 (2021).
2. Rook J. M., Bertron J. L., Cho H. P., Garcia-Barrantes P. M., Moran S. P., Maksymetz J. T., Nance K. D., Dickerson J. W., Remke D. H., Chang S., Harp J. M., Blobaum A. L., Niswender C. M., Jones C. K., Stauffer S. R., Conn P. J., Lindsley C. W. A.: ACS Chem. Neurosci. 9, 2274 (2018).

#### 4P-01 2,3-DIHYDROBENZOFURANY JAKOŽTO OKOUZLUJÍCÍ SEKUNDÁRNÍ METABOLITY ROSTLIN

**DANIEL CHRENKO<sup>a,b</sup>, JIŘÍ POSPÍŠIL<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> Laboratoř růstových regulátorů, Univerzita Palackého a Ústav experimentální botaniky AV ČR, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, <sup>b</sup> Katedra Chemické Biologie, Univerzita Palackého, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, Czech Republic

Neolignany jsou sekundární metabolity rostlin biosyntetizované pomocí šikimátové dráhy<sup>1</sup>. Ze strukturního hlediska se jedná o dimery fenylpropanoidů, metabolity L-fenylalaninu. Fenylpropanoidy podstupují homodimerizaci a další (non-)enzymatické transformace jako je kyselá katalyzovaná cyklizace, methylace nebo oxidace<sup>2,3</sup>. 2,3-Dihydrobenzofurany (DHB) jsou jedním z 15 subtypů neolignanových struktur, které jsou právě (bio)syntetizovány homodimerizačním procesem 3,5'-fenylpropanoidů<sup>4</sup>.

DHB motiv je například přítomen v přírodně se vyskytujících molekulách DGC-A **I.** a Licarin A **II.**, ale také v syntetických molekulách, které mají velké spektrum biologických aktivit, jako jsou antibakteriální a protiplísňové, protinádorové, antituberkulární a antimalariální. Některé další DHB molekuly mohou také vykazovat antioxidantní či cytoprotektivní vlastnosti<sup>2</sup>.

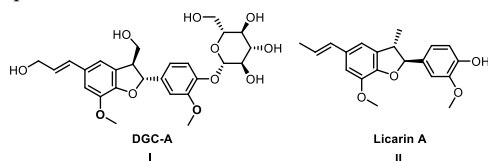


Schéma 1. Struktury přírodně se vyskytujících neolignanů DGC-A a Licarin A

Cílem našeho výzkumu je vyvinout novou metodu přípravy molekul tohoto strukturního typu pomocí organokatalyzátorů duálního charakteru a následně otestovat biologické vlastnosti nově připravených molekul zejména v kontextu jejich antiparazitických a protinádorových aktivit. Dosažené cíle budou prezentovány a diskutovány.

Tato práce byla podpořena vnitřním Grantem Univerzity Palackého (IGA\_PrF\_2022\_12 a IGA\_PrF\_2022\_16).

#### LITERATURA

- Vogt T.: Mol. Plant 3, 2 (2010).
- Zálešák F., Bon D. J. Y. D., Pospíšil J.: Pharmacol. Res. 146, 104284 (2019).
- Radadiya A., Shah A.: Eur. J. Med. Chem. 97, 356 (2015).
- Miao Y. H., Hu Y. H., Yang J., Liu T., Sun J., Wang X. J.: RSC Adv. 9, 27510 (2019).

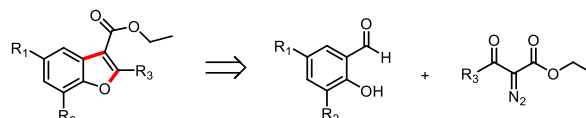
#### 4P-02 SYNTEZA NEOLIGNANOVÉHO SKELETU POMOCÍ KATALÝZY ZALOŽENÉ NA VYUŽITÍ TRANZITNÍCH KOVŮ

**ROKSOLANA ILNYCKA<sup>a</sup>, JIŘÍ POSPÍŠIL<sup>a,b,c</sup>**

<sup>a</sup> Katedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc, <sup>b</sup> Katedra chemické biologie Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, <sup>c</sup> Laboratoř růstových regulátorů, Univerzita Palackého v Olomouci a Institut experimentální botaniky AS CR, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc  
roksolana.ilnycka01@upol.cz

Biosyntéza neolignanů a dalších přírodních sekundárních metabolitů šikimátové dráhy dovoluje rostlinám reagovat na změny v prostředí, na napadení patogeny nebo jako obrana před opasem býložravci. Široké spektrum těchto metabolitů vychází z různých možností (radikálové) dimerizace základních fenylpropanoidových jednotek za účasti peroxidas nebo lakas a může být specifické pro druh, geografickou lokaci nebo dané roční období. Ačkoli tedy sekundární rostlinné metabolity neolignanového typu nejsou pro rostlinu esenciální, hrají nezastupitelnou roli v kvalitě jejího života<sup>1,2</sup>.

Někteří zástupci neolignanů s benzofuranovým skeletem vykazují antimikrobiální (Licarin B), anthelmintické (Licarin A) či protirakovinné (Tirpitzin A, Boehmenan) účinky. I tyto látky tak slouží v oblasti medicínální chemie k inspiraci při vývoji nových léčiv.<sup>2,3,4</sup> Syntéze látek obdobného typu se v naší skupině věnujeme již delší dobu s cílem vyvinout obecný, rychlý a stereoselektivní přístup k těmto skeletům. Jednou ze sledovaných cest je využití katalýzy tranzitními kovy (Rh<sup>III</sup>). Tento přístup pak bude diskutován v rámci mého příspěvku (obr. 1).



Obr. 1. Retrosyntéza benzofuranového skeletu neolignanů založeném na katalýze Rh<sup>III</sup>

#### LITERATURA

- Yang L., Wen K. S., Ruan X., Zhao Y. X., Wei F., Wang Q.: Molecules 23, 762 (2018).
- Zálešák F., Bon D. J.-Y. D., Pospíšil J.: Pharmacol. Res. 146, 104284 (2019).
- Pospíšil J., Konrádová D., Strnad M.: Antileishmanial Activity of Lignans, Neolignans, and Other Plant Phenols. In: Kinghorn A. D., Falk H., Gibbons S., Asakawa Y., Liu J. K., Dirsch V. M. (eds): Progress in the Chemistry of Organic Natural Products, vol 115. Springer, Cham. (2021).
- Pan L. L., Wang X. L., Luo X. L., Liu S. Y., Xu P., Hu J. F., Liu X. H.: Integr. Cancer Ther. 16 (3), 351–359 (2017).

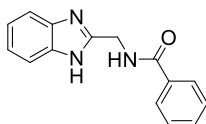
## 4P-03

**SYNTEZA, ŠTRUKTÚRA A ZMENY FYZIKÁLNO-CHEMICKÝCH VLASTNOSTÍ BENZIMIDAZOLOVÉHO DERIVÁTU APLIKOVANÉHO AKO CHEMOSENZOR PRE TOXICKÝ ORGANICKÝ REAGENT**

**NATÁLIA KABAŇOVÁ, ZITA TOKÁROVÁ**

Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave, Nám. J. Herdu 2, Trnava, SK-917 01, Slovensko  
kabanova1@ucm.sk

Benzimidazolové deriváty sa vyznačujú svojou všestrannou aplikovateľnosťou v rôznych odvetviach vedy, a tiež rozsiahlym spektrom možností ich syntéz. Jednou z hlavných charakteristík prezentovaného výskumu je návrh a aplikácia najefektívnejšej syntetickej metódy pre prípravu derivátu *N*-(1*H*-benzimidazol-2-ylmetyl)benzamid (**I**).



Obr. 1. Chemická štruktúra syntetizovaného benzimidazolového derivátu *N*-(1*H*-benzimidazol-2-ylmetyl)benzamid (**I**) a jav zhasania fluorescence pre senzoring tionylchloridu pri rôznych koncentráciách  $\text{SOCl}_2$  v dichlórmetáne

Syntetizovaný benzimidazolový derivát **I** sme sa po identifikácii chemickej štruktúry snažili využívať ako fluorescenčný chemosenzor. Naše snahy boli úspešné pre proces senzoringu tionylchloridu ( $\text{SOCl}_2$ ), ktorý častým činidlom v organickej syntéze, ako aj technologických procesoch. Pre proces bol využitý derivát **I** (obr. 1) s  $c = 10^{-4}$  mol  $\text{dm}^{-3}$ . Koncentrácia tionylchloridu sa zvyšovala od 0,7 mol  $\text{dm}^{-3}$  do 4,6 mol  $\text{dm}^{-3}$ , pričom očakávaná zmena pozorovaná aj vizuálne voľným okom bola dosiahnutá už pri koncentrácii 0,7 mol  $\text{dm}^{-3}$  ( $\text{SOCl}_2$ ). Sledovaný jav sa na UV-Vis spektrách prejavil batochrómym posunom pre  $\lambda_{\text{max}} / \text{nm}$  z pôvodných 338 nm pre senzor **I** na 368 nm. Proces je spojený so zmenou chemickej štruktúry senzoru, a preto nevyhnutnosťou bola charakterizácia štruktúry **I** pred a po senzoringu. Využitím  $^1\text{H}$  NMR, IČ, spektroskopie sme navrhli chemickú podstatu konkrétneho procesu senzoringu, ktorý je však zároveň spojený s javom zhasania fluorescence (obr. 1). Takýto jav nie je úplne ideálny, keďže práve v prevádzke s nadmernou koncentráciou toxického činidla tionylchloridu by bolo výhodnejšie výrazná zmena vo fluorescencii, ktorá je zreteľná okamžite aj v náročných prevádzkových podmienkach.

Práca vznikla s podporou grantov VEGA 1/0086/2, VEGA 2/0055/21 a UCM FVP 22-2022.

## 4P-04

**NOVEL MODIFIED PRALIDOXIME DERIVATES AS POTENTIAL REACTIVATORS OF ORGANOPHOSPHATE-INHIBITED CHOLINESTERASES**

**KAROLINA KNITTELOVÁ<sup>a</sup>, DAVID MALINAK<sup>a,b</sup>, RUDOLF ANDRYS<sup>a</sup>, KAMIL MUSILEK<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> University of Hradec Kralove, Faculty of Science, Rokitanskeho 62, 500 03 Hradec Kralove, <sup>b</sup> University Hospital in Hradec Kralove, Biomedical Research Center, Sokolska 581, 500 05 Hradec Kralove, Czech Republic  
karolina.knittelova@uhk.cz

Acetylcholinesterase (AChE) oxime reactivators are used as antidotes to organophosphate (OP) poisoning, while butyrylcholinesterase (BChE) reactivators are suitable for pseudocatalytic uptake of OP. OP acts as irreversible inhibitors of AChE. Due to the inhibition of AChE OPs cause impairment of cholinergic functions, which can lead to the death of the organism<sup>1</sup>. The modification of the already known structure of pralidoxime aims primarily at overcoming the problems associated with physicochemical properties. The disadvantage of quaternary pyridinium oximes, which have a permanently positive charge, is poor penetration across the blood-brain barrier (BBB), which makes them ineffective in the central nervous system<sup>2</sup>. Introducing a substituent that could contribute to increased lipophilicity, may thus provide better penetration into BBB. At the same time, a substituent in a suitable position relative to the oxime group on the pyridinium ring can reduce its pKa value and thus lead to easier formation of the oximate anion, which is important for the ability to reactivate inhibited cholinesterase<sup>3</sup>. The aim of this work is to synthesize oxime reactivators derived from the structure of pralidoxime, determine their stability and pKa values. Finally, the new derivatives will be measured *in vitro* for their ability to reactivate OP-inhibited cholinesterases.

This work was supported by the Czech Science Foundation (No. GA21-03000S) and the University of Hradec Kralove (No. SV2102-2022).

## REFERENCES

1. Musilek K., Dolezal M., Gunn-Moore F., Kuca K.: Med. Res. Rev. 31 (4), 548 (2011).
2. Gorecki L., Korabecny J., Musilek K., Malinak D., Nepovimova E., Dolezal R., Jun D., Soukup O., Kuca K.: Arch. Toxicol. 90 (12), 2831 (2016).
3. Zorbaz T., Malinak D., Maraković N., Maček Hrvat N., Zandona A., Novotny M., Skarka A., Andrys R., Benkova M., Soukup O., Katalinić M., Kuca K., Kovarik Z., Musilek K.: J. Med. Chem. 61 (23), 10753 (2018).

## 4P-05

SYNTHESIS AND *IN VITRO* EVALUATION OF NON-SYMMETRICAL MONOQUATERNARY AMMONIUM SALTS AS POTENTIAL REACTIVATORS OF INHIBITED CHOLINESTERASES

**ZUZANA KOHOUTOVA<sup>a</sup>, DAVID MALINAK<sup>a,b</sup>, TEREZA HOFMANOVA<sup>a</sup>, RUDOLF ANDRYS<sup>a</sup>, LUKAS PRCHAL<sup>b</sup>, JANA SVOBODOVA<sup>a</sup>, KAMIL MUSILEK<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> University of Hradec Kralove, Faculty of Science, Rokitanskeho 62, 500 03 Hradec Kralove, <sup>b</sup> University Hospital in Hradec Kralove, Biomedical Research Center, Sokolska 581, 500 05 Hradec Kralove, Czech Republic  
zuzana.kohoutova@uhk.cz

Organophosphorous compounds (OPs) such as nerve agents or pesticides are irreversible inhibitors of cholinesterases, namely Acetylcholinesterase (AChE) and Butyrylcholinesterase (BChE), causing cholinergic crisis<sup>1</sup>. While inhibition of AChE can be lethal, inhibition of BChE has no adverse effects. Therefore, BChE can be used for scavenging OPs before it reaches AChE in CNS. BChE itself has no catalytic activity, but by joint administration of BChE and reactivator we can establish pseudo-catalytic bioscavenger<sup>2</sup>. Reactivators cleave the OP moiety from the enzyme by making a covalent bond with it. Reactivators of AChE are already widely used (eg. pralidoxime, asoxime) but there are few disadvantages. Firstly, there is no broad-spectrum reactivator. Second problem is that they have low ability to pass the blood-brain barrier (BBB) due to their double-charged structure. Moreover, when the OP-ChE complex is dealkylated (so called “aging” of ChE), it is no longer possible to reactivate. That is why nowadays the research is focusing to development of reactivators of BChE as well<sup>3</sup>. Promising results were obtained for the novel “K-oximes” K027, K048 and K203. The aim of this research is synthesis and *in vitro* evaluation of monoquaternary analogues of oxime K203 and observation of the effect of charge on physicochemical properties of compounds and on biological activity.

This work was supported by the Czech Science Foundation (No. GA21-03000S) and the University of Hradec Kralove (No. SV2102-2022).

## REFERENCES

- Zorbaz T., Malinak D., Kuca K., Musilek K., Kovarik Z.: Chem.-Biol. Interact. 307, 16 (2019).
- Masson P., Lockridge O.: Arch. Biochem. Biophys. 494, 107 (2010).
- Gorecki L., Korabecny J., Musilek K., Malinak D., Nepovimova E., Dolezal R., Jun D., Soukup O., Kuca K.: Arch. Toxicol. 90, 2831 (2016).

## 4P-06

## NEW THIAZOLIDINEDIONE DERIVATIVES AS POTENTIAL ANTIBACTERIAL AGENTS

**MICHAL KOLÁŘÍK, LUCIE BRULÍKOVÁ**

Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, 17. listopadu 12, Olomouc, 77146  
lucie.brulikova@upol.cz

The thiazolidine-2,4-diones (glitazones) are well-known pharmacophores introduced in the late 1990s for treating type 2 diabetes mellitus<sup>1</sup>. Thiazolidinediones are found to exhibit a broad spectrum of biological activities<sup>2</sup>.

In view of the biological significance of the thiazolidinedione scaffold, we designed and synthesised several thiazolidinedione-based derivatives (Fig. 1) and studied their antibacterial activity.

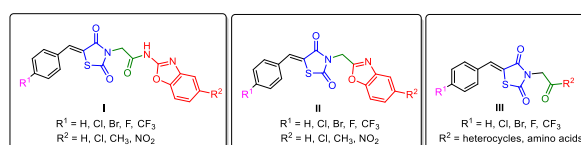


Fig. 1. Overview of thiazolidinedione derivatives

All prepared compounds were evaluated for their antibacterial activity against Gram-positive and Gram-negative bacterial strains such as *B. subtilis*, *M. luteus*, *M. vaccae*, *S. aureus*, *P. aeruginosa*, and *E. coli*. The most exciting compounds showed activity against *P. aeruginosa* and *M. vaccae* with a MIC value of 0.39 µg/ml. Some other derivatives exhibited moderate activity against *M. luteus* with a MIC value of 12.5 µg/ml.

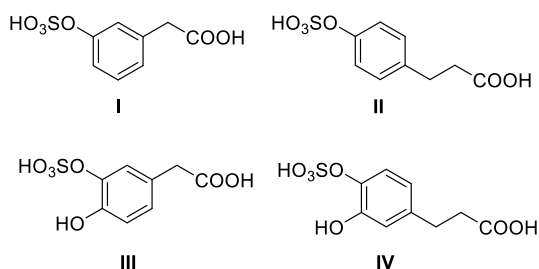
This work was supported by internal grants from Palacký University IGA\_PrF\_2021\_024 and IGA\_PrF\_2022\_022.

## REFERENCES

- Nanjan M. J., Mohammed M., Prashantha Kumar B. R., Chandrasekar M. J. N.: Bioorg. Chem. 77, 548 (2018).
- Munwar, S., Ilango, K.: Int. J. Pharm. Sci. Rev. Res. 63 (2), 58 (2020).

**4P-07**  
**SULFATED METABOLITES OF FLAVONOIDS**
**VIOLA KOLAŘÍKOVÁ, LUCIE PETRÁSKOVÁ,**  
**VLADIMÍR KŘEN, KATEŘINA VALENTOVÁ**
*Institute of Microbiology of the CAS, v. v. i., Vídeňská 1083,  
 142 20 Praha 4-Krč  
 viola.kolarikova@biomed.cas.cz*

Flavonoids are natural polyphenols with a number of important biological activities<sup>1</sup>. However, these effects have not been fully elucidated and could possibly be attributed to flavonoid metabolites formed in the intestine. Hydroxyphenylcarboxylic acids are known metabolites of a variety of flavonoids<sup>2</sup>. During the biotransformation phase II, these small molecules may be conjugated to form *e.g.* sulfates (Scheme 1), whose biological effects are still under investigation.



Scheme 1. Potential flavonoid metabolites

Starting from hydroxyphenylcarboxylic acids, several sulfates were prepared by chemical and chemoenzymatic synthesis methods. Several synthetic methods were studied, which show significant differences in the sulfation of monohydroxyphenylcarboxylic acids (*i.e.*, preparation of **I** and **II**) and dihydroxyphenylcarboxylic acids (**III** and **IV**). The obtained compounds will later be used as authentic standards in metabolic studies and in biological assays to better understand the impact of the flavonoids metabolism on their biological activity.

*This work was supported by the Czech Health Research Council (NU21-01-00135).*

**REFERENCES**

- Boots A. W., Haenen G. R., Bast A.: *Eur. J. Pharmacol.* 585, 325 (2008).
- Almeida A. F., Borge G. I. A., Piskula M., Tudose A., Tudoreanu L., Valentova K., Williamson G., Santos C. N.: *Compr. Rev. Food Sci. Food Saf.* 17, 714 (2018).

**4P-08**  
**HETEROCYKLICKÉ SULFONAMIDY AKO**  
**CHIRÁLNE H-DONORY A BRŇSTEDOVÉ**  
**KYSELINY S LADITEĽNÝMI VLASTNOSTAMI PRE**  
**ORGANOKATALÝZU**
**JOZEF KRISTEK<sup>a</sup>, JIŘÍ POSPÍŠIL<sup>b,c</sup>**

<sup>a</sup> Katedra Organické Chemie, Přírodovědecká fakulta  
 Univerzity Palackého, tř. 17. listopadu 1192/12, 771 46  
 Olomouc, <sup>b</sup> Katedra Chemické Biologie, Univerzita  
 Palackého, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, <sup>c</sup> Laboratoř  
 Růstových Regulátorů, Univerzita Palackého a Ústav  
 Experimentální Botaniky AV ČR, Šlechtitelů 27, 783 71  
 Olomouc  
 jozef.kristek01@upol.cz

Začiatkom 21. storočia nastal ohromný pokrok v oblasti asymetrickej katalýzy. V snahe nájsť bezpečné a netoxické alternatívy oproti reakciám katalyzovaných tranzitnými kovmi, sa vyvinul nový smer katalýzy – organokatalýza<sup>1,2</sup>. V posledných dvoch dekádach táto oblasť zaznamenala obrovský pokrok a následne umožnila objaviť mnoho nových syntetických transformácií. Jedna z nich sa nazýva „duálna organokatalýza“ – hlavná téma tohto príspevku.

Cieľom nášho projektu je vyvinúť novú triedu chirálnych bifunkčných organokatalyzátorov aplikovateľné v duálnej organokatalýze. Hlavný zámer je prepojiť dve funkčné skupiny, donor vodíkovej väzby (HBD) a Brønstedovú kyselinu (BA)<sup>3</sup> a to v jednej molekule (Schéma 1). Hlavnou výhodou týchto heterocyklických sulfonamidov je možnosť jemne meniť pK<sub>a</sub> daného organokatalyzátoru<sup>4</sup>. Naše doterajšie úspechy a výsledky budú prezentované v posterí.

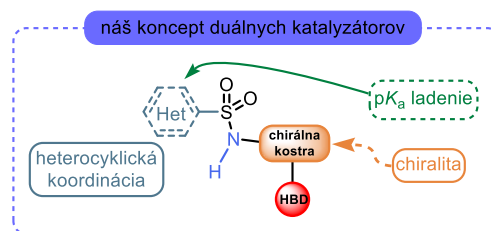


Schéma 1. Návrh nových duálnych katalyzátorov

*Táto práca vznikla za podpory Internej Grantovej Agentúry Univerzity Palackého v Olomouci (IGA\_PrF\_2022\_22).*

**LITERATÚRA**

- List B., Lerner R. A., Barbas C. F.: *J. Am. Chem. Soc.* 122, 2395 (2000).
- MacMillan D. W. C., Ahrendt K. A., Borths C. J.: *J. Am. Chem. Soc.* 122, 4243 (2000).
- Min C., Seidel D.: *Chem. Soc. Rev.* 46, 5889 (2017).
- Iakovenko R. O., Chrenko D., Kristek J., Desmedt E., Zálešák F., Vleeschouwer F. D., Pospíšil J.: *Org. Biomol. Chem.* 20, 3154 (2022).



## 4P-09

**MODULACE FLT3 A CDK9 V BUŇKÁCH AKUTNÍ MYELOIDNÍ LEUKÉMIE POMOCÍ TECHNOLOGIE PROTAC****EVA ŘEZNÍČKOVÁ<sup>a</sup>, SOŇA KRAJČOVIČOVÁ<sup>b</sup>, MIROSLAV PEŘINA<sup>a</sup>, MARKÉTA KOVALOVÁ<sup>a</sup>, MIROSLAV SOURAL<sup>b</sup>, VLADIMÍR KRYŠTOF<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Katedra experimentální biologie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, <sup>b</sup> Katedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 779 00 Olomouc, Česká republika  
vladimir.krystof@upol.cz

Akutní myeloidní leukémie (AML) je jednou z nejzávažnějších forem hematologických malignit. Vznik tohoto onemocnění je zhruba u třetiny všech pacientů spojován s onkogenními mutacemi v genu kódujícím receptorovou tyrosinkinazu FLT3. Ačkoli je v současné době známa celá řada FLT3 inhibitorů, z nichž několik již bylo schváleno pro klinické použití, jejich uplatnění v praxi je často limitováno časným rozvojem rezistence a následným relapsem. Vhodnou alternativou k inhibici kinasové aktivity FLT3 se jeví být jeho cílená degradace pomocí technologie PROTAC<sup>1</sup> (z angl. proteolysis targeting chimera). Z toho důvodu jsme dříve publikovaný FLT3/CDK9 kinasový inhibitor<sup>2</sup> linkerem propojili s ligandem E3 ubiquitinligasy, pomalidomidem, za vzniku heterobifunkčního konjugátu. Řadou experimentů byla prokázána selektivita této molekuly vůči FLT3-ITD-mutovaným AML buněčným liniím a potvrzen mechanismus jejího působení založený na proteasomální degradaci. Látka účinně snižovala hladinu FLT3 i CDK9, což vedlo k zablokování FLT3 signální dráhy, aktivaci apoptosy a zástavě buněčného cyklu těchto buněk. Kromě toho došlo, vlivem transkripční represe způsobené degradací CDK9, i k významnému snížení exprese genů zapojených v patogenezi AML. Získané výsledky potvrzují pozitivní dopad simultánní degradace FLT3 a CDK9 pro potenciální léčbu pacientů s AML.

*Tato práce vznikla za podpory grantu Grantové agentury ČR (19-09086S) a Univerzity Palackého v Olomouci (IGA\_2022\_007).*

## LITERATURA

1. Sakamoto K. M., Kim K. B., Kumagai A., Mercurio F., Crews C. M., Deshaies R. J.: Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 98, 8554 (2001).
2. Gucký T., Řezníčková E., Radošová Muchová T., Jorda R., Klejová Z., Malínková V., Berka K., Bazgier V., Ajani H., Lepšík M., Divoký V., Kryštof V.: J. Med. Chem. 61, 3855 (2018).

## 4P-10

**HALOGEN-SUBSTITUTED PYRIDINIUM OXIMES REACTIVATING CHOLINESTERASES INHIBITED BY NERVE AGENTS****DAVID MALINAK<sup>a,b</sup>, TAMARA ZORBAZ<sup>c</sup>, TEREZA HOFMANOVÁ<sup>a</sup>, RUDOLF ANDRYS<sup>a</sup>, MIROSLAV PSOTKA<sup>a,b</sup>, JANA SVOBODOVA<sup>a</sup>, LUKAS PRCHAL<sup>b</sup>, ZRINKA KOVARIK<sup>c</sup>, KAMIL MUSILEK<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> University of Hradec Kralove, Faculty of Science, Rokitsanskeho 62, 500 03 Hradec Kralove, Czech Republic, <sup>b</sup> University Hospital in Hradec Kralove, Biomedical Research Center, Sokolska 581, 500 05 Hradec Kralove, Czech Republic, <sup>c</sup> Institute for Medical Research and Occupational Health, Ksaverska Cesta 2, HR-10000, Zagreb, Croatia  
david.malinak@uhk.cz

Nerve agents are organophosphorus compounds (OPs) with very potent toxicity due to their irreversible inhibition of the essential enzyme acetylcholinesterase (AChE; EC 3.1.1.7), which is primarily important in the control of neurotransmission in synapses. The related enzyme butyrylcholinesterase (BChE; EC 3.1.1.8) is inhibited by OPs as well. Compounds with an oxime group act as reactivators of the inhibited AChE by the nucleophilic displacement of OP moiety from the enzyme's catalytic serine and are used as a pharmacological treatment after OP poisoning. However, restoration of the AChE activity is directly related to the oxime structure and standard oximes in medical practice are not equally effective for various OPs<sup>1</sup>. It was demonstrated that the chlorine substituent reduce the pKa of the oxime group compared to the non-substituted analogues and result in the higher formation of oximate anion which can be correlated to their increased reactivation ability<sup>2</sup>. In this work, the synthesis and thorough evaluation of fluorinated and chlorinated oximes is presented. Firstly, their stability and oximate forming properties (pKa) were determined. Further, the evaluation comprised testing for affinity for human recombinant AChE and human purified plasmatic BChE, the oxime's efficacy in reactivation of sarin-, cyclosarin-, VX-, tabun-inhibited AChE or BChE. Finally, the antidotal potential of the lead halogenated oxime was tested in mice exposed to sarin and cyclosarin<sup>3</sup>.

*This work was supported by Czech Science Foundation (No. GA21-03000S).*

## REFERENCES

1. Gorecki L., Korabecny J., Musilek K., Malinak D., et al.: Arch. Toxicol. 90, 2831 (2016).
2. Zorbaz T., Malinak D., Marakovic N., Macek Hrvat N., et al.: J. Med. Chem. 61, 10753 (2018).
3. Zorbaz T., Malinak D., Hofmanova T., Marakovic N., et al.: Eur. J. Med. Chem. 238, 114377 (2022).

## 4P-11

**IN VITRO EVALUATION OF BODIPY LABELED BISQUATERNARY AMONIUM SALTS USED AS REACTIVATORS OF INHIBITED ACETYLCHOLINESTERASE****ELISKA PRCHALOVA<sup>a</sup>, DAVID MALINAK<sup>a,b</sup>, JANA SVOBODOVA<sup>a</sup>, LUKAS FRESSER<sup>a</sup>, RUDOLF ANDRYS<sup>a</sup>, ZBYNEK HEGER<sup>c</sup>, KAMIL MUSILEK<sup>a,b</sup>**<sup>a</sup> University of Hradec Kralove, Faculty of Science, Rokitanskeho 62, 500 03 Hradec Kralove, <sup>b</sup> University Hospital in Hradec Kralove, Biomedical Research Center, Sokolska 581, 500 05 Hradec Kralove, <sup>c</sup> Mendel University in Brno, Department of Chemistry and Biochemistry, Zemedelska 1, 613 00 Brno, Czech Republic  
eliska.prchalova@uhk.cz

Oxime reactivators are causal antidotes commonly used against organophosphate (OP) poisoning. Although OPs are utilized in agriculture as pesticides, they can be misused by terrorist groups as nerve agents (NA). These compounds are fast acting inhibitors of human acetylcholinesterase (AChE) causing cholinergic crisis ultimately leading to death by respiratory failure. Treatment of OP intoxication consists of immediate administration of symptomatic drugs, namely, atropine and diazepam and antidotes in form of oxime reactivators of AChE. Undoubtedly commercially used reactivators are the best countermeasure for OP intoxications so far, however they have several downsides. First of all, there is no broad-spectrum reactivator effective against all NAs, secondly they cannot reactivate “aged” form of AChE and lastly they poorly cross the blood-brain barrier (BBB) due to low lipophilicity<sup>1</sup>. For instance, widely used reactivator 2-PAM crosses the BBB approximately from only 10% (ref.<sup>2</sup>). However, most of the techniques used for measuring the concentration of reactivator crossing BBB are relying on HPLC combined with MS or UV detector. BODIPY probe could be great alternative as it is a strongly fluorescing probe standardly used for imaging techniques *in vitro*<sup>3</sup>. The aim of this work is *in vitro* evaluation and analysis of physicochemical properties of BODIPY labeled oxime reactivators of AChE.

This work was supported by the Czech Science Foundation (No. GA22-14568S) and the University of Hradec Kralove (No. SV2102-2022).

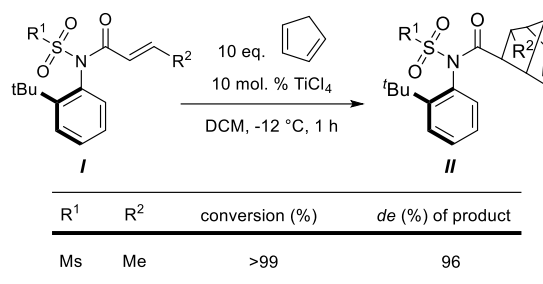
## REFERENCES

- Gorecki L., Soukup O., Kucera T., Malinak D., Jun D., Kuca K., Musilek K., Korabecny J.: Arch. Toxicol. 93, 673 (2019).
- Sakurada K., Matsubara K., Shimizu K., Shiono H., Seto Y., Tsuge K., Yoshino M., Sakai I., Mukoyama H., Taketori T.: Neurochem. Res. 28, 673 (2003).
- Loudet A., Burgess K.: Chem. Rev. 107, 4891 (2007).

## 4P-12

**A PRELIMINARY STUDY OF ASYMMETRIC DIELS-ALDER REACTION WITH AXIALLY CHIRAL AMIDES****RADOSLAV SOKOL, LUKÁŠ JEDINÁK, PETR CANKAŘ**Katedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého, tř. 17. listopadu 1182/12, 779 00 Olomouc  
radoslav.sokol01@upol.cz

Axially chiral anilides can be easily prepared by acylation of *N*-sulfonyl anilide with carboxylic anhydride in the presence of a chiral isothioureia catalyst. The method provided anilides with high atroposelectivity. The anilides can be used as a chiral auxiliary to synthesize chiral carboxylic acids, carbonyl compounds, or alcohols. High diastereoselective Lewis acid mediated asymmetric Diels-Alder reaction was carried out with various dienes in DCM already at temperatures close to 0 °C.



Scheme 1. Diels-Alder cycloaddition of axially chiral anilides with cyclopentadiene

TiCl<sub>4</sub> and SnCl<sub>4</sub> were found to be suitable Lewis acids. When 10 mol.% of TiCl<sub>4</sub> was used, the reaction provided product with high yield and diastereoselectivity. Various anilide derivatives were tried. The best result were achieved in case of R<sup>1</sup> = Ms, R<sup>2</sup> = H or Me.

## REFERENCES

- Ward D. E., Gai Y.: Tetrahedron Lett. 33, 14 (1992).
- Kitagawa O., Izawa H., Dobashi A., Taguchi T.: J. Org. Chem. 63 (1998).
- Dawei L., Sijing W., Shulin G., Shunxi D., Xiaoming F.: Org. Lett. 22, 14 (2020).

#### 4P-13 REGIOSELEKTIVNÍ SUBSTITUCE PURINOVÝCH DERIVÁTŮ V POLOZE N<sup>7</sup> TERCIÁRNÍMI ZBYTKY

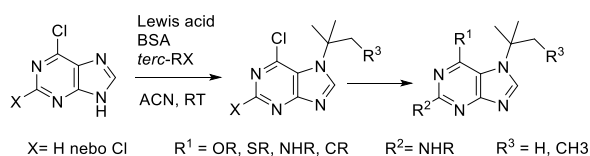
**JAKUB STÝSKALA, FILIP NEVRLKA, LENKA  
TRANOVA**

*Katedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta UP  
Olomouc, 17. listopadu 12, CZ-779 00 Olomouc  
jakub.styskala@upol.cz*

Purin je heterocyklická sloučenina, která se nejčastěji vyskytuje v přírodě a často je součástí celé řady přírodních a syntetických sloučenin s prokázanými biologickými vlastnostmi.

Začátky chemické modifikace purinového skeletu sahají hluboko do minulého století a jsou neustále spojeny s hledáním nových cest umožňující přípravu dalších sloučenin s potenciální biologickou aktivitou. Z tohoto pohledu jsou například velice zajímavé 2,6,9-trisubstituované puriny jako olomoucín, roskovitin, bohemín nebo purvalanol-A mající silný inhibiční účinek na CDK<sup>1</sup>. Na druhou stranu 2,6,7-trisubstituované analoga jsou málo známé.

Existuje několik metod umožňující substituovat polohu N<sup>7</sup>. Metody jsou ale buď neselektivní anebo umožňují regioselektivně zavést pouze jednodušší primární či sekundární substituenty<sup>2,3</sup>. My jsme vyvinuli zcela nový přístup umožňující na principu silylační metody a vhodné Lewisovy kyseliny regioselektivně zavést do polohy N<sup>7</sup> purinového skeletu doposud nepopsané terciární zbytky, které zmíněnými metodami nešlo zavést. Tato metoda byla vyvinuta pro purinové chloro prekurzory, které pak substitučními reakcemi poskytují příslušná analoga výše popsaných sloučenin.



*Tato práce vznikla za podpory GAČR (21-06553S) a vnitřního grantu UP (IGA\_PřF\_2022\_022).*

#### LITERATURA

- Havlíček L., Hanuš J., Veselý J., Leclerc S., Meijer L., Shaw G., Strnad M.: *J. Med. Chem.* **40**, 408 (1997).
- Kotek V., Chudíková N., Tobrman T., Dvořák D.: *Org. Lett.* **12**, 5724, (2010).
- Chen S., Graceffa R. F., Boezio A. A.: *Org. Lett.* **18**, 16 (2016).

#### 4P-14 DE NOVO SYNTÉZA HETEROARYL SULFONAMIDŮ

**NIKOLA ŠTASTNÁ<sup>a</sup>, FRANTIŠEK ZÁLEŠÁK<sup>a</sup>, JIŘÍ  
POSPÍŠIL<sup>a,b,c</sup>**

*<sup>a</sup> Katedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. Listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc, <sup>b</sup> Katedra chemické biologie Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, <sup>c</sup> Laboratoř růstových regulátorů, Univerzita Palackého v Olomouci a Institut experimentální botaniky AS CR, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc  
nikisek.stastna@seznam.cz*

Sloučeniny obsahující sulfonamidickou funkční skupinu vykazují širokou škálu biologických aktivit. Chemie sulfonamidů, a tedy sulfonamidů obecně, tedy hraje důležitou roli při medicíně výzkumu a přípravě nových sloučenin se zajímavými biologickými vlastnostmi. Výhodou sulfonamidů je, že jsou značně inertní a lze je tedy využít při designu nových medicínálních skeletů a building bloků. Zajímavé je, že v literatuře existuje mnoho možností jak připravit velkou škálu alkyl a aryl sulfonamidů<sup>1</sup>. Naopak, reporty jež popisují přípravu heteroarylsulfonamidů jsou velmi ojedinělé a až do nedávna neexistovala žádná syntetická cesta jež by v obecné rovině umožňovala jejich přípravu.

V našem příspěvku budeme diskutovat obecný přístup k této skupině látek jež je založena (a) na reakcích heteroaryl thiolů a odpovídajících aminů, anebo (b) na reakci heteroarylsulfon fluoridů s aminy ze SuFEx protokolu<sup>2</sup>.

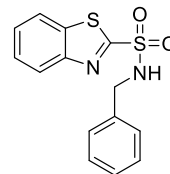


Schéma 1. Struktura benzothiazolsulfonamidu

*Tato práce vznikla za podpory grantu Interní Grantové Agentury Univerzity Palackého v Olomouci (grant IGA\_PřF\_2022\_022).*

#### LITERATURA

- Oudah K. H., Najm M. A. A., Roomi A. B., Al-Sa'idi H. A., Awadallah F. M.: *Syst. Rev. Pharm.* **11**, 1473 (2020).
- Dong J., Krasnova L., Finn M. G., Barry Sharpless K. J.: *Org. Chem.* **53**, 9430 (2014).

#### 4P-15 SYNTEZA PŘÍRODNÍCH FYTOSLOUČENIN PATŘÍCÍCH DO RODINY COUMESTANŮ

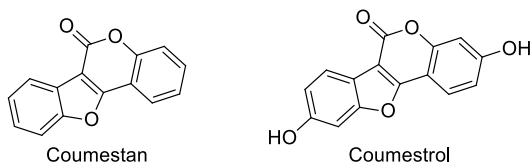
**DENISA VYSLOUŽILOVÁ<sup>a</sup>, JIŘÍ POSPÍŠIL<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> Katedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. Listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc, <sup>b</sup> Katedra chemické biologie Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc vyslde01@upol.cz

Sekundární rostlinné metabolity fenolického typu s fenylpropanoidovým skeletem jsou všudypřítomné v rostlinné říši. Ze strukturálního hlediska do této skupiny patří jak monolignoly (fenylpropanoidové monomery), tak jejich dimery (lignany a neolignany), oligomery, tak polymery (lignin). Fenylpropanoidové monomery jsou tvořeny v Šikimátové dráze a jejich následnou radikálovou dimerizací<sup>1</sup> vznikají následné dimery. Tyto dimery pak v rostlinách podléhají dalším oxido-redukčním reakcím, substitučním reakcím atp. a generují celou škálu dimerů, tzv. lignanů a neolignanů.

Coumestany (obr. 1) strukturálně patří do skupiny fenylpropanoidových dimerů neolignanového typu s benzofuranovým skeletem<sup>2</sup>. Tyto látky nejsou pouze zajímavé svým polykondenzovaným tetracyklickým skeletem, ale hlavně svými biologickými vlastnostmi. Vykazují nejenom zajímavé antibakteriální, antifungální a antitumorální vlastnosti, ale zejména jsou známé pro své estrogenní vlastnosti<sup>1,3</sup>.

V naší výzkumné skupině se již delší dobu zabýváme cílenou syntézou vybraných lignanů a neolignanů<sup>4</sup>. V tomto příspěvku bychom rádi popsali náš konvergentní přístup ke coumestanům, který vychází z derivátů 2-hydroxysalicylaldehydu a je založený na kaskádě tří syntetických kroků (migraci arylu, Suzukioho couplingu a intramolekulární cyklizaci).



Obr 1. Struktura coumestanů – coumestan a coumestrol

Tato práce vznikla za podpory IGA\_PrF\_2022\_024.

#### LITERATURA

- Zálešák F., Bon D. J.-Y. D., Pospíšil J.: *Pharmacol. Res.* **146**, 104284 (2019).
- Ososki A. L., Kennelly E. J.: *Phyther. Res.* **17** (8), 845 (2003).
- Kurzer M. S., Xu X.: *Annu. Rev. Nutr.* **17** (1), 353 (1997).
- Barbušáková Z., Kozubíková H., Zálešák F., Doležal K., Pospíšil J.: *Monatshefte für Chemie - Chem. Mon.* **149** (4), 737 (2018).

#### 4P-16 SYNTEZA 2,3-DISUBSTITUOVANÝCH CHINOLIN-4- KARBONITRILŮ POMOCÍ TRUCE-SMILE PŘESMYKU FENACYL-4- NITROBENZENSULFONAMIDŮ

**PETRA KRÁLOVÁ<sup>a</sup>, KATEŘINA ŽÁKOVÁ<sup>a</sup>, LENKA  
POSPÍŠILOVÁ<sup>a</sup>, MIROSLAV SOURAL<sup>\*a,b</sup>**

<sup>a</sup> Katedra Organické Chemie Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého, 17. listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc, <sup>b</sup> Ústav molekulární a translační medicíny Lékařské fakulty Univerzity Palackého, Hněvotínská 5, 779 00 Olomouc katerina.zakova02@upol.cz

2/4-nitrobenzensulfonamidy představují klíčové výchozí intermediáty v organické syntéze. V posledních letech byla studována aplikace jejich alifatických analogů, jež snadno podléhají C-arylaci, probíhající prostřednictvím Truce-Smiles přesmyku<sup>1</sup>. Tento výzkum přináší rozšíření dříve studovaných metodik pro C-arylaci o aromatickou řadu N-(2-(kyanomethyl) fenyl)benzensulfonamidů **2**, jež nebyly doposud zkoumány. Studovaná reakce klíčové sloučeniny **2** s 2-bromacetofenonem v bazickém prostředí navazuje na předchozí výzkum<sup>2</sup> a umožňuje jednoduše a rychle v jednom kroku připravit žádané 2,3-diarylchinoliny-4-karbonitrily **5a**<sup>3</sup>. Sloučeniny s tímto strukturálním motivem jsou zřídka studovány a mohou dosahovat rozmanitých biologických vlastností jako například antibakteriálních<sup>4</sup> nebo antituberkulotických<sup>5</sup> účinků.

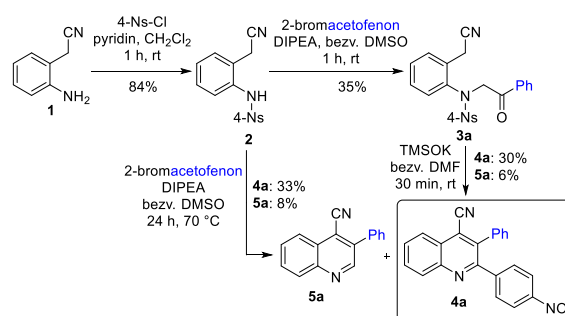


Schéma 1. Syntéza chinolinů **4a** a **5a** pomocí Truce-Smiles přesmyku

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR (projekt 21-06553S) a vnitřního grantu ÚPOL IGA\_PrF\_2022\_022.

#### LITERATURA

- Smyslová P., Kisseljova K., Krchňák V.: *ACS Comb. Sci.* **16** (9), 500 (2014)
- Lemrova B., Maloň M., Soural M.: *Org. Biomol. Chem.* **20**, 3811 (2022).
- Králová P., Žáková K., Pospíšilová L., Soural M.: *Eur. J. Org. Chem.* (2022) v tisku.
- Saeed A. E. M., Elhadi S. A.: *Synt. Commun.* **41** (10), 1435 (2011).
- Bose P., Harit A. K., Das R., Sau S., Iyer A. K., Kashaw S. K.: *Tuberculosis: Current Scenario, Med. Chem. Res.* **30** (4), 807 (2021).

### 5L-01 THEORETICAL DFT-D3 STUDY OF INTERACTIONS BETWEEN MONTMORILLONITE CLAY AND DIFFERENT POLYMERS

**SANAM BASHIR, PETER ŠKORŇA,  
EVA SCHOLTZOVÁ**

*Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of  
Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovakia  
uachsnam@savba.sk*

In the last decade, advanced hybrid materials based on polymer and clay minerals have been widely studied and used in research. Different types of clay minerals, e.g., smectites, are considered promising nanofillers to improve the mechanical properties of the polymers<sup>1</sup>.

The layered structures of smectites, such as montmorillonite (Mt) and/or beidellite (Bd), consist of tetrahedral (T) and octahedral (O) sheets. The possible isomorphous substitution in the tetrahedral sheets by trivalent ions (e.g., Al<sup>3+</sup>/Si<sup>4+</sup>) and/or divalent ions in octahedral sheets (e.g., Fe<sup>2+</sup>, Mg<sup>2+</sup>/Al<sup>3+</sup>) generates a negative layered charge. It is compensated by the interlayer cations, e.g., Ca<sup>2+</sup>, Na<sup>+</sup>, Li<sup>+</sup>. The exchangeability of the interlayer cations, low cost, and abundance of the montmorillonite are key factors for using it as a potential filler for clay-polymer hybrids<sup>2</sup>.

In the presented work, a detailed study of the structural stability of proposed models *via* intercalation energies and hydrogen bonds interactions between montmorillonite and polymers were performed by the computed DFT-D3 method<sup>3</sup>. The Perdew, Burke, and Ernzerhof (PBE) functional based on the generalized gradient approximation (GGA) theory was used for the description of the exchange-correlation energy. The structural models of the hybrid structures of montmorillonite and pentaethylenimine, Mt-PEI, and Mt with poly(2-methyl-2-oxazoline), Mt-PMOx were examined.

The structural stability of the hybrid structures based on the montmorillonite and two different polymers (PEI and PMOx) was compared.

*This work was supported by grants from Scientific Grant Agency (project No. VEGA 02/0021/19) and Slovak Research and Development Agency (projects No. APVV-18-0075, APVV-19-0487).*

#### REFERENCES

1. Teepakakorn A, Ogawa M.: Appl. Clay Sci. 222, 106487 (2022).
2. Jawaid M., Chee S. S., Asim M., Saba N., Kalia S.: J. Clean Prod. 330, 129938 (2022).
3. Grimme S., Antony J., Ehrlich S., Krieg H.: J. Chem. Phys. 132, 154104 (2010).

### 5L-02 INTERACTION OF SMALL MOLECULES WITH BIOLOGICAL MEMBRANES

**KATEŘINA STORCHMANNOVÁ, JAKUB JURAČKA,  
DOMINIK MARTINÁT, MARTIN ŠREJBER, VÁCLAV  
BAZGIER, KAREL BERKA\***

*Department of Physical Chemistry, Faculty of Science,  
Palacký University in Olomouc, 17. listopadu 12, 771 46  
Olomouc  
karel.berka@upol.cz*

Biological membranes represent one of the main barriers for drug transport and its accessibility to the molecular target. Therefore, interactions of small molecules with biological membranes play a key role in the pharmacokinetics of xenobiotics and drug delivery. Unfortunately, data on membrane interactions of small molecules and drugs are reported in the literature in different formats and quality, which effectively hinders the development of this field. For this reason, we created the MolMeDB<sup>1</sup> as an open database on (small) molecule membrane interactions (<https://molmedb.upol.cz>). MolMeDB currently contains data from 1471 publications and our own calculations, including more than 950,000 interactions of 450,000 molecules. MolMeDB covers 52 methods and 40 membranes and also contains more than 25,800 interactions with more than 200 protein transporters mainly from the ABC and SLC transporter families, sodium, potassium and calcium channels and ATPases.

The database allows the study of the membrane behaviour of different classes of compounds, the influence of functional groups on the permeability and partition coefficients of small molecules, and, by coupling with computational methods, can guide applications such as the liposomal formulation of different types of active pharmaceutical ingredients (APIs). In our recent work<sup>2</sup>, we defined the regions of applicability of APIs for liposomal formulations according to their partition and permeability coefficients for a given membrane. Unfortunately, it has been shown that most APIs are not suitable for formulation in liposomes per se. There are three possible solutions to this problem: (I) changing the liposome composition, (II) adding a permeation enhancing agent, and (III) a small modification of the API structure. In our current work, we investigate the possibility of modifying APIs on hydrophilic and lipophilic model substances for possible liposomal formulations.

*This work was supported by the Palacký University in Olomouc (project IGA\_PrF\_2022\_019 and subproject DSGC-2021-0060 within OP VVV CZ.02.2.69/0.0/0.0/19\_073/0016713) and ELIXIR-CZ infrastructure (MŠMT project LM2018131).*

#### REFERENCES

1. Juračka J., Šrejber M., Melíková M., Bazgier V., Berka K.: Database 2019 (2019).
2. Balouch M.; Šrejber M., Šoltys M., Janská P., Štěpánek F., Berka K.: Mol. Sys. Des. Eng. 6 (5), 368 (2021).

**5L-03****METODY ZÍSKÁVÁNÍ NANOČÁSTIC OXIDU ŽELEZNATO-ŽELEZITÉHO O RŮZNÉ MORFOLOGII****ARKADII BIKBASHEV, MARTINA KUBÍKOVÁ, TOMÁŠ STRYŠOVSKÝ, LIBOR KVÍTEK***Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc  
arkadii.bikbashev01@upol.cz*

Oxid železnato-železitý (magnetit) je slibný katalyzátorem pro různé reakce, ale především pro aktuálně nejzajímavější aplikaci v modifikované reakci průmyslové výroby uhlovodíků z CO podle Fisher-Tropsche – hydrogenace oxidu uhličitého jako jedna z alternativ uhlíkové neutrální energetiky 21. století<sup>1</sup>.

V závislosti na složení oxidů železa (či jiných sloučenin jako jsou např. karbidy), rovněž tak na velikosti nanočástic a jejich morfologii lze získat různé produkty hydrogenační reakce – od jednoduchých nasycených uhlovodíků přes aromáty až po alkoholy i jiné typy kyslíkatých derivátů uhlovodíků<sup>2</sup>.

Existuje obrovské množství reakcí na získání nanočástic oxidů železa, jako jsou metody sonochemické, solvotermální či oxidační procesy v pevné i kapalně fázi, které jsou pro přípravu těchto katalyzátorů obzvláště oblíbené.

Sonochemické metody umožňují získat kulové a kubické nanočástice různých velikostí, zajímavé jsou především nanočástice do 100 nanometrů.

Použitím solvotermálních metod lze připravit ještě více typů nanočástic různých morfologií, především kubických, šestihorných i nanotyčinek. Solvotermální reakce nevyžadují drahé a složité vybavení, což z nich činí atraktivní a populární typ syntézy magnetitu.

Konečně oxidační reakce umožňují také získat nanočástice magnetitu různých velikostí, například krychlové o velikosti až 100 nanometrů, nicméně stojí za to, věnovat zvláštní pozornost stechiometrii výchozích látek, zejména množství oxidantů v reaktivním prostředí.

*Tato práce vznikla za podpory IGA PrF\_2022\_26 Příprava a studium nanomateriálů pro účely jejich využití v oblasti katalytických, spektroskopických, biologických a foto nebo elektrochemických aplikací.*

**LITERATURA**

1. Choi Y. H., Jang Y. J., Park H., Kim W. Y., Lee Y. H., Choi S. H., Lee J. S.: *Appl. Catal. B* 202, 605 (2017).
2. Aitbekova A., Goodman E. D., Wu L., Boubnov A., Hoffman A. S., Genc A., Cheng H., Casalena L., Bare S. R., Cargnello M.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 58, 17451 (2019).

**5L-04****METHACRYLATED GELATIN/ALGINATE-BASED BIOINK PRECURSORS FOR 3D BIOPRINTING****PAVLA HÁJOVSKÁ<sup>a,c,\*</sup>, ABOLFAZL HEYDARI<sup>b,c</sup>, VIERA JANČOVIČOVÁ<sup>a</sup>, IGOR LACÍK<sup>b,c</sup>**

*<sup>a</sup> Faculty of chemical and food technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, <sup>b</sup> Polymer Institute SAS, v.v.i., Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, <sup>c</sup> National Institute of Rheumatic Diseases, Nábežie. I. Krasku 4782/4, 921 12 Piešťany  
pavla.hajovska@stuba.sk*

Three-dimensional (3D) bioprinting is an emerging field that arose as an extension to traditional tissue engineering techniques. It allows precise placement of various materials or cell types simultaneously, layer-by-layer, in order to create bioengineered 3D constructs for regenerative medicine or other biological and/or medical applications<sup>1,2</sup>.

Although various biomaterials have been developed for use in tissue engineering and/or regenerative medicine, significant majority of these materials is not suitable for use as a bioink in 3D bioprinting<sup>1</sup>. The development of a bioink therefore represents a crucial part of the bioprinting process and it represents an objective of many ongoing studies. Combining two or more polymers in a single composite material can lead to advanced multicomponent systems potentially possessing advantageous characteristics of each polymer component<sup>3</sup>.

In our work, we focused on the bioink precursors based on the combination of methacrylated gelatin, capable of photocrosslinking, with sodium alginate, well known for its ability to crosslink in the presence of divalent cations. The impact of various factors on the bioink properties were investigated, such as the component concentration and their ratio, alginate molar mass, solvent composition, the presence of photoinitiator, in order to achieve suitable conditions with respect to both the printability and future incorporation of cells of interest using the extrusion-based bioprinter.

*This work is the result of the project implementation CEMBAM – Center for Medical Bioadditive Research and Production, ITMS2014+: 313011V358 supported by the Operational Programme Integrated Infrastructure funded by the European Regional Development Fund.*

**REFERENCES**

1. I. T. Ozbolat, 3D Bioprinting: Fundamentals, Principles and Applications, Elsevier Inc. (2016).
2. C. K. Chua, W. Y. Yeong, Bioprinting, World Scientific, (2015).
3. R. Kadri, K. Elkhoury, G. Ben Messaoud, C. Kahn, A. Tamayol, J. F. Mano, E. Arab-Tehrany, L. Sánchez-González, Physicochemical interactions in nanofunctionalized alginate/gelMA IPN hydrogels, *Nanomaterials*. 11 (2021) 2256.

**5L-05****PŘÍPRAVA TENKÝCH VRSTEV SYSTÉMU As-S-Se METODOU SPIN-COATING Z ROZTOKU CHALKOGENIDOVÉHO SKLA As<sub>2</sub>S<sub>3</sub> DOPOVANÉHO ELEMENTÁRNÍM Se****JIRÍ JEMELKA<sup>a</sup>, KAREL PÁLKA<sup>a</sup>, JIRÍ JANČÁLEK<sup>b</sup>, MIČHAL KURKA<sup>b</sup>, STANISLAV ŠLANG<sup>b</sup>, MIROSLAV VLČEK<sup>b</sup>**<sup>a</sup> *Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice,*  
<sup>b</sup> *Centrum materiálů a nanotechnologií, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice, Česká republika*  
jiri.jemelka@student.upce.cz

Chalkogenidová skla jsou dlouhodobě studovanými polovodičovými materiály. Vyznačují se vysokou propustností v IČ spektru a vysokým indexem lomu<sup>1</sup>.

Pro většinu aplikací je vhodné připravit tenké vrstvy těchto materiálů. Obvykle se tyto tenké vrstvy připravují fyzikálními metodami například vakuovým napařováním nebo naprašováním. Levnější alternativou je příprava vrstev chemickou cestou z roztoků, nejčastěji metodou spin-coating. Výhodou těchto metod je možnost úpravy složení tenké vrstvy změnou složení výchozího roztoku. Nevýhodou je zanesení organických residuí do struktury skla, jejich obsah je však možné výrazně omezit následnou temperací tenké vrstvy<sup>1,2</sup>.

Tato práce se zabývá přípravou tenkých vrstev ternárního systému As-S-Se z roztoku komerčně dostupného chalkogenidového skla As<sub>2</sub>S<sub>3</sub> přidávkem elementárního selenu za účelem cílené modifikace optických a chemických vlastností tenkých vrstev deponovaných metodou spin-coating. Rozpustnost selenu je výrazně ovlivněna jeho krystalografickou modifikací<sup>3</sup>. Amorfni modifikace Se je rozpustná v roztocích chalkogenidových skel systému As-S. To umožňuje připravit tenké vrstvy různých složení z jednoho výchozího roztoku, případně připravit tenké vrstvy se zvolenými parametry.

Byly studovány optické vlastnosti, struktura a chemická odolnost deponovaných tenkých vrstev v závislosti na obsahu Se a teplotní historii připravených vzorků.

*Autoři této práce děkují za finanční podporu z projektů „Senzory s vysokou citlivostí a materiály s nízkou hustotou na bázi polymerních nanokompozitů“ NANOMAT (CZ.02.1.01/0.0/0.0/17\_048/0007376), LM2018103 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR a internímu grantu Univerzity Pardubice SGS2022\_006.*

**LITERATURA**

1. S. Song, J. Dua, C. B. Arnold: *Opt. Express* 18, 5472 (2010).
2. J. Orava, T. Kohoutek, T. Wagner: Woodhead Publishing, Cambridge, UK, 265 (2014).
3. D. H. Webber, J. J. Buckley, P. D. Antunez, R. L. Brutchey: *Chem. Science* 5(6) 2498 (2014).

**5L-06****MĚŘENÍ POVRCHOVÉHO A MEZIFÁZOVÉHO NAPĚTÍ VISKÓZNÍCH MATERIÁLŮ: METODA VISÍCÍ KAPKY A RELAXACE TVARU****JOSEF JÚZA, MARTINA NEVORALOVÁ, DANUŠE MIČHALKOVÁ, ZDENĚK STARÝ***Ústav makromolekulární chemie AVČR, v.v.i., Heyrovského náměstí 2, 162 00 Praha 6*  
juza@imc.cas.cz

Metoda visící kapky pro měření povrchového a mezifázového napětí (1938 Andreas et al.<sup>1</sup>) je uváděna jako vhodná i pro viskózní kapaliny<sup>2,3</sup>. Pracuje s rovnovážným tvarem kapky, k jehož dosažení dochází pomaleji než v řádu sekund u materiálů o viskozitě v desítkách Pa.s a vyšších. Relaxaci pro elipsoidní kapky viskózních materiálů matematicky popsal Luciani et al.<sup>4</sup> Jejich rovnice využívá metoda anglicky zvaná *Deformed drop retraction method*. Popis průběhu relaxace visící kapky nebyl v literatuře nalezen. Proto jsme se v nedávných pracích<sup>5,6</sup> pokusili na vzorcích velmi viskózního silikonového oleje o aproximaci rovnicemi pro elipsoidní kapky. Ověřili jsme použitelnost vzorce ke stanovení povrchového napětí z průběhu relaxace elipsoidu pro visící kapku. Výsledná hodnota byla několikanásobně vyšší než očekávaná<sup>3</sup>. K významnému zpřesnění výsledku by mohlo vést použití empirických parametrů spolu s příslušnou kalibrací. Dále byl extrapolací získán rovnovážný tvar kapky, jemuž se kapka reálně dostatečně přiblíží až po dlouhém čase. Tato práce vychází z měření viskozit a vývoje tvaru visící kapky při různých teplotách na taveninách několika technických polyethylenů, polypropylenů a polystyrenů za účelem ověření poznatků z měření silikonového oleje. Problémem se zde ukázala podmínka válcové souměrnosti soustavy: technické polymery často dlouho zaujímají tvar zkroucených vláken a jiných asymetrických tvarů, na něž nelze dané rovnice uplatnit. Dosavadní měření a výpočty ukazují potřebu brát v úvahu dobu relaxace tvaru kapky. Nalezené rovnice jsou použitelné, ale oproti optimistickým předpokladům jen v omezené míře.

**LITERATURA**

1. Andreas J. M., Hauser E. A., Tucker W. B.: *J. Phys. Chem.* 42, 1001 (1938).
2. Padday J. F., in: *Surface and Colloid Science*, Volume 1; E. Matijević, Ed.; Wiley-Interscience 1969, pp. 39–260. ISBN 0-471-57630-1
3. Wu S., in: *Polymer Interface and Adhesion*, M. Dekker, 1982. ISBN 0-8247-1533-0
4. Luciani A., Champagne M. F., Utracki L. A.: *J. Polym. Sci. Phys. Ed.* 35, 1393 (1997).
5. Jůza J.: *Macromolecular Symposia* 384, 1800150 (2019).
6. Jůza J.: *AIP Conf. Proc.* 2107, 050009-1 (2019).

**5L-07**  
**PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF SELECTED**  
**IMIDAZOLIUM CHLORIDE IONIC LIQUIDS IN**  
**TETRAETHYLENE GLYCOL**

**ZDZISŁAW KINART<sup>a</sup>, RENATO TOMAŠ<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Faculty of Chemistry, University of Lodz, 90-236 Lodz, Pomorska 163/165, Poland, <sup>b</sup> Faculty of Chemistry and Technology, University of Split, Ruđera Boškovića 35, HR-21000 Split, Croatia  
 zdzislaw.kinart@chemia.uni.lodz.pl

The obtained results of conductivity were analyzed with the use of new modified conductivity models in order to determine the value of the ion association constant and the limiting molar conductivity. The results were analyzed in a wide range of temperatures. Based on the dependence of limiting molar conductivity as a function of temperature, the values of the diffusion coefficient and the thermodynamic function of the Eyring activation enthalpy of charge transfer were determined

Using the following dependencies:

$$\begin{aligned}\Delta G^\circ(T) &= -R T \ln K_A(T) \\ \Delta S^\circ(T) &= -B - 2 \cdot C \cdot T \\ \Delta H^\circ &= \Delta G^\circ + T \Delta S^\circ\end{aligned}$$

and the values of the association constants which were determined from conductivity measurements at different temperatures the values of thermodynamic parameters such as Gibbs free energy, entropy and enthalpy of ion pair formation were estimated.

The obtained conductometric results made it possible to compare the changes in the limiting molar conductivity in different glycols as a function of temperature changes. These data also allowed for the comparison of the influence of the properties and structure of various glycols on the values of the discussed thermodynamic functions.

**REFERENCES**

1. Tomaš R., Kinart Z., Tot A., Papović S., Borović T. T., Vraneš M.: *J. Mol. Liq.* 345, 118178 (2022).
2. Tomaš R.: *Croat. Chem. Acta* 94, 1 (2021).

**5L-08**  
**PRÍPRAVA A CHARAKTERIZACE**  
**NANOŠTRUKTUROVANÝCH POVRCHŮ PRO**  
**RŮZNÉ APLIKACE**

**ZDEŇKA KOLSKÁ<sup>a</sup>, SIMONA LUPÍNKOVÁ<sup>a</sup>,**  
**VÁCLAV ŠVORČÍK<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> CENAB, PřF, Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem, Pasteurova 15, 400 96 Ústí nad Labem, <sup>b</sup> ÚIPL, FCHT, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 3, 166 28 Praha  
 zdenka.kolska@ujep.cz

Byly připraveny nanostrukturované povrchy různých materiálů pro různé aplikace. Povrchy substrátů byly nejprve aktivovány a následně roubovány chemickými sloučeninami s cílem buď připravit povrchy pro lepší adhezi buněk či naopak antimikrobiální povrchy<sup>1-3</sup> nebo následně roubovat na povrchy částice síry<sup>4</sup> nebo oxidů železa<sup>5</sup>.

Byly studovány: (i) různé substráty, zejména různé typy polymerů, skla, silikáty, (ii) různé metody aktivace povrchů substrátů, fyzikální (plazma, UV záření, laserová ablace), chemické (Piranha roztoky a/nebo následná roubování různých chemických látek (cysteamin, oktenidin, aminokyseliny, thiooly, boranové klastry, ...); (iii) různé metody syntézy částic síry a oxidů železa; (iv) různá činidla pro stabilizaci částic; (v) různá činidla pro roubování připravených částic na aktivované a chemicky modifikované povrchy substrátů.

Povrchové vlastnosti byly charakterizovány dostupnými technikami: XPS, goniometricky, elektrokinetickou analýzou; goniometricky pro studium smáčivosti; AFM a SEM pro zjištění změn drsnosti a morfologie povrchu, velikosti klastrů částic naroubovaných na povrchu substrátu; pro stanovení velikosti povrchu a porozity materiálů; sorpce CO<sub>2</sub>; DLS analýzou byly studovány velikosti a zeta potenciál testovaných částic.

Všechny použité techniky prokázaly (i) úspěšnou aktivaci povrchů polymerů, (ii) následné chemické roubování povrchů materiálů, (iii) imobilizaci testovaných částic síry a železa, (iv) antibakteriální chování některých testovaných povrchů

*Tato práce vznikla za podpory GAČR projektu č. 20-01639S.*

**LITERATURA**

1. Benkocká M., Lupínková S., Knapová T., Svorcik V., Matousek J., Kolska Z.: *Mater. Sci. Eng. C-Mater.* 96, 479 (2019).
2. Benkocká M., Herma R., Lupínková S., Slepíčka P., Švorčík V., Kolská Z.: *Surf Interface Anal.* 54, 1 (2022).
3. Neubertová V., Slepíčková Kasálková N., Vokatá B., Bačáková L., Švorčík V., Kolská Z.: *Cellulose* 29, 1405 (2022).
4. Lupínková S, Kaimlová M, Kormunda M, Kolská Z.: *Surf. Interface Anal.* 53, 108 (2021).
5. Lupínková S., Benkocká M., Ryšánek P., Kolská Z.: *Polym Eng Sci.* 62, 1463 (2022).



**5L-09**  
**TEORETICKÉ STUDIUM RENTGENOVÉ**  
**FOTOLEKTRONOVÉ SPEKTROSKOPIE 2D**  
**MATERIÁLŮ**

**RADIM MACH<sup>a,b</sup>, PETR LAZAR<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, <sup>b</sup> Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Czech Advanced Technology and Research Institute (CATRIN), Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 27, 779 00 Olomouc  
 radim.mach01@upol.cz

Rentgenová fotoelektronová spektroskopie (XPS) je klíčovou technikou pro chemickou analýzu povrchů a nanomateriálů. XPS umožňuje kromě kvalitativní a kvantitativní analýzy zastoupení chemických prvků také rozlišovat jejich oxidační stavy a poskytovat informace o chemickém okolí jednotlivých atomů. Při interpretaci XPS spekter se vychází z hodnot vazebných energií vnitřních elektronů (BE) pro jednotlivé prvky, které je možné najít v databázích. Nicméně tyto hodnoty mohou být nedostačující pro nové nanomateriály jako jsou deriváty grafenu. Navíc hodnoty BE mohou být ovlivněny přítomností defektů, povrchovou kontaminací materiálu a substrátem na kterém probíhalo měření, což znesnadňuje správné přiřazení. Proto je výhodné znát hodnoty BE pro prvky vyskytující se v těchto materiálech za přesně daných podmínek<sup>1</sup>.

Tato přednáška je zaměřena na kvantově chemické výpočty hodnot vazebných energií 2D materiálu na bázi derivátů grafenu. Nejprve budou diskutovány metody výpočtů BE pro molekuly a periodické nanomateriály. Následně se zaměříme na výpočet BE pro jednotlivé prvky obsažené v kyslíkatých a dusíkatých derivátech grafenu a v N-dopovaném grafenu<sup>2</sup>. Stanovíme také vliv stupně funkcionalizace na hodnoty BE, abychom posoudili, zda lze určit míru funkcionalizace z experimentálně změřených XPS spekter. V neposlední řadě byl také zkoumán vliv adsorbovaných molekul vody a jiných rozpouštěděl, které mohou kontaminovat materiál na hodnoty BE. Všechny vypočtené hodnoty jsou porovnávány s dostupnými experimentálními daty.

Tato práce vznikla za podpory IGA\_PrF\_2022\_019.

LITERATURA

1. Susi T., Pichler T., Ayala P.: Beilstein J. Nanotechnol. 6, 177 (2015).
2. Lazar P., Mach R., Otyepka M.: J. Phys. Chem. C 123 (16), 10695 (2019).

**5L-10**  
**ROUBOVÁNÍ STŘÍBRNÝCH NANOKULIČEK A**  
**NANODESTIČEK NA PLAZMATEM OŠETŘENÝ PET:**  
**VLIV TVARU NANOČÁSTIC NA ANTIBAKTERIÁLNÍ**  
**AKTIVITU**

**ALENA ŘEZNÍČKOVÁ<sup>a,\*</sup>, HOANG YEN**  
**NGUYENOVA<sup>a</sup>, VERONIKA LACMANOVA<sup>a</sup>, ALENA**  
**MICHALCOVÁ<sup>b</sup>, FILIP PRŮŠA<sup>b</sup>, ANNA KUTOVÁ<sup>a</sup>,**  
**VÁCLAV ŠVORČÍK<sup>a</sup>, PETR SLEPIČKA<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav inženýrství pevných látek, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha, <sup>b</sup> Ústav kovových materiálů a korozního inženýrství, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha  
 reznicka@vscht.cz

K minimalizaci přenosu nozokomiálních infekcí do lidského organismu z lékařských nástrojů či implantátů, se v dnešní době využívá antibakteriální úpravy povrchů<sup>1</sup>. Jedním z účinných způsobů prevence těchto infekcí je použití antimikrobiálně-biokompatibilních polymerů namísto těch běžných<sup>2,3</sup>. Cílem této práce byla příprava antibakteriální povrchů roubováním nanočástic stříbra (Ag NP) na plazmatem aktivovaný polyethylentereftalát (PET) přes mezivrstvu bifeny-4,4'-dithiolu (BPD). Pro zohlednění tvarového faktoru, který může významně ovlivnit antibakteriální vlastnosti Ag NP, byly použity dva různé tvary nanočástic, kulový (Ag0) a trojúhelníkový (Ag3). Průměrná velikost Ag NP stanovená pomocí TEM byla 21,0 nm pro Ag0 a (20,5 x 5,5) nm pro Ag3. S využitím HRTEM byl tvar Ag0 stanoven jako dekaedr a Ag3 jako trojúhelníkové nanoplátky. Úspěšné naroubování Ag NP na PET bylo potvrzeno pomocí metod XPS, SEM a AFM. Antibakteriální účinky Ag0 a Ag3 roubovaných vzorků byly stanoveny vůči *E. coli* a *S. epidermidis*. I když větší množství Ag bylo naroubováno na povrch PET s Ag0, v případě *S. epidermidis* měl vzorek s Ag3 o něco výraznější antibakteriální aktivitu. Na druhé straně *E. coli* nebyla významně ovlivněna připravenými substráty, pravděpodobně kvůli nízké koncentraci naroubovaného Ag na povrch. Navíc v Ag3 převládaly povrchové roviny (100), které mají vyšší povrchovou energii. Což zřejmě přispělo k uvolnění většího množství Ag<sup>+</sup> z povrchu vzorku a ke zvýšení antibakteriální aktivity. Lze shrnout, že námi připravené vzorky by mohly najít uplatnění jako povlaky zdravotnických prostředků pro inhibici bakteriálních biofilmů.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 21-05506S.

LITERATURA

1. Polívková M., Hubáček T., Staszek M., Švorčík V., Siegel J.: Int. J. Mol. Sci. 18, 419 (2017).
2. Munoz-Bonilla A., Fernandez-Garcia, M.: Prog. Polym. Sci. 37, 281 (2012).
3. Nguyenova H. Y., Vokata B., Zaruba K., Siegel J., Kolska Z., Svorcik V., Slepicka P., Reznickova A.: React. Funct. Polym. 145, 104376 (2019).

### 5L-11 MATERIÁLOVÉ ŠTRUKTURY PRO VYUŽITÍ CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O a SLUNCE PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE

**VÁCLAV ŠVORČÍK<sup>a</sup>, ZDEŇKA KOLSKÁ<sup>b</sup>, OLEKSIY  
LYUTAKOV<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Ústav inženýrství pevných látek, FCHT, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 3, 166 28 Praha,  
<sup>b</sup> CENAB, PČF, Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem,  
Pasteurova 15, 400 96 Ústí nad Labem  
vaclav.svorcik@vscht.cz

Nárůst CO<sub>2</sub> v ovzduší díky emisím je obecně považován za jednu z hlavních příčin globálních změn klimatu. V příspěvku budou uvedeny hlavní zdroje CO<sub>2</sub>, způsobené lidskou činností. CO<sub>2</sub> je lehce a všude dostupný plyn, který lze jímát přímo ze vzduchu. Je uvolňován při mnoha průmyslových výrobcích, v energetice, apod. CO<sub>2</sub> se využívá v řadě aplikací (např. chemické reakce, chlazení, potravinářství). Dominantní část CO<sub>2</sub> je asimilována v zelených rostlinách při fotosyntéze na monosacharidy a kyslík. Rostliny však nejsou schopny „zpracovat“ veškerý nadbytečný CO<sub>2</sub>.

V tomto příspěvku bude diskutována možnost využití „vzdušného“ CO<sub>2</sub> pro přípravu polymerů. Při použití „zeleného“, vodíku lze CO<sub>2</sub> použít pro výrobu uhlovodíků (tzv. e-nafty) a methanolu. Dále se zaměříme na „umělou fotosyntézu“, kterou lze připravit přímo methanol. Methanol je vynikající palivo do spalovacích motorů nebo palivových článků.

Dále bude diskutována možnost přípravy H<sub>2</sub> pomocí plazmonem stimulovaného štěpení vody, jeho ukládání do COF struktur a využití plazmonů v palivových článcích.

Všechny reakce, tj. příprava „zeleného“ vodíku, příprava methanolu „umělou fotosyntézou“ a aktivace palivových článků, jsou stimulovány Sluncem na námi připravených nanostrukturách.

*Tato práce vznikla za podpory tAČR projektu č. TK 01030128.*

#### LITERATURA

1. Miliutina E., Guselnikova O., Kolska Z., Elashnikov R., Burtsev V., Svorcik V., Lyutakov O.: ACS Sens. 4, 3133 (2019).
2. Guselnikova O., Trelin A., Miliutina E., Elashnikov R., Postnikov P., Kolska Z., Svorcik V., Lyutakov O.: ACS Appl. Mater. Interf. 12, 28110 (2020).
3. Guselnikova O., Postnikov P., Kosina J., Kolska Z., Svocik V., Lyutakov O.: J. Mater. Chem. A 9, 8462 (2021).
4. Zabelin D., Zabelina A., Miliutina E., Trelin A., Elashnikov R., Nazarov D., Svorcik V., Lyutakov O.: Chem. Eng. J. 443, 1 (2022).

### 5L-12 BIMETALICKÉ NANOKOMPOZITY OBSAHUJÍCÍ FLUORESCENTNÍ Au NANOKLASTRY A SUPERPARAMAGNETICKÉ Fe(III) ČÁSTICE

**RADEK OSTRUSZKA<sup>a</sup>, DENISA PULPÁNOVÁ<sup>b</sup>, PETR  
NOVÁK<sup>a</sup>, DANIEL JIRÁK<sup>b</sup> a KAROLINA ŠÍŠKOVÁ<sup>\*a</sup>**

<sup>a</sup> Katedra experimentální fyziky, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 779 00 Olomouc, <sup>b</sup> Institut klinické a experimentální medicíny, Vídeňská 1958/9, 140 21 Praha  
karolina.siskova@upol.cz

Tato práce se zabývá vývojem nových typů Au-Fe(III) nanokompozitů, jež nazýváme bimetalické s ohledem na obsah dvou různých kovů. Těchto nanokompozitů by mohlo být využíváno pro multimodální zobrazování buněk a biologických tkání, a to díky unikátním optickým a magnetickým vlastnostem, jež tyto nanokompozity vykazují. Zlaté nanoklastry (AuNCs), alias Au částice o velikostech do 2 nm v průměru, jsou známé svou fluorescencí ve viditelné až blízké infračervené oblasti<sup>1,2</sup>; Fe(III) částice v superparamagnetickém stavu jsou s úspěchem využívány coby kontrastní látky v zobrazování magnetickou rezonancí (MRI)<sup>3</sup>. Zakomponováním obou typů částic do jednoho nanokompozitu za využití biomakromolekuly typu sérového albuminu (konkrétně BSA, albuminu hovězího séra) je tak vytvořen plně funkční nanokompozit. Jeho fyzikálně-chemické vlastnosti byly ověřovány mnoha technikami včetně fluorescence, absorpční spektroskopie, dynamického rozptylu světla, zeta potenciálových měření, cirkulárního dichroismu, skenovací transmisní elektronové mikroskopie, Mössbauerovi spektroskopie a v neposlední řadě pak měřeními MR relaxivit a zobrazováním. Nyní je zkoumána viabilita několika buněčných linií při interakci s těmito Au-Fe(III) nanokompozity.

Z našich výsledků měření Au-Fe(III) nanokompozitů je zřejmé, že přítomnost superparamagnetických Fe(III) částic neovlivní pozici fluorescenčního maxima AuNCs a dojde pouze k mírnému snížení fluorescenčního kvantového výtěžku. Současně bylo pro Au-Fe(III) nanokompozity dosaženo hodnot MR relaxivit srovnatelných s hodnotami komerčních MRI kontrastních látek.

*Tato práce vznikla za podpory grantů GAČR 19-03207S, IGA\_PrF\_2021\_003, IGA\_PrF\_2022\_003.*

#### LITERATURA

1. Ostruszka R., Zoppellaro G., Tomanec O., Pinkas D., Filimonenko V., Šišková K.: Nanomaterials 12, 1425 (2022).
2. Andrášková P., Šišková K. M., Michetschlagerová Š., Jiráková K., Kubala M., Jirák D.: Nanomaterials 10, 343 (2020).
3. Babes L., Denizot B., Tanguy G., Le Jeune J. J., Jallet P.: J. Colloid Interface Sci. 212, 474 (1999).

### 5P-01 CORROSION OF PARTIALLY SUBMERGED SAMPLES IN MOLTEN FLiNAK SALT

RAMU AMBATI

Slovak Academy of Sciences, Institute of Inorganic Chemistry,  
Dúbravská cesta 9, 845 36, Karlova Ves, Bratislava, Slovakia  
ramuambati@savba.sk

This contribution discusses the finding of corrosion phenomenon, in a partially submerged environment. In this experiment, the bottom region is exposed to molten FLiNaK salt and top region to volatile vapours generated from FLiNaK salt. The experiment was conducted on SS316L and Hastelloy<sup>®</sup>-G35 at 600 °C for 100Hrs. The results show that, at the end of the experiment, the surface of the SS316L is smoother and the surface of the Hastelloy<sup>®</sup>-G35 is rougher, in all regions of the samples. The cross-section of SS316L shows uniform corrosion in vapours corrosion region and an intergranular corrosion in the molten salt corrosion region. In the Hastelloy<sup>®</sup>-G35 however, only uniform corrosion is found in all regions. The elemental mapping shows a high concentration of F, K and Na along the

grain boundaries on the surface of SS316L and uniformly in Hastelloy<sup>®</sup>-G35. The ICP-OES analysis showed high concentration of Cr in the Hastelloy<sup>®</sup>-G35 salt samples. However, the Cr content was lower for SS316L salt sample, when compared to Hastelloy<sup>®</sup>-G35 salt.

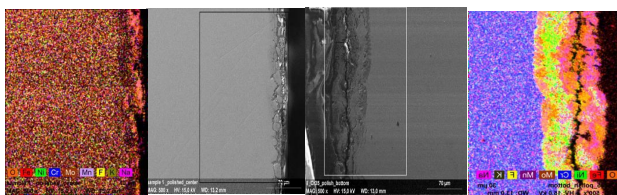


Fig. 1. The images shows the different corrosion mechanisms taking place in two different metals. The image (a) shows the intergranular corrosion and the image (b) shows a uniform corrosion

### 5P-02 KRISTALOVÉ INŽENÝRSTVÍ MOLEKULÁRNÍCH MATERIÁLŮ PRO NELINEÁRNÍ OPTIKU – SOLI N,N-DIMETHYLBIGUANIDU

MARIE CHEVALLIER<sup>a</sup>, IVANA ČÍSAŘOVÁ<sup>a</sup>, PETR  
NĚMEC<sup>b</sup>, JAN STIBŮREK<sup>c</sup>, MICHAELA  
FRIDRICHOVÁ<sup>a\*</sup>

<sup>a</sup> Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta  
Univerzity Karlovy, Hlavova 8, Praha 2, 128 00, <sup>b</sup> Katedra  
chemické fyziky a optiky, Matematicko-fyzikální fakulta  
Univerzity Karlovy, Ke Karlovu 3, Praha 2, 120 00,  
<sup>c</sup> Masarykova střední škola chemická, Křemencova 12,  
Praha 1, 116 28  
michaela.fridrichova@natur.cuni.cz

Nelineární optické jevy, zejména jevy druhého řádu, jako je generování druhé harmonické frekvence (second harmonic generation, SHG) nacházejí praktické využití<sup>1</sup> pro konverzi vlnových délek laserů, optickou signalizaci, v informačních technologiích i ve speciálních technikách konfokální mikroskopie a endoskopie. Nutným předpokladem pro to, aby materiál mohl vykazovat SHG, je uspořádání jeho krystalové struktury bez středu symetrie. Jedním z přístupů k dosažení tohoto cíle je příprava solí, v nichž jsou potenciální nositelé nelineárně optických vlastností doplněni dalšími cíleně zvolenými stavebními kameny tak, aby se pokud možno zabránilo centrosymetrickému uspořádání výsledné struktury a současně bylo dosaženo vhodných vlastností vzniklého materiálu.

Základem zde popsaného systému je malá dusíkatá organická molekula *N,N*-dimethylbiguanid, schopná tvořit jednou i dvakrát protonizované kationty. Chlorid této látky je používán jako účinné antidiabetikum metformin<sup>2</sup>. Podobně jako další deriváty guanidinu, i kationty této látky vykazují tzv. Y-aromaticitu, což je slibným předpokladem pro hledané optické vlastnosti<sup>1</sup>.

Anionty je možno volit buď čistě anorganické (mohou přispívat k důležitým materiálovým vlastnostem jako jsou optická odolnost, dobrá rozpustnost a snazší krystalizace) nebo chirální organické (ty zajišťují necentrosymetrické uspořádání a jejich variabilita umožňuje studium vlivu malé modifikace aniontu na výslednou strukturu; často ale nedokážou zabránit nežádoucímu tzv. head-to-tail uspořádání kationtů).

Prezentované výsledky představují skupinu nově připravených solí *N,N*-dimethylbiguanidu a pozitivní i negativní plynoucí z popsaných přístupů krystalového inženýrství.

#### LITERATURA

1. Matulková I., Němec I., Němec P.: Čs. Čas. Fyz. 61, 76 (2011).
2. Watkins W. M., Chulay J. D., Sixsmith D. G., Spencer H. C., Howells R. E.: J. Pharm. Pharmacol. 39, 261 (1987).

## 5P-03

## PLASMONIC NANOSILVER-MODIFIED SURFACES FOR PHOTOTHERMAL THERAPY

LUCIE HOCHVALDOVÁ<sup>a</sup>, LUCIE VÁLKOVÁ<sup>b</sup>,  
KATEŘINA PLECHO<sup>a</sup>, LIBOR KVÍTEK<sup>a</sup>, ALEŠ  
PANÁČEK<sup>a</sup>

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

<sup>b</sup> Palacký University, Faculty of Medicine and Dentistry, Department of Biophysics, Hněvotínská 5, 775 15 Olomouc, Czech Republic  
lucie.hochvaldova@upol.cz

Photothermal therapy is, among other applications, a promising tool in the treatment of various cancerous diseases. Cancer cells are killed by inducing high local temperatures, which are generated by laser irradiation of the nanoparticles with a laser of suitable wavelength. The position of the absorption maximum of the used colloidal nanoparticles was tuned to be in resonance with the wavelength of the used laser, which increases the absorption of the light by the nanoparticles and the conversion of energy to heat, leading to local hyperthermia and causing irreversible cell damage.

Nanoparticles with a wide range of plasmonic properties used within this research were synthesized by two step reduction process, where nanoparticles of different sizes, shapes and therefore varying in their optical properties were formed by tuning the ratio between reducing and stabilizing agent. With respect to the laser used, nanoparticles with the absorption maximum of desired wavelength were deposited on 96-well microtitration plate (by electrostatic layer-by-layer assembly) and used to evaluate antitumor efficacy of photothermal therapy.

The authors gratefully acknowledge the support provided by the inert grant of Palacký University Olomouc project IGA\_PrF\_2022\_020.

## 5P-04

## FORENZNÁ ANALÝZA POVÝSTRELOVÝCH SPLODÍN POMOCOU HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRIE SEKUNDÁRNYCH IÓNOV

KATARÍNA KOŤUHOVÁ<sup>a</sup>, MONIKA JERIGOVÁ<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Prirodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava 4, <sup>b</sup> Medzinárodné laserové centrum CVTI, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava 4  
kotuhova2@uniba.sk

Forenzná analýza povýstrelových splodín bola zameraná na analýzu ľahkých pevných častíc, ktoré sa tesne po výstrele zo zbrane v podobe prachu usádzajú na objekty v okolí miesta, na ktorom strelec strieľal. Častice boli výsledkom horenia zápalnej zmesi a pušného prachu umiestneného v náboji, ktoré vo svojom zložení obsahujú špecifický obsah prvkov a zlúčenín, najmä kovových prvkov a ich zlúčenín<sup>1</sup>. Tento obsah, ktorý bolo možné analyzovať v zmesi povýstrelových splodín napomáha k identifikácii strelca a potvrdeniu jeho totožnosti k zaistenej zbraňi. Za účelom jeho identifikácie pomocou chemickej charakterizácie povýstrelových splodín sme sa zamerali na chemickú analýzu

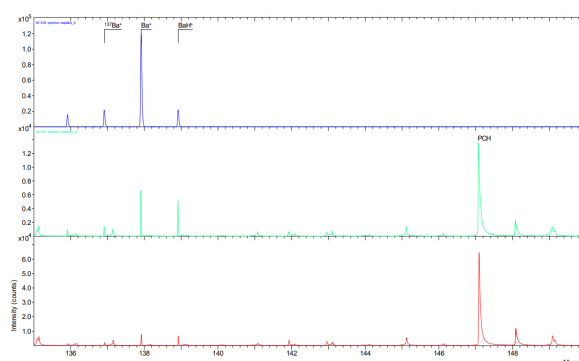
vyhorených zápaliek v troch typoch nábojov a na častice povýstrelových splodín prítomných na odtlačkoch prstov páchatel'a.

Na chemickú charakterizáciu bola využitá hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov, pomocou ktorej bola vzorka na ploche 100×100 μm<sup>2</sup> analyzovaná s cieľom stanovenia zloženia povýstrelových splodín samostatným zaznamenaním hmotnostných spektier. V nich boli identifikované charakteristické píky prvkov, molekúl a zlúčenín, ktoré charakterizovali zloženie pušného prachu a zápalkej zmesi troch skúmaných nábojov. Druhovú ich bolo možné odlíšiť na základe definovaných kovových prvkov a prítomnosťou zlúčenín prirodzene sa vyskytujúcich na koži, primárne fosfatidylcholínu v hmotnostných spektrách a na základe ich integrálnych intenzít normalizovaných na totálnu integrálnu intenzitu, čím bolo možné stotožniť strelca k jednej z dvoch skúmaných zbraní. Z 2D zobrazení distribúcií prvkov na odtlačkoch prsta bolo možné priradiť strelca k typu náboja.

## Tabuľka I

Identifikované kovové prvky v povýstrelových splodinách vo vzorke prstov

| Náboj             | Prvky   |
|-------------------|---|
| 0.38 Special      | Pb, Ba, Sb, Na, Al, Si, S, K, Ca, Ti<br>Fe, Cu, Zn                    |
| 0.40 S&W          | Pb, Ba, Sb, Sr, Cu, Ni, Fe, K, Ca                                     |
| Blazer Ammunition | Pb, Ba, Sb, Sr, Li, Na, K, C, Mg, C<br>Mg, Ca, Al, Si, Ti, Fe, Cu, Zn |



Obr. 1. Hmotnostné spektrá – porovnanie prítomnosti píkov Ba v povýstrelových splodinách a fosfatidylcholínu so sumárnym vzorcom C<sub>5</sub>H<sub>10</sub>NPO<sub>2</sub><sup>+</sup> vo vzorke zápalky a odtlačku prsta náboja 0.40 S&W modrá – zápalka, zelená – odtlačok prsta, červená – odtlačok prsta (image)

## LITERATÚRA

1. Heard B. J.: *Handbook of Firearms and Ballistics*. 2nd Edition, ISBN 978-0-4-70-69460-2.

**5P-05****ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF THE MOLTEN SYSTEMS OF (LiF – CaF<sub>2</sub>)<sub>eut</sub> – NdF<sub>3</sub> AND (LiF – NaF)<sub>eut</sub> – NdF<sub>3</sub>****DHIYA KRISHNAN<sup>\*,a</sup>, MICHAL KORENKO<sup>a,b</sup>, FRANTIŠEK ŠIMKO<sup>a,b</sup>**<sup>a</sup> *Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovakia,*<sup>b</sup> *Centre of Excellence for Advanced Materials Application – CEMEA, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 5807/9, 845 11 Bratislava, Slovakia  
dhiya.krishnan@savba.sk*

The electrical conductivity of molten systems of (LiF – CaF<sub>2</sub>)<sub>eut</sub> – NdF<sub>3</sub> and (LiF – NaF)<sub>eut</sub> – NdF<sub>3</sub> was experimentally measured at different temperatures, and several concentrations of NdF<sub>3</sub> (0–20 mol%). A pyrolytic boron nitride tube, platinum-rhodium alloy electrode, graphite crucible, and altering current impedance method was used for the study. The conductivity of both measured systems increases with the temperature and decreases with the increasing content of NdF<sub>3</sub>. The electrical conductivity of the molten system of (LiF – CaF<sub>2</sub>)<sub>eut</sub> – 5 mol% NdF<sub>3</sub> has been experimentally found to be at 800 °C; 5.56 S·cm<sup>-1</sup> vs. the electrical conductivity of the molten system of (LiF – NaF)<sub>eut</sub> – 5 mol% NdF<sub>3</sub> at the same temperature; 5.52 S·cm<sup>-1</sup>. The electrical conductivity of the molten system of (LiF – CaF<sub>2</sub>)<sub>eut</sub> – 20 mol% NdF<sub>3</sub> (800 °C) is 4.02 S·cm<sup>-1</sup>, while the electrical conductivity of the molten system of (LiF – NaF)<sub>eut</sub> – 20 mol% NdF<sub>3</sub> at this temperature was found to be 3.46 S·cm<sup>-1</sup>. The XRD patterns of the solidified samples of the investigated systems (LiF – CaF<sub>2</sub>)<sub>eut</sub> – NdF<sub>3</sub> and (LiF – NaF)<sub>eut</sub> – NdF<sub>3</sub> were after the conductivity measurements also determined.

*This study was financially supported by the Slovak grant agencies VEGA 2/0024/20, APVV-19-0270 and VEGA 2/0046/22. The work was performed within the ITMS project (with code 313021T081) supported by Research & Innovation Operational Programme funded by the ERDF.*

**5P-06****KATALYTICKÁ HYDROGENACE CO<sub>2</sub>****MARTINA KUBÍKOVÁ<sup>a</sup>, TOMÁŠ STRYŠOVSKÝ<sup>a</sup>, KAROLÍNA ŠIMKOVIČOVÁ<sup>a,b</sup>, ZUZANA KOVÁŘOVÁ<sup>a</sup>, ALEŠ PANÁČEK<sup>a</sup>, ROBERT PRUCEK<sup>a</sup>, LIBOR KVÍTEK<sup>a</sup>**<sup>a</sup> *Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc,*<sup>b</sup> *Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i. Oddělení nanokatalýzy, Dolejškova 2155/3, 182 23 Praha 8  
libor.kvitek@upol.cz*

Emise skleníkových plynů představují základní problém současné civilizace vyvolaný fenoménem globálního oteplování. Aktuálně nejdiskutovanějším skleníkovým plynem je CO<sub>2</sub>, jehož koncentrace v atmosféře rychle roste s tím, jak jsou v současných technologiích extenzivně využívána fosilní paliva<sup>1</sup>. Jednou z cest k omezení růstu koncentrace CO<sub>2</sub> v atmosféře, tedy k cíli tzv. uhlíkové neutrality, představuje přeměna CO<sub>2</sub> zpět na sloučeniny využitelné nejen v energetice a dopravě, ale i v chemickém průmyslu. Proces hydrogenace CO<sub>2</sub> využívá výhody heterogenní katalýzy založené převážně na katalytických účincích katalyzátorů na bázi oxidů kovů ze skupiny Fe, Co, Ni resp. jejich kompozitů s ušlechtilějšími kovy (nejčastěji Cu)<sup>2</sup>.

Na pracovišti Katedry fyzikální chemie PřF Univerzity Palackého v Olomouci se v posledních cca 5 letech (i ve spolupráci s Ústavem fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR v Praze) rozjíždí rozsáhlý výzkum zaměřený na vývoj efektivních katalyzátorů pro hydrogenaci CO<sub>2</sub>, přičemž jako hlavní katalytické sloučeniny jsou studovány právě oxidy výše zmíněných kovů společně s oxidy india, které jsou rovněž studovány jako vhodné katalyzátory pro tuto environmentálně zajímavou reakci. Dosavadní výsledky ukazují, že v případě oxidů Fe a Co hrají důležitou roli morfologie a velikost částic prekurzorů koncových katalyzátorů, přičemž kombinace FeO<sub>x</sub> s nanočásticemi mědi výrazně zvyšuje katalytickou aktivitu finálních katalyzátorů ve prospěch tvorby vyšších uhlovodíků. U oxidů india v kompozitu s nanočásticemi Cu je oproti oxidům Fe a Co hlavním produktem redukce CO<sub>2</sub> vedle CO rovněž methanol, což je velmi zajímavá sloučenina jak pro energetické aplikace, tak i pro chemický průmysl.

*Tato práce vznikla za podpory interního grantu Univerzity Palackého v Olomouci IGA\_PrF\_2022\_26.*

**LITERATURA**

1. Rafiee A., Khalilpour R., Milani D., Panahi M.: *J. Environ. Chem. Eng.* 6, 5771 (2018).
2. Li W., Wang H., Jang X., Zhu J., Liu Z., Guo X., Song Ch.: *RSC Adv.* 8, 7651 (2018).

### 5P-07 TOWARDS GAS DETECTION BY THZ FOUR-WAVE MIXING IN BULK MEDIA

**DUSAN LORENC<sup>a</sup>, EVA NOSKOVICOVA<sup>a,b</sup>, MARTIN KOYS<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> International Laser Centre, Ilkovicova 3, 84104 Bratislava,

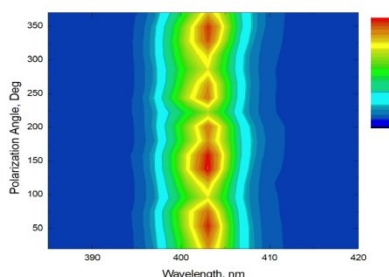
<sup>b</sup> Faculty of Natural Sciences, Comenius University,

Ilkovicova 6, Bratislava

dusan.lorenc@gmail.com

Nebezpečné priemyselné chemické látky (TIC, TIM) zohrávajú významnú úlohu z environmentálneho aj bezpečnostného hľadiska. Jednou z oblastí intenzívneho výskumu je použitie THz spektroskopických techník pri identifikácii látok typu TIC/TIM v plynnej fáze.

Štvornové zmiešavanie v  $\chi(3)$  médiách ponúka možnosť konverzie THz signálu do optickej oblasti. V príspevku sme sa zamerali na interakciu intenzívnych THz impulzov s amplitúdou do 100 kV/cm s optickým signálom s vlnovou dĺžkou 800 nm pričom študujeme vlastnosti generovaného signálu s vlnovou dĺžkou 400 nm. Predkladaná metóda má perspektívne využitie v THz senzoričke.



Tato práce vznikla za podpory grantu NATO SPS G5795.

#### LITERATURA

1. M. Koys, E. Noskovicova, D. Velic, D. Lorenc: Opt. Express 25, 13872 (2017).

### 5P-08 PROMISING ALTERNATIVES OF COBALT-FREE PROMOTERS IN UPB: EVALUATION OF GELATION AND EXOTHERM BEHAVIOUR

**ELIŠKA MATUŠKOVÁ<sup>a</sup>, JAN HONZÍČEK<sup>a</sup>, JAROMÍR VINKLÁREK<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Institute of Chemistry and Technology of Macromolecular Materials, Faculty of chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, <sup>b</sup> Department of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice

eliska.matuskova@upce.cz

The curing of unsaturated polyester resins is a free-radical polymerization initiated by organic peroxides and accelerated by a curing agent. During the curing process, the resin is transforming from a liquid structure into a rigid one<sup>1</sup>. Commonly used cobalt accelerator was established as a carcinogen in many studies. Due to the toxicity of cobalt, the use of only cobalt-free alternatives is expected.

The catalytic activity of potential cobalt-free alternatives was confirmed in a commercial polyester/styrene/methyl ethyl ketone peroxides system. In general, transition metal compounds are used as a curing agent for their ability to accelerate peroxide decomposition. Synthesized compounds based on iron and vanadium were tested and compared to the commercially available accelerators.

Evaluation of gel time and exothermic behavior indicates the course of the cross-linking process. Due to the peroxide decomposition accelerated by the promotor, an exothermic process of polymerization was initiated. The production of free radicals causes a sharp increase in viscosity of the resin system due to cross-linking. Subsequently, the gel time meter records adequate resistance, and the curing process continue to the final step giving glassy material.

In a thermally isolated system, the exothermic behavior of the studied system was achieved by the use of K-type thermocouples. Through the high-temperature rise upon the curve, the degree of cure was determined. Subsequently, the inflection point was estimated based on the results of the curve derivation. At this specific point, the maximum rate of the temperature rise at an appropriate time gives an overview of the catalytic activity of potential cobalt-free alternatives.

All tested synthesized promoters proved to catalyze the curing process of unsaturated polyester resin.

*This research was funded by Ministry of Education of the Czech Republic (UPA SGS\_2022\_005)*

#### REFERENCE

1. Pandiyan Kuppasamy R. R., Neogi S.: Bull. Mater. Sci. 36.7., 1217 (2013).

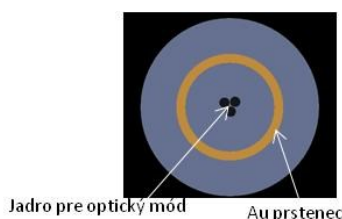
## 5P-09

## DIZAJN MPOF VLÁKNA PRE THZ ŠTVORVLNOVÉ ZMIEŠAVANIE

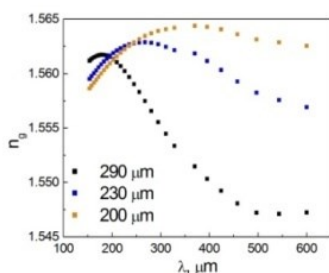
EVA NOSKOVIČOVÁ<sup>a,b</sup>, JAKUB ORSÁG<sup>b</sup>, DUŠAN LORENC<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičová 3, 84104, Bratislava, <sup>b</sup> Prírodovedecká fakulta univerzity Komenského v Bratislave, Ilkovičová 6, 84215, Bratislava, Slovensko noskovic.eva@gmail.com

Terahertzové (THz) žiarenie je možné využiť v bezpečnostných zložkách na detekciu celej škály nebezpečných látok od environmentálne a biologicky nebezpečných zlúčenín cez drogy až po výbušniny<sup>1</sup>. V našej práci sa zameriavame na rizikové priemyselné plyny (NH<sub>3</sub>, SO<sub>2</sub>) a na ich detekciu bude použitý senzor na báze mikroštruktúrneho vlákna (MPOF), v ktorom nastáva štvorvlňové zmiešavanie. Konkrétne v ňom ide o interakciu optického žiarenia, jeho druhej harmonickej frekvencie a THz žiarenia. V špeciálne navrhnutom vlákne je rozhodujúca ich vzájomná časová a spektrálna evolúcia<sup>2</sup>. Pomocou metódy FDTD boli počítané efektívne indexy lomu a grupové indexy lomu pre rôzne dizajny MPOF vlákien. Zatiaľ najslubnejším návrhom sa javí vlákno s tzv. „mercedes“ geometriou vlákna pre optický mód, ktorá je zabudovaná do vlákna s pevným jadrom ohraničeným kovovým prstencom pre THz mód.



Obr. 1. Schéma MPOF vlákna pre THz štvorvlňové zmiešavanie

Obr. 2. Spektrálne závislosti  $n_b$  v THz oblasti pre vybrané MPOF vlákna s rôznou vzdialenosťou Au prstenca od centra jadra

Práca vznikla za podpory grantu NATO SPS G5795.

## LITERATÚRA

1. Bandyopadhyay A., Sengupta A.: IETE Technical Review 39, 471 (2022).
2. Koys M., Noskovicova E., Velic D., Lorenc D.: Opt. Express 25, 13872 (2017).

## 5P-10

## GEOMETRY OF LASER POST-IONIZATION SECONDARY ION MASS SPECTROMETER

JUSTÍNA NOVÁKOVÁ<sup>a,b</sup>, EVA NOSKOVIČOVÁ<sup>a,b</sup>, DUŠAN LORENC<sup>b</sup>, MONIKA JERIGOVÁ<sup>a,b</sup>, DUŠAN VELIČ<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Ilkovičova 4, 841 04 Bratislava 4, <sup>b</sup> MLC CVTI SR, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava 4, Slovensko justina.novakova@uniba.sk

A Secondary Ion Mass Spectrometer (SIMS) is an analytical tool for surface analysis. Its almost non-destructive nature and wide range of detected masses (0–1000 amu)<sup>1</sup> predetermine it for a multitude of applications in inorganic, as well as organic chemistry.

The principle of this tool lies in bombardment of the sample surface with primary ions, sputtering from it a plume of secondary species (charged or neutral). The separation of masses is performed in a time-of-flight column, to which the particles are dragged by the extractor potential, usually 2000 V (ref.<sup>1</sup>).

The only down-side of this technique is that it is by nature qualitative, as only app. 1% of the secondary species are ionized<sup>1</sup>. The only means to get quantitative information is by augmenting the secondary ion yield. For this purpose, we established and parametrized a laser post-ionization SIMS platform.

However, the introduction of a laser beam into the SIMS chamber bears with it distortion of the previously precisely adjusted geometry between the primary ion gun, the secondary ion plume, and the extractor. The reason is that the laser beam diameter inside the SIMS vacuum chamber is a few micrometres wide, and to avoid hitting the sample with the laser beam, it is imperative to lower it compared to its original position.

One of the parameters to be considered when dealing with the geometry distortion was the relative position between the laser beam, the SIMS secondary ion plume, and the SIMS extractor. In this work, we present the experiments on a silver plate focused on finding the optimal position of the laser beam by changing the extractor focus.

This work was supported by European Space Agency, France PECS grant No. 4000126501/19/NL/SC.

## REFERENCE

1. Vickerman J. C., Briggs D., Benninghoven A., Urbassek H. M., v knihe: *ToF-SIMS: Materials Analysis by Mass Spectrometry*, kap. 0-3, kap. 7 a kap. 13. IM Publications and SurfaceSpectra Limited (2013).

### 5P-11 FLUORESCENČNÁ SPEKTOSKOPIA SUPRAMOLEKULOVÉHO KOMPLEXU CYKLODEXTRÍN-KUMARÍN C500

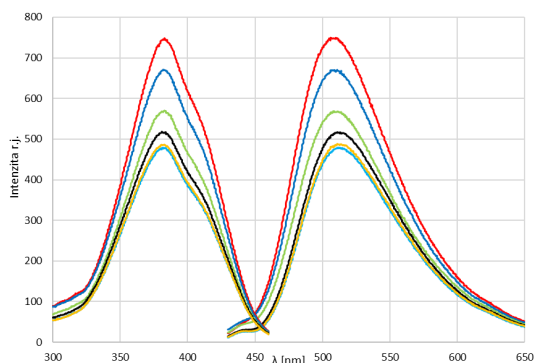
JAKUB ORSÁG<sup>a</sup>, DUŠAN VELIČ<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie PRIF UK, Ilkovičova 6, 845 12 Bratislava, <sup>b</sup> MLC CVTI, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava  
orsag13@uniba.sk

Pri hydrofóbných liečivách býva častým problémom nízka biodostupnosť. Vyššiu biodostupnosť dosiahneme využitím transportnej látky, ktorá liečivo dopraví na miesto účinku. Jedným zo spôsobov transportu je vytvorenie supramolekulového komplexu, čo cyklodextríny, vďaka ich hydrofóbnnej kavitě a hydrofilnému obalu dokážu. Ako náhradu za hydrofóbné liečivo sme si vybrali fluorescenčne aktívne farbivo kumarín C500.

Do vodného roztoku kumarínu C500 s koncentráciou  $10^{-7}$  M sme pridali  $\beta$ -cyclodextrín ( $\beta$ -CD). Jeho koncentrácia sa postupne zvyšovala a bola v rozmedzí  $10^{-5}$  až  $10^{-3}$  M. Pri zvýšení prídavku  $\beta$ -CD sme pozorovali zvýšenie emisie aj excitácie a zníženie Stokesovho posunu. V porovnaní s čistým kumarínom C500 bola intenzita pri prídavku s najvyššou koncentráciou  $\beta$ -CD o 56,5 % vyššia a zmena Stokesovho posunu dosiahla 5nm.

Zmena Stokesovho posunu sa dá vysvetliť zmenou prostredia, v ktorom sa kumarín C500 nachádzal pri excitácii. Pri nulovom prídavku  $\beta$ -CD sa kumarín nachádzal vo vode (polárnom rozpúšťadle), no pri komplexe sa kumarín nachádzal v nepolárnej kavitě  $\beta$ -CD. Z toho vyplýva, že zmena Stokesovho posunu je vhodným parametrom pre overenie tvorby komplexu. Zvýšenie intenzity nám zase dáva údaj do akej miery sa komplex vytvoril.



Obr. 1. Excitačné (vľavo) a emisné (vpravo) spektrá kumarínu C500 (tyrkysová) s prídavkami  $\beta$ -CD ( $10^{-5}$  žltá- $10^{-3}$  M červená)

Benesi-Hildenbrandovou metódou sme zistili konštantu stability vytvoreného komplexu  $\beta$ -CD-kumarín C500. Keďže jej hodnota bola  $20965 \text{ M}^{-1}$  rovnováha bola posunutá ku tvorbe komplexu.

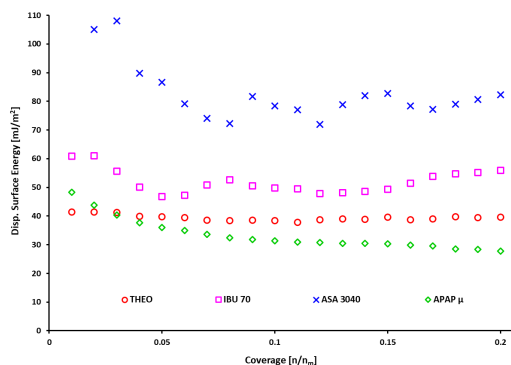
### 5P-12 STUDIUM POVRCHOVÝCH VLASTNOSTÍ PEVNÝCH LÁTEK POMOCÍ iGC

EVA OTYEPKOVÁ<sup>a</sup>, LAURE DESCAMPS<sup>b</sup>

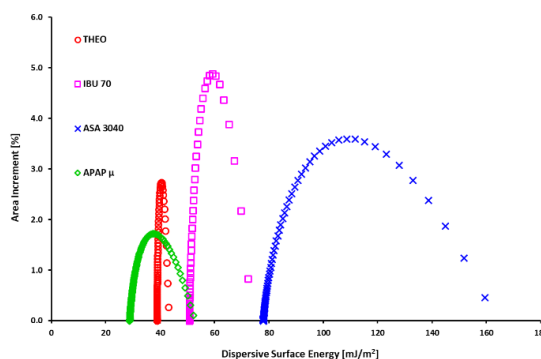
<sup>a</sup> Katedra fyzikální chemie, PřF UP, Olomouc;

<sup>b</sup> Faculty of Pharm. Sciences, Ghent University, Ghent  
eva.otyepkova@upol.cz

Inverzní plynová chromatografie (iGC) je metoda, která se používá ke stanovení povrchové energie různých pevných látek včetně práškových materiálů z adsorpčních izoterem par vybraných organických rozpouštědel. Vhodnou volbou organických rozpouštědel, lze stanovit jednotlivé složky povrchové energie, tj., její disperzní a specifickou část<sup>1,2</sup>. Vzhledem k tomu, že metoda dovoluje kontrolovat povrchové pokrytí a stanovovat izosterickou povrchovou energii  $\gamma_v$ , lze následně posuzovat závislost  $\gamma_v$  na pokrytí a posuzovat tak homogenitu povrchu<sup>3</sup>. Z tepelných závislostí adsorpčních izoterem je možno také stanovit adsorpční entalpie a entropie daných organických rozpouštědel k povrchu pevné látky<sup>4</sup>.



Graf I. Profil disperzní povrchové energie práškových materiálů [Ibuprofen (IBU70), Acetylic acid (ASA3040), Theophylline (THEO), Paracetamol (APAPμ)]



Graf II. Distribuce disperzní povrchové energie práškových materiálů

#### LITERATURA

1. Ho R. et. al.: Kona Powder Part J 30, 164 (2013).
2. Mohammadi-Jam S. et al.: Adv. Colloid Interfac. 21, 212 (2014).
3. Otyepkova E. et al.: Appl. Surf. Sci. 565, 150382 (2021).
4. Lazar P et al.: J. Am. Chem. Soc. 135, 6372 (2013).



## 5P-13

**RESTORATION OF ANTIBACTERIAL ACTIVITY OF INACTIVE ANTIBIOTICS VIA COMBINED TREATMENT WITH SILVER BASED ANTIBACTERIAL NANOMATERIALS AT NON-TOXIC CONCENTRATIONS TO HUMAN CELLS****ALES PANACEK<sup>a,\*</sup>, LUCIE HOCHVALDOVA<sup>a</sup>, DAVID PANACEK<sup>a,b</sup>, LIBOR KVITEK<sup>a</sup>, RENATA VECEROVA<sup>c</sup>, MILAN KOLAR<sup>c</sup>**

<sup>a</sup> Department of Physical Chemistry, Faculty of Science, Palacký University in Olomouc, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, <sup>b</sup> Czech Advanced Technology and Research Institute, Palacký University in Olomouc, Křížkovského 511/8, 779 00 Olomouc, <sup>c</sup> Department of Microbiology, Faculty of Medicine and Dentistry, Palacký University in Olomouc, Hněvotínská 5, 775 15 Olomouc, Czech Republic  
ales.panacek@upol.cz

Misuse and overuse of antibiotics has led to the rapid emergence of bacterial resistance to antibiotics following their introduction<sup>1</sup>. Because new antibiotics seem unlikely to provide a way of quickly overcoming bacterial resistance in the near future, we need alternative ways of overcoming bacterial resistance.

A very promising option is combination therapy, in which traditional antibiotics are combined with other substances that enhance their effectiveness. Silver nanoparticles (NPs) may be appropriate for this purpose; they exhibit strong antibacterial activity at very low concentrations and show no cytotoxicity towards mammalian cells<sup>2-4</sup>. We investigate the synergistic antibacterial effects resulting from combining a silver-based nanomaterials with inactive antibiotics having different modes of action against bacteria with different resistance mechanisms. The objective was to find the combinations of antibiotics and the silver nanomaterials exhibiting the greatest activity against the resistant strains and to thereby identify effective ways of overcoming bacterial resistance for individual antibiotics against particular resistant bacteria based on their mode of action and mechanism of resistance, respectively<sup>3,4</sup>.

*The authors gratefully acknowledge financial support from the Ministry of Health of the Czech Republic (project NU20-05-00165) and Internal Student Grant Agency of the Palacký University in Olomouc, Czech Republic (IGA\_PrF\_2022\_020).*

## LITERATURA

1. Graham C. J.: *J. Glob. Health Rep.* 1, 1 (2017).
2. Panáček A., et al.: *Colloids Surf. B* 142, 392 (2016).
3. Panacek D., et al.: *Adv. Sci.* 8, Art. 2003090 (2021).
4. Hochvaldova L., et al.: *Sci. Rep.* 12, Art. 5222 (2022).

## 5P-14

**MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS OF SODIUM SULFATE IN WATER****LYDIE PLAČKOVÁ<sup>a</sup>, MILAN PŘEDOTA<sup>a</sup>, ONDŘEJ KROUTIL<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> Faculty of Science, University of South Bohemia, Branišovská 1645/31a, 370 05 České Budějovice, <sup>b</sup> Faculty of Chemistry, Materials Research Centre, University of Technology, Purkyňova 464/118, 61200 Brno, Czech Republic  
plackl00@prf.jcu.cz

Sulfate salts play a key role in a range of biological, environmental, and technical systems among multivalent anions<sup>1,2</sup>. For instance, in protein crystallization, ammonium sulfate represents the most common protein crystallizing agent<sup>2</sup>. According to Yang et al.<sup>3</sup>, the concentration of sodium and magnesium sulfates influences the stability of bound chlorides in cement paste. Though less attention has been devoted to sulfate salts in MD simulations, and only few sulfate models have been developed so far<sup>4,5</sup>.

It is now well known that full charge models significantly overestimate electrostatic interatomic interactions of multivalent ions due to lack of electron polarization. Thus, electronic continuum correction (ECC) method has recently been developed improving the structural characteristic. In this case, atomic charges are scaled down e.g. to 0.75 of their usual (commonly RESP) charges<sup>6,7</sup>.

In this study, we focused on the development of sodium sulfate model with the aim to obtain reasonable sulfate structure and at the same time reliable dynamic properties of sodium sulfate aqueous solution. The comparison of performance of our model with previous developed ones was performed and discussed.

*This research was supported by the Czech Science Foundation, project 21-27338S.*

## LITERATURA

1. Radaev S., Li S., Sun P. D.: *Acta Crystallogr., Sect. D: Biol. Crystallogr.* 62, 605 (2006).
2. Bokhimi X., Morales A., Ortíz E., López T., Gómez R., Navarrete J.: *J. Sol-Gel Sci. Technol.* 29, 31 (2004).
3. Yang Z., Jiang J., Jiang X., Mu S., Wu M., Sui S., Wang L., Wang F.: *Constr. Build. Mater.* 228, 116775 (2019).
4. Pegado L., Marsalek O., Jungwirth P., Wernersson E.: *Phys. Chem. Chem. Phys.* 14, 10248 (2012).
5. Zeron I. M., Abascal J. L. F., Vega C.: *J. Phys. Chem.* 151, 134504 (2019).
6. Leontyev I., Stuchebrukhov A.: *Phys Chem Chem Phys.* 13, 2613 (2011).
7. Biriukov D., Kroutil O., Předota M.: *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20, 23954 (2018).

## 5P-15

**DETEKCE GLYFOSÁTU POMOCÍ POUŽITÍ ZESÍLENÉ RAMANOVY SPEKTROSKOPIE ZA POUŽITÍ NANOČÁSTIC STRÍBRA ZLATA****ROBERT PRUCEK, FILIP KUBEŠ, BARBORA ŠTEFKOVÁ, ALEŠ PÁNAČEK, LIBOR KVÍTEK***Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecké fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 779 00 Olomouc  
robert.prucek@upol.cz*

Glyfosát představuje světově nejznámější a nejrozšířenější herbicid pro zemědělskou, zahradní či městskou eliminaci plevelů. Přípravek známý od 70. let 20. století pod komerčním názvem Roundup je dnes jedním z nesledovanějších pesticidů<sup>1</sup>. Studie ovšem ukazují přímou spojitost mezi tímto herbicidem a rakovinou lymfatické tkáně u lidí, prokazatelnou genotoxicitou pro lidské buňky, ovlivnění hormonální regulace a negativním dopadem na životní prostředí. V roce 1974 byl patentován pro komerční použití jako herbicid s názvem Roundup. Účinná látka glyfosát tvoří asi 40–50 % přípravku. Ostatní podíl je tvořen surfaktanty a plnidly usnadňujícími aplikaci<sup>2</sup>. Nadužívání glyfosátu v zemědělství vedlo k vytvoření rezistence u určitých plevelů, a to vede opět ke zvýšení spotřeby a tedy k jeho kumulaci a negativnímu dopadu na životní prostředí. Proto je potřeba koncentrace glyfosátu v půdách a vodách kontrolovat<sup>3</sup>.

Nanočástice zlata a stříbra jsou schopné výrazně zesílit Ramanův rozptyl a umožňují stanovit velmi malé koncentrace látek. Prvním testovaným substrátem byla koloidní disperze Ag nanočástic připravená redukcí AgNO<sub>3</sub> maltosou s finální koncentrací NH<sub>3</sub> 0,02 mol dm<sup>-3</sup>, jejichž průměrná velikost byla 36 nm. SERS detekce glyfosátu byla provedena při vlnové délce laseru 633 nm a glyfosát byl detekován při koncentraci 10<sup>-3</sup> mol dm<sup>-3</sup>. Druhým substrátem byla koloidní disperze nanočástic Au připravená redukcí tetrachlorzlatitanu draselného kyselinou askorbovou. Takto připravené nanočástice měly průměrnou velikost 60 nm. Pomocí takto připravených nanočástic byly provedeny SERS experimenty za využití laseru 785 nm, kdy bylo získáno spektrum glyfosátu o koncentraci 10<sup>-3</sup> mol dm<sup>-3</sup>.

*The authors gratefully acknowledge financial support from the Czech Science Foundation (project GA CR – 19-22720S), the Ministry of Health of the Czech Republic (project NU20-05-00165) and Internal Student Grant Agency of the Palacký University in Olomouc, Czech Republic (IGA\_PrF\_2022\_026).*

## LITERATURA

1. Szekacs A., Darvas B.: Forty Years with Glyphosate. In *Herbicides – Properties, Synthesis and Control of Weeds (InTech)*.
2. Duke S. O., Powles S. B.: Glyphosate. *Pest Manag. Sci.* **64**, 319 (2008).
3. Duke S. O.: The history and current status of glyphosate. *PEST Manag. Sci.* **74**, 1027 (2018).

## 5P-16

**INFRAČERVENÁ SPEKTROSKOPIA TEPELNEJ DEGRADÁCIE VITAMÍNU C****DOMINIK SARVAŠ<sup>a</sup>, DUŠAN VELIČ<sup>a,b</sup>, MONIKA JERIGOVÁ<sup>a,b</sup>***<sup>a</sup> Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 845 12 Bratislava, <sup>b</sup> Medzinárodné laserové centrum CVTI, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava  
sarvas6@uniba.sk*

Stabilita vitamínu C je ovplyvnená mnohými faktormi<sup>1</sup>, medzi ktoré patrí teplota a dĺžka zahrievania. Tieto faktory boli skúmané FTIR spektroskopiou s využitím FTIR spektrometra IRPrestige-21 od firmy Shimadzu v rozsahu vlnočtov 400–4000 cm<sup>-1</sup>, s rozlíšením 1 cm<sup>-1</sup>.

Pre sledovanie vplyvu teploty na degradáciu vitamínu C, boli vzorky s hmotnosťou približne 0,2 g zahrievané v elektrickej rúre, v rozsahu teplôt 50–250 °C, 5 min. Pre sledovanie vplyvu dĺžky zahrievania na degradáciu vitamínu C, boli vzorky s hmotnosťou približne 0,2 g zahrievané pri 190 °C, 2–10 min. Infračervené spektrá boli merané v zmesi s KBr.

V infračervenom spektre vitamínu C boli v oblasti vlnočtov 3600–3200 cm<sup>-1</sup> identifikované štyri pásy prislúchajúce valenčným vibráciám väzieb O-H. Pásky s vlnočtami 3021 a 2916 cm<sup>-1</sup> boli priradené valenčnej vibrácii C-H väzby. Dva pásy s vlnočtami 1754 a 1674 cm<sup>-1</sup> boli priradené valenčným vibráciám karbonylovej skupiny C=O a dvojitej väzbe C=C. Vlnočtom 1322 a 1142 cm<sup>-1</sup> prislúchajú valenčné vibrácie zoskupenia O-(C=O)-C. Vibrácia s vlnočtom 1021 cm<sup>-1</sup> zodpovedá valenčnej vibrácii C-O-C.

Dokázali sme, že teplota a aj dĺžka zahrievania vplyva na tepelnú degradáciu vitamínu C. Pri nižších teplotách ako 200 °C, bolo pozorované iba postupné znižovanie intenzity pík. V prípade teplôt nad 200 °C sa pozorovalo splynutie píku hydroxylových skupín do jedného širokého píku a tiež posun píku C=O a C=C skupiny k vyšším vlnočtom o 10 cm<sup>-1</sup>. Podobná situácia sa pozorovala v prípade vzoriek zahrievaných 4–10 minút. Pozorované zmeny v študovanom teplotnom a časovom intervale boli priradené jeho dehydratácii a dekarboxylácii<sup>2,3</sup> za súčasného vzniku niektorých nekonjugovaných zlúčenín, ktorých molekuly sú medzi sebou pútané vodíkovými väzbami.

## LITERATÚRA

1. Rucker R. B., Suttie J. W., McCormick D. B., Machlin L. J., v knihe: *Handbook of vitamins*, 3rd Ed. kap. 15, s. 530, Marcel Dekker, Inc., New York 2001.
2. Jingyan S., Yuwen L., Zhiyong W., et al.: *J. Pharm. Biomed. Anal.* **77**, 116 (2013).
3. Vernin G., Soundouss Ch., Rogacheva M. S., et al.: *Carbohydr. Res.* **305**, 1 (1998).

## 5P-17

ANALYSIS OF POROSITY EVOLUTION  
IN PERMANENT GRASSLAND SOIL THROUGH  
THE SEASONS

PETRA ZÁVODSKÁ<sup>a,\*</sup>, VICTORY JAQUES<sup>b</sup>,  
MARTINA KLUČÁKOVÁ<sup>a</sup>, MILOSLAV PEKAŘ<sup>a</sup>,  
TOMÁŠ ZIKMUND<sup>b</sup>, JOZEF KAISER<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, <sup>b</sup> CEITEC VUT, Purkyňova 656/123, 612 00 Brno  
Petra.Zavodska@vut.cz

Soil is indispensable material for life on earth not only for organisms living in soil but even for human needs. Various soils are habitats for numerous organisms (fauna, flora, bacteria). Soil structure is important factor for many processes in soils. It regulates water retention, root penetration, sorption processes of nutrients or xenobiotics and diffusion. However, soil structure changes with the activity of micro and macroorganisms<sup>1</sup>. Macroorganisms or macrofauna is defined as invertebrates larger than 2 mm, for example worms, termites, or ants. They are considered to have important role in controlling soil structure dynamic<sup>2</sup>. There are also changes caused by diverting grasslands into croplands<sup>3</sup>. Therefore, we used permanent grassland for our study to minimize these changes.

There is not much research about the structure changes caused by climate change or by different seasons. Most studies focus on changes caused by organisms<sup>4</sup>. Therefore, we combined X-ray computed tomography with chemical analysis to observe seasonal changes during spring, summer, and autumn in natural permanent grassland. Top layer of soil (10 cm), that is directly impacted by climate, was sampled carefully to not cause any damage, and put into transparent container. Samples were scanned with microCT in this transparent container firstly. After that the chemical analysis, which contains humidity measurement, FTIR, thermogravimetry and elemental analysis, was made. Meanwhile the scanned soil was segmented into organic matter, pores and inorganic part and molecular diffusion and permeability simulation was ran based on the diffusion coefficients of two chosen drugs (sulfapyridine, sulfamethoxazole) using program VG studio.

*This work was supported by the VUT specific interfaculty junior project (BD622224002).*

## REFERENCES

1. Rabot E., Wiesmeier M., Schlüter S., Vogel H.-J.: *Geoderma* 314, 122 (2018).
2. Bottinelli N., Jouquet P., Capowiez Y., Podwojewski P., Grimaldi M., Peng X.: *Soil Tillage Res.* 146, 118 (2015)
3. Singh N., Kumar S., Udawatta R. P., Anderson S. H., de Jonge L. W., Katuwal S.: *Soil Sci. Soc. Am. J.* 85, 73 (2020).
4. Pritchard S. G.: *Plant Pathology* 60, 82 (2011).

## 5P-18

ZELENÁ SYNTÉZA STRĚBRNÝCH NANOČÁSTIC  
EXTRAKTEM Z VINNÝCH LISTŮ

ADÉLA ŽIŽLAVSKÁ, ROBERT PRUCEK

Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, tř. 17. listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc  
adela.zizlavska01@upol.cz

Většina konvenčních syntéz nanočástic stříbra (AgNPs) vyžaduje použití nebezpečných chemikálií a vytváří toxický organický odpad. Navíc v současnosti je jedním ze skloňovaných témat obava z jejich toxicity<sup>1,2</sup>. K překonání těchto problémů se syntéza nanočástic biosyntetickými metodami jeví jako bezpečná, biokompatibilní a ekologická cesta obzvláště pak v odvětví životního prostředí a biomedicíny. Zelená syntéza může být provedena s houbami, řasami, bakteriemi a rostlinami, přičemž mezi nejvíce implementovanou metodu patří použití rostlinných extraktů.

Je známo, že listy vinné révy obsahují různé typy fenolických sloučenin, jako jsou třísloviny, flavonoidy, prokyanidiny a antokyany. Funkčních skupiny těchto látek jsou pak pravděpodobně schopné zprostředkovat redukci Ag<sup>+</sup> na Ag<sup>0</sup> a zároveň v syntéze působí jako stabilizační činidlo<sup>3,4</sup>.

V této práci jsme prováděli biologickou redukci iontů stříbra na nanočástice stříbra pomocí extraktu z hroznových listů. Extrakt byl připraven vařením 6 g očištěných hroznových listů se 40 ml destilované vody při 100 °C po dobu 30 minut. Získaný objem extraktu byl odfiltrován a upraven na objem 100 ml přidáním destilované vody. AgNPs byly připraveny přidáním AgNO<sub>3</sub> (0,1 mol dm<sup>-3</sup>) k extraktu z hroznových listů, směs byla poté za stálého míchání zahřívána při teplotě 70 °C po dobu 2 hodin. Připravená suspenze AgNPs byla poté centrifugována (6000 ot./min.) a několikrát promyta destilovanou vodou. Vliv reakční teploty a slunečního světla na vznik a velikost nanočástic stříbra byl hodnocen pomocí UV-Vis spektrofotometru (SPECORD S 600) a jako reference byl použit extrakt z hroznových listů. Charakteristický absorpční pás s maximální absorpcí se pohyboval kolem  $\lambda_{\max} = 436$  nm k tvorbě částic docházelo po 55–60 minutách. Morfologie získaných nanočástic byla většinou sférická s velikostí částic od 12 do 40 nm (TEM JEM 2100, JEOL).

## LITERATURA

1. Sharma V., Yngard R., Lin Y.: *Advances in Colloid and Interface Science.* 145, 1–2 (2009).
2. Li Y., Chen C.: *Nanoparticles for Biomedical Applications* 7, 21 (2011).
3. Jadoun S., Arif R., Jangid N., Meena R.: *Environ. Chem. Lett.* 19, 1 (2021).
4. Dani C., Oliboni L., Agostini F., Funchal C., Serafini L., Henriques J., Salvador M.: *Toxicology in Vitro.* 24, 1 (2010).

**5P-19****RESTORATION OF ANTIBACTERIAL ACTIVITY OF INACTIVE ANTIBIOTICS VIA COMBINED TREATMENT WITH SILVER BASED ANTIBACTERIAL NANOMATERIALS AT NON-TOXIC CONCENTRATIONS TO HUMAN CELLS****ALES PANACEK<sup>a,\*</sup>, LUCIE HOCHVALDOVA<sup>a</sup>, DAVID PANACEK<sup>a,b</sup>, LIBOR KVITEK<sup>a</sup>, RENATA VECEROVA<sup>c</sup>, MILAN KOLAR<sup>c</sup>**

<sup>a</sup> Department of Physical Chemistry, Faculty of Science, Palacký University in Olomouc, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, <sup>b</sup> Czech Advanced Technology and Research Institute, Palacký University in Olomouc, Křížkovského 511/8, Olomouc 779 00, <sup>c</sup> Department of Microbiology, Faculty of Medicine and Dentistry, Palacký University in Olomouc, Hněvotinská 5, 775 15 Olomouc, Czech Republic  
ales.panacek@upol.cz

Misuse and overuse of antibiotics has led to the rapid emergence of bacterial resistance to antibiotics following their introduction<sup>1</sup>. Because new antibiotics seem unlikely to provide a way of quickly overcoming bacterial resistance in the near future, we need alternative ways of overcoming bacterial resistance.

A very promising option is combination therapy, in which traditional antibiotics are combined with other substances that enhance their effectiveness. Silver nanoparticles (NPs) may be appropriate for this purpose; they exhibit strong antibacterial activity at very low concentrations and show no cytotoxicity towards mammalian cells<sup>2-4</sup>. We investigate the synergistic antibacterial effects resulting from combining a silver-based nanomaterials with inactive antibiotics having different modes of action against bacteria with different resistance mechanisms. The objective was to find the combinations of antibiotics and the silver nanomaterials exhibiting the greatest activity against the resistant strains and to thereby identify effective ways of overcoming bacterial resistance for individual antibiotics against particular resistant bacteria based on their mode of action and mechanism of resistance, respectively<sup>3,4</sup>.

*The authors gratefully acknowledge financial support from the Ministry of Health of the Czech Republic (project NU20-05-00165) and Internal Student Grant Agency of the Palacký University in Olomouc, Czech Republic (IGA\_PrF\_2022\_020).*

**REFERENCES**

1. Graham C. J.: J. Glob. Health Rep. 1, 1 (2017).
2. Panáček, A. et al.: Colloids Surf. B 142, 392 (2016).
3. Panacek, D. et al.: Adv. Sci. 8, Artn. 2003090 (2021).
4. Hochvaldova, L. et al.: Sci. Rep. 12, Artn. 5222 (2022).

### 6L-01 REDUKCE OLIGONUKLEOTIDŮ TVOŘÍCÍCH CYTOSINOVÉ TETRAPLEXY NA RTUŤOVÉ ELEKTRODĚ

**MIROSLAV FOJTA, HANA PIVOŇKOVÁ, MONIKA  
HERMANOVÁ**

Biofyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Královopolská 135, 612 65  
Brno  
fojta@ibp.cz

Již dříve bylo zjištěno, že katodická redukce nukleobází v DNA vyžaduje protonaci příslušných zbytků bází<sup>1</sup>. V této práci jsme studovali vliv pH na redukci cytosinových zbytků v závislosti na délkách homocytosinových úseků. Naše výsledky ukazují, že elektrochemická redukce cytosinů v homo-blocích probíhá na rtuťové elektrodě při hodnotách pH blízkých neutrálnímu snadněji než redukce izolovaných cytosinů za stejných podmínek. Tato „snadnost“ redukce cytosinu v blocích vykazovala jasnou závislost na délce příslušného homocytosinového bloku. Nalezli jsme souvislost mezi schopností jednotlivých zkoumaných oligonukleotidů podléhat elektrochemické redukci v neutrálním prostředí a jejich schopností vytvářet tzv. i-motivy (interkalované cytosinové tetraplexy)<sup>2</sup>. Tyto struktury jsou rovněž závislé na protonizaci cytosinových zbytků, vzhledem k tomu že jejich základem jsou hemiprotonované cytosinové páry (viz Schéma 1).

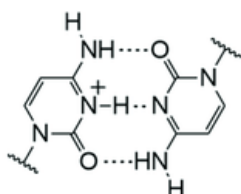


Schéma 1. Hemiprotonovaný pár C<sup>+</sup>•C

Naše výsledky tedy naznačují, že redukce cytosinů v delších blocích je méně náročná na dostupnost protonů v základním elektrolytu ve srovnání s redukcí izolovaných cytosinů a a cytosinů uspořádaných v kratších blocích. Tento jev může souviset se schopností cytosinových bloků akumulovat protony při tvorbě hemiprotonovaných párů C<sup>+</sup>•C.

Tato práce vznikla za podpory projektu SYMBIT reg. č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000477 financovaného z ERDF a projektu GAČR č. 22-11252S.

#### LITERATURA

1. Paleček E., Bartošík M.: Chem. Rev. 112, 3427 (2012).
2. Školáková, P. a kol., Nucleic Acids Res. 47, 2177 (2019).

### 6L-02 CHOVÁNÍ GUANINOVÝCH KVADRUPLEXŮ NA POVRŠÍCH ELEKTROD

**MONIKA HERMANOVÁ, HANA PIVOŇKOVÁ,  
MARTINA OUTLÁ, JAN ŠPAČEK, MIROSLAV FOJTA**

Biofyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Královopolská 135, 612 65  
Brno  
hermanova@ibp.cz

Guaninové kvadruplexy (G4) jsou alternativní sekundární struktury DNA nebo RNA vytvářené G-bohatými úseky jejich řetězců. Jejich podstatou je tvorba guaninových kvartetů a jejich stabilizace kationty (obvykle K<sup>+</sup>). Současný zájem o výzkum G4 vychází jednak z jejich předpokládané úlohy v buněčných regulačních procesech, a jednak z jejich aplikací v DNA nanotechnologiích ve spojení s různými technikami detekce jejich strukturálních přechodů, včetně metod elektrochemických<sup>1</sup>. Studie elektrochemického chování úseků DNA vytvářejících G4 s využitím oxidačních nebo redukčních procesů guaninových zbytků přináší ne zcela jednoznačné výsledky. Bylo například pozorováno, že guaniny v oligonukleotidu (ON) tvořícím G4 jsou na elektrodě ze skelného uhlíku oxidovány při podstatně pozitivnějším potenciálu než guaniny v nestrukturované DNA<sup>2</sup>. Naproti tomu naše experimenty s ON tvořícími a netvořícími G4, využívající elektrodu z pyrolytického grafitu (PGE), analogický efekt neprokázaly. Využití redukce guaninu na rtuťové elektrodě pro detekci G4<sup>3</sup> s sebou přináší komplikace v důsledku vlivu přítomnosti dalších bází na samotný redukční proces.

Jednoznačnou odpověď na otázku, zda ON tvořící G4 v roztoku si mohou zachovat podobu této struktury i po adsorpci na povrch elektrody, a zda je možno pro jejich odlišení od jiných struktur použít přímou elektrochemickou detekci, tyto studie tedy nepřinesly. V této práci jsme se pokusili využít nepřímou metodu založenou na hybridizaci DNA na povrchu elektrody a její detekci pomocí enzymové značky generující elektroaktivní indikátor<sup>4</sup>. ON s potenciálem tvořit G4 byly adsorbovány na povrch PGE jednak v přítomnosti KCl (stabilizujícího G4) a jednak LiCl (lithné ionty G4 destabilizují). V případě LiCl probíhala hybridizace s komplementární DNA sondou výrazně rychleji než v případě KCl. Tato pozorování jsou ve shodě s předpokladem, že z prostředí LiCl jsou řetězce ON adsorbovány na povrch PGE v nestrukturované podobě, která je dostupnější pro tvorbu dvoušroubovice s komplementární sondou, než draselnými ionty stabilizovaný kvadruplex.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 20-03187S.

#### LITERATURA

1. Mergny J., Sen D.: Chem. Rev. 119, 6290 (2019).
2. Rodrigues Pontinha A., et al.: Anal. Chem. 86, 5851 (2014).
3. Vidláková P., et al.: Anal. Bioanal. Chem. 407, 5817 (2015).
4. Špaček J., et al.: J. Electroanal. Chem. 862, 113951 (2020).

## 6L-03

## NOVÉ AKRIDÍN-BIS-TIOMOČOVINOVÉ LIGANDY S VYSOKOU SELEKTIVITOU K I-MOTÍVOM DNA

LUKÁŠ TRIZNA<sup>a</sup>, MARIANA BUDOVSKÁ<sup>b</sup>,  
LADISLAV JANOVEC<sup>b</sup>, VIKTOR VÍGLASKÝ<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Katedra biochémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesova 11, 040 01 Košice, <sup>b</sup> Katedra organickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesova 11, 040 01 Košice  
lukas.trizna@student.upjs.sk

Je všeobecne známe, že molekula DNA môže okrem štandardnej B-formy vytvárať aj iné, tzv. nekanonické topologické štruktúry<sup>1</sup>. Štvorvláknové i-motívy sa vytvárajú v kyslých podmienkach, v sekvenciách bohatých na cytozín, za vzniku hemiprotonizovaných väzieb cytozín-cytozín<sup>+</sup> vznikajúcich medzi jednotlivými vláknami tvoriacimi ich celkovú štruktúru. Vďaka ich závislosti od pH sa i-motívy vo veľkej miere využívajú v nanotechnológiach. Spočiatku sa predpokladalo, že ich výskyt *in vivo* je kvôli ich nestabilite pri fyziologickom pH nepravdepodobný, čo však aktuálne výskumy čoraz častejšie vyvracajú, a do pozornosti sa dostáva aj ich biologický význam v bunkách<sup>2</sup>.

Za účelom cielej regulácie patofyziologických stavov prostredníctvom tzv. DNA ligandov sa dizajnuje a následne študuje množstvo synteticky pripravených zlúčenín<sup>3</sup>. V rámci našej štúdie boli analyzované interakcie novo-syntetizovaných ligandov **1** a **2** so širokou škálou rozličných nekanonických štruktúr. Nosnými experimentálnymi metodikami tejto štúdie boli kruhový dichroizmus, UV-Vis absorpčná spektroskopia, spektrofotometria a polyakrylamidová gélová elektroforéza.

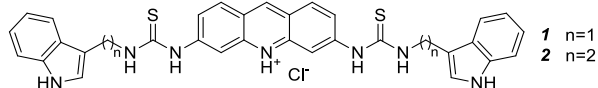


Schéma 1. Štruktúra študovaných zlúčenín

Na základe výsledkov analýz možno konštatovať, že zlúčeniny **1** a **2**, vzhľadom na široký diapazón študovaných motívov, vykazujú pomerne vysokú mieru stabilizácie, selektivity a afinity najmä k i-motívom DNA.

Tato práca vznikla vďaka finančnej podpore grantov VEGA č. 1/0138/20 a VVGS-PF-2022-2122.

## LITERATÚRA

- Choi J., Majima T.: Chem. Soc. Rev. 40, 5893 (2011).
- Day H. A., Pavlou P., Waller Z. A. E.: Bioorg. Med. Chem. 22, 4407 (2014).
- Tateishi-Karimata H., Sugimoto N.: Chem. Commun. 56, 2379 (2020).

## 6L-04

## KYSELINA ARACHIDONOVÁ A JEJÍ NITROVANÁ FORMA: CHEMISMUS A BIOLOGICKÁ AKTIVITA

JAN VACEK

Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta,  
Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3, 775 15  
Olomouc  
jan.vacek@upol.cz

Nitrované mastné kyseliny (NO<sub>2</sub>-MK) vznikajú interakcií reaktívnych forem dusíku s nenasycenými mastnými kyselinami. NO<sub>2</sub>-MK jsou pleiotropními modulatory buněčných procesů a podílí se na regulaci homeostázy. NO<sub>2</sub>-MK řadíme mezi elektrofilní látky, které mohou reagovat s biologicky významnými nukleofily, peptidy nebo proteiny. Mezi hlavními zástupci endogenně produkovaných NO<sub>2</sub>-MK patří kyselina nitro-olejová, nitro-linolová, nitro-arachidonová (NO<sub>2</sub>-AA) a jejich deriváty. V předloženém příspěvku je diskutována příprava a základní fyzikálně-chemické vlastnosti a elektrofilicita (reaktivita) NO<sub>2</sub>-AA ve srovnání s dalšími endogenně produkovanými NO<sub>2</sub>-MK. V pufovaném roztoku při pH 7,4 byla stanovena kritická micelární koncentrace (KMC = 41,6 μM) NO<sub>2</sub>-AA. Taktéž byla stanovena disociační konstanta ( $pK_a = 7,9$ ) a byla hodnocena stabilita NO<sub>2</sub>-AA. Stabilita mono-nitro derivátu AA je srovnatelná se stabilitou kyseliny nitro-olejové. Stabilita byla hodnocena pomocí LC-MS metody a elektrochemických metod. Nitro skupina lokalizovaná na dvojně vazbě MK je redukovatelná pomocí uhlíkových a rtuťových elektrod ( $E_p = -0,71$  V vs. Ag/AgCl/3M KCl). Mezi jedny z hlavních degradačních produktů NO<sub>2</sub>-AA patří hydroxylové deriváty. Strukturální flexibilita a elektronová struktura různých isomerů NO<sub>2</sub>-AA byla hodnocena pomocí nástrojů výpočetní chemie (LUMO = -0,74 eV). Fyzikálně-chemické vlastnosti popsané výše jsou v příspěvku dále diskutovány s ohledem na interakci NO<sub>2</sub>-AA s buněčnými membránami a její biologickou aktivitou hodnocenou pomocí *in vitro* buněčných modelů. Získané mechanistické výsledky (taktéž cit.<sup>1-5</sup>) mohou být dále využity nejenom k dalšímu studiu endogenně produkovaných NO<sub>2</sub>-MK, ale i synteticky připravených kandidátních molekul s definovanou farmakologickou aktivitou.

Tato práce vznikla za podpory GACR 19-21237Y.

## LITERATURA

- Hernychova L., et al.: IJBM 203, 116 (2022).
- Zatloukalova M., et al.: Redox Biol. 46, 102097 (2021).
- Novak D., et al.: Free Radic. Biol. Med. 164, 381 (2021).
- Grippo V., et al.: Redox Biol. 38, 101756 (2021).
- Zatloukalova M., et al.: Redox Biol. 24, 101213 (2019).

**6P-01**  
**SYNTHESIS AND SPECTROSCOPIC STUDY**  
**OF NOVEL COUMARIN DERIVATIVES**  
**AS DNA-INTERACTING AGENTS**

**ADRIÁN GUCKÝ<sup>a</sup>, MÁRIA KOŽURKOVÁ<sup>a</sup>, SLÁVKA HAMUEAKOVÁ<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Department of Biochemistry, Institute of Chemical Sciences, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 040 11 Košice, <sup>b</sup> Department of Organic Chemistry, Institute of Chemical Sciences, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 040 11 Košice  
 adrian.gucky@student.upjs.sk

Owing to its intriguing physicochemical properties and the versatile and relatively simple synthetic transformation into a variety of different derivatives, coumarin represents a privileged and desirable scaffold in the field of medicinal chemistry. A significant number of coumarin derivatives have been isolated, synthesized and tested to address distinctive pharmacological targets. Differently substituted coumarins exhibit a broad range of beneficial effects including anticancer, antibacterial, antiviral, antioxidant, neuroprotective and various other activities<sup>1</sup>. DNA represents the major pharmacological target of a substantial range of therapeutics. The study of their interaction with DNA is advantageous in elucidating their mode of action and structural specificity for binding regions. Various small ligands generally bind to DNA through three different non-covalent modes that include intercalative binding, major and/or minor groove binding and electrostatic interactions. The mechanisms of drug-DNA interactions may be investigated and deciphered with the aid of spectroscopic techniques<sup>2,3</sup>. In this study, we have synthesized a series of novel 4,7-disubstituted coumarin derivatives and evaluated their structure with the use of 1D and 2D NMR spectroscopy. Furthermore, we have attempted to ascertain their mode of interaction with calf thymus DNA (ctDNA) with the employment of UV-Visible, fluorescence and CD spectroscopies as well as thermal denaturation studies. In most cases, the results seem to indicate a groove binding mechanism rather than intercalation into DNA base pairs. However, the possibility of electrostatic interactions between the derivatives and ctDNA cannot be excluded either.

*The present work was supported by VEGA grant no. 1/0037/22.*

**REFERENCES**

1. Stefanachi A., Leonetti F., Pisani L., Catto M., Carotti A.: *Molecules* **23**, 250 (2018).
2. Sarwar T., Rehman S. U., Husain M. A., Ishqi H. M., Tabish M.: *Int. J. Biol. Macromol.* **73**, 9 (2015).
3. Sirajuddin M., Ali S., Badshah A.: *J. Photochem. Photobiol. B* **124**, 1 (2013).

**6P-02**  
**2,9-DISUBSTITUTED ACRIDINE DERIVATIVES –**  
**INTERACTION WITH DNA AND TOPOISOMERASE I**

**KRISTÍNA KROCHTOVÁ<sup>a</sup>, JÁN TAŠŠÍK<sup>a</sup>, LADISLAV JANOVEC<sup>b</sup>, MÁRIA KOŽURKOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Department of Biochemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovak Republic, <sup>b</sup> Department of Organic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovak Republic  
 kristina.krochtova@student.upjs.sk

Acridines are the unique group of molecules due to their physicochemical properties as well as due to their broad spectrum of biological activities. One of their main characteristics important for searching for new potentially active compounds is the ability to bind with nucleic acids<sup>1</sup>. In connection with nucleic acid interaction acridine derivatives display antiproliferative, antiviral, antiparasitic and antibacterial properties<sup>2</sup>. Also their effects on topoisomerase functions were studied since both types of topoisomerases (I and II) are currently targets for new antiproliferative active ligands<sup>3</sup>. Some acridines were active against both: topoisomerase I and topoisomerase II<sup>4</sup>.

The aim of this work was to study interactions between selected 2,9-disubstituted acridine derivatives and DNA resp. topoisomerase I. Based on the results it is possible to conclude that chosen ligands are capable of interaction, which was proven by changes in absorption, fluorescence, and CD spectra. Besides, there was conducted analysis of thermal denaturation curves where the shift in transition temperature was seen in range 7.7–8.3 °C. This shift also points to the complex formation between acridine molecules and DNA. Study of the impact of selected derivatives on the topoisomerase I proved their ability to inhibit the action of this enzyme and based on the further experiments for determination mechanism of inhibition we assumed that topoisomerase I is inhibited through the binding of ligands with DNA.

*This work was supported by VEGA Grant No. 1/0037/22.*

**REFERENCES**

1. Rugar J. S., Dobričić V. D., Aleksić M. M., Brborić J. S., Čudina O. A.: *Kragujev. J. Sci.* **40**, 83 (2018).
2. Gensicka-Kowalewska M., Cholewiński G., Dzierzbicka K.: *RSC Adv.* **7**, 15776 (2017).
3. Delgado J. L., Hsieh Ch.-M., Chan N.-L., Hiasa H.: *Biochem J.* **475**, 373 (2018).
4. Janočková J., Plšíková J., Kašpárková J., Brabec V., Jendželovský R., Mikeš J., Kovaľ J., Hamuláková S., Fedoročko P., Kuča K., Kožurková M.: *Eur. J. Pharm. Sci.* **76**, 192 (2015).

**6P-03**  
**EXTRACELLULAR ELECTRON TRANSPORT**  
**BY PROTEINS**

**JAKUB OLAJOŠ, MARIAN ANTALÍK**

*Department of Biochemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovakia  
 olajosjakub@gmail.com*

While the ET mechanism appears to be well studied for MHC in aqueous solution, the ETp mechanism in bioelectronic links such as STM remains misunderstood, in part due to the complexity of the electrode-protein interface. *Shewanella oneidensis* has developed one of the most amazing survival mechanisms in response to low oxygen concentrations. As cytoplasmic O<sub>2</sub> becomes scarce, several mm long electrically conductive cell tags begin to grow, allowing the bacterium to export electrons from the cytoplasm to the extracellular space to reduce extracellular electron acceptors instead of O<sub>2</sub>. Until recently, it has been speculated that these conductive tags are bacterial pili, which are thought to be relevant for extracellular electron transport (ETp) in other organisms, such as *Geobacter sulfurreducens*. It is believed that their electrical conductivity, which competes with the conductivity of artificial organic semiconductors, is given to these structures by multi-heme cytochromes (MHC), which form wire-like complexes spanning the outer membrane<sup>1</sup>.

The electron exchange reactions that take place between microbial cells and solid materials, referred to as extracellular electron transport (EET), have attracted a great deal of attention in microbial physiology, ecology, and biotechnology. Studies of model species of iron-reducing bacteria, such as *Geobacter spp.* and *Shewanella spp.* revealed that redox – active proteins, in particular cytochromes c outer membrane (OMC), play a key role in the EET process. Recent metagenomic analyzes have revealed that various microorganisms that have not been shown to have EET ability also contain OMC-like proteins, suggesting that OMC via OMC could be more conserved in microorganisms than previously thought<sup>2</sup>.

*This work was supported by the Grant Agency of Ministry of the Education, Science, Research and Sport of the Slovak Republic VEGA 1/0138/20.*

**REFERENCES**

1. Gorby Y., et al.: Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 103, 11358 (2006).
2. Pirbadian S., et al.: *Shewanella oneidensis* MR-1 nanowires are outer membrane and periplasmic extensions of the extracellular electron transport components. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA*. Vol. 111, pp. 12883–12888 (2014).

**6P-04**  
**DETERMINATION OF THE BINDING AFFINITIES**  
**OF NOVEL INDOLE-CHALCONE HYBRIDS WITH**  
**BOVINE SERUM ALBUMINE AND CT DNA**

**SIMONA SOVOVÁ<sup>a\*</sup>, DOMINIKA RADOVÁ<sup>a</sup>, DANICA SABOLOVÁ<sup>a</sup>, ZUZANA KUDLIČKOVÁ<sup>b</sup>**

*<sup>a</sup> Department of Biochemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovakia, <sup>b</sup> Laboratory of Nuclear Magnetic Resonance, Institute of Chemistry, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovakia  
 simona.sovova@student.upjs.sk*

Deoxyribonucleic acid (DNA) as a template for protein synthesis is the primary target of the small molecules used to treat certain types of cancer or infections<sup>1</sup>. Bovine serum albumin (BSA) is a transporter and distributor of many molecules with endogenous and exogenous origin<sup>2</sup>. The study of the DNA-drug interactions is important for designing the new active pharmaceutical ingredients<sup>1</sup> and the study of protein-drug interactions can provide information about therapeutic effectiveness of the active pharmaceutical ingredients<sup>2</sup>. This work was focused on the interactions of the newly synthesized indole-chalcone hybrids with CT DNA and BSA. Molecules containing indole ring have similar biological effects as chalcones, such as anticancer, anti-inflammatory and antimicrobial.

The aim of this study was to investigate the DNA/BSA binding activity of three newly synthesized indole based chalcones **C1**: (2E)-1-(2-fluorophenyl)-3-(2-propoxy-1H-indole-3-yl)prop-2-en-1-one; **C2**: (2E)-1-(2-fluorophenyl)-3-(1-methoxy-1H-indole-3-yl)prop-2-en-1-one; **C3**: (2E)-1-(2-fluorophenyl)-3-(1H-indole-3-yl)prop-2-en-1-one by using biophysical spectral methods. Also, the standard plasmid cleavage assay and *h*Topo I inhibition were investigated by electrophoresis. The spectroscopic measurements have shown that all studied indole-chalcone hybrids bind into DNA with binding constants ( $K_b$ ) in the range  $0.14 \times 10^6$ – $3.94 \times 10^6$  M<sup>-1</sup>. Their Stern-Volmer constants ( $K_{sv}$ ) for *Ethidium bromide* displacement assay were in the range from  $0.66 \times 10^3$  to  $7.26 \times 10^3$  M<sup>-1</sup> and for *Hoechst 33258* displacement assay were  $1.44 \times 10^4$ – $2.16 \times 10^4$  M<sup>-1</sup>.  $K_{sv}$  of the interaction with BSA were in the order of  $10^5$  M<sup>-1</sup>. The electrophoretic record has shown inhibition of *h*Topo I only by **C3** at concentration 60 μM.

*This work was supported by VEGA 1/0037/22.*

**REFERENCES**

1. Bayraktepe D. E.: *Microchem. J.* 157, 1 (2020).
2. Roy S., Nandi R. K., Ganai S., Majumdar K. C., Das T. K.: *J. Pharm. Anal.* 7, 19 (2017).



## 7L-01

**INOVAČE PŘEDMĚTU APLIKOVANÁ CHEMIE A MODERNÍ METODY CHEMICKÉHO VÝZKUMU NA PEDAGOGICKÉ FAKULTĚ MASARYKOVY UNIVERZITY****HANA ČÍDLOVÁ\***, JANA HORSKÁ*Katedra fyziky, chemie a odborného vzdělávání, Pedagogická fakulta Masarykovy univerzity, Poříčí 7, 603 00 Brno  
761@mail.muni.cz*

Na PdF MU je v magisterském stupni studia již 9 let vyučován předmět Aplikovaná chemie a moderní metody chemického výzkumu. Ve školním roce 2021/22 jsme se rozhodli jej kompletně inovovat a převést na novou formu. Původně výuka probíhala tak, že vedoucí výuky nejprve přednesl teorii, jejíž využití následně se studenty procvičoval na konkrétních příkladech či úkolech. Většinou šlo o odborná fyzikálně chemická a analytická témata. Nyní je základem výuky práce s textem prvních tří dílů série velmi čtivě zpracovaných populárně naučných prací M. Kechlibara *Zapomenuté příběhy*<sup>1–3</sup>.

Před výukou studenti vždy obdrží seznam problematik, na které se mají v dané lekci hlouběji zaměřit. V úvodu lekce se nejprve snaží zadané úkoly vyřešit vlastními silami bez použití literatury, internetu aj. Následně si mohou přečíst anebo vyslechnout relevantní kapitoly ze série *Zapomenutých příběhů* a do konce lekce mohou o textu společně diskutovat, odpovědi na zadané úkoly kdekoli vyhledávat a diskutovat o nich s vyučujícím i mezi sebou. Studenti během výuky vyhledávají v textu a kontrolují např. historické milníky vývoje fyziky, chemie, medicíny, ekologie apod., zmínky o různých jevech či událostech souvisejících zejména s chemií či fyzikou, provádějí související výpočty aj. tak, aby na závěr práce textu do detailu odborně rozuměli, aby byli tzv. „nad věcí“. Doma pak odpovědi samostatně sepiší a odevzdají vyučujícímu. Pokud odpovědi nejsou správně, student si je po upozornění a případně konzultaci s vyučujícím opraví.

Studenti uvedenou inovaci výuky přijali kladně, mj. pro blízkost jejího pojetí s konceptem STEM. Rozbor studentských prací ukazuje, že i přes předcházející odborné vzdělání studentů, jejich již složenou státní zkoušku z chemie na závěr bakalářského studia, i přes veškerou péči věnovanou studentům v konkrétní výuce, mnozí z nich nadále opakují určité druhy chyb. Typickým příkladem jsou problémy s řešením kinetiky jaderné přeměny při přirozené radioaktivitě. K dalším problematičtým tématům patří např. výpočet objemu dutých těles nebo vyjadřovací i odborné problémy při práci s nově zavedenými pojmy.

## LITERATURA

1. Kechlibar M.: *Zapomenuté příběhy*. Klika, Praha 2018.
2. Kechlibar M.: *Zapomenuté příběhy 2*. Klika, Praha 2019.
3. Kechlibar M.: *Zapomenuté příběhy 3*. Klika, Praha 2020.

## 7L-02

**VÝUKA CHEMIE NA ZŠ A SŠ Z HLEDISKA KURIKULÁRNÍCH DOKUMENTŮ****HANA ČTRNÁCTOVÁ***Univerzita Karlova – Přírodovědecká fakulta, Albertov 6,  
128 43 Praha 2  
hana.ctrnactova@natur.cuni.cz*

Chemie je součástí výuky jako samostatný předmět na všech středních školách (SŠ) a na základních školách (ZŠ) již více než 70 let. Od doby zavedení předmětu chemie, stejně jako u ostatních předmětů, stanovuje obsah a rozsah učiva na základě svých pravomocí MŠMT, a to formou závazných kurikulárních dokumentů. Do r. 1989 plnily tento úkol tzv. učební osnovy. V 90. letech minulého století byly nejprve tyto učební osnovy prohlášeny za nezávazné, následně byly vytvořeny nové kurikulární dokumenty, tzv. standardy učiva, které byly na počátku 21. století znovu nahrazeny učebními osnovami.

V r. 2005 vstoupil v platnost nový školský zákon č. 561/2004 Sb.<sup>1</sup>, který mj. zavádí nové kurikulární dokumenty pro všechny úrovně vzdělávání. Těmito dokumenty jsou tzv. rámcové vzdělávací programy (RVP), na jejichž základě si jednotlivé školy vytvářejí školní vzdělávací programy (ŠVP).

RVP pro základní vzdělávání (RVP ZV)<sup>2</sup>, platný od r. 2005, stejně jako RVP pro gymnázia (RVP G)<sup>3</sup>, platný od r. 2007, považují za významné dosažení tzv. klíčových kompetencí, kterými jsou např. kompetence k učení nebo kompetence k řešení problémů. V RVP jsou jednotlivé obory (předměty) sdruženy do vzdělávacích oblastí, které jsou uvedeny celkovou charakteristikou oblasti a jejím cílovým zameřením. Chemie je zařazena do oblasti Člověk a příroda spolu s fyzikou, biologií, geografii a v RVP G i geologií. Casová dotace pro jednotlivé přírodovědné předměty však není pevně určená, ale je stanovena pro celou oblast Člověk a příroda dohromady a záleží jen na škole, kolik hodin, jakým předmětům a ve kterých ročnících v rámci svého ŠVP přidělí.

Obsah učiva chemie je v RVP uveden ve formě očekávaných výstupů, tj. co by měl žák znát po výuce daného tématu, a učiva, tj. jaké učivo by mělo být v daném tématu uvedeno. Příkladem očekávaného výstupu v RVP ZV je např. žák: rozlišuje směsi a chemické látky; orientuje se na stupnici pH a uvede příklady uplatňování neutralizace v praxi; rozliší nejjednodušší uhlovodíky, uvede jejich zdroje, vlastnosti a použití; příkladem učiva je např. vzduch – složení, čistota ovzduší, ozonová vrstva; oxidy – názvosloví, vlastnosti a použití vybraných prakticky významných oxidů; paliva – ropa, uhlí, zemní plyn, průmyslově vyráběná paliva. V RVP G jsou uvedeny jako očekávané výstupy např. žák: využívá odbornou terminologii při popisu látek a vysvětlování chemických dějů; předvídá průběh typických reakcí anorganických sloučenin; aplikuje znalosti o průběhu organických reakcí na konkrétních příkladech; charakterizuje základní metabolické procesy a jejich význam; příkladem učiva je např. Stavba atomu, Vodík a jeho sloučeniny, Heterocyklické sloučeniny, Nukleové kyseliny.

Po dobu platnosti těchto závazných kurikulárních dokumentů byly prováděny různé dílčí změny, které se obsahu učiva chemie významněji nedotýkaly. Začátkem r. 2021 se však náhle objevila nová revize RVP ZV<sup>4</sup>, která v souvislosti se zavedením nové klíčové kompetence – kompetence digitální a nahrazením původní vzdělávací oblasti Informační a komunikační technologie oblastí Informatika

s inovovanými očekávanými výstupy i doporučeným učivem pro 1. a 2. stupeň základního vzdělávání – navýšila počet výukových hodin této oblasti na ZŠ ze dvou na šest a vyžádala si tak redukci hodin jiných vzdělávacích oblastí, mj. oblasti Člověk a příroda. V souvislosti s tím došlo zároveň ke značně nejasné redukci učiva přírodovědných předmětů, mezi nimi i chemie. ČSCH reagovala na tyto neuvážené redukce otevřeným dopisem, který získal rychle podporu členů ČSCH. V reakci na náš dopis se dne 29. 4. 2021 uskutečnilo online jednání se zástupci MŠMT, o jehož výsledcích byli členové ČSCH informováni<sup>5</sup>.

V souvislosti s přijetím Strategie vzdělávací politiky ČR 2030+ (cit.<sup>6</sup>), zpracovanou širokou skupinou odborníků po rozsáhlé diskusi s řadou odborných skupin, která stanoví základní pilíře vzdělávání v ČR v příštím desetiletí, se začala v polovině r. 2021 připravovat celková revize RVP ZV. Zástupci MŠMT uvedli, že v souvislosti s touto „velkou“ revizí bude rozhodně využita komunikace a širší diskuse se zainteresovanými organizacemi a skupinami, mezi jinými i s ČSCH.

V současnosti tedy dochází k vytváření celkové koncepce změny kurikulárních dokumentů a tvorbě pracovních skupin pro jejich úpravu v jednotlivých oblastech a oborech. Zdá se, že důraz bude i nadále položen na získávání kompetencí a plnění očekávaných výstupů. Jak se změny projeví v obsahu učiva, zatím zřejmé není. Aby se změnil obsah a řazení učiva, totiž není jen úkol tvůrců kurikula, ale i přijetí změn vyučujícími a ti se často ukazují jako velmi konzervativní. Změnit metodu výuky je poměrně dobře možné, ale vynechat některé téma současného učiva nebo změnit pořadí témat je pro učitele obtížně přijatelné. Proto je zřejmé, že před tvůrci nového kurikula pro ZŠ a následně pro SŠ stojí problém, který by měly řešit skutečně kvalifikované kolektivy odborníků s respektem učitelů tak, aby dokázaly učitele přesvědčit o správnosti navrhovaných změn.

*Tato práce vznikla za podpory projektu COOPERATIO v oblasti „Subject Specific Education Research“, který byl udělen UK.*

#### LITERATURA

1. Zákon č. 561/2004 Sb., o předškolním, základním, středním, vyšším odborném a jiném vzdělávání. <https://www.msmt.cz/dokumenty-3/skolsky-zakon-ve-zneni-ucinnem-od-11-7-2020>
2. Rámcový vzdělávací program pro základní vzdělávání. VÚP – Tauris, Praha 2005.
3. Rámcový vzdělávací program pro gymnázia. VÚP – Tauris, Praha 2007.
4. Rámcový vzdělávací program pro základní vzdělávání 2021. <http://www.nuv.cz/file/4983>
5. Čtrnáctová H., John J.: Chem. Listy 115, 293 (2021).
6. Strategie vzdělávací politiky ČR 2030+.
7. <https://www.msmt.cz/vzdelavani/skolstvi-v-cr/strategie-2030>

#### 7L-03

### INTERAKTIVNÍ MOOC KURZ „VÝZNAM RADIOCHEMIE A JADERNÉ CHEMIE PRO NAŠI SPOLEČNOST“

#### PETR DISTLER

*Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha 1*

Zajímavým zdrojem aktuálních informací z jaderné chemie a radiochemie pro žáky, studenty i veřejnost může být tzv. MOOC (Massive open online course, do češtiny volně překládán jako „hromadný otevřený online kurz“). Hlavním cílem MOOCu s názvem „Essential radiochemistry for society“ je nabídnout ucelený online kurz, jehož absolvováním se zlepší nejenom povědomí o praktickém využití jaderné chemie a radiochemie v každodenním životě, ale může přilákat i nové zájemce o studium těchto zajímavých oborů. MOOC byl vytvořen v rámci evropského projektu CINCH (Cooperation in Education and Training in Nuclear and Radiochemistry)<sup>1</sup> a kromě týmu grafiků a IT/výukové podpory se na jeho vzniku podílelo 14 vědeckých pracovníků ze šesti evropských univerzit. Příspěvek tedy prezentuje společnou práci autorského týmu.

Obsah kurzu je rozdělen do pěti částí (Radiochemie pro: životní prostředí, zdraví, průmysl, jadernou energii a společnost). Každému odpovídá jeden týden a přibližná studijní zátěž pěti hodin. V každém celku student najde motivační úvod, pestré originální studijní materiály (texty, videa, infografiky, kvízy, materiály nad základní rámec kurzu) a téma je ukončeno závěrečným testem, kterým student ověří svou orientaci v dané problematice. Kurz je v angličtině a je pro zájemce zdarma dostupný na stránkách milánské univerzity Politecnico di Milano<sup>2</sup>. Během pilotáže ( $N = 203$ ) MOOCu byla vyhodnocena kvalita jednotlivých částí, náročnější témata nebo hodnocení různých typů studijních materiálů na základě zpětné vazby od studentů. Vysoké skóre, kterého studenti v závěru každého celku dosáhli, svědčí o efektivním a kvalitním sestavení jednotlivých lekcí.

*Tato práce vznikla za podpory grantů Horizon 2020 (MEET-CINCH, 754972, a A-CINCH, 945301).*

#### LITERATURA

1. Němec M., Distler P., John J.: Jaderná energie/Jadrová energia 2(4), 32 (2021).
2. [https://www.pok.polimi.it/courses/course-v1:Polimi+ERS101+2021\\_M8/about](https://www.pok.polimi.it/courses/course-v1:Polimi+ERS101+2021_M8/about), staženo 10. 7. 2022.

7L-04

**PŘÍBĚH OBJEVOVÁNÍ VITAMINŮ****MARTIN KRÁTKÝ**

*Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Univerzita Karlova, Akadematika Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové martin.kratky@faf.cuni.cz*

Vitaminy jsou pro lidské tělo nepostradatelné látky, které nemají funkci stavební ani energetickou, ale slouží jako koenzymy v biochemických přeměnách. Člověk musí většinu vitaminů přijímat v potravě, léčebně se používají v případě jejich nedostatku, poruch metabolismu, ale i ke specifické terapii některých chorob<sup>1</sup>. Některé jsou též populární u široké veřejnosti, která jim (mnohdy nesprávně) přisuzuje až zázračné účinky, z poslední doby např. v prevenci a léčbě covid-19.

Existence avitaminózy je u člověka známa od pradávna (skorbut, rachitis aj.), stejně tak se empiricky hledaly cesty, jak jim předcházet. Počátky moderního výzkumu spadají do přelomu 19. a 20. století, kdy začal být hledán a chemicky charakterizován vitamin B<sub>1</sub> (thiamin)<sup>1</sup>, který byl získán v r. 1910. Na jeho identifikaci se podílelo více vědců, za objevitele je obvykle (a nesprávně) považován chemik polského původu Kazimierz Funk. Ten také zavedl pojem vitamin (vital + amine) a úspěšně předpověděl existenci dalších<sup>2</sup>. V krystalické podobě se thiamin podařilo získat r. 1926 a synteticky byl připraven až o 10 let později<sup>1</sup>.

Následovaly objevy vitaminů A, C, dalších vitaminů skupiny B a nových skupin D, E a K. Posledním popsáným vitaminem byl kobalamin (B<sub>12</sub>; 1948)<sup>1,2</sup>. Obvyklý postup byl následující – identifikace potraviny, jejíž vynechání ze stravy vedlo k avitaminóze, poté příprava koncentrovaného extraktu, z něhož byl získán více či méně čistý vitamin, získání sloučeniny v krystalickém stavu, určení struktury, která byla následně potvrzena syntetickou přípravou. Paralelně probíhala biochemická a farmakologická charakterizace.

Za objev funkce a struktur vitaminů byla udělena řada Nobelových cen – za chemii i fyziologii a lékařství<sup>2</sup>. K nejznámějším nositelům patří maďarský lékař a biochemik Albert Szent-Györgyi, který ji získal v r. 1937 za izolaci a výzkum vitaminu C. Tento rok byla udělena za výzkum vitaminů i Nobelova cena za chemii, a to Normanu Haworthovi (také za práce ohledně vitaminu C) a Paulu Karrerovi za výzkum karotenoidů, vitaminů skupiny A a B<sub>2</sub>.

V historii byla také popsána řada látek, které byly považovány za vitaminy, nicméně vitaminový účinek nemají<sup>1</sup>. Současný výzkum vitaminů je převážně farmakologický.

*Tato práce vznikla za podpory GAČR 20-19638Y a SVV 260547.*

**LITERATURA**

1. Kňazko M., v knize: *Chemická léčiva*, kap. 7.1, s. 484. Avicenum, Praha 1987.
2. <https://en.wikipedia.org/wiki/Vitamin>, staženo 26. 5. 2022.

7L-05

**CHEMIK EMIL VOTOČEK A NOVĚ NALEZENÉ ARCHIVÁLIE****IVANA LORENCOVÁ**

*Národní technické muzeum, Kostelní 42, 170 78 Praha 7 ivana.lorencova@gmail.com*

Emil Votoček (5. října 1872, Hostinné – 11. října 1950, Praha) byl významným představitelem organické chemie. Byl jednou z nejvýznamnějších osobností české chemie první poloviny 20. století. S jeho působením došlo v první třetině dvacátého století na pražské polytechnice ke zvýšení úrovně výuky chemie a vědeckého výzkumu. Byl autorem učebnic anorganické a organické chemie, z kterých studovalo několik generací chemiků. Emil Votoček působil na pražské technice od roku 1895, kdy se stal asistentem, v roce 1905 byl jmenován docentem a o dva roky později profesorem experimentální anorganické a organické chemie. Zpočátku se věnoval organickým sloučeninám a barvivům, později jeho vědecká činnost zasahovala do oblasti organické, anorganické a analytické chemie<sup>1,2</sup>.

Emil Votoček byl neuvěřitelně činnorodý. Kromě vyučování chemie, se věnoval odborné publikační a redaktorské práci v časopise *Listy chemické*. Spolu s Jaroslavem Heyrovským, profesorem chemie na Univerzitě Karlově a nositelem Nobelovy ceny za chemii (1959), založil v roce 1929 reprezentační časopis *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*, který dnes přináší vědecké práce českých a zahraničních chemiků publikované v anglickém jazyce.

Aktivně se věnoval hudbě, hrál na několik hudebních nástrojů a sestavil obsáhlý hudební slovník<sup>3</sup>. Svou výbornou znalost sedmi světových jazyků uplatnil při vypracování několika různojazyčných terminologických a frazeologických slovníků, např. česko-francouzský nebo šestijazyčný česko-německo-anglicko-italsko-latinsko-francouzský. Sepsal Česko-francouzskou konverzací a frazeologii. Zajímala ho filologie, lexikografie a frazeologie.

Emil Votoček byl členem terminologické komise organické chemie v rámci *International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC)*. Zasloužil se také o rozvoj českého chemického názvosloví anorganických sloučenin. Spolu s Alexandrem Sommerem-Batfem vytvořil systematické a srozumitelné názvosloví. Pro určování oxidačního čísla prvků zavedl osm přípon, které dnes zná každý školák: -ný, -natý, -itý, ičitý, -ecný nebo -ičný, -ový, -istý, -ičelý. Tento návrh přednesl oficiálně v roce 1918.

Rád cestoval, soukromě i pracovně. Přednášel o svých pracích na mezinárodních kongresech chemiků v Paříži 1927 a v Římě 1938. Získal řadu ocenění, byl vyznamenán čestnými doktoráty významných zahraničních univerzit. Roku 1933 byl Votoček navržen na udělení Nobelovy ceny, v tomto roce však Nobelova cena udělena nebyla chemie<sup>4</sup>. Byl důstojníkem francouzské Čestné legie.

Rektor VŠCHT v Praze udílí jako nejvyšší ocenění vědeckých zásluh v chemii Votočkovu medaili.

Ačkoliv se jedná o známou a významnou osobnost, nebyla o něm dosud napsána monografie, která by mapovala jeho život a dílo. Na odborné publikaci se nyní pracují a bude vydána koncem roku 2022. V Archivu Národního technického muzea jsou uloženy archiválie, zachovaly se vzácné skleněné negativy z jeho zahraničních cest, papírová fotografická alba s poznámkami, několik desítek originálních notových záznamů písní<sup>5</sup>. Fond 573 Emil Votoček byl získán do

Archivu NTM v roce 1960 od Libuše Votočkové ze Senohrab. Zachovalo se např. 7 sešitů přednášek a laboratorních záznamů, část korespondence. Další archiválie byly převedeny z Vysoké školy chemicko-technologické do správy Archivu NTM. Rodinné fotografie byly poskytnuty z Městského muzea v Hostinném chemie<sup>6</sup>.

*Práce vznikla za finanční podpory Ministerstva kultury v rámci institucionálního financování na dlouhodobý koncepční rozvoj výzkumné organizace Národní technické muzeum (DKRVO, MK000023299).*

#### LITERATURA

1. Dostál J.: Emil Votoček pětasedmdesátiletý. *Svobodné noviny*, roč. 4, č. 233, 5. 10. (1947), s. 5
2. Švagr E.: Emil Votoček sedmdesátníkem. *Lidové noviny*, roč. 50, č. 502, 4. 10. (1942), s. 4
3. Československý hudební slovník osob a institucí II. (M–Ž), 1965, Státní hudební vydavatelství, Praha, s. 912
4. Jindra J.: Češi a vědecké Nobelovy ceny. *Akademický bulletin*, 7–8, 2011, s. 12–16
5. Dostál J.: Nekrolog. *Hudební rozhledy*, roč. III–1950/51, č. 3
6. Anděl T., kronikář města. Prof. dr. Emil Votoček, slavný rodák města Hostinného. *Zpravodaj města Hostinné*, 9/2010, s. 5–6.

#### 7L-06

### WEBOVÉ STRÁNKY „CHEMIE ŽIJE“ – INTERAKTIVNÍ MAPA CHEMICKÉHO PRŮMYSLU

#### KAMILA PETRŽELOVÁ, KLÁRA SADÍLKOVÁ

*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta UP, 17. listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc  
kamila.petrzelova@upol.cz*

Mezi současné trendy ve vzdělávání neodmyslitelně patří využívání moderních ICT technologií ve vyučování. K dalším trendům patří využívání výukových materiálů vytvořených ve whiteboardovém prostředí místo klasické tabule, nebo výuka se zařazením videa<sup>1</sup>.

Katedra anorganické chemie se již více než 50 let věnuje vzdělávání profesních chemiků a také budoucích učitelů chemie. Nyní pod její záštitou vznikají nové webové stránky s názvem „CHEMIE ŽIJE“, které si kladnou za cíl vytvořit on-line výukové materiály pro studenty 1. ročníků chemických oborů na VŠ, a zároveň vytvořit sekci, kde si učitelé chemie ze školské praxe mohou zdarma stáhnout zajímavé výukové materiály<sup>2</sup>.

Jako první výukový materiál je na www stránkách k dispozici sestavená interaktivní mapa chemického průmyslu, kde nejen studenti ale také vyučující na ZŠ a SŠ mohou najít informace o chemickém průmyslu v ČR. K jednotlivým podnikům jsou volně ke stažení materiály pro organizaci exkurze. Pro učitele je zde zpracovaná teoretická příprava k dané technologii<sup>3</sup>. Následně byly vytvořeny další materiály pro žáky – aktivity na zopakování důležitých poznatků, které budou potřeba k pochopení odborné náplně exkurze a na upevnění získaných znalostí. K dispozici jsou na stránkách volně ke stažení i pracovní listy, které mohou žáci doplňovat již v průběhu exkurze a tím více udržet jejich pozornost<sup>4</sup>.

V příspěvku budou detailněji představeny www stránky „CHEMIE ŽIJE“ s ukázkou interaktivní mapy chemického průmyslu ČR a podpůrných materiálů pro exkurze.

#### LITERATURA

1. Mašek J.: *10 vzdělávacích trendů pro rok 2021*. Metodický portál RVP.CZ. Národní pedagogický institut ČR. <https://clanky.rvp.cz/clanek/c/Z/22792/10-vzdelavacich-trendu-pro-rok2021.html>, staženo 12. 4. 2022.
2. Fišerová V.: *Průmyslová výroba sody a tvorba výukových materiálů k tématu soda*. Bakalářská práce. Univerzita Palackého v Olomouci, Olomouc 2022.
3. Prášilová J., Kameníček J.: *Vybrané kapitoly z průmyslové chemie*. Olomouc: Univerzita Palackého v Olomouci, Olomouc 2013.
4. Sadílková K.: *Tvorba podpůrných materiálů pro exkurze do chemických podniků vyrábějících základní anorganické sloučeniny*. Diplomová práce. Univerzita Palackého v Olomouci, Olomouc 2022.

#### 7L-07

### WEBOVÉ PORTÁLY NA PODPORU VÝUKY CHEMIE A STUDENTŮ UČITELSTVÍ

#### VERONIKA ŠVANDOVÁ, PATRIK POSPÍŠIL, JANA HRUBA

*Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kamenice 5, 625 00 Brno  
106381@mail.muni.cz*

V příspěvku jsou postupně představeny webové portály provozované na Přírodovědecké fakultě Masarykovy univerzity, jejichž základním posláním je podpora výuky chemie na základních a středních školách v České republice a podpora studentů učitelství v jejich vysokoškolském studiu a přechodu do praxe.

Webový portál Učit se učit<sup>1</sup> vznikl v roce 2010 s cílem lépe připravit budoucí středoškolské učitele (přírodovědných předmětů a informatiky Masarykovy univerzity) na jejich budoucí povolání a požadavky praxe. V roce 2019 byl portál obnoven a od roku 2020 inovován. Postupně byl rozšiřován jeho redakční tým, byl převeden do nového redakčního systému, který je v souladu s jednotným vizuálním stylem Masarykovy univerzity a odpovídá současným (nejen grafickým) trendům. Obsahuje rubriky Novinky, Nabídka pravidelných aktivit, Kalendář, Zajímavosti z oboru a Inspirace do výuky. Obsah je též členěn dle jednotlivých oborů (chemie, dále je zastoupena též biologie, geografie, matematika, fyzika či učitelství obecně).

Webový portál Webchemie<sup>2</sup> vznikl v r. 2011 na základě výzkumného šetření<sup>3</sup> zkoumajícího priority středoškolských učitelů chemie realizovaného v letech 2008–2011. Portál je určen především učitelům chemie středních a základních škol České republiky, zajímavé informace v něm však najdou i žáci nižších stupňů škol, či veřejnost. Portál prošel v letech 2020–2022 hloubkovou inovací. Relevantní obsah byl postupně převeden do nového redakčního systému a jednotného vizuálního stylu Masarykovy univerzity. V uvedeném období byl přidáván nový obsah (především do sekce Zajímavosti, která obsahuje nejen popularizační články). Rozvoj jednotlivých částí portálu je plánován i do budoucna (především propojování z dalšími weby Přírodovědecké fakulty Masarykovy univerzity, např.

s databází chemických pokusů).

*Tato práce vznikla za podpory projektu Zkvalitnění a Inovace Přípravy budoucích učitelů na MUNI (ZIP MUNI), registrační číslo CZ.02.3.68/0.0/0.0/19\_068/0016170.*

#### LITERATURA

1. Masarykova univerzita. Učit se učit. <http://www.ucitseucit.cz/>, staženo 30. 6. 2022.
2. Masarykova univerzita. Webchemie. <http://www.webchemie.cz/>, staženo 30. 6. 2022.
3. Švandová V., Müller L.: Internet a výuka chemie (Media4u Magazine) 8, X3, 105–111 (2011).

#### 7L-08

#### NANOME – VÝUKA CHEMIE VE VIRTUÁLNÍ REALITĚ

**PETR ŠMEJKAL<sup>a</sup>, LUDEK MÍKA<sup>a</sup>, CARLO PIROLA<sup>b</sup>, ALESSANDRO PEDRETTI<sup>b</sup>, CLAUDE JOLIVALT<sup>c</sup>, NIKOLA KOUPILOVÁ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Katedra učitelství a didaktiky chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 8, 128 43 Praha 2, Česká republika, <sup>b</sup> Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Milano, Via Golgi, 19, Milano, Italy, <sup>c</sup> Laboratoire de Réactivité de Surface UMR, Faculté des Sciences et Ingénierie, Sorbonne Université, 4 place Jussieu, 75252 Paris cedex 05  
psmejkal@natur.cuni.cz

Výuka témat spojených se strukturou látek a vlastnostmi, které ze struktury látek vycházejí, může být v řadě případů obtížná a demotivující. Jde totiž o náročné téma, které od žáků i studentů vyžaduje značnou pozornost, soustředění a rovněž prostorovou představivost. V tomto ohledu mohou při výuce pomoci různé 3D zobrazovací programy, jako např. VEGA ZZ<sup>1</sup> nebo BIOVIA Discovery Studio Visualizer<sup>2</sup>, který také disponuje módem pro stereoskopické<sup>3</sup> zobrazení molekul. Možná ještě názornější při výuce výše uvedených témat může být využití virtuální reality (VR). Virtuální realitu jako takovou můžeme charakterizovat např. jako „Počítačem generované prostředí, které umožňuje vnímat toto prostředí obdobně reálné zkušenosti“<sup>4</sup>. Počítač ve VR vlastně generuje dle daného návrhu objekty, které tvoří zvolené prostředí, které můžeme vnímat trojrozměrně a s nímž můžeme do určité míry nebo zcela interagovat tak, jako bychom byli v reálném světě tohoto prostředí. Ve výuce chemie tak můžeme např. navštívit virtuální chemickou laborator<sup>5</sup> a nebo jednotku, kde probíhá frakční destilace ropy<sup>6</sup>. Vhodnou platformou pro již zmíněnou výuku témat spojených se strukturou látek a jejich vlastnostmi se jeví být program Nanome<sup>7</sup>. Nanome je primárně komerční kolaborativní software pro design (navrhování) a prohlížení molekul ve virtuální realitě, ale nabízí také verzi zdarma a rovněž vzdělávací (EDU) verzi, které lze využít ve výuce chemie. Jakkoliv se VR jeví jako perspektivní a názorný prostředek pro výuku chemie, stále její nasazení do reálné výuky přináší řadu otázek. Například, řada lidí po použití VR hlásí bolesti hlavy, únavu očí, závratě nebo nevolnost. Je také otázkou, zda je opravdu využití VR dostatečně názorné, uživatelsky přívětivé a zda při uvedených obtížích opravdu může být motivující pro dostatečně velkou skupinu žáků a studentů.

Z uvedených důvodů jsme se v rámci naší studie zaměřili na výhody, možnosti a limity využití programu Nanome při výuce témat spojených se strukturou látek a jejich vlastnostmi a dále na sledování a hodnocení motivace žáků při výuce ve VR. Za účelem sběru dat byly využity rozhovory se žáky, pozorování procesu výuky dvěma výzkumníky a dále trojice dotazníků hodnotících motivaci (MSLQ<sup>8</sup> a IMI<sup>9</sup>) a rovněž uživatelskou zkušenost při práci s VR. Celkem 15 výukových akcí (o délce 90–180 minut) s využitím VR se zúčastnilo zhruba 100 žáků a studentů ze 3 univerzit a 4 středních škol. Pro účely výuky témat zaměřených na strukturu látek a jejich vlastnosti bylo vytvořeno 15 výukových jednotek, které obsahovaly výuková témata spojená např. s různými typy struktury bílkovin, krystalografií nebo alotropickými modifikacemi uhlíku a fosforu. Vybrané materiály z výše uvedených budou rovněž prezentovány v rámci příspěvku.

Výsledky provedeného šetření naznačují, že ačkoliv výuka chemie ve VR provázela řada technických problémů a rovněž i problémů zdravotních, i tak tato výuka byla hodnocena velmi pozitivně a vedla k vysoké motivaci žáků a studentů participujících v šetření. Výuka ve VR a rovněž vytvořené výukové materiály byly také účastníky šetření považovány za názorné, kvalitní a zajímavé, přičemž účastníci šetření naznačovali, že jejich porozumění danému tématu výuka ve VR napomáhá. Zdá se tedy, že k výuce témat spojených se strukturou a vlastnostmi látek je VR vhodným prostředkem, byť technické aspekty jeho implementace stále čekají na uspokojivější řešení, stejně tak také některé aspekty ovládní v programu Nanome.

*Tato práce vznikla za podpory grantu 4EU+ VIRTICHEM (číslo 2021\_F3\_07) a projektu COOPERATIO v oblasti „Subject Specific Education Research“, které byly uděleny Univerzitou Karlovou.*

#### LITERATURA

1. Drug Design Laboratory, Vega ZZ: [https://www.ddl.unimi.it/cms/index.php?Software\\_projects:VEGA\\_ZZ](https://www.ddl.unimi.it/cms/index.php?Software_projects:VEGA_ZZ), staženo 30. 6. 2022.
2. Dassault Systèmes, BIOVIA: <https://discover.3ds.com/discovery-studio-visualizer-download>, staženo 30. 6. 2022.
3. Britannica: <https://www.britannica.com/technology/stereoscopy>, staženo 30. 6. 2022.
4. Vance A.: *The Future of Virtual reality in the Classroom*, National Association of State Boards of Education, State Education Standard (2016).
5. Demin V., Bataeva E., Ignatiev I. et al, VR Chemistry Lab: <https://vrchemlab.ru/>, staženo 30. 6. 2022.
6. Pirola C., Peretti C., Galli F.: Immersive virtual crude distillation unit learning experience: The EYE4EDU project, *Comput. Chem. Eng.*, Volume 140 (2020).
7. Nanome Inc, Nanome – the Future of Molecular Design: <https://nanome.ai/>, staženo 30. 6. 2022.
8. Pintrich P. R., Smith D. A., Garcia T. McKeachie W. J. *A Manual for the Use of the Motivated Strategies for Learning Questionnaire (MSLQ)*. The Regents of the University of Michigan, Michigan 1991.
9. Ryan R. M.: *Journal of Personality and Social Psychology* 43(3), 450 (1982).

## 7L-09 MOLEGRAPH – ŠKOLNÍ MĚŘICÍ SYSTÉM SVĚPOMOCÍ

TOMÁŠ FELTL<sup>a,b</sup>, PETR ŠMEJKAL<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Katedra učitelství a didaktiky chemie, Univerzita Karlova, Hlavova 8, 128 43 Praha 2, <sup>b</sup> Gymnázium Polička, nábreží Svobody 306, 572 01 Polička  
feltl@natur.cuni.cz

Školní měřicí systémy se staly součástí výuky nejen přírodních věd. S nástupem trendu podpory Průmyslu 4.0 dostává práce se školními měřicími systémy další rozměr. Jde o to nejen využívat zmiňovaných systémů k měření a zkoumání různých jevů a jejich zákonitostí, ale také o to lépe porozumět tomu, jak je takový měřicí systém konstruován, jak funguje, co jednotlivá čidla zaznamenávají a na jakém principu pracují. Právě tyto kompetence vedou ke správnému a smysluplnému využívání měřicích systémů v praxi, ať už ve školním nebo průmyslovém prostředí.

V příspěvku se seznámíme s aktuálním stavem našeho projektu otevřeného řešení (open source) školního měřicího systému MoleGraph<sup>1</sup>. Právě DIY (Do It Yourself = vyrob si sám) přístup v oblasti školních měření může přinést možnost hlubšího pochopení důležitosti zapojení a funkce čidla i celého „měřicího řetězce“, což může být využito pro účely STEM výuky. Ukážeme si také, jak se stejným hardwarem přejít plynule k programování, automatizaci a robotice. Celý systém je totiž postavený na levném „mikrokontroléru“ Arduino NANO<sup>2</sup> a bluetooth modulu<sup>3</sup> pro bezdrátovou komunikaci, což umožňuje snadné připojení systému k mobilním zařízením typu „chytrý“ telefon/tablet. Díky použití Arduina se otevírají pro žáky i učitele téměř neomezené možnosti v oblasti výběru čidla, rozšíření o případné aktuátory i možnosti různých způsobů programování. Právě proto se s žáky ve výsledku nemusíme věnovat pouze „měření“, ale celé řadě dalších oblastí.

Pro školy je podstatné, že cena je oproti komerčním systémům skutečně nízká, což umožňuje např. pořízení většího množství různých čidel. Pro výrobu doplňků modulů a čidel, včetně zmiňované konstrukční stavebnice, je ideální využívat 3D tisk, což opět propojuje práci s měřicím systémem s další významnou technologií vhodnou pro oblast STEM.

*Tato práce vznikla za podpory projektu COOPERATIO v oblasti „Subject Specific Education Research“, který byl udělen UK.*

### LITERATURA

1. Feltl T., MoleGraph – měření s Arduinem, e-Mole: <https://www.e-mole.cz/diy/molegraph>, staženo 30. 6. 2022.
2. © 2022 Arduino – Arduino Documentation: <https://docs.arduino.cc/hardware/nano>, staženo 30. 6. 2022.
3. ITead Studio, HC-05 Module Datasheet pdf – Port Module. Equivalent, Catalog: <https://datasheetspdf.com/pdf/1418730/ITead/HC-05/1>, staženo 30. 6. 2022.

## 7L-10 DYNAMICKÁ VIZUALIZACE VE VÝUCE A JEJÍ VLIV NA ŽÁKY

MILADA TEPLÁ

Katedra učitelství a didaktiky chemie, Přírodovědecká fakulta univerzity karlovy, Hlavova 8/2030, 128 43 Praha 2  
milada.tepla@natur.cuni.cz

Zařazování vizualizačních pomůcek do výuky chemie a dalších přírodovědných předmětů je významnou složkou vzdělávání a je vhodné zkoumat, jak je efektivní a jaký má vliv na samotné aktéry vzdělávání – žáky. Podstatné je také porovnávání efektivnosti různých typů vizualizačních pomůcek – konkrétně porovnávání statické vizualizace s vizualizací dynamickou, čemuž se věnují i četné zahraniční výzkumy, které však přináší heterogenní výsledky<sup>1,2</sup>.

Vliv dynamické vizualizace na žáky zkoumal též pedagogický výzkum, který byl realizován v Královéhradeckém kraji v roce 2019 a jehož se zúčastnilo 565 žáků základních a středních škol. Cílem výzkumu bylo zjistit, jaký vliv má používání dynamické vizualizace (animací a 3D modelů) určené pro podporu chemie a dalších přírodovědných předmětů na vnitřní motivaci žáků (konkrétně na zájem žáka, uvědomění si svých nabytých schopností, na ochotě vkládat úsilí do výuky a vnímání významu) a na úroveň získaných poznatků na úrovni ISCED 2 a ISCED 3. Testovanou pomůckou byla aplikace Corinth (obr. 1)<sup>3</sup>.



Obr. 1. Aplikace Corint a její využití ve výuce

Výsledky ukazují, že využití dynamické vizualizace významně zvýšilo vnitřní motivaci žáků pro výuku přírodních věd i po třech měsících intenzivního užívání (Cohenovo  $d = 0,38$ ,  $p = 0,000$ ). Žáci v experimentální skupině navíc dosáhli výrazně vyšší úrovně znalostí z chemie než jejich vrstevníci v kontrolní skupině (Cohenovo  $d = 0,93$ ,  $p = 0,001$ ). Jedním z možných vysvětlení může být vyšší náročnost předmětu chemie z hlediska abstraktního myšlení a představivosti.

Dále byly identifikovány tři moderující proměnné (věk žáků, vyučovaný předmět a osobnost učitele), které výraznou měrou ovlivňovaly výsledky, nejsilněji se efekt moderující proměnné projevil u faktoru osobnost učitele.

Pedagogický výzkum potvrdil, že vhodné používání dynamických vizualizačních pomůcek vede k usnadnění (*enabling effect*<sup>4</sup>) a porozumění (*facilitating effect*<sup>4</sup>) abstraktního a obtížně představitelného učiva ve výuce chemie a dalších přírodovědných předmětů. Na základě posouzení kognitivního výkonu a motivačních a afektivních cílů (zájem, postoje, motivace, sebepojetí) lze prohlásit, že správně zvolená dynamická vizualizace (tedy adekvátní

vzdělávacím cílům, vzdělávacímu obsahu i věku žákům) má pozitivní vliv na kvalitu výuky a její efektivitu. Dynamické vizualizace představují jednu z možností, jak žákům pomoci k lepšímu pochopení (nejen) abstraktnějšího učiva chemie, kterou dynamické vizualizace dokáží vhodně přiblížit z neviditelného mikrosvěta do světa pozorovatelného a pochopitelného našimi smysly, ale hlavně v nich mohou probudit zájem o náš fascinující vědní obor, chemii.

Revidovaná forma RVP ZV, publikovaná v roce 2021, ještě více zdůrazňuje využití moderních technologií ve výuce a zavádí novou klíčovou kompetenci – digitální. Zapojování této technologie je i v souladu s Doporučením Rady evropské unie o klíčových kompetencích pro celoživotní učení<sup>5</sup> a se Strategií vzdělávací politiky ČR do roku 2030+ (cit.<sup>6</sup>), protože s využitím digitálních technologií dochází mimo jiné k rozvoji tzv. 3. klíčové kompetence (matematická kompetence a kompetence v oblasti přírodních věd, technologií a inženýrství). Vzhledem k pozitivnímu vlivu dynamické vizualizace na kognitivní výkon i motivační orientaci ve výuce chemie a dalších přírodovědných předmětů lze předpokládat, že žáci budou mít větší zájem o učení se těmito předměty a mohou dokonce uvažovat o jejich dalším studiu a následném hledání povolání v oblasti, které s těmito vědami souvisí. Z tohoto důvodu by učitelé měli tyto názorné pomůcky do výuky zařazovat.

*Tato práce vznikla za podpory Univerzitního výzkumného centra UK UNCE/HUM/024.*

#### LITERATURA

1. Kaushal R. K., Panda S. N.: *Malaysian Journal of Learning and Instruction* 16, 129 (2019).
2. Castro-Alonso J. C., Wong M., Adesope O. O., Ayres P., Paas F.: *Educational Psychology Review* 31, 361 (2019).
3. Teplá M., Teplý P., Distler P., Šmejkal P.: *Chem. Listy* 115, 383 (2021).
4. Schnotz W., Rasch T.: *Educational Technology Research and Development* 53, 47 (2005).
5. *Doporučení Rady ze dne 22. května 2018 o klíčových kompetencích pro celoživotní učení (Text s významem pro EHP)*. Úřední věstník Evropské unie 2018.
6. MŠMT: *Strategie vzdělávací politiky České republiky do roku 2030+*. MŠMT, Praha 2021.

## 7P-01

 **DIDAKTICKÁ HRA VE VÝUCE ANORGANICKÉ CHEMIE****DANIELA BARÁNKOVÁ, RICHARD KŘAPÁČEK, KATEŘINA TRČKOVA**

*Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, katedra chemie, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, Česká republika, P21138@student.osu.cz, P21034@student.osu.cz, katerina.trckova@osu.cz*

Chemie patří mezi neoblíbené, nenáviděné, těžké a nudné vyučovací předměty. Výuku je potřeba zatraktivnit zaváděním vhodných, moderních, kreativních a aktivizačních metod, např. didaktické hry<sup>1</sup>. Začleněním hry do výuky zvýšíme motivaci, zlepšíme a udržíme koncentraci žáků při učení<sup>2</sup>. Rozvíjíme klíčové kompetence<sup>3</sup>.

V tomto příspěvku je prezentována desková hra „Elementárie: Prvky v ohrožení“ s tematikou anorganické chemie. Tato hra umožňuje propojovat životní zkušenosti žáků se znalostmi získanými z učebnic a slouží jako doplňkový učební materiál. Je určena pro dva a více hráčů ve věku 14–16 let. Její součástí je herní plán, příručka pro hráče (obsahuje instrukce, otázky, almanach odpovědí, periodickou soustavu prvků a kartu náhody), průvodní listina a soubor hracích karet. Herní figurky a hrací kostka nejsou součástí hry, časová náročnost je 45 minut. Během hry hráči plní předepsané úkoly v jednotlivých provinciích a postupují s figurkou k cíli herního pole. Za splnění úkolů získávají karty s názvy či značkami prvků, které si zapisují do průvodní listiny podle tabulky prvků.

Hráči si volí postavu (Alkalu, Metalona, Halogenu nebo Radiona) odvozenou od skupin prvků a získávají určitou výhodu. Na konci hry soutěží s drakem Pyrolákem (osobním strážcem Entropie, který chrání vchod do hradu a mění prvky na oxidy) a Entropií (zlou čarodějnici, která chce království všech prvků přeměnit na Oxodus, kde pro samotné prvky není místo). Vítězství v tomto souboji ovlivní kartičky s prvky získané během hry a počet správně zodpovězených úkolů.

*Tato práce vznikla za podpory projektu SGS13/PřF/2022 – Praktické aplikace chemie v běžném životě.*

## LITERATURA

1. Tsai J.-C., Chen S.-Y., Chang C.-Y., Liu S.-Y.: *Education Sciences* 10(3), 48 (2020).
2. Kavak N.: *Journal of Chemical Education* 89(8), 1047 (2012).
3. Morris T. A.: *Journal of Chemical Education* 88(10), 1397 (2011).

## 7P-02

 **VPLYV RESPIRÁTOROV NA ROZPOZNÁVANIE EMÓCIÍ ŽIAKOV ZÁKLADNÝCH ŠKÔL NA SLOVENSKU****LUJZA GRAMBLIČKOVÁ**

*Univerzita Komenského v Bratislave, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovenská republika gramblickova1@uniba.sk*

COVID-19 je infekčné ochorenie spôsobené vírusom tzv. SARS-CoV-2. Šíreniu sa dá zabrániť dezinfekčnými prostriedkami, fyzickým odstupom, očkovaním a respirátormi.

Respirátory sú účinné voči ochrane proti nakazeniu sa koronavírusom, avšak spôsobujú problém pri rozpoznávaní emócií nielen u dospelých, ale hlavne u žiakov, závislých na efektívnej neverbálnej komunikácii. Výraz tváre nám ponúka prvú informáciu o danom človeku, ktorá môže byť kvôli noseniu respirátorov výrazne oslabená.

Do štúdie sa zapojilo 31 respondentov staršieho školského veku tj. 11 až 15 rokov z rôznych základných škôl na Slovensku ( $N_{6.ročník} = 10$ ,  $N_{7.ročník} = 5$ ,  $N_{8.ročník} = 6$ ,  $N_{9.ročník} = 10$ ). Výskum bol uskutočnený pomocou online-dotazníka, v ktorom mali žiaci určiť emočné stavy ľudí na fotografiách. Výber emócií ľudí (*hnev*, *smiech*, *strach* a *smútok*) bol zámerný, keďže ide o univerzálne výrazy tváre. Jednotlivé triedy fotografií sme označili ako model A (fotografia osoby bez tvárovej masky) a model B (fotografia osoby s tvárovou maskou).

Výsledky ukazujú, že žiaci základných škôl vedia určiť emócie ľudí z výrazu tváre, priemerná úspešnosť modelu A dosiahla 73,4 %. V prípade modelu B došlo k poklesu priemernej úspešnosti na 66,9 %.

Štúdie označili emocionálne stavy *smiech*, *smútok* a *hnev* za emócie, ktoré sú vyjadrené najmä spodnou časťou tváre<sup>1</sup>. Hoci respirátor zakrýva práve spodnú časť tváre, žiaci určovali emócie *smiech* a *hnev* pomerne správne. Pokles nachádzame najmä v modeli B pri emóciách *strach* a *smútok*, kde boli zistené miery úspešnosti 35,5 % a 48,4 %.

Výsledky ukázali, že žiaci ZŠ poznajú iba mechanickú funkciu respirátora, tj. izoláciu úst a nosa prekrytím. O chemickom zložení tvarových masiek a ich antibakteriálnych, antivirotických účinkoch nie sú žiaci dostatočne informovaní. Štúdium chemického zloženia, princípu respirátorov a praktického využitia vedeckých poznatkov by mohlo výučbu chémie zatraktivniť.

## LITERATÚRA

1. Fischer, A. H., Gillebaart, M., Rotteveel, M. et al.: *Soc. Psychol. Pers. Sci.* 3, 266 (2012).



## 7P-03

**MOŽNOSTI ZAŘAZENÍ TÉMATU  
NANOTECHNOLOGIE A NANOMATERIÁLY  
DO VÝUKY NA STŘEDNÍ ŠKOLE****JAKUB KROPÁČEK\*, MARTIN MUCHA***Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská  
univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava  
martin.mucha@osu.cz*

Nanotechnologie a nanomateriály v současnosti představují velmi rychle se rozvíjející oblast výzkumu a vývoje, proto by bylo vhodné zařadit základy tohoto tématu do výuky na střední škole. Nanotechnologie představují široce multidisciplinární oblast zasahující do chemie, fyziky, biologie, medicíny, ochrany životního prostředí, ale také informatiky. Tato multidisciplinarita může vést ke komplikacím při zařazování tohoto tématu do výuky. Rámcový vzdělávací program pro gymnázia<sup>1</sup> definuje jednotlivé vzdělávací oblasti, přičemž pro zařazení tematiky nanotechnologií se jeví jako nejvhodnější oblast Člověk a příroda, případně průřezové téma Environmentální výchova.

Studenty na střední škole je potřeba seznámit nejen se základní terminologií, s výskytem a výrobou nanomateriálů a nanostruktur, ale také s riziky, která mohou nanomateriály představovat pro životní prostředí nebo pro zdraví člověka. V rámci výuky na střední škole není prostor pro zavedení nanotechnologií jako samostatného tematického celku, je tedy potřeba problematiku nanotechnologií a nanomateriálů přiřadit k vhodnému učivu, které je již na středních školách vyučováno, a to především v předmětech chemie a fyzika.

Tato studie se zabývá možnostmi zařazení tématu nanotechnologie a nanomateriály do výuky chemie na střední škole a výběrem vhodných tematických celků, kam je možné toto téma přiřadit. Cílem studie je také navrhnout vhodné učební pomůcky (pracovní listy, videoukázky) a také pokusy realizovatelné na střední škole, které mohou pomoci přiblížit tematiku nanotechnologií a nanomateriálů studentům.

*Tato práce vznikla za podpory grantu SGS č. SGS13/PřF/2022 „Praktické aplikace chemie v každodenním životě“.*

## LITERATURA

1. Rámcový vzdělávací program pro gymnázia v platném znění, MŠMT ČR, <https://www.edu.cz/rvp-ramcove-vzdelavaci-programy/ramcove-vzdelavaci-programy-pro-gymnazia-rvp-g/> [dostupné online, cit. 2022-06-13].

## 7P-04

**GUSTAV JAUMANN A HISTORIE (NEJEN)  
REOLOGIE****MILOSLAV PEKAŘ***Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Purkyňova  
118, 612 00 Brno  
pekar@fch.vut.cz*

Gustav Jaumann byl německý (rakouský) fyzik, který strávil svou odbornou kariéru v českých zemích a který zasáhl i do oblasti chemie. Narodil se roku 1863 v Karánsebesi, studoval na chemickém oddělení pražské techniky (1880/1881), na technice ve Vídni (1881–1883) a na (c.k. Karlo-Ferdinandově) univerzitě v Praze (1883–1885). Od roku 1885 tam působil jako asistent Ernsta Macha. V roce 1893 byl na pražské univerzitě jmenován mimořádným profesorem experimentální fyziky a fyzikální chemie. Během jeho profesorského působení byl na univerzitě založen fyzikálně-chemický ústav. Roku 1901 přechází do Brna, kde se stává řádným profesorem fyziky na německé technice. Na tomto místě působil až do své smrti v roce 1924. Ve školním roce 1912/13 byl rektorem, v letech 1908–1910 byl děkanem odboru technické chemie (Abteilung für technische Chemie nebo též Chemisch-technische Fachschule).

Odbornou dráhu začal v experimentální fyzice, později přešel k teorii. Snažil se sjednotit základy fyziky a chemie pomocí minimálního počtu vhodných konstant. Jeho odborné zaměření během brněnského působení bylo významně ovlivněno knihou J. W. Gibbsa pojednávající o vektorové analýze, kterou posléze využíval ve svých pracích. V reologii nese jeho jméno speciální, ko-rotací derivace<sup>1</sup>. Její zárodky se objevují v prvním Jaumannově díle věnovaném tomuto modernímu přístupu ke studiu pohybu<sup>2</sup>. Ten dále rozvinul ve spise z roku 1911<sup>3</sup>, kde můžeme nalézt nejen onu derivaci, ale i výrazy pro tok entropie nebo lokální produkci entropie. Jaumanna tedy můžeme považovat za pozapomenutého průkopníka nerovnovážné termodynamiky (kontinua) soustav s chemickými reakcemi. Bednarczyk přímo mluví o Jaumannově metodě formulace materiálových rovnic, splňujících bilanci energie a entropie<sup>4</sup>.

Náhlá smrt znemožnila uzavřít a vydat jeho zřejmě monumentální dílo o společných základech fyziky a chemie, čítající v rukopise údajně dva tisíce stran<sup>4</sup>. Osudy tohoto rukopisu jsou neznámé.

## LITERATURA

1. Tanner R. I., Walters K. *Rheology: An Historical Perspective*. Amsterdam, Elsevier 1998.
2. Jaumann G.: *Die Grundlagen der Bewegungslehre*. Barth Verlag, Leipzig 1905.
3. Jaumann G.: *Geschlossenes System physikalischer und chemischer Differentialgesetze*. K. k. Hof- und Staatsdruckerei, Wien 1911.
4. Bednarczyk H.: *Österreichische Ingenieur- und Architekten-Zeitschrift (ÖIAZ)*, 135, 538 (1990).

**7P-05****CHEMIE JE VŠUDE, KAM SE DOMA PODÍVÁŠ****HANA TKAČÍKOVÁ, KATEŘINA TRČKOVÁ**

*Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, 30. dubna 22,  
701 03 Ostrava, Česká republika  
P21035@student.osu.cz, katerina.trckova@osu.cz*

Ve světě, jak ho známe, hraje chemie velmi důležitou a nezastupitelnou roli. Současný životní styl, délka a kvalita života jsou založeny na obrovském množství výrobků. Chemie je nepostradatelná pro všechna odvětví průmyslu a zemědělství. Každý živý organismus, i naše tělo je jedna velká „chemická továrna“. „Chemie je zkrátka všude, kam se doma podíváš!“ Této skutečnosti je potřeba využívat ve výuce za účelem motivace a aktivizace žáků.

Pracovní listy jsou považovány za účinný a efektivní učební materiál, který podporuje aktivní činnosti žáků, poskytuje návod a nabízí řešení problémů<sup>1</sup>. Pracovní listy obsahují požadované postupy, pomáhají žákům uspořádat znalosti a umožňují zapojení celé třídy na aktivitách.

V příspěvku jsou prezentovány pracovní listy s řízeným dotazováním, které byly vyvinuty za účelem zvýšení motivace a aktivní činnosti žáků prostřednictvím řešení praktických problémových situací každodenního života. K vysvětlení některých zákonitostí byly použity cenově výhodné a běžně dostupné látky vyskytující se v domácnosti. Ověřováním praktických úloh pracovních listů žák získává odpovědi na otázky týkající se průběhu procesu kvašení, koroze, výroby mýdla a balzámů, výroby másla, čištění kovů, přírodních indikátorů, barvicích a odbarvovacích technik.

Implementace tohoto nástroje do výuky vede ke zlepšení pozorovacích schopností, zvýšení úrovně kritického, kreativního, kolaborativního a komunikativního myšlení žáků. Učení se stává pro žáky smysluplnějším<sup>2</sup>. Byl prokázán vliv na studijní výsledky žáků<sup>3</sup>.

*Tato práce vznikla za podpory projektu SGS13/PřF/2022 – Praktické aplikace chemie v běžném životě.*

**LITERATURA**

1. Celikler D.: The International Journal of Research in Teacher Education 1, 42 (2010).
2. Desi Lesmini B., Hidayat I.: Journal of Physics: Conference Series 1166, 012005 (2018).
3. Schultz M., Callahan D. L., Miltiadous A.: J. Chem. Educ. 97, 2678 (2020).

**8L-01**  
**POVRCHOVÉ NAPĚTÍ V TAVENINÁCH**  
**A PODCHLAZENÝCH TAVENINÁCH**  
**CHALKOGENIDOVÝCH SKLOTVORNÝCH**  
**MATERIÁLŮ**

**JAROSLAV BARTÁK<sup>a</sup>, MICHAELA VČELÁKOVÁ<sup>b</sup>,**  
**PETR PILNÝ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Katedra fyzikální chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice,

<sup>b</sup> Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Doubravice 41, 532 10 Pardubice, ČR  
 jaroslav.bartak@upce.cz

Studium fyzikálních vlastností chalkogenidových sklotvorných materiálů je důležité nejen pro přípravu, zpracování a dlouhodobé uchování těchto materiálů, ale také pro popis kinetických procesů (krystalizace, strukturní relaxace), jež probíhají v amorfních materiálech, a pro samotné využití těchto materiálů. Povrchové napětí a jeho závislost na teplotě je přínosné jak pro popis nukleace a růstu krystalů v amorfní matici<sup>1,2</sup>, tak pro studium a určení transportních jevů v površích studovaných materiálů<sup>3,4</sup>. Prezentovaný příspěvek bude věnován studiu povrchového napětí v taveninách a v podchlazených taveninách (v blízkosti teploty skelné transformace,  $T_g$ ) chalkogenidových sklotvorných materiálů. Povrchové napětí v oblasti taveniny bylo studováno analýzou profilu visící kapky daného materiálu pomocí programu OriTas<sup>5</sup>. Ke studiu povrchového napětí v blízkosti  $T_g$  bylo využito studia roztékání sinusoidální mřížky vtlačené do vyleštěného povrchu studovaného skelného materiálu<sup>6</sup>. Kombinací těchto dvou přístupů ke studiu povrchového napětí ve sklotvorných taveninách lze získat data, s jejichž pomocí můžeme interpolovat hodnoty povrchového napětí sklotvorných tavenin v oblasti podchlazené taveniny pro popis důležitých kinetických procesů a transportních jevů probíhajících v blízkosti povrchů těchto materiálů.

*Tato práce vznikla za podpory Grantové Agentury ČR v rámci projektu 20-02183Y, Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy v rámci projektu LM2018103 a Interní grantové agentury Univerzity Pardubice číslo SGS\_2022\_007.*

**LITERATURA**

1. Málek J., et al.: Cryst. Growth Des. 17, 4990 (2017).
2. Martinková S., et al.: Cryst. Growth Des. 18, 4562 (2018).
3. Barták J., et al.: J. Chem. Phys. 154, 074703 (2021).
4. Martinková S., et al.: Acta Mater. 213, 116953 (2021).
5. Pilny P.; Available from: <http://www.petrpilny.cz/oritas/>.
6. Mullins W. W.: J. Appl. Phys. 30, 77 (1959).

**8L-02**  
**DETERMINATION OF MATERIALS RESIDUAL**  
**STABILITY AFTER COMBINED AGEING**

**ZUZANA CIBULKOVÁ, TIBOR DUBAJ, PETER**  
**SIMON**

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia  
 zuzana.cibulkova@stuba.sk

Materials in practical applications undergo various types of ageing. In case of organic materials, the thermooxidative stability is often decisive for their service life; thus, there is a need to study the influence of various factors on their stability. Accelerated oxidation tests employing methods of thermal analysis such as differential thermal analysis (DTA), differential scanning calorimetry (DSC), and thermogravimetry (TG) are frequently used to determine thermooxidative stability of the materials<sup>1,2</sup>. A complete analysis of the thermooxidative stability of a material usually involves either a series of isothermal measurements at different temperatures or non-isothermal measurements at several heating rates. Subsequently, a kinetic analysis of the data obtained from these measurements is performed.

*Financial support from the Slovak Research and Development Agency (APVV-15-0124) is gratefully acknowledged. The financial support from the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA 1/0498/22) is also acknowledged.*

**REFERENCES**

1. Šimon P., Kolman E.: J. Therm. Anal. Calorim. 64, 813 (2001).
2. Šimon P.: J. Therm. Anal. Calorim. 84, 263 (2006).
3. Cibulková Z., Vykydalová A., Plaček V., Šimon P.: Thermochim. Acta 668, 28 (2018).

**8L-03**  
**STUDIUM POLYKONDENZACE RESORCINOLU**  
**S FORMALDEHYDEM POMOCÍ TEPLITNĚ**  
**MODULOVANÉ DSC**

**EVA KINNERTOVÁ, VÁCLAV SLOVÁK**

Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava  
 eva.kinnertova@osu.cz

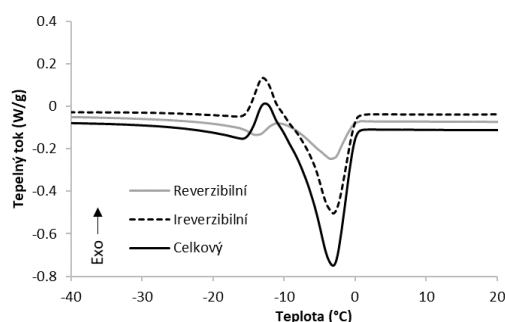
Jednou z nejužitečnějších technik ke zkoumání průběhu a mechanismu sol-gel polykondenzace resorcinolu (R) s formaldehydem (F) se ukázala diferenční skenovací kalorimetrie (DSC). Předchozím zkoumáním bylo zjištěno, že v některých případech lze u vznikajících polymerních struktur v průběhu polykondenzace pozorovat skelný přechod a právě ke zkoumání této fázové přeměny je vhodná modulovaná DSC (MDSC). Cílem tohoto příspěvku bylo prozkoumat proces tuhnutí a tání reakčních směsí v kombinaci s izotermickým krokem při 40 °C pomocí MDSC.

Zkoumané RF polykondenzační směsi se vyznačovaly různými koncentracemi reaktantů a katalyzátoru. Nejprve bylo potřeba optimalizovat podmínky měření, zejména periodu modulace, teplotu amplitudy modulace a rychlost ohřevu. Ke studiu RF polykondenzačních směsí se ukázaly vhodné podmínky: perioda modulace 60 s, amplituda 1 °C,

rychlost ohřevu  $2\text{ °C min}^{-1}$ .

Při sledování tání reakční směsi byly pozorovány dva typy křivek. Na začátku a na konci reakce byly zaznamenány prosté endotermní píky spojené s táním vody. Naproti tomu v některých fázích reakce byl při nižší teplotě pozorován exotermický pik, který byl pravděpodobně spjat s další fázovou přeměnou, pravděpodobně skelným přechodem polymeru. V této fázi reakce se struktura vzniklého polymeru stává elastickou a nezmrzlá voda uzavřená v původně rigidním polymeru exotermicky mrzne. Klesající koncentrace katalyzátoru vedla k pozdějšímu nástupu skelného přechodu.

MDSC umožňuje detekovat fázi reakce, ve které RF polymerní struktury vykazují skelný přechod a umožňují ji oddělit od prostého tání.



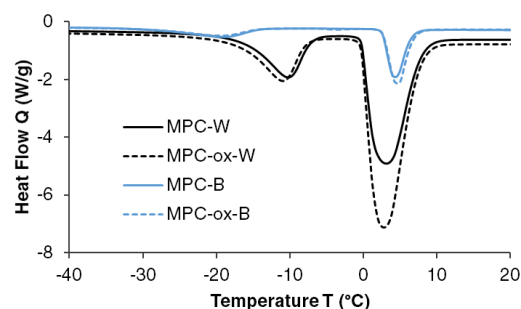
Obr. 1. DSC křivky tání RF směsi s nejvyšší koncentrací reaktantů a katalyzátoru v průběhu skelného přechodu

#### 8L-04 SROVNÁNÍ VODY A BENZENU JAKO TESTOVACÍCH KAPALIN PRO DSC TERMOPOROMETRII MEZOPORÉZNÍCH UHLÍKŮ

**LUCIE KOŘENÁ, VÁCLAV SLOVÁK**

Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava  
korena2@seznam.cz

Termoporometrie (TPM) je relativně nová, rychlá a jednoduchá technika využívaná k charakterizaci porozity na základě DSC měření poklesu teploty tání kapaliny nacházející se v mezopórech sledovaného materiálu. TPM s vodou jako testovací kapalinou byla pro charakterizaci porozity uhlíkatých materiálů popsána teprve nedávno<sup>1</sup> a lze ji velice snadno aplikovat. Avšak polarita vody a hydrofóbnost porézních uhlíků vedou ke špatné smáčivosti bránící pronikání vody do malých pórů a v důsledku toho k méně přesným výsledkům. Proto byl pro charakterizaci porozity mezoporézních uhlíků pomocí TPM otestován benzen jakožto nepolární testovací kapalina. Bylo připraveno několik porézních uhlíkatých materiálů s průměrem mezopórů v rozmezí 3–13 nm (charakterizováno pomocí sorpce dusíku), všechny ve dvou variantách – jako hydrofobnější (vyšší teplota pyrolýzy) a hydrofilnější (povrchová oxidace). V tomto příspěvku budou ukázány a diskutovány vlivy testovací kapaliny, povrchové chemie a objemu pórů na záznamy TPM měření.



Obr. 1. Záznamy TPM měření s vodou (W) a benzenem (B) jako testovacími kapalinami pro vzorek mezoporézního uhlíku (MPC) v hydrofobnější i hydrofilnější (označeno ox) variantě

Tato práce vznikla za podpory projektu SGS16/PřF/2022.

#### LITERATURA

1. Veselá P., Riikonen J., Nissinen T., Lehto V.-P., Slovák V.: *Thermochim. Acta.* 621, 81 (2015).

#### 8L-05 VPLYV TEPLNOTNÉHO ŽIHANIA NA MAGNETICKÉ VLASTNOSTI Bi DOPOVANÝCH GELENITOVÝCH SKIEL

**MELINDA MAJEROVÁ<sup>a</sup>, MARTIN ŠKRÁTEK<sup>a</sup>, ANNA  
PRNOVÁ<sup>b,c</sup>, ANDREJ DVUREČENSKIJ<sup>a</sup>, JÁN  
MAŇKA<sup>a</sup>, DUŠAN GALUSEK<sup>b,c</sup>**

<sup>a</sup> Ústav merania v.v.i., Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 842 19 Bratislava, <sup>b</sup> Vitrum Laugaricio, Centrum kompetencie skla, Spoločné pracovisko ÚACh SAV, TnU AD a FChPT STU, Študentská 2, 911 50 Trenčín, <sup>c</sup> Centrum pre funkčné a povrchovo funkcionalizované sklá, Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka, Študentská 2, 911 50 Trenčín, Slovenská Republika  
melinda.majerova@savba.sk

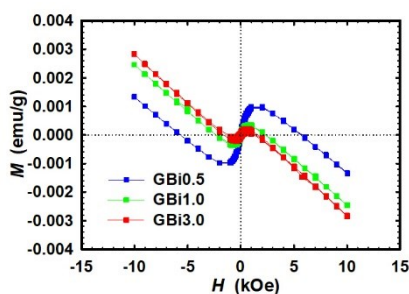
V rámci tejto práce sa kombináciou reakcie v tuhej fáze a plameňovej syntézy pripravili Bi dopované gelenitové sklené mikrogulôčky. Termická analýza v kombinácii s RTG práškovou difrakciou potvrdili v pripravených systémoch kryštalizáciu gelenitu v teplotnom intervale od 800 do 1000 °C.

#### Tabuľka I

Základné termické parametre pripravených mikrogulôčok ( $T_g$  – teplota skleného prechodu,  $T_x$  – teplota začiatku kryštalizácie,  $T_p$  – teplota maxima kryštalizačného píku)

| Vzorka | $T_g$ [°C] | $T_x$ [°C] | $T_p$ [°C] |
|--------|------------|------------|------------|
| GBi0.5 | 863        | 978        | 996        |
| GBi1.0 | 860        | 944        | 976        |
| GBi3.0 | 837        | 867        | 884        |
|        |            | 938        | 973        |

Pomocou magnetometrie sa študoval vplyv obsahu kryštalických fáz na magnetické vlastnosti pripravených systémov. Namerané  $M(H)$  závislosti ako aj teplotné závislosti magnetickej susceptibility ukázali, že diamagnetické alebo feromagnetické usporiadanie magnetizácie prevláda pri 300 K a to v amorfných aj kryštalických vzorkách. Pri teplote 2 K sa vo vzorkách pozorovalo paramagnetické alebo slabé feromagnetické/antiferomagnetické správanie.



Obr. 1.  $M(H)$  závislosti skryštalizovaných Bi-dopovaných gelenitových voriek pri teplote 300 K

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 2/0028/21 a VEGA 2/0141/21.

#### 8L-06

### STUDY OF THERMAL AND PL PROPERTIES OF $\text{Er}^{3+}$ DOPED ALUMINATE GLASSES, IMPACT OF CRYSTALLINITY ON PL PROPERTIES

**ANNA PRNOVÁ<sup>a</sup>, JAKUB MICHALÍK,  
BEĀTA PECUŠOVÁ<sup>b</sup>, RÓBERT KLEMENT<sup>b</sup>,  
JANA VALÚCHOVÁ<sup>a</sup>, DUŠAN GALUSEK<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup> Join Glass Centre of the IIC SAS, TnUAD, FChPT STU, Študentská 2, 911 50 Trenčín, <sup>b</sup> FunGlass, A. Dubček University of Trenčín, Študentská 2, 911 50 Trenčín, Slovakia  
anna.prnova@tmuni.sk

Yttrium and ytterbium aluminum garnet ( $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  and  $\text{Yb}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ ) are often used in production of solid-state lasers and upconversion phosphors.  $\text{Er}^{3+}$  ion is frequently used as a dopant due to several optical transitions in the visible and near-infrared (NIR) spectral range. However,  $\text{Er}^{3+}$  doped materials have some limitations due to low absorption cross section of  $\text{Er}^{3+}$  ion, and thus poor pump efficiency. The well-known role of  $\text{Yb}^{3+}$  ion which can support  $\text{Er}^{3+}$  ion emission has been confirmed in many works. However, the currently used aluminates (in both, monocrystalline and polycrystalline form) have a limited ability to accept rare earth ions into their structure and a concentration quenching at certain concentrations was observed. Glasses are generally known for their ability to absorb a higher amount of dopants in the matrix and thus an increasing emission efficiency. In this work, the  $\text{Er}^{3+}$  doped aluminate glass microspheres in system  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-RE}_2\text{O}_3$  (RE=Y or Yb) were prepared by combination of sol-gel Pechini method and flame synthesis. In DSC curves exothermic effects in temperature interval 918–943 °C, were observed and YAG, YbAG and  $\Theta\text{-Al}_2\text{O}_3$  phases were found in X-ray diffraction patterns of the samples after DSC (depending on the composition). The results of these studies confirm crystallization as the prevailing process

in the studied temperature range. The glass microspheres were crystallized at selected temperatures with the holding times of 20 and 120 min. PL spectra were measured in all raw and crystallized systems, and SEM and SEM EDX analysis were performed for more detailed examination of microstructure changes during heat treatment. Broad bands centred at 524 nm and 547 nm ( $^2\text{H}_{11/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$  and  $^4\text{S}_{3/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$  transitions) were observed in I yttrium aluminate glass matrix. The bands at 547 nm and 660/670 nm ( $^4\text{S}_{3/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$  and  $^4\text{F}_{9/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$  transitions) were present in PL spectra of ytterbium aluminate system. A band at  $\approx 1530$  nm ( $^4\text{I}_{13/2} \rightarrow ^4\text{I}_{15/2}$  transition) was present in the IR region. An impact of the  $\text{Er}^{3+}$  ion addition and the degree of crystallinity on PL properties was critically discussed.

This paper is a part of the dissemination activities of project FunGlass. This project has received funding from the European Union's Horizon 2020, research and innovation program under grant agreement No 739566. The financial support of this work by the projects APVV 19-0010, APVV 17-0049, and VEGA 1/0476/22 is gratefully acknowledged.

#### 8L-07

### STANOVENÍ RYCHLOSTI RŮSTU KRYSTALŮ A NUKLEACE VE SKELNÝCH MATERIÁLECH

**JANA SHÁNĚLOVÁ<sup>a</sup>, PAVLA HONCOVÁ<sup>b</sup>, JIŘÍ MÁLEK<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Univerzita Pardubice, FChT, katedra fyzikální chemie, Studencká 573, 532 10 Pardubice, <sup>b</sup> Univerzita Pardubice, FChT, katedra anorganické technologie, Studencká 573, 532 10 Pardubice  
jana.shanelova@upce.cz

Krystalizační chování sklovitých materiálů je často zkoumáno diferenciální skenovací kalorimetrií. Získanou krystalizační křivku je možné popsat pomocí základních kinetických modelů<sup>1</sup> založených na reakcích n-tého řádu, difúzní kinetice nebo čistě empirických. Tyto modely neposkytují relevantní parametry odpovídající skutečnému průběhu procesu krystalizace tak, aby mohlo být chování extrapolováno na jiné experimentální podmínky. Jediný kinetický model, který byl odvozen na základě fyzikální podstaty nukleace a růstu krystalů je model Johnson-Mehl-Avrami<sup>2</sup> (JMA). Při využití tohoto modelu je také obtížné extrapolovat krystalizační chování mimo podmínky daného experimentu, jelikož reálné parametry krystalizace jsou v modelu sprážené a zpravidla není snaha je stanovit. Navíc je model JMA někdy používán i v případech, kdy průběh krystalizace neodpovídá jeho základním předpokladům. Je tedy třeba definovat takový model krystalizace, který by odpovídal většinu množství pozorovaných průběhů krystalizace a umožňoval extrapolaci výsledků na jiné podmínky.

V této práci jsme se zabývaly odhadem pravděpodobného mechanismu krystalizace na základě tvaru krystalizačních píků. A následně vytvořením komplexnějšího modelu krystalizace, který je schopen popsat krystalizační proces sestávající z krystalizace probíhající z povrchu zrn ke středu a souběžného růstu krystalů z nukleí náhodně rozmístěných v objemu zrn<sup>3</sup>. Přičemž oba typy krystalizačního chování mohou být i časově zpožděné. Výstupem modelu jsou reálné parametry krystalizačního chování, jako jsou nukleační rychlost, počet nukleí, časové

zpoždění nukleace a rychlost růstu krystalů. Představený model umožňuje, na základě těchto výsledků, předpovědět krystalizační chování v širokém rozsahu experimentálních podmínek s výrazně vyšší přesností než dosud používané kinetické modely.

*Tato práce vznikla za podpory Excelentních týmů Univerzity Pardubice.*

#### LITERATURA

1. Málek J., Mitsuhashi T., Criado J.M.: *J. Mater. Res.* 16, 1862 (2001).
2. Avrami M.: *J. Phys. Chem.* 8, 212 (1940).
3. Honcová P., Shánělová J., Barták J., Málek J., Košťál P., Stehlík S.: *Cryst. Growth Des.* 16, 2904 (2016).

#### 8L-08

### CONSIDERATIONS ON THE ISOCONVERSIONAL PRINCIPLE

**PETER ŠIMON, ZUZANA CIBULKOVÁ, TIBOR DUBAJ**

*Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia  
peter.simon@stuba.sk*

Processes in condensed phase 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 methods based on the single-step approximation are often used which are represented by the general rate equation<sup>1</sup>:

$$\frac{d\alpha}{dt} = k(T)f(\alpha) \quad (1)$$

where  $\alpha$  is the degree of conversion of the process,  $t$  is time,  $T$  is temperature,  $k(T)$  and  $f(\alpha)$  stand for the temperature and conversion functions. If the Arrhenius equation is applied as the temperature function, one can get:

$$\frac{d\alpha}{dt} = A \exp\left[-\frac{E}{RT}\right] f(\alpha) \quad (2)$$

where  $A$  is the preexponential factor,  $E$  is the activation energy and  $R$  is the gas constant. The isoconversional principle resides in the differentiation of the logarithm of Eq.(2) at constant conversion and thus obtaining the value of the activation energy<sup>2</sup>:

$$\left(\frac{\partial \ln\left(\frac{d\alpha}{dt}\right)}{\partial T}\right)_\alpha = \frac{E}{RT^2} \quad (3)$$

When deriving Eq.(3) it is implicitly assumed that the preexponential factor does not depend on temperature. On the simplest case of the complex process, i.e. two parallel first-order reactions, it will be shown that the implicit assumption is erroneous. The preexponential factor does depend on temperature if the single-step approximation is used. Hence, the correct form of the isoconversional principle should be:

$$\left(\frac{\partial \ln\left(\frac{d\alpha}{dt}\right)}{\partial T}\right)_\alpha = \left(\frac{\partial \ln A}{\partial T}\right)_\alpha + \frac{E}{RT^2} \quad (4)$$

*Financial support from the Slovak Research and Development Agency (APVV-15-0124) is gratefully acknowledged.*

#### REFERENCES

1. Šimon P.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 88, 709 (2007).
2. Vyazovkin S.: *Isoconversional Kinetics of Thermally Stimulated Processes*. Springer, 2015. ISBN 978-3-319-14175-6.

#### 8L-09

### KVANTITATIVNÍ VYUŽITÍ TG-MS K ANALÝZE UVOLNĚNÝCH PLYNŮ – METODOLOGICKÉ POZNÁMKY

**VÁCLAV SLOVÁK**

*Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava  
vaclav.slovak@osu.cz*

Hmotnostní spektrometr propojený s termovahami (technika TG-MS) se běžně používá pro identifikaci plynů uvolňovaných při ohřevu pevných látek. Použití TG-MS pro kvantitativní stanovení složení uvolněných plynů je mnohem vzácnější<sup>1</sup>, ale za specifických experimentálních podmínek je možné.

Pokud má být hmotnostní spektrometr používán jako kvantitativní analytický nástroj, je nezbytná vhodná kalibrace. Propojení s termogravimetrií umožňuje kalibraci MS signálu pomocí změn hmotnosti pozorovaných na TG, ale pouze v případě, že pokles hmotnosti vyhodnocený z TG jasně souvisí s jedním nebo několika předem známými plyny.

Během měření TG-MS je pro analýzu plynů odebrána pouze jedna miliontina atmosféry pece. Citlivost detekce MS (poměr MS signál/množství plynu) je tedy velmi důležitá. Citlivost je ovlivněna dynamikou vývoje plynů a jejich transportem v atmosféře pece, které jsou ovlivněny zejména hmotností vzorku, rychlostí ohřevu a rychlostí proudění pecní atmosféry.

V příspěvku je diskutován a demonstrován vliv experimentálních podmínek na rozklad šřavelanu vápenatého a jsou uvedeny příklady úspěšného použití této techniky pro analýzu povrchu uhlíku<sup>2</sup> a rozklad anorganických solí<sup>3</sup>. Dále jsou shrnuta základní doporučení pro zlepšení citlivosti měření TG-MS.

#### LITERATURA

1. Hotová G., Slovák V.: *Thermochim. Acta* 632, 23 (2016).
2. Hotová G., et al.: *Carbon* 134, 255 (2018).
3. Hotová G., Slovák V.: *J. Therm. Anal. Calorim.*, under review.

**8L-10  
EXPERIMENTAL AND THEORETICAL STUDY OF  
SPECIFIC HEATS AND PHASE TRANSFORMATION  
TEMPERATURES OF ALLOYS BASED ON Fe-C-Cr-Ni  
DEPENDING ON COMPOSITION AND  
TEMPERATURE**

**SVETLANA SOROKINA, BEDŘICH SMETANA,  
EUBOMIRA DROZDOVÁ, SIMONA ZLÁ, MONIKA  
KAWULOKOVÁ**

*Faculty of materials science and technology, VŠB-Technical  
University of Ostrava, 17. listopadu 15, 708 00 Ostrava-  
Poruba, Czech Republic  
svetlana.sorokina.st@vsb.cz*

Steels are commonly used metallic materials, that's why higher requirements are imposed on their properties. Thermodynamical and thermophysical properties are one of the most important quantities of materials, which are needed for understanding behavior of materials under defined conditions. Thermal analysis has been widely used and is widely used for studying thermophysical and thermodynamic properties of simpler and higher order and complex iron, carbon, chromium, and nickel based systems also. The aim of the paper is study of six model alloys based on Fe-C-Cr-Ni, which contained carbon in a range of 0.0023–0.0095 wt%, chromium 0.0050–4.5528 wt% and nickel 0.0020–4.9600 wt%.

Specific heats and phase transformations temperatures were studied in a high-temperature area. Experimental data were obtained using Setaram MHTC 96 Line with a 3D DSC sensor. Theoretical data were calculated using SW ThermoCalc and JMatPro. The method DSC was used for obtaining of specific heats and phase transformation temperatures, such as temperatures of transformation of  $\alpha \rightarrow \gamma$ ,  $\gamma \rightarrow \delta$ , solidus, liquidus and Curie temperatures of laboratory prepared Fe-C-Cr-Ni alloys. It is important to know thermodynamic and thermophysical properties of these materials, because they are used almost in all branches of modern production. These properties are the main material data for description of the behavior depending on the chemical and phase composition and experimental conditions (temperature)<sup>4</sup>. There is still not enough accurate experimental data, that could be used for creation and clarification of databases based on Fe-C-Cr-Ni and for simulation of metallurgical processes. That is why the study of systems based on Fe-C-Cr-Ni has received substantial interest.

*This paper was supported in the frame of project No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/17\_049/0008399, students projects SP2022/39, SP2022/68 and "Support of gifted students of doctoral studies at VŠB-TUO" no.: 04766/2017 / RRC (MSR).*

**REFERENCE**

1. Smetana B., Žaludová M., Tkadlečková M., Dobrovská J., Zlá S., Gryc K., Klus P., Michalek K., Machovčák P., Řeháčková L.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 1, 112 (2013).

**8L-11  
ČINNOST ODBORNÉ SKUPINY TERMICKÉ  
ANALÝZY**

**PETRA ŠULCOVÁ**

*Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-  
technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573,  
532 10 Pardubice  
petra.sulcova@upce.cz*

V letošním roce slaví Odborná skupina termické analýzy (OSTA) při České společnosti chemické 50. výročí svého vzniku a při této příležitosti byl organizován čtvrtý ročník Termoanalytického semináře, který se uskutečnil 27. 1. 2022 v Pardubicích a jehož účastníci si připomněli toto výročí.

Odborná skupina termické analýzy (OSTA) je aktivní od roku 1972 a od svého vzniku je členem celosvětově působící odborné společnosti International Confederation for Thermal Analysis and Calorimetry (ICTA, od r. 1992 jako ICTAC – rozšíření o kalorimetrii), která je asociovaná s IUPAC. Mezinárodní konfederace pro termickou analýzu byla založena v roce 1965 za spolupůsobnosti také českých zástupců R. Bárty a J. Šestáka.

Národní skupina organizuje semináře a zvané přednášky, které jsou zaměřeny jak na teoretické základy, tak i přístrojovou techniku pro termickou analýzu. Cílem je umožnit především studentům, mladým i zkušeným vědcům výměnu poznatků a zkušeností s využíváním termoanalytických technik v různých oblastech výzkumu.

Česká odborná skupina aktivně spolupracuje s dalšími národními odbornými skupinami zejména na Slovensku, ale také v Polsku, Maďarsku či Německu a také se účastní termoanalytických konferencí, které tyto národní odborné skupiny pořádají.

V rámci odborného programu sjezdu v Olomouci je sekce termické analýzy zařazena již po sedmé. Vůbec poprvé se sekce s názvem „Termická analýza a kalorimetrie“ objevila v programu 62. Sjezdu asociací českých a slovenských chemických společností, který se konal v Pardubicích v roce 2010. Stala se tak historicky významnou, neboť se jednalo o první společné setkání termoanalytiků z Česka a Slovenska. Toto první setkání bylo symbolické pro Pardubice také tím, že termická analýza vždy měla a stále má na Fakultě chemicko-technologické Univerzity Pardubice hluboké kořeny. Tato sekce byla součástí programu také na 64. Sjezdu v Olomouci (2012), 66. Sjezdu v Ostravě (2014), 68. Sjezdu v Praze (2016), 70. Sjezdu ve Zlíně (2018) a 72. Sjezdu v Praze (2020).

Na webových stránkách OSTA ([www.thermal-analysis.cz](http://www.thermal-analysis.cz)) jsou k dispozici aktuální informace o odborné skupině včetně akcí z oblasti termické analýzy nejen v České republice, ale také ve světě, přičemž v letošním roce se koná 13. European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry (Parermo, Itálie), kde má Česká republika také své zástupce.

## 8L-12 INFLUENCE OF FLAME RETARDANTS ON THE FLAMMABILITY OF EPOXIDES STUDIED BY CONE CALORIMETRY

**ANNA VYKYDALOVÁ<sup>a,b</sup>, JOZEF RYCHLÝ<sup>a</sup>, EDITA  
MATYSOVA<sup>c</sup>, ZDENKO ŠPITÁLSKÝ<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská  
cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovakia, <sup>b</sup> Institute of Inorganic  
Chemistry, Czech Academy of Sciences, Husinec-Řež 1001,  
250 68 Řež, Czech Republic, <sup>c</sup> SYNPO, a.s., S. K. Neumanna  
1316, 532 07 Pardubice, Czech Republic  
anna.vykydalova@savba.sk

Epoxides are highly reactive cyclic ethers which are used in manufacture of coatings, adhesives, primers, sealers or plastics and other products and also as materials for building and construction applications. Flame retardants are frequently added to potentially flammable materials, including textiles, plastics, coatings and other products and building materials<sup>1</sup>. Flame retardants, when added to flammable matrices, are able to slow down the spread of fire or even prevent the initial ignition<sup>2</sup>.

This work deals with the research and development of novel flame retardants intended as additives for carbon-epoxy laminates to reduce their flammability and improve their thermal properties. The goal is to extend the area of their applications, especially to transportation industry such as automotive, aviation or railways and also to construction industry. The effect of the novel type of flame retardants that are environmentally more friendly and less toxic than the current ones was studied by cone calorimetry. The novel flame retardants are covalently bound to the matrix and contain an amine group and phosphazenes. The results have shown that these flame retardants are a promising alternative to currently used products.

*This research was supported by the project MERF TH71020008: in a framework of M-ERA.NET (M-ERA.NET 2/2019/966/MERF).*

### REFERENCES

1. Siemel G., Rieth R., Rowbottom K. T.: Epoxides. In: *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. John Wiley, New York 2000.
2. Hollingbery L. A., Hull T. R.: *Thermochim. Acta* 509, 1 (2010).

## 8L-13 TERMICKÁ ANALÝZA ELASTOMERŮ

**MICHAL ZAVADIL, VÍT PLAČEK**

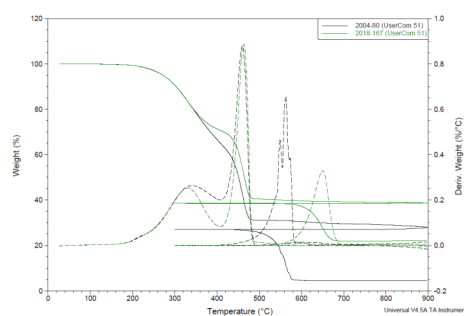
ÚJV Řež a. s., Hlavní 130, Řež, 250 68 Husinec, ČR  
michal.zavadil@ujv.cz

Pro zajištění bezpečnosti provozu jaderných elektráren se používají opatření daná legislativou (např. zákon č. 263/2016 Sb.), a normami (např. IEC/IEEE 60 780-323). Komponenty významné z hlediska bezpečnosti jsou vyjmenované ve vyhlášce č. 358/2016 Sb.. Cílem požadavků je zaručit, aby nově dodávané výrobky měly stále stejné vlastnosti jako ty, které byly použity při kvalifikaci.

V oblasti elastomerů existují metody (např. NMR), které dokážou identifikovat strukturu, i organické složky polymerů. Pro analýzu anorganických plniv je však termická analýza stále nezbytná, zvláště použijí-li se upravené metody. Na pracovišti ÚJV Řež byla ověřována metoda TGA k identifikaci shody testovaných materiálů.

Při klasickém rozkladu vzorku polymeru metodou TGA zjistíme přesně pouze obsah nespalitelných plniv (př. kaolin). Přesné určení obsahu sazí komplikuje fakt, že uhlík vzniká též pyrolýzou polymerní matrice, a tyto děje se obvykle překrývají. Postup pro odlišení uhlíku pocházejícího z pyrolýzy termoplastického polymeru od uhlíku vyskytujícího se ve formě plniva byl publikován společností Mettler Toledo<sup>1</sup>. Postup spočívá v provedení analýzy TGA ve dvou krocích; první krok běží v inertní atmosféře, následuje chlazení, a ohřev v oxidační atmosféře až na nespalitelný zbytek.

Pro prvotní testy byly ÚJV použity dva vzorky těsnění, které byly deklarovány jako identické. Analýza TGA postupem dle Mettler Toledo umožnila rozlišení obou elastomerů – viz obr. 1. Tento postup bude pro rutinní použití potřebné ještě optimalizovat.



Obr. 1. TGA elastomerů postupem dle Mettler Toledo

Podrobná studie analýz různých elastomerů s různými obsahy plniv pravděpodobně umožní definovat optimální podmínky rozkladu buď obecně, nebo alespoň pro skupiny vybraných elastomerů. Dle teploty pyrolýzy a množství pyrolyzního produktu, jakožto i nespalitelného zbytku, bude možno přesněji usuzovat na složení elastomeru. Současně bude umožněno přesnější posouzení shody dvou různých vzorků.

### LITERATURA

1. Dandekar S.: Mettler Toledo UserCom 51 (2020).



### 8L-14 TERMOPOROMETRIE: JAK JE MOŽNÉ CHARAKTERIZOVAT VELKÉ MEZOPÓRY?

**GABRIELA ZELENKOVÁ, VÁCLAV SLOVÁK**

Ostravská univerzita, PřF, 30. dubna 22, 702 00 Ostrava  
garbiela.zelenkova@osu.cz

Mezoporozita uhlíkatých materiálů je nejčastěji charakterizována pomocí standardních metod jako je fyzisorpce  $N_2$  a Hg porozimetrie. Nicméně, ani tyto metody nejsou úplně vhodné, pokud je potřeba charakterizovat velké mezopóry (> cca 20 nm). Určité východisko může poskytnout právě metoda termoporometrie (TPM), která dokáže postihnout celý velikostní rozsah mezopórů. Ve skutečnosti je TPM založena na snížení teploty tání/tuhnutí kapaliny, která je uzavřena v pórech. Nejčastěji se jako smáčecí kapalina volí právě voda, díky svému vysokému měrnému teplu tání a tudíž vyšší přesnosti měření. Nedostatkem vody jakožto smáčecí kapaliny je skutečnost, že póry větší než 10 nm nelze charakterizovat díky splynutí píků tání vody v pórech a mimo ně. Využití jiných smáčecích kapalin jako např. cyklohexanu, benzenu, oktametyl-cyklotetrasiloxanu aj. může vést k vyřešení zmíněného problému. Ve skutečnosti jsou však tyto organické kapaliny spojeny s jinými problémy (nízké měrné teplo tání, přítomnost fázové přeměny atd.), které komplikují získání věrohodných výsledků.

Cílem tohoto příspěvku je ukázat jak lze charakterizovat velké mezopóry pomocí TPM s využitím vody jakožto smáčecí kapaliny. Problém s překryvem píků tání vody byl vyřešen dekonvolucí DSC křivky na jednotlivé děje popsané jednoduchou kinetickou rovnicí. Na základě tohoto přístupu je možné získat DSC záznam odpovídající pouze tání vody v pórech a ten následně převést na informaci o distribuci pórů ve vzorku.

Pro tuto studii byly analyzovány uhlíkaté materiály lišící se především ve velikosti mezopórů, tj. od 6 nm až po materiál s 50 nm. Získaná data potvrdila, že tento přístup je vhodný pro charakterizaci velkých mezopórů, což z TPM dělá velmi univerzální techniku, se kterou je možné postihnout celou oblast mezopórů (od nejmenších až po ty největší).

### 8L-15 VYUŽITÍ MĚRNÉ TEPELNÉ KAPACITY INTERMETALIK PŘI MODELOVÁNÍ FÁZOVÉHO DIAGRAMU Al-Ge-Mg METODOU CALPHAD

**ONDŘEJ ZOBAC, LENKA KARPÍŠKOVÁ, ALEŠ  
KROUPA**

Ústav fyziky materiálů, AVČR v.v.i. Žižkova 22, 616 00 Brno  
zobac@ipm.cz

Metoda CALPHAD (CALculation of the PHase Diagrams)<sup>1</sup> je semiempirická metoda výpočtu fázových diagramů, která slouží k predikci termodynamických vlastností a stability všech fází studovaného systému. Predikce fázových rovnováh vychází ze znalosti termodynamických funkcí, především Gibbsovy energie (GE). GE jednotlivých fází jsou popsány pomocí matematicko-fyzikálních modelů, které obsahují určitou formu polynomu s nastavitelnými parametry. GE dané fáze je vztažena k entalpii standardních stavů (SER):

$$G_i^0(T) = {}^0G_i^0(T) - H_i^{SER} = a + bT + cT \ln(T) + \sum_n d_n T^n$$

Z tohoto vztahu lze pak odvodit výraz pro měrnou tepelnou kapacitu:

$$C_i^0(T) = -c - \sum n(n-1)d_n T^{n-1},$$

Takto upravený polynom lze optimalizovat pro získání co nejlepší shody s experimentálně měřenou teplotní závislostí měrné tepelné kapacity pro binární nebo ternární intermetalickou fázi.

Ternární soustava Al-Ge-Mg obsahuje jednu ternární fázi  $Al_2Ge_2Mg$ <sup>2</sup> se strukturou typu  $Al_2Si_2Ca$ . Dříve publikovaný termodynamický assessment soustavy Al-Ge-Mg<sup>3</sup> tuto ternární fázi neobsahoval. Na základě znalostí isotermických sekci experimentálního fázového diagramu Al-Ge-Mg při teplotách 250–450 °C jsme přistoupili k reassessmentu ternární soustavy. Měrná tepelná kapacita fáze  $Al_2Ge_2Mg$  byla nedávno teoreticky spočítána pomocí fononových spekter<sup>4</sup>. Tato měrná tepelná kapacita byla porovnána s experimentálními hodnotami a implementována do termodynamického popisu ternární intermetalické fáze  $Al_2Ge_2Mg$ . Na základě získaných hodnot termodynamických parametrů byl predikován ternární fázový diagram Al-Ge-Mg a porovnán s experimentálními hodnotami.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 22-22187S.*

#### LITERATURA

1. Saunders N., Miodownik, A. P. CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams) A comprehensive guide. Oxford, Elsevier Science Ltd, 1998.
2. Pukas S., Pylypchak L., Matselko O., Demchenko P., Gladyshevskii R.: Chem. Met. Alloys. 5, 59 (2012).
3. Islam F., Thykadavil A. K., Medraj M.: J. Alloys Compd. 425/1, 129 (2006).
4. Karim A. M., Helal M. A., Alam M. A., Ali M. A., Ara I., Naqib S. H.: SN Applied Sciences 3, 229 (2021)

## 9L-01

**METAL-ORGANIC FRAMEWORKS OF MOF-76 FAMILY FOR ENVIRONMENTAL APPLICATIONS, HETEROGENEOUS CATALYSIS AND ENERGY STORAGE**

MIROSLAV ALMÁŠI

Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science,  
Pavol Jozef Safarik University, Moyzesova 11, 040 01 Kosice,  
Slovak Republic  
miroslav.almasi@upjs.sk

Microporous isostructural lanthanide-based MOFs of composition  $[Ln(BTC)(H_2O)] \cdot G$  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 members of the MOF-76(Ln) (Ln(III) = Gd, Tb, Ho, Tm and Lu) family 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 the 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<sup>2</sup>. Lutetium (III) form was tested as a heterogeneous catalyst in Knoevenagel condensation of different bulky aldehydes and active methylene compounds<sup>3</sup>. MOF-76(Gd, Tb, Ho, Tm and Lu) were tested as adsorbents for nitrogen, carbon dioxide, hydrogen, and methane at low and high pressures, and it was shown that compounds exhibited high affinity to CO<sub>2</sub><sup>1,3,4,5</sup>. The humidity sensing was performed using MOF-76(Tb)<sup>5</sup>, and the results illustrate that material is suitable for sensing applications. The obtained results will be presented more in detail at the conference.

*This work was supported by VEGA project No. 1/0865/21, KEGA project No. 006UPJŠ-4/2021, APVV projects No. 20-0138, SK-CZ-RD-21-0068, UPJS project No. VVGS-2022-2123 and TRIANGEL.*

## REFERENCES

1. Zelenák V., Almáši M., Zelenáková A., Hrubovčák P., Tarasenko R., Bourelly S., Llewellyn P.: *Sci. Rep.* 9, 15572 (2019).
2. Čapková D., Kazda T., Čech O., Király N., Zelenka T., Čudek P., Sharma A., Hornebecq V., Straková Fedorková A., Almáši M.: *J. Energy Stor.* 51, 104419 (2022).
3. Almáši M., Zelenák V., Opanasenko M., Císařová I.: *Cat. Today* 243, 184 (2015).
4. Almáši M., Zelenák V., Kuchár J., Bourelly S., Llewellyn P.: *Colloids Surf. A* 496, 114 (2016).
5. Garg A., Almáši M., Saini R., Rao V., Panchal P., Paul D., Jain A., Sharma S.: *Environ. Sci. Poll. Res. in press* (2022).

## 9L-02

**VYUŽITÍ METAL-ORGANICKÝCH SÍTÍ (MOFŮ) V ENVIRONMENTÁLNÍ PRAXI – CESTA SPÁSY NEBO NESPLNITELNÝ SEN?**DANIEL BŮŽEK<sup>a,b\*</sup>, VERONIKA ZLÁMALOVÁ<sup>a</sup>, SLAVOMÍR ADAMĚC<sup>a</sup>, JAN DEMEL<sup>b</sup>, KAMIL LANG<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Fakulta životního prostředí, Univerzita J. E. Purkyně,  
Pasteurova 15, 400 01 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 koordinační polymery, které se skládají z anorganických uzlů vzájemně propojených organickými polytopickými ligandy. Typickými ligandy používanými pro konstrukci MOFů jsou karboxylové aromatické kyseliny. Propojením anorganických a organických stavebních jednotek vznikají většinou 3D krystalické struktury, jejichž typickým rysem je vysoký měrný povrch a objem pórů. Dnes existuje nespočet různých struktur MOFů, jejich vlastnosti závisí zejména na volbě stavebních jednotek, a tak je možné připravit MOFy s různými funkcemi a vlastnostmi. Díky tomu se MOFy testují pro řadu potenciálních aplikací, od sorpce, separace a skladování plynů až po sensory a katalyzátory.

Jedním z často studovaných směrů je potenciální využití MOFů v environmentální praxi, kde se MOFy testují jako materiály pro např. adsorpci polutantů, katalytické odbourávání polutantů, či senzorická detekce polutantů. Typickým rysem těchto aplikací je vodné prostředí, ve kterém se MOF vyskytuje. Nejedná se však vždy o čistou vodu, ale o vodu s obsahem dalších složek – různou salinitu, pH, apod. Ač MOFy často vynikají svými adsorpčními kapacitami pro polutanty, tak na druhé straně se ke slovu dostává slabší stabilita MOFů, která může být pro tento směr limitujícím faktorem.

Příspěvek je zaměřen na MOFy zejména z rodiny UiO-66, tj. obsahující Zr, Hf nebo Ce oxoklastry, které jsou propojeny kyselinou tereftalovou. V literatuře se o těchto MOFech píše, že se jedná o vysoce stabilní MOFy, které navíc hojně nachází potenciál ve výše uvedených environmentálních aplikacích. Stabilita této rodiny MOFů je v této práci studována stanovením uvolněného ligandu ze struktury MOFů do roztoku metodou kapalinové chromatografie. Množství uvolněného ligandu lze považovat za kvantitativní ukazatel stability na rozdíl od běžných postupů používaných ke studiu stability (např. práškové rentgenové difrakce nebo adsorpčních měřeních provedených po vystavení daným podmínkám), které jsou schopny zaznamenat až totální kolaps struktury. Zaměříme se zejména na stabilitu MOFů při různých pH nebo v přítomnosti pufrujících složek.

Studované MOFy překvapivě nenaplnují z hlediska stability svá očekávání. Jejich citlivost na pH a na přítomnost pufrujících složek ve vodě je překážkou pro použití v environmentální praxi a tím se tento směr stává spíše nesplnitelným snem.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR číslo 20-04408S.*

## 9L-03

## ACTIVATION OF MOLECULAR OXYGEN BY ITS SPLITTING OVER BINUCLEAR TRANSITION METAL ION SITES STABILIZED IN ALUMOSILICATE ZEOLITE MATRICES

JIRÍ DĚDEČEK<sup>a</sup>, HANA JIRGLOVÁ<sup>a</sup>, MARIHA LEMISHKA<sup>a,b</sup>, AGNIESZKA KORNAS<sup>a</sup>, KINGA MLEKODAJ<sup>a</sup>, ŠTĚPÁN SKLENÁK<sup>a</sup>, EDYTA TABOR<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i., Dolejškova 3, 182 00 Praha 8, <sup>b</sup> Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 573, 532 10 Pardubice  
jiri.dedecek@jh-inst.cas.cz

Oxygen is a cheap and environmentally friendly oxidant. Nevertheless, its application in selective oxidation of stable molecules is rather limited and activation of dioxygen to more reactive species is necessary. This can be illustrated e.g. on the selective oxidation of methane to methanol which represents one of the biggest current challenges in chemical technology. Although a significant effort was spent in the last years in this area, developed catalysts are unsuitable for industry application. Isolated Fe sites in zeolite matrix are able to oxidize methane to methanol, but active oxygen is formed by splitting of expensive N<sub>2</sub>O. On the contrary, multinuclear Cu sites can form reactive dioxygen bridges capable of methane oxidation. However, this system exhibits unrealistic low yields and requires methanol extraction by water vapour.

Recently, we described a new type of enzyme-inspired active sites, which are able to activate dioxygen by its splitting at room temperature to two  $[M^{4+}=O^2-]^{2+}$  species. These distant binuclear transition metal ions (TMI) sites are formed by two cooperating TMI capable of  $M^{2+} \leftrightarrow M^{4+}$  redox cycle, stabilized in extraframework positions of the zeolite matrix and facing each other at the distance of 0.75 nm. Although these sites exhibit similarities with active centres in metalloenzymes (two cooperating TMI with open coordination sphere), however, both the structure (twice larger TMI distance) and mechanism of O<sub>2</sub> splitting are different. The active  $[M^{4+}=O^2-]^{2+}$  species formed by the splitting of dioxygen over metallozeolites are able to selectively oxidize methane to methanol (or transform propane to propylene with 100 % selectivity) already at room temperature. Moreover, the reaction products are spontaneously released into the gas stream; their extraction by water vapour is not required. This feature makes zeolite catalysts containing binuclear TMI sites highly promising for the application in industrial selective oxidation.

*This work was supported by the Grant Agency of the Czech Republic under projects # 19-02901S, # 21-45567L (2020/39/I/ST4/02559) and # 22-06737S.*

## 9L-04

## AKTIVOVANÝ BORÁN – NOVÝ DRUH PORÉZNÍHO POLYMERU

JAN DEMEL, DANIEL BŮŽEK, KAREL ŠKOCH, MICHAEL G.S. LONDESBOROUGH

Ústav anorganické chemie AV ČR, Husinec-Řež 1001, 250 68 Řež  
demel@iic.cas.cz

Porézní polymery mají široké použití v celé řadě odvětví, mimo jiné jako sorbenty, katalyzátory, pro uchovávání a separaci plynů atd. Cílem přípravy nových porézních polymerů je připravit materiál o žádané velikosti pórů, konektivitě a chemickém složení pro danou aplikaci.

Porézní polymery mají charakter organických nebo anorganických materiálů. V první skupině se jedná především o aktivní uhlí, hyper-crosslinked polymers (HCP), polymers of intrinsic microporosity (PIM), covalent-organic frameworks (COF), tyto materiály jsou tvořené vazbami C-C, C-N apod. Oproti tomu anorganické porézní polymery, např. zeolity, mesoporézní molekulová síta, hlinitofosforečnany apod. jsou tvořené 3D sítí atomů (Si, Al, Ti atd.) spojených pomocí můstků v podobě kyslíkových atomů. Dále sem patří porézní koordinační polymery (MOF), které spojují monomery pomocí koordinačních vazeb. Každá skupina porézních materiálů je díky své chemické podstatě předurčena k jiné aplikaci.

Cílem přednášky je seznámit posluchače s novým typem porézního polymeru – Aktivního boránu, který je založen na boranových klastrech spojených pomocí organických molekul pomocí B-C a B-B vazeb. Aktivní borán vzniká koterpolýzou otevřených boranových klastřů (např. *nido-B<sub>10</sub>H<sub>14</sub>*) a malých organických molekul např. toluenu, cyklohexanu apod.

Aktivní borán je amorfni a má mikroporézní charakter s průměrnou velikostí póru okolo 1 nm a měrným povrchem 750 m<sup>2</sup> g<sup>-1</sup>. Aktivní borán vykazuje ca. o 50 % vyšší sorpční kapacitu pro sulfamethoxazol než aktivní uhlí (aldrich).

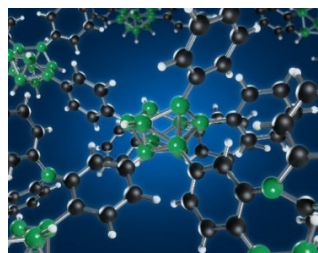


Schéma 1. Předpokládaná struktura Aktivního boránu

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR číslo 20-04408S.*

## LITERATURA

1. Práce je v preprintové formě publikována: <https://chemrxiv.org/engage/chemrxiv/article-details/61f2fc004b9500809d0c59c7>

## 9L-05

TLAČENÉ ELEKTRODY NA BÁZE BIOCHARU  
A TETRAISOPROPOXIDU TITANIČITÉHO PRE  
FARBIVOM SENZIBILIZOVANÉ SOLÁRNE ČLÁNKYPAVOL GEMEINER<sup>a</sup>, TATIANA BUCHLOVÁ<sup>a</sup>,  
MICHAELA PAVLIČKOVÁ<sup>a</sup>, MICHAL HATALA<sup>a</sup>,  
PETER VETEŠKA<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Oddelenie polygrafie a aplikovanej fotochémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, <sup>b</sup> Oddelenie anorganických materiálov, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko  
pavol.gemeiner@stuba.sk

Farbivom senzibilizované solárne články (DSSC) patria do 3-tej generácie fotovoltiky, ktorá má v porovnaní s konvenčnými kremíkovými solárnymi článkami (c-Si, 1. generácia) niekoľko výhod. Sú to najmä nižšie náklady výroby, rekordné účinnosti pri interiérovom osvetlení a možnosť prípravy pomocou tlačových techník na rôznych aj flexibilných substrátoch. Na druhej strane, ich nevýhodami sú nízka účinnosť pri osvetlení simulujúcim slnečným žiarením, problémy spojené s aplikáciou kvapalného elektrolytu a vysoké náklady na Pt protielektrodu<sup>1</sup>. Štandardná štruktúra DSSC pozostáva z TiO<sub>2</sub> fotoanódy, ruténiového farbiva, iodidového elektrolytu a Pt protielektrody. Protielektroda (CE) má v DSSC kľúčovú úlohu pri redukcii iónov elektrolytu. Ako vhodná alternatíva k Pt CE boli skúmané uhlíkové materiály ako napr. sadze, grafit, uhlíkové nanorúrky, grafén a grafén oxid<sup>2</sup>. Okrem vyššie uvedených foriem uhlíka sa ako ekologickejšia, obnoviteľná a lacnejšia alternatíva na prípravu CE ukazuje biochar, ktorý je získavaný pyrolýzou biomasy v inertnej atmosfére<sup>3</sup>.

V tejto práci boli skúmané biocharové tlačové disperzie s prídavkom tetraizopropoxidu titaničitého (TTIP). Reologické merania preukázali, že TTIP je vhodným reologickým činidlom a spojivom pre prípravu mechanicky stabilných biocharových elektród. Ramanova spektroskopia potvrdila vznik kryštalických TiO<sub>2</sub> častíc (anatas) po sintrovaní elektród v atmosfére Ar. Elektródy biocharu a TTIP dosiahli provnateľné elektrochemické vlastnosti ako Pt. Aplikáciou tlačených biochar/TTIP katalytických vrstiev CE v DSSC boli dosiahnuté lepšie fotovoltické parametre ako v prípade štandardnej Pt CE.

Táto práca vznikla za podpory grantu MŠVVaŠ SR VEGA 1/0488/19.

## LITERATÚRA

- Gemeiner P., Pavličková M., Hatala M., et al.: J. Appl. Polym. Sci. 139, 15 (2022).
- Li G.-R., Gao X.-P.: Advanced Materials 32, 3 (2019).
- Kusumawati Y., Hutama A. S., Wellia D. V., Subagyo R.: Helyion 7, e08436 (2021).

## 9L-06

PORÉZNÍ HYPERSESÍŤOVANÉ POLYACETYLENY  
S IONTOVÝMI SEGMENTY PYRIDINIOVÉHO TYPUALENA HAŠKOVÁ<sup>a</sup>, BOGDANA BASHTA<sup>a</sup>,  
KATEŘINA ZÍTOVÁ<sup>a</sup>, EVA VRBKOVÁ<sup>b</sup>, ELIŠKA  
VYSKOČILOVÁ<sup>b</sup>, JAN SEDLÁČEK<sup>a</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.haskova@natur.cuni.cz

Byla připravena nová skupina mikro/mesoporézních iontových polymerů typu hypersesíťovaných polyacetylenových sítí s vysokým obsahem pyridiniových segmentů (až 4,2 mmol/g) a specifickým povrchem až 592 m<sup>2</sup>/g. Příprava sítí využívala různé kombinace řetězové koordinační homopolymeryzace a kvarternizace. Síť byly připraveny např. kopolymerizacemi (i) *N*-alkylpyridinium bromidů obsahujících ethynylovou skupinou na jádře nebo v alkylovém substituentu s (ii) di- a triethynylovanými sítíovadly. K přípravě sítí vedla též postpolymerizační kvarternizace hypersesíťovaných polyacetylenů obsahujících buď pyridinové nebo alkylobromidové skupiny. Některé z těchto postupů dovolovaly zavést do sítí též pyridiniové segmenty chirálního typu. Připravené sítě byly testovány jako heterogenní katalyzátory pro transformaci styren oxidu a oxidu uhličitého na styren karbonát (konverze styren oxidu 84 %, v případě použití sítí s chirálními segmenty bylo dosaženo 10 % ee).

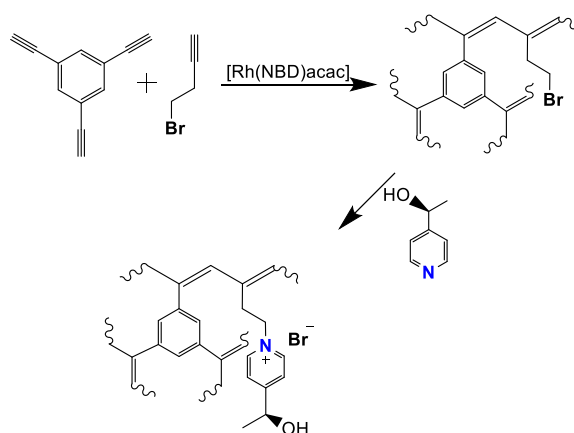


Schéma 1. Příklad přípravy chirální iontové porézní sítě

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 21-02183S a "Grantových schémat na UK" (reg. no. CZ.02.2.69/0.0/0.0/19\_073/0016935) (START/SCI/081).

### 9L-07 FUNKCIONALIZOVANÉ PORÉZNÍ ORGANICKÉ POLYMERY PRO SORPČNÍ A KATALYTICKÉ APLIKACE

**LUCIE HAVELKOVÁ, BOGDANA BASHTA, JAN  
SEDLÁČEK**

*Katedra fyzikální a makromolekulární chemie,  
Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030/8,  
128 00 Praha 2*

Porézní organické polymery (POP) typu hypersešítovaných polyacetylenických sítí s laditelným kovalentním složením, permanentní porozitou a vysokým specifickým povrchem ( $S_{\text{BET}} \sim 1000 \text{ m}^2/\text{g}$ ) budou v rámci konferenčního příspěvku představeny jako nový typ materiálů vhodných pro sorpci plynů a látek z roztoku a heterogenní katalýzu. Bylo zavedeno a optimalizováno několik způsobů přípravy funkcionalizovaných POP a to: i) přímá homo/kopolymerizace monomerů s nechráněnými funkčními skupinami<sup>1</sup>, ii) přímá homo/kopolymerizace monomerů s chráněnými funkčními skupinami následovaná hydrolytickým odchráněním<sup>2</sup> a iii) postpolymerizační kovalentní modifikace povrchu sítí vhodnými funkcionalizačními činidly<sup>3</sup>.

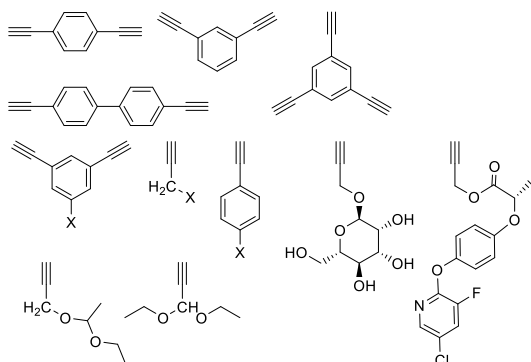


Schéma 1. Acetylenické (ko)monomery použité k přípravě funkcionalizovaných POP

*Tato práce vznikla za podpory grantů GAČR (projekt 21-02183S) a "Grant Schemes at CU" (reg. no. CZ.02.2.69/0.0/0.0/19\_073/0016935) (START/SCI/081).*

#### 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).
- Bashta B., Havelková L., Sokol J., Brus J., Sedláček J.: *Microporous Mesoporous Mater.* 330, 111636 (2022).
- Sekerová L., Březinová P., Do T. T., Vyskočilová E., Krupka J., Červený L., Havelková L., Bashta B., Sedláček J.: *ChemCatChem* 12, 1075 (2020).

### 9L-08 IMPREGNATION OF POROUS MATERIALS WITH IONIC LIQUIDS AND THEIR APPLICATION IN SORPTION OF POLLUTANTS AND ANTIMICROBIAL TESTS

**JAROSLAV LANG, JAN BEDNÁREK**

*Institute of Environmental Technology, CEET, VSB-Technical  
University of Ostrava, 17.listopadu 2172/15,708 00 Ostrava-  
Poruba  
jaroslav.lang@vsb.cz*

The ionic liquids (IL) represent a greener alternative to organic solvents<sup>1</sup>. The IL exhibit low vapour pressure, low melting points and some even antimicrobial activity<sup>1,2</sup>. The porous materials like activated carbon or clay minerals find use as adsorbents due to their large specific surface area, suitable surface chemistry and pore size<sup>3</sup>.

The use of porous materials as support for IL results in composite materials exhibiting sorption properties towards pharmaceuticals and antimicrobial activity that has the advantage of being easily separable from solution.

In this work various porous materials were impregnated with IL and their sorption activity towards chosen pharmaceutical and antimicrobial activity was tested.

*The authors acknowledge the support from ERDF "Institute of Environmental Technology – Excellent Research" (No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000853). 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.*

#### REFERENCES

- Fojtášková J., Koutník I., Vráblová M., Sezimová H., Maxa M., Obalová L., Pánek P.: *Molecules* 25, 5181 (2020).
- Chen Y., Mu T.: *GreenChE*, 2 (2021).
- Haciosmanoglu G. G., Mejías C., Martín J., Santos J. L., Aparicio I., Alonso E.: *Environ.* 317 (2022).

**9L-09**  
**TLAČENÉ FLEXIBILNÉ GRAFÉN OXIDOVÉ**  
**VRSTVY REDUKOVANÉ NÍZKOTEPLNOTNOU**  
**PLAZMOU**

**MICHAELA PAVLIČKOVÁ<sup>a</sup>, MICHAL HATALA<sup>a</sup>,**  
**JULIUS VIDA<sup>b</sup>, TOMÁŠ HOMOLA<sup>b</sup>, PAVOL**  
**GEMEINER<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> *Oddelenie polygrafie a aplikovanej fotochémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava,*  
<sup>b</sup> *Ústav fyzikálnej elektroniky, Masarykova univerzita, Kotlářská 267/2, 61137 Brno*  
 michaela.pavlickova@stuba.sk

Grafén oxid (GO) je derivát grafénu obsahujúci kyslíkové funkčné skupiny – epoxidové, hydroxylové, karboxylové, karbonylové a esterové skupiny<sup>1</sup>. Vďaka hydrofilnému charakteru sa GO ľahko disperguje vo vode alebo organických rozpúšťadlách<sup>2</sup>. Tenké GO vrstvy môžu byť zhotovené rôznymi tlačovými technikami, ako sú: ink-jet, flexotlač, sieťotlač alebo tampónová tlač („tampoprint“). Práve tampoprint má viacero výhod, je to relatívne jednoduchá, lacná tlačová technika a je ju možné použiť pri tlači na zakrivané alebo drsné povrchy<sup>3</sup>. GO je elektrický izolant ale redukciami vzniká redukovaný GO (rGO), ktorý je elektricky vodivý a opticky aktívny<sup>4</sup>. Redukcia plazmou v porovnaní s inými redukčnými technikami (tepelná, chemická, mikrovlnná) je časovo nenáročná (iba niekoľko sekúnd), prebieha pri nízkej teplote, je možné ju aplikovať v tlačovom procese a spotrebuje málo energie<sup>1</sup>. Plazmová redukcia v prostredí rôznych pracovných plynov (Ar, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>) vedie k vytvoreniu aktívnych miest, zavedeniu dopantov a štiepeniu povrchových funkčných skupín, čo umožňuje riadiť výsledné vlastnosti rGO<sup>5</sup>. Na základe výsledných vlastností môže byť GO použitý v rôznych aplikáciách (senzory, skladovanie energie, elektrochemické systémy, atď.).

Cieľom tejto práce bola príprava GO disperzií s obsahom rozpúšťadla a polyméru vhodných pre tampoprint a ich následná tlač na flexibilné PET fólie. Vhodnosť GO disperzií pre tlač bola charakterizovaná pomocou reologických meraní. Topografia a homogenita vrstiev sa analyzovala pomocou optického a SEM mikroskopu. Tenké GO vrstvy boli redukované pomocou nízkoteplotnej plazmy v atmosfére argónu. Účinnosť redukcie bola charakterizovaná pomocou Ramanovej spektroskopie.

*Táto práca vznikla s podporou grantu VEGA 1/0488/19 a Grantovej agentúry ČR projekt 19-14770Y.*

**LITERATÚRA**

- Jing Z., Qi S., Tao X., et al.: *J. Mater. Sci.* 56, 3296 (2021).
- Konios D., Stylianakis M. M., Stratakis E., Kymakis E.: *J. Colloid Interface Sci.* 430, 108 (2014).
- Manjunath G., et al.: *Mater. Res. Express* 5, 014014 (2018).
- Homola T., Pospíšil J., Krumpolec R., Souček P., Dzik P., Weiter M., Černák M.: *ChemSusChem.* 11, 941 (2018).
- Liu C., Hung C.-W., Cheng I.-C., Hsu C.-C., Cheng I.-C., Chen J.-Z.: *Polymers* 13, 3585 (2021).

**9L-10**  
**HYPERSESÍŤOVANÉ PORÉZNÍ POLYACETYLENY**  
**S ACHIRÁLNÍMI A CHIRÁLNÍMI**  
**ORGANOMETALICKÝMI SEGMENTY**

**DAVID ŠORM<sup>a</sup>, BOGDANA BASHTA<sup>a</sup>, LADA**  
**SEKEROVÁ<sup>b</sup>, EVA VRBKOVÁ<sup>b</sup>, ELIŠKA**  
**VYSKOČILOVÁ<sup>b</sup>, JAN SEDLÁČEK<sup>a</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@natur.cuni.cz

Pomocí řetězové koordinační polymerizace byly zabudovány organometalické komplexy nesoucí koncové ethynylové skupiny do porézních organometalických polymerních sítí. Tyto sítě dosahují vysokých hodnot specifických povrchů (až 700 m<sup>2</sup>/g). Centrální kovové ionty organometalických komplexů v těchto sítích mají dvě hlavní funkce: (i) slouží jako uzly sítě, zajišťující propojení 2 polymerních řetězců a (ii) společně s ligandy tvoří katalyticky aktivní místo. Výsledné sítě tedy mohou sloužit jako heterogenní katalyzátory chemických reakcí.

Organometalické komplexy, jež jsou základními stavebními jednotkami diskutovaných porézních organometalických polymerních sítí, mohou být tvořeny buď achirálními ligandy nebo chirálními ligandy, které mají ve své struktuře asymetrický uhlíkový atom. Zabudování chirálních organometalických komplexů do polymerních sítí může ovlivnit konformaci polyacetylenových řetězců, a to tak, že tyto řetězce vykazují helikálně chirální uspořádání.

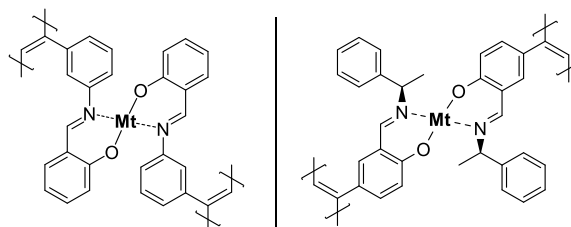


Schéma 1. Achirální (vlevo) a chirální typ (vpravo) organometalického komplexu zabudovaného do polymerní sítě

Výsledné hypersesíťované porézní organometalické polyacetyleny budou testovány jako heterogenní katalyzátory.

*Tato práce vznikla za podpory grantů GAČR 21-02183S a “Grantových schémat na UK” (reg. č. CZ.02.2.69/0.0/0.0/19\_073/0016935) (START/SCI/081)*

**9L-11****METODA FYZISORPCE PLYNŮ: NEOBVYKLÉ TVARY IZOTEREM****TOMÁŠ ZELENKA**

*Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 702 00 Ostrava  
tomas.zelenka@osu.cz*

Fyzisorpci plynů lze považovat za jednu z nejpoužívanějších metod pro texturní charakterizaci nanoporézních materiálů. Navzdory komerční dostupnosti moderních přístrojů pro fyzisorpci plynů i propracovaným softwarům pro vyhodnocování sorpčních izoterm jsou vypočtené texturní parametry pouze tak kvalitní, jak kvalitní jsou vstupní data.

Jestliže naměřená izoterma vykazuje neobvyklý tvar, který lze popsat jako "otevřený" (= nízkotlaká hystereze), "zkřížený" nebo "negativní", mělo by to pro obsluhu přístroje být varováním, že experimentální podmínky nemusely být vhodně nastaveny. Texturní parametry vypočtené z takovýchto izoterm mohou být nesprávné, stejně jako z nich vyvozené závěry.

Tento příspěvek se zaměřuje na přehled možných příčin neobvyklých tvarů izoterm, včetně návrhu nápravných opatření. Mezi běžné důvody patří např. nízká hmotnost vzorku, nesprávné odplynění vzorku, nedostatečně rovnovážné měření, popř. netěsnost systému. Dále pak problémy související se stanovením mrtvého objemu systému a strukturně nestabilním vzorkem.

*Tato práce vznikla za podpory SGS16/PřF/2022.*

## 9P-01

**HYPER-CROSS-LINKED POLYACETYLENE POLYMERS WITH SCHIFF BASE SEGMENTS. TEXTURE AND PROPERTIES MODIFICATION VIA TEMPLATE APPROACH****BOGDANA BASHTA<sup>a</sup>, JAN SEDLÁČEK<sup>a</sup>, JIŘÍ SOKOL<sup>a</sup>, JIŘÍ BRUS<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Department of Physical and Macromolecular Chemistry, Faculty of Science, Charles University, Hlavova 2030/8, Prague 2, 128 00, Czech Republic, <sup>b</sup> Institute of Macromolecular Chemistry, Czech Academy of Sciences, Heyrovského nám. 2, Prague 6, 162 06, Czech Republic  
bashtab@natur.cuni.cz

Here we present the synthesis and modification of hyper-cross-linked polymers (HCPs). The number of HCPs with polyacetylene main chains and Schiff base segments have been prepared through coordination chain-growth homo- and copolymerization approach<sup>1,2</sup>. Aromatic Schiff base-type monomers (bearing –CH=N groups) substituted with one or more polymerizable ethynyl groups have been used as a source of template-bearing segments and (i) 4,4'-diethynyl-biphenyl or (ii) tetrakis(4-ethynylphenyl)methane have been used as cross-linkers for copolymerization approach. The polymerizations have been initiated with [Rh(nbd)acac] complex and provided HCPs in high yield.

The Schiff base-type fragments of parent HCPs were found to be smoothly and quantitatively dissociated by acid hydrolysis, resulting in template-free micro/mesoporous HCPs with high specific surface area and simultaneously functionalized with –CHO or –NH<sub>2</sub> groups. The modified HCPs decorated with these reactive groups acted as a chemisorbents for trapping low molecular weight aldehydes or primary amines under formation of azomethine links between network and adsorptive. Moreover, prepared HCPs were effective for physisorption of model adsorptives (N<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, I<sub>2</sub>).

*Financial support from the Czech Science Foundation (Project 21-02183S) is gratefully acknowledged.*

## REFERENCES

1. Bashta B., Hašková A., Faulkner T., Elsayy M., Šorm D., Brus J., Sedláček J.: *Eur. Polym. J.* 136, 109914 (2020).
2. Bashta B., Havelková L., Sokol J., Brus J., Sedláček J.: *Micropor. Mesopor. Mat.* 330, 111636 (2022).

## 9P-02

**TLAČOU ZHOTOVENÉ VRSTVY OBSAHUJÚCE BIOCHAR PRE SENZORICKÉ APLIKÁCIE****MICHAL HATALA<sup>a</sup>, MICHAELA PAVLIČKOVÁ<sup>a</sup>, PAVOL GEMEINER<sup>a</sup>, OLHA SARA KHMAN<sup>b</sup>, ĽUBOMÍR ŠVORC<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Oddelenie polygrafie a aplikovanej fotochémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, <sup>b</sup> Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko  
michal.hatala@stuba.sk

Tlačená elektronika patrí v dnešnej dobe k veľmi rýchlo sa rozvíjajúcim výrobným odvetviám. Jednou z aplikácií tlačenej elektroniky je aj oblasť tlačených elektrochemických senzorov, využívajúcich rôzne štruktúrne formy uhlíka. Jedným z takýchto materiálov je biochar<sup>1</sup> – uhlíkový materiál získavaný pyrolýzou biomasy. Jeho perspektíva z hľadiska využitia nie len v oblasti senzorických aplikácií vychádza z jeho rôznorodých vlastností, udržateľnosti a nízkych výrobných nákladov<sup>2</sup>.

Cieľom tejto práce bolo pripraviť disperzie biocharu vhodné pre tlač. Snahou bolo optimalizovať proces prípravy disperzií ako z hľadiska ideálneho postupu homogenizácie tak ich samotného zloženia. Kompozície boli modifikované špecificky pre aplikáciu pomocou sieťotlače a tampónovej tlače. Charakterizované boli reologické vlastnosti v ich korelácii s tlačovým procesom a kvalitatívne parametre tlačených vrstiev. Analyzovaná bola možnosť ich využitia pre modifikáciu uhlíkovej pracovnej elektródy elektrochemických senzorov s troj-elektrodovou štruktúrou. Aplikovateľnosť týchto senzorov bola overená štúdiom elektrochemického správania modelovej zlúčeniny – paracetamol s možnosťou jeho spoľahlivého stanovenia vo vzorkách komerčných farmaceutických prípravkov. V budúcnosti by senzory na báze biocharu mohli predstavovať lacnú, zelenú a efektívnu alternatívu k tradičným elektrochemickým senzorom na báze grafitu a sklovitého uhlíka.

*Táto práca vznikla s podporou grantov VEGA 1/0488/19 a 1/0159/20, operačného programu: Integrovaná infraštruktúra, projektu č. 313011ASS8: Strategický výskum v oblasti SMART monitoringu, liečby a preventívnej ochrany pred koronavírusom (SARS-CoV-2).*

## LITERATÚRA

1. Li Y., Xu R., Wang H., Xu W., Tian L., Huang J., Liang Ch., Zhang Y.: *Biosensors* 12(6), 377 (2022).
2. Spanu D., Binda G., Dossi C., Monticelli D.: *Microchem. J.* 159, 105506 (2020).



## 9P-03

## METAL-ORGANIC FRAMEWORKS CONTAINING FLUORINATED LIGANDS

**DÁVID PRINCÍK, VLADIMÍR ZELENÁK**

Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, P. J. Šafárik University, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovak Republic  
david.princik@student.upjs.sk

The last two decades have received a huge expansion in the field of crystal polymeric porous materials also known as Metal-Organic Frameworks (MOF). These versatile materials dominate mainly due to their surface area and pore volume with various pore topologies, accessible cages and their potential applications in different fields, such as heterogeneous catalysis<sup>1</sup>, gas storage and gas separation materials<sup>2</sup> or drug delivery systems. Despite their great advantages, these materials also have certain disadvantages. From an industrial point of view, the main disadvantage is the hydrolytic lability, which is compensated by drying the used reactants, gases or solvents, which increases the production costs. Several methods are known to increase the hydrolytic resistance of MOF materials, but they often lead to pore occupancy and potentially decrease the sorption capacity of gases<sup>3</sup>.

In this work we focus on increasing the hydrolytic resistance of MOF-type materials using a synthetic method that includes a completely new synthesis of MOF materials from a series of new, hydrophobic fluorinated ligands. Their hydrophobic effect is ensured by the aromatic skeleton of the ligand and the fluorine atoms bound to it. Two series of MOF complexes with non-fluorinated ligand as a reference material and fluorinated derivative were prepared. The first ligand represents biphenyl-4,4'-dicarboxylic acid (H<sub>2</sub>BPDC), with which MOF complexes have been successfully prepared using Zn<sup>2+</sup>, Ba<sup>2+</sup>, Ce<sup>3+</sup>, Fe<sup>3+</sup>, Cr<sup>3+</sup>, La<sup>3+</sup>, Yb<sup>3+</sup> and Zr<sup>4+</sup> salts. The second ligand represents 3,3',5,5'-tetrafluorobiphenyl-4,4'-dicarboxylic acid (H<sub>2</sub>4FBPDC), with which MOF complexes have been prepared using Ce<sup>3+</sup> and La<sup>3+</sup> salts and all prepared MOF complexes were subjected to IR, TG and SXRD measurements confirming their composition. Experimental results confirm the increased stability of fluorinated derivatives compared to reference complexes.

*This work was supported by the Scientific Grant Agency (VEGA 1/0865/21).*

## REFERENCES

1. S. Li, Y. Zhang, Y. Hu et al.: *J. Materiomics*. 7, 1029 (2021).
2. Q.-F. Qiu, C.-X. Chen, Z. Zeng, et al.: *Inorg. Chem.* 59, 14856 (2020).
3. S.-Y. Jiang, W.-W. He, S.-L. Li., et al.: *Inorg. Chem.* 57, 6118 (2018).

## 9P-04

## MESOPOROUS SILICAS WITH PEI-MODIFIED SURFACE FOR HEAVY METAL IONS CAPTURE FROM WASTEWATER: EFFECT OF MORPHOLOGY

**ĽUBOŠ ZAUŠKA, MIROSLAV ALMÁŠI**

Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzessova 11, 041 54 Košice, Slovenská republika  
lubos.zauska@student.upjs.sk

Human diseases caused by heavy metal ions are commonly connected with bioaccumulation. The metal ions are accumulated in human tissue, mostly in fats. If the initial concentration of chronic toxicity is reached, first symptoms of intoxication are appeared. This is caused by Fenton reaction radical are produced by decomposition of peroxides. In water treatment, especially heavy metal ions removing, ion-exchange sorbents are used. Well-known materials are zeolites, humic acids, resins and more. These materials are cheap and eco-friendly but there is a disadvantage, for great and effective ion capture, large amount of these sorbents are needed. Our prepared materials SBA with Schiff base PEI modified surface was used as novel adsorbents. SBA materials were characterised via analytical methods like Fourier-transformation infrared spectroscopy (FTIR), specifically, middle infrared attenuated total reflectance (MIR-ATR) and far infrared using CsI technique (FIR-CsI). Nitrogen adsorption was realised at 77 K in pressure range  $p/p_0 = 0.05-0.95$ . Surface area was determined with Brunauer-Emmett-Teller (BET) mathematical model and pore volume and pore diameter was characterised with Barret-Joyner-Halenda (BJH) method. Small angle X-ray diffraction (SAXS) diffraction was also realised for SBA materials lattice cell determination. Angle range was set to  $2\theta 0-3^\circ$  with speed scan  $0.5^\circ \text{ min}^{-1}$ . Thermal properties were studied with thermal analysis (TGA) and The samples were heated with a heating rate of  $10^\circ \text{ C min}^{-1}$  in the air with a maximum of  $800^\circ \text{ C}$ . Texture properties and morphology of mesoporous silica were checked with the transmission (TEM) and scanning electron microscope (SEM). Conductometry was used for quantification and effectivity of ion capture. We have prepared three types of well-known materials (SBA-12, SBA-15 and SBA-16) with novel modifications and further tested them for water purification. Surface modification had excellent affect on their adsorption properties against selected metal ions (Ni<sup>2+</sup>, Co<sup>2+</sup> and Cu<sup>2+</sup>), and there is no reverse elution of cations to the water.

*This work was supported by VVGS-PF-2021-2092 grant scheme and APVV SK-CZ-RD-21-0068.*

## 10L-01

## SYNTECKÉ POLYMERY V KNIHOVNÍCH FONDECH

RADKA KALOUSKOVÁ, VÁCLAVA BENEŠOVÁ,  
ANATOLIJ SOKOLOHORSKYJ, LENKA MALINOVÁ,  
JIRÍ BROŽEK

Ústav polymerů, Vysoká škola chemicko-technologická  
v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6  
jiri.brozek@vscht.cz

V knižní vazbě byly historicky používány výhradně materiály, jejichž základem jsou přírodní polymery. S vývojem modifikovaných přírodních a syntetických polymerních materiálů našly uplatnění v knihařství i plasty. Prvním aplikovaným plastem byl nitrát celulosy, který úspěšně nahrazoval přírodní materiály, jako je perleť nebo želvovina<sup>1</sup>.

S rozvojem polymerní chemie byly postupně v knižní vazbě využívány další deriváty celulosy, polyvinylchlorid, polyestery, polyamidy, polyurethany, polystyren, polyethylen a polypropylen. Rada polymerů je aplikována i ve formě lepidel, například polyvinylacetát a polyakrylát.

Při aplikaci polymerních materiálů v tomto oboru se často opomíjela předpokládaná životnost výrobku v závislosti na vlivu okolního prostředí. Tento problém je aktuální i v případě archivace knih s plastovou knižní vazbou. Zásadní komplikací je zde historie skladování či podmínky uchování knih. Vlivem působení světla a jiných faktorů dochází k deterioraci vlastností knižního obalu tj. křehnutí, odlupování, tmavnutí atd. Změna ve vlastnostech plastů spočívá jak v degradaci v průběhu stárnutí, tak v uvolňování přísad s ohledem na chemickou strukturu polymeru<sup>2</sup>.

Příspěvek je zaměřen na hodnocení stárnutí knižních vazeb z měkkého resp. neměkkého PVC<sup>3</sup>. Tento proces lze hodnotit celou řadou metod, které jsou až na výjimky invazivní. Nejjednodušší neinvazivní detekční metodou je IR spektrometrie, která v řadě případů není efektivní. Rozsah degradace, který jsme studovali na záměrně stárnutých vzorcích knižních vazeb, jsme charakterizovali změnou tepelné stability, molární hmotností, barvy, teploty skelného přechodu, obsahu změkčovadla atd. Jsou též diskutovány možnosti zotavení knižních obalů z hlediska ohebnosti.

Tato práce vznikla za podpory projektu DG18PO2OVV001 – Syntetické materiály v knižních fondech v rámci programu NAKI II Ministerstva kultury České republiky.

## LITERATURA

1. Lagana A., v knize: *Modern Material and contemporary art*. ICOM CC, Lisbon 2011.
2. Kalousková R., Brožek J., v knize: *Kapitoly z konzervace a restaurování plastů II*, Vávrová P. (ed.), s. 27. Technické museum v Brně, 2021.
3. Kalousková R., Malinová L., Benešová V., Brožek J., *Chem. Listy* 116, 381 (2022).

## 10L-02

## DEHALOGENACE KAPALNÝCH PRODUKTŮ Z PYROLÝZY PLASTŮ PRO PETROCHEMICKÉ VYUŽITÍ

JAN HUBÁČEK<sup>a,b</sup>, JAROMÍR LEDERER<sup>a</sup>, PAVEL KURAN<sup>b</sup>

<sup>a</sup> ORLEN UniCRE a.s., Revoluční 1521/84, 400 01 Ústí nad Labem, Czech Republic, <sup>b</sup> Faculty of Environment, Jan Evangelista Purkyně University in Ústí nad Labem, Pasteurova 3632/15, Ústí nad Labem, 400 96, Czech Republic  
Jan.Hubacek@orlenunicre.cz, Pavel.Kuran@ujep.cz

Pyrolýza je v oblasti chemické recyklace v současné době středem pozornosti, jelikož nabízí možnost přeměnit plastový odpad na surovinu vhodnou k dalšímu zpracování na nové polymery v rámci rafinérsko-petrochemického komplexu. Přestože se využití pyrolýzy nabízí pro celou řadu odpadních surovin, je třeba vyřešit zejména složení produktů z hlediska obsahu heteroatomů, které mohou při samotné pyrolýze a v navazujících technologiích způsobit vážné poškození technologie vlivem koroze<sup>1</sup>. Nejrizikovější je v běžném plastovém komunálním odpadu chlór, který je obsažený zejména v PVC<sup>2</sup>.

Dechlorace byla zkoumána na laboratorní vsádkové pyrolýze popsané dříve<sup>3</sup>. Pyrolýzována byla modelová směs 5P obsahující HDPE, LDPE, PP, PS a PVC, při 500 °C.

Tab. I shrnuje obsah Cl v kapalných produktech s použitím sorbentů a krokové pyrolýzy při 350 °C. Testovány byly také odlišné podmínky zahrnující kratší dobu zdržení v reaktoru se sorbenty *in-situ* (A) a delší dobu zdržení produktů v reaktoru a sorbenty mimo reaktor *ex-situ* (B). Z obsahu Cl je patrné, že při delší době zdržení, došlo k výraznému snížení obsahu Cl v kapalném produktu. Kromě krokové pyrolýzy se osvědčilo zejména uložení sorbentů *ex-situ*. Na základě výsledků byly navrženy mechanismy a vhodné podmínky pro pyrolýzu reálných plastových odpadů

Tabulka I

| Podmínky                             | A            | B          |
|--------------------------------------|--------------|------------|
| Konvenční                            | 12329 ± 1562 | 7789 ± 618 |
| Kroková                              | 1062 ± 81    | 86 ± 12    |
| + Ca(OH) <sub>2</sub>                | 13570 ± 4821 | 10 ± 6     |
| + Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> -Si | 16537 ± 2730 | 8 ± 2      |
| + CaCO <sub>3</sub>                  | 13203 ± 3781 | –          |

Tato práce vznikla za podpory grantu CZ.02.1.01/0.0/0.0/17\_049/0008397 a LM2018119 MSM CR.

## LITERATURA

1. Nagu M., Alanazi N., Adam F.: *Materials performance* 56, (2017).
2. Miranda R., Pakdel H., Roy C., Vasile C.: *Polymer Degradation and Stability* 73(1), (2001).
3. Hubáček J., Lederer, J., Kuráň P., Koutník P., Gholami Z., Zbuzek M., Bačiak M.: *Fuel Processing Technology* 231, (2022).

**10P-01****STRUCTURE OF HIGH-TEMPERATURE PHASES IN THE MULTICOMPONENT CEMENT PASTES STUDIED BY INFRARED SPECTROSCOPY IN THE MID-IR REGION****ZORA HAJDÚCHOVÁ<sup>a</sup>, EVA KUZIELOVÁ<sup>a,b</sup>, MICHAL SLANÝ<sup>b</sup>, MATÚŠ ŽEMLIČKA<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic, <sup>b</sup> Institute of Construction and Architecture, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK-845 03 Bratislava, Slovak Republic  
zora.hajduchova@stuba.sk

Phase composition of cementitious systems and its changes due to high temperatures and pressures affect material properties. Detailed investigation of the cementitious binders' phase transformations caused by such conditions is conditioned by the development of new materials with the potential for use in geothermal wells or for geological sequestration of CO<sub>2</sub>.

Multicomponent cement pastes based on the high sulphate resistant Class G cement substituted by 30 mass% of binary or ternary mixtures of silica fume (SF), metakaolin (MK), and ground granulated blast-furnace slag (BFS) were submitted to hydrothermal curing (150 °C, 18 MPa, 7 days). A detailed study of the formed phases was performed by FTIR.

The structure and thermal stability of the formed phases depended on the used combination of additives. The lowest CaO/SiO<sub>2</sub> (C/S) ratio, the higher degree of silicate chains polymerization was attained, which was demonstrated by the shift of absorption band due to Si-O stretching vibration (1250–750 cm<sup>-1</sup>) to higher wavenumbers. The highest wavenumbers were achieved by the samples with SF and MK. When BFS was used instead of MK or in the case of MK – BFS combination, the position of this absorption peak moved to lower wavenumbers following increasing C/S. It was caused by decomposition and higher condensation degree of formed C(-A)-S-H accompanying transformation of primary hydration products to crystalline phases at high temperature. Documented α-C<sub>2</sub>SH consisted of isolated [SiO<sub>4</sub>]<sup>4-</sup> groups. On the contrary, the position of the main absorption band in the area of Si-O bending vibrations moved to higher wavenumbers with increasing depolymerization and increasing C/S. The shift to higher wavenumbers as a result of stronger binding energy follows shorter bonds associated with higher angles. Besides, the higher the C/S ratio, the lower intensity of absorption band at about 456 cm<sup>-1</sup> due to O-Si-O bending vibration is documented again confirming transformation of polymerized structures of hydration products to the smaller units.

*This work was supported by the courtesy of APVV-19-0490 and Slovak Grant Agency VEGA No. 2/0032/21.*

**10P-02****FACTORS INFLUENCING THE HYDRATION COURSE OF BLENDED CEMENT UNDER CONDITIONS SIMULATING REAL GEOTHERMAL WELLS IN SLOVAKIA****EVA KUZIELOVÁ<sup>a,b</sup>, JANA JURISOVÁ<sup>a</sup>, RADOSLAV NOVOTNÝ<sup>c</sup>, MATÚŠ ŽEMLIČKA<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic, <sup>b</sup> Institute of Construction and Architecture, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK-845 03 Bratislava, Slovak Republic, <sup>c</sup> Materials Research Centre, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118, CZ-612 00 Brno, Czech Republic  
jana.jurisovala@stuba.sk

Geothermal wells and wells for petroleum and natural gas present an application area with the most severe conditions for cementitious materials. Factors such as temperature, pressure, and corrosive fluids have a significant impact on the hydration course of cement-based materials, especially during the early and middle stages, and can cause damage of the well's integrity.

Early and middle stages of hydration in the multi-component cement systems were therefore studied in dependence on their composition (cement class G partially replaced by silica fume, metakaolin, and ground-granulated blast-furnace slag), temperature (25, 60, and 80 °C), and hydration media (water and geothermal solution). Ongoing processes were evaluated by a combination of isothermal calorimetry, thermogravimetric, X-ray diffraction, and Fourier Transform Infrared analyses in the mid-IR region.

Geothermal solution delayed main hydration, however, considering the times of the calorimetric maxima at 25 °C, it led to higher amounts of hydration products with more polymerized structures than hydration in water. At higher temperatures, the deceleration effect of the geothermal solution became less evident, but a higher degree of silica polymerization and more hydration products demonstrated samples hydrated in water. Regardless of the hydration temperature, already in 40 min, the hydration was more promoted in the solution. The acting of fine additives advanced by higher temperatures accelerated hydration and resulted in the faster depletion of gypsum and the formation of SO<sub>4</sub>-AFm and CO<sub>3</sub>-AFm phases was confirmed during the deceleration period in the case of hydration in water and geothermal solution, respectively.

*This work was supported by the courtesy of The Slovak Research and Development Agency APVV-19-0490 and Slovak Grant Agency VEGA No. 2/0032/21.*

## 10P-03

## DEGRADACE TEXTILNÍCH BARVIV Z ODPADNÍCH VOD OXIDAČNÍMI PROCESY

OLGA KRUPKOVÁ, LIBOR DUŠEK

Ústav environmentálního a chemického inženýrství, fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice 2  
olga.krupkova@student.upce.cz

Tato práce se zabývá degradací textilních barviv ve vodných roztocích pomocí pokročilých oxidačních procesů, kde pro odbourávání byla použita barviva Acid Blue 80 (schéma 1) a Acid Green 25 (schéma 2). Jedná se o antrachinonová barviva používaná pro barvení vlny, nylonu a polyakrylonitrilu. Odolnost těchto barviv vůči biologické degradaci je vysoká, proto je třeba použít pokročilé oxidační procesy (AOP).

Roztoky modelových barviv byly odbarvovány pomocí systémů UV-C, UV-C/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> a pomocí foto-Fentonovy reakce. U systémů UV-C a UV-C/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> degradace barviv probíhala v rozmezí pH 3–11 a u foto-Fentonovy reakce se pH pohybovalo v menším rozmezí 3–7. Při vyšším pH již kinetická měření pro foto-Fentonovu reakci nebyla možná z důvodu nehomogenity měřené reakční směsi. Kinetické experimenty byly prováděny v 10% molárním přebytku peroxidu vodíku, nutného pro celkovou mineralizaci modelových barviv a současně byl molární poměr peroxidu vodíku ke katalytickým Fe<sup>2+</sup> iontům vždy 10:1.

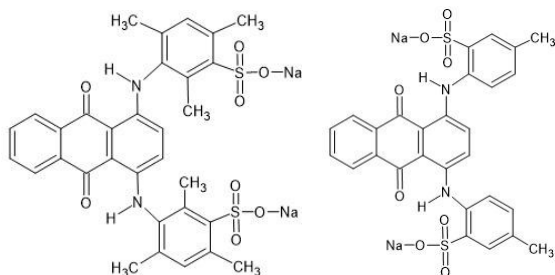


Schéma 1. Acid Blue 80      Schéma 2. Acid Green 25

Tato práce vznikla za podpory Studentské grantové soutěže 2022 (SGS\_2022\_001).

## LITERATURA

1. Dušek L.: Chem. Listy 104, 846 (2010).
2. Khataee A. R., Zarei M., Fathinia M., Khobnasab Jafari M.: Desaliation. 268, 126 (2011).
3. Kuchtová G., Chýlková J., Váňa J., Vojs M., Dušek L.: J. Electroanal. Chem., 863 (2020).

## 10P-04

## ENERGETICKÉ MATERIÁLY SPLŇAJÚCE REACH

MILAN OLŠOVSKÝ<sup>a</sup>, MILAN KRIŠTOF<sup>a</sup>, PETR KUNA<sup>b</sup>, ŠIMON BUDZÁK<sup>c</sup>

<sup>a</sup> ZVS Impex, a. s. Štúrova 925/27, 01841 Dubnica nad Váhom  
<sup>b</sup> STC, s. r. o. Hlinky, Brno, <sup>c</sup> Fakulta prírodných vied UMB, Tajovského 40, 97401 Banská Bystrica  
milan.olsovsky@umb.sk

Príspevok sa zaoberá vývojom nových a náhradou zložení v súčasnosti používaných energetických materiálov, ktoré obsahujú zložky predstavujúce riziká z hľadiska vplyvov na životné prostredie a ľudské zdravie. Takéto energetické materiály budú postupne nahrádzané novými, ktorých zloženie spĺňa všetky aktuálne predpisy v oblasti nakladania s chemickými látkami v zmysle legislatívy REACH. Navyiac budú takéto kompozície energetických materiálov aj oveľa bezpečnejšie pri manipulácii a použití vo výrobkoch. Návrh nových formulácií energetických materiálov zlepši pracovné prostredie, eliminujú sa nebezpečné zlúčeniny (najmä na báze ťažkých kovov), ktoré sa uvoľňujú pri výrobe, spracovaní a používaní energetických materiálov. Laboratórne navrhnuté nové zloženia budú overené v poloprevádzkovom meradle tak, aby mohli byť zavedené do výroby. Súčasťou vývoja je aj príprava skúšobných metód a technických podmienok výroby novovyvinutých energetických materiálov (pyrotechnických zloží) pre vojenské (muničné elementy) a civilné (hasiace prístroje, airbagy) použitie.

Táto práca vznikla v rámci projektu NFP304010X023 „Ekologicky prijateľné energetické materiály spĺňajúce požiadavky REACH“ podporeného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja.



## 11L-01

**CHEMICAL COMPOSITION AND ANTIBACTERIAL ACTIVITY OF ESSENTIAL OILS FROM NATIVE PLANT SPECIES OF LEYTE, PHILIPPINES****GENESIS ALBARICO<sup>a,b</sup>, KLARA URBANOVÁ<sup>a</sup>, MARKETA HOUDKOVÁ<sup>a</sup>, MARLITO BANDE<sup>b</sup>, EDGARDO TULIN<sup>b</sup>, LADISLAV KOKOSKA<sup>a\*</sup>**

<sup>a</sup> Faculty of Tropical AgriSciences, Czech University of Life Sciences Prague, Kamycka 129, 165 00 Prague 6 – Suchbát, Czech Republic, <sup>b</sup> Visayas State University, Visca, Baybay City, Leyte, Philippines 6521-A  
genesis.albarico@vnu.edu.ph; kokoska@ftz.czu.cz

The Philippines, a tropical archipelago in Southeast Asia, is one of the top biodiversity hotspots in the world<sup>1</sup>. Some of the flora species found in the country are essential oil (EO) bearing plants which belong to the Lauraceae, Myrtaceae, and Zingiberaceae families. The enormous variety of plant species in the country suggests various EOs with possible significant economic and commercial importance. In this study, we aimed to determine the chemical composition of volatile compounds present from six Philippine plant species, namely *Alpinia elegans* (C.Presl) K.Schum. (seeds), *Alpinia haenkei* C. Presl (pericarp), *Cinnamomum iners* Reinw. (leaves), and *Xanthostemon verdugonianus* Náves (leaves). The EOs were collected via hydrodistillation and analyzed using dual-column/dual-detector system gas chromatography-mass spectrometry. Analysis of the EOs revealed that D-limonene (16.8/15.4 % w/w), methyl cinnamate (86.9/88.4 % w/w), caryophyllene (21.0/34.9 % w/w), and  $\alpha$ -gurjunene (32.3/19.5 % w/w) are major components of *A. elegans* (seeds), *A. haenkei* (pericarp), *C. iners* (leaves), and *X. verdugonianus* (leaves), respectively. The EOs were tested for antibacterial activity using broth microdilution assay<sup>2</sup> using microplates sealed by EVA capmat<sup>3</sup>. *A. elegans* (seeds) EO exhibited an MIC of 256  $\mu$ g/mL and 512  $\mu$ g/mL against *Staphylococcus aureus* and *Candida albicans*, respectively. *X. verdugonianus* also presented considerable activity with MICs of 256  $\mu$ g/mL against *S. aureus* and *C. albicans*. The remaining EOs tested for antibacterial activity showed MICs >1024  $\mu$ g/mL. In conclusion, the result of this study will contribute to the knowledge on the phytochemistry of Southeast Asian plant taxa, especially on the chemical composition of essential oil-bearing plant species and their volatile compounds and their potential antimicrobial activities.

*This study was supported by the Czech University of Life Sciences Prague (project IGA 20223102)*

## REFERENCES

1. Myers N., Mittermeier R.A., Mittermeier C.G., da Fonseca G.A.B., Kent J.: *Nature*. 403, 6772 (2000).
2. Houdkova M., Albarico G., Doskocil I., Tauchen J., Urbanova K., Tulin E., Kokoska L.: *Molecules*. 25, 6004 (2020).
3. Rondevaldova J., Novy P., Urban J., Kokoska L.: *Arabian Journal of Chemistry* 10, 4 (2017).

## 11L-02

**ANALÝZA SEKUNDÁRNÍCH METABOLITŮ KONOPÍ****TIBOR BÉRES<sup>a</sup>, DOMINIKA KACZOROVÁ<sup>b,c</sup>, SANJA ČAVAR ZELJKOVIĆ<sup>a,c</sup>, PETR TARKOWSKI<sup>a,c</sup>**

<sup>a</sup> Centrum regionu Haná pro biotechnologický a zemědělský výzkum, Český institut výzkumu a pokročilých technologií CATRIN, Univerzita Palackého, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, <sup>b</sup> Katedra biochemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, <sup>c</sup> Centrum regionu Haná pro biotechnologický a zemědělský výzkum, Oddělení genetických zdrojů zelenin, léčivých rostlin a speciálních plodin, Výzkumný ústav rostlinné výroby, v.v.i, Šlechtitelů 29, 783 71 Olomouc  
tibor.beres@upol.cz

V posledních letech roste globální zájem o terapeutické využití konopí, zejména v humánní a veterinární medicíně. Atraktivním se ale stává také v oblastech zdravé výživy a psychohygieny. Většina biologicky aktivních obsahových látek pochází z řad sekundárních metabolitů a patří sem zejména fytokanabinoidy, terpeny a terpenoidy či fenolové látky. Kromě sekundárních metabolitů nabízí konopná semínka výborný zdroj proteinů a esenciálních mastných kyselin<sup>1</sup>.

K plnému využití potenciálu konopí v medicíně pravděpodobně dojde až po pochopení interakce jednotlivých složek komplexních konopních extraktů. Tato souhra relevantních komponentů je označována termínem „entourage (tedy doprovodný) efekt“ (cit.<sup>2</sup>).

Přednáška pojednává o analytických metodách používaných výzkumnou skupinou Fytochemie CATRIN k charakterizaci jednotlivých složek konopí. Představeny jsou metody kapalinové a plynové chromatografie spojené s různými detekčními systémy. Součástí přednášky je rovněž přehled rozmanitých vzorků a požadavků, s nimiž pracovníci výzkumné skupiny přichází do styku. Diskutovány jsou také zajímavosti či úskalí chemické analýzy konopí.

## LITERATURA

1. Kaczorová D., Béres T., Čavar Zeljković S., Bjelková M., Kuchař M., Tarkowski P.: *Chem. Listy* 114, 277 (2020).
2. Ben-Shabat S., Fride E., Sheskin T., Tamiri T., Rhee M. H., Vogel Z, Bisogno T., De Petrocellis L., Di Marzo V., Mechoulam R.: *Eur. J. Pharmacol.* 353, 23 (1998).

## 11L-03

**SILICE V POTRAVINÁŘSTVÍ A ZEMĚDĚLSTVÍ – SLEPÁ ULICE NEBO SVĚTLO NA KONCI TUNELU?****PAVEL KLOUČEK**

*Katedra kvality a bezpečnosti potravin, Česká zemědělská univerzita v Praze, Kamýcká 129, 16500 Praha 6-Suchbátka, kloucek@af.czu.cz*

Historicky měly silice obrovský význam ve formě přírodních konzervačních látek a/nebo koření. Jaká je situace dnes? Mohou být opět využívány jako přírodní antimikrobiální látky v různých částech řetězce výroby potravin?

Antimikrobiální aktivita silic byla rozsáhle studována a prokázána proti řadě mikroorganismů, většinou *in vitro* a v poslední době také na modelových případech<sup>1</sup> (obr. 1). Přesto je jejich komerční využití stále spíše ojedinělé. Důvodem může být jejich vysoká hydrofobicita, těkavost a intenzivní vliv na senzory vlastnosti ošetřovaných produktů, což omezuje jejich použití v reálných aplikacích. Hlubší poznání mechanismu jejich působení vede ke zlepšení způsobů aplikace EO. Existují pokusy o jejich využití v plynné fázi, s modifikovanou atmosférou, jako součást obalů<sup>2</sup>, nebo formulované různými metodami enkapsulace či sorpcí<sup>3</sup>. Počet výrobků na bázi silic se pomalu zvyšuje především v zemědělské prvovýrobě, zatímco potravinářský sektor na zásadní průlom stále čeká.



Obr. 1. Počet publikovaných článků na téma antimikrobiální aktivita silic „(essential oil or essential oils) and (antibacterial or antimicrobial or antifungal)“

*Tato práce vznikla za podpory grantu NAZV QK21010064 a METROFOOD-CZ (LM2018100).*

## LITERATURA

- Ni Z. J., Wang X., Shen Y., Thakur K., Han J., Zhang J. G., Hu F., Wei Z. J.: *Trends Food Sci. Technol.* 110, 78 (2021).
- Sharma S., Barkauskaite S., Jaiswal A. K., Jaiswal S.: *Food Chem.* 343, 128403 (2021).
- Bernardos A., Božik M., Montero A., Pérez-Esteve É., García-Casado E., Lhotka M., Fraňková A., Marcos M. D., Barat J. M., Martínez-Mañez R., Klouček P.: *Nanomaterials* 11, 1280 (2021).

## 11L-04

**STEROIDNÍ SAPONINY V ROSTLINÁCH – BIOLOGICKÝ VÝZNAM A ANALÝZA****DANUŠE TARKOWSKÁ\*, TEREZA TROJANSKÁ, MIROSLAV STRNAD**

*Laboratoř růstových regulátorů, Univerzita Palackého a Ústav experimentální botaniky AVČR, v.v.i., Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, tarkowska@ueb.cas.cz*

Saponiny jsou terpenoidní, převážně rostlinné, glykosidy, s povrchově aktivními vlastnostmi (ve vodném prostředí tvoří mýdlovou pěnu; z lat. *sapon* = mýdlo + *-in* = jeden z). Mezi nejvýznamnější farmaceutické a nutraceutické vlastnosti saponinů patří zejména hypocholesterolemické, antikarcinogenní, hepatoprotektivní a hypoglykemické (data z testů *in vitro* a na zvířecích modelech)<sup>1</sup>. V rostlině samotné pak plní roli sekundárních metabolitů chemicky regulujících interakci rostlina-hmyz. Jejich toxický účinek u hmyzu je většinou spojen s trávicí dysfunkcí a se sníženým nebo zastaveným růstem a vývojem<sup>2</sup>. Názvy saponinů jsou, podobně jako je tomu u alkaloidů, odvozeny od názvu rostliny, ze které byly poprvé izolovány, např. ginsenosidy ze ženšenu (*angl.* ginseng), sójové saponiny ze sóji apod.

Ze strukturního hlediska jsou saponiny složeny z lipofilní a hydrofilní části – viz Tabulka I. Skelet lipofilní části bývá složen buď z 30 uhlíků (triterpenoidní saponiny) nebo z 27 uhlíků (steroidní saponiny). Hydrofilní část tvoří sacharidové jednotky v různém počtu, v různých kombinacích a rovněž různým způsobem připojených k saponogenu.

Tabulka I

Přehled rozdělení rostlinných saponinů

| Saponin | Aglykon (saponogenin) | triterpenoidní<br>steroidní   |
|---------|-----------------------|---|
|         | Glykon (sacharid)     | D-glukóza, D-galaktóza, L-ramnóza, kyselina D-glukuronová, L-arabinóza, D-fukóza, D-xyulóza |

Tato práce byla zaměřena na vypracování metodiky izolace a analýzy vybraných saponinů se steroidním aglykonem z rostlinného materiálu. Izolace byla provedena v mikroměřítku metodou extrakce na tuhé fázi a pro následnou analýzu bylo použito spojení separace za pomoci UHPLC (sorbent typu reverzní fáze) s tandemovou hmotnostní detekcí (MS/MS). V rámci práce bylo rovněž provedeno studium matričního efektu a kvantifikace byla provedena na principu metody izotopového zředování.

## LITERATURA

- Rao A. V., Gurfinkel D. M.: *Drug Metab. Drug Interact.* 17, 211 (2000).
- Hostettmann K., Marston A.: *Saponins*, Cambridge Univ. Press, Cambridge 1995.

## 11L-05 KONOPÍ – HROZBA NEBO ŠANCE?

**PETR TARKOWSKI**

Centrum regionu Haná pro biotechnologický a zemědělský výzkum, Český institut výzkumu a pokročilých technologií (CATRIN), Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc  
petr.tarkowski@upol.cz

Konopí je jednou z nejpoužívanějších, nejdiskutovanějších a současně nejkontroverznějších rostlin. Již celá tisíciletí provází lidstvo jako průmyslová plodina, léčivá rostlina i rekreační droga navozující pocit radosti a bezstarostnosti. Právě zneužívání jediné malé skupiny substancí s psychoaktivním účinkem, které tato rostlina produkuje, již od 50. let minulého století zásadně omezuje její širší použití a dynamičtější výzkum<sup>1</sup>. Destigmatizace konopí přispěje k rychlejšímu získávání poznatků a uplatnění této unikátní rostliny, ať už půjde o individualizovanou léčbu v humánní a veterinární medicíně, udržitelnost zemědělství či ekologizaci výroby textilií, biopolymerů nebo stavebních materiálů.

Přednáška je věnována přehledu metod chemické analýzy sekundárních metabolitů v rostlinách konopí a konopných produktech, které na našem pracovišti rutinně používáme, právě zavádíme a jejichž zavedení teprve plánujeme. Dále budou diskutovány novinky v naší legislativě související s produkcí konopí pro léčebné účely, potravin obsahujících konopí, nepotravinářských konopných produktů. Závěrem budou nastíněny nové trendy ve šlechtění konopí s cílem získat genotypy s unikátním spektrem sekundárních metabolitů, vlákno požadovaných parametrů nebo sníženou fytoextrakční účinností.

### LITERATURA

1. Kaczorová D., Béres T., Čavar Zeljković S., Bjelková M., Kuchař M., Tarkowski P.: Chem. Listy 114, 277 (2020).

## 11L-06 MODULACE MNOHOČETNÉ LÉKOVÉ REZISTENCE FLAVONOIDY

**KATEŘINA VALENTOVÁ<sup>a</sup>, JITKA VIKTOROVÁ<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Mikrobiologický ústav AV ČR, v.v.i., Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4 – Krč, <sup>b</sup> Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice  
kata.valentova@email.cz

Mnohočetná léková rezistence (MDR) vůči protinádorové chemoterapii a antibiotikům je horkým tématem ve vývoji léčiv<sup>1,2</sup>. Cílem práce bylo prostudovat modulaci MDR vybranými flavonoidy, flavonolignany a jejich deriváty. Silybin A, B a AB, 2,3-dehydrosilybin A, B a AB, silychristin A, anhydrosilychristin, isosilychristin a 2,3-dehydrosilychristin A inhibovaly P-glykoprotein (P-gp). Senzitivizace buněk karcinomu vaječníků rezistentních na doxorubicin s nadměrnou produkcí P-gp byla pozorována především pro 2,3-dehydrosilybin A, silychristin A a 2,3-dehydrosilychristin A. Anhydrosilychristin a isosilychristin ovlivnily expresi genů P-gp a ABCG2. Silybin B působil přímo na P-gp a snižoval expresi P-gp, MRP-1 a BCRP<sup>3,4</sup>. Silybin A, 2,3-dehydrosilybin B a 2,3-dehydrosilybin AB při koncentracích £ 20 µM zvrátily rezistenci klinického izolátu *Staphylococcus aureus* na antibiotika. 2,3-Dehydrosilybin B a AB snížily genovou expresi efluxních pump a 2,3-dehydrosilybin B také inhiboval eflux ethidiumbromidu prostřednictvím pump NorA a MdeA<sup>5</sup>. Látky také inhibovaly adhezi bakterií a jejich komunikaci (quorum sensing)<sup>5</sup>. Bromované deriváty kvercetinu, taxifolinu, silybinu a 2,3-dehydrosilybinu<sup>6</sup> vykazovaly výraznější účinky vůči tvorbě biofilmu a quorum sensing než parentní látky a zvrátily rezistenci *S. aureus* vůči gentamicinu a *Pseudomonas aeruginosa* vůči kolistin<sup>7</sup>. Flavonoidy a flavonolignany jsou tedy slibnými agens modulující zejména bakteriální rezistenci vůči antibiotikům, jejichž účinnost silně závisí na struktuře.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 21-00551S a mobilního projektu MŠMT LTC20070.

### LITERATURA

1. Chambers C. S., Valentová K., Křen V.: Curr. Pharm. Design 21, 5489 (2015).
2. Chambers C. S. et al.: J. Agr. Food Chem. 68, 1763 (2020).
3. Viktorová J., et al.: Antioxidants 8, 303 (2019).
4. Dobiasová S., et al.: Antioxidants 9, 455 (2020).
5. Holasová K., et al: Biomed. Pharmacother. 149, 112806 (2022).
6. Hurtová M., et al.: J. Nat. Prod. 83, 3324 (2020).
7. Hurtová M., et al. rukopis.

**11P-01****ŠTÚDIUM POVRCHOVÝCH VLASTNOSTÍ  
A DESKRIPTOROV LIPOFILITY SAPONÍNŮV  
IZOLOVANÝCH Z *PRIMULAE RADIX*****MARTIN BAJCURA, TOMÁŠ POPELKA, MILOŠ  
LUKÁČ, MARTIN PISÁRČIK***Katedra chemickej teórie liečiv, Farmaceutická fakulta,  
Univerzita Komenského, Kalinčiakova 8, 832 32 Bratislava  
bajcura1@uniba.sk*

Triterpénové saponíny, získané napríklad z rastlín čeľade Primulaceae vykazujú rôzne biologické aktivity vrátane antiprotazoálnych, antifungálnych, antiproliferatívnych, cytotoxických a antibakteriálnych účinkov<sup>1</sup>. Primulasaponín 1 a primakrosaponín nachádzajúce sa ako sekundárne metabolity v liečivej rastline *Primula veris*, boli extrahované zo sušenej drogy *Priulae radix* metanolom za pomoci ultrazvuku.

Čistenie triterpénových saponínov bolo uskutočnené pomocou série chromatografií na reverzných fázach MCI gel CHP20P a RPC18. Z hrubého extraktu bol vyzolovaný taktiež fenolový glykozid primeverín spolu s jeho stereoisomérom primulaverínom, ktoré boli použité pri stanovení deskriptorov lipofily. Zlúčeniny boli charakterizované pomocou <sup>1</sup>H a <sup>13</sup>C nukleárnej magnetickej rezonančnej spektroskopie a štrukturálne identifikované porovnaním zápisov s literatúrou.

Polarita izolovaných obsahových látok, bola vzájomne porovnávaná stanovením základných deskriptorov lipofily, pomocou chromatografie na tenkej vrstve s reverznou stacionárnou fázou. Pomocou stanovených deskriptorov lipofily bolo určené, že lipofilita izolovaných zlúčenín klesá v poradí: primulasaponín 1, primakrosaponín, primeverín a primulaverín.

Meraním závislosti povrchového napätia od koncentrácie vo vodnom roztoku hydrogenuhličitanu sodného, bola získaná kritická micelárna koncentrácia (cmc) primulasaponínu 1, respektíve primulátu sodného 1. Hodnota cmc saponínu bola  $9,4 \cdot 10^{-5}$  mol dm<sup>-3</sup> (cit.<sup>2</sup>). Porovnaním hodnôt povrchových napätí vykazoval primakrosaponín vyššie hodnoty cmc.

*Táto práca vznikla za podpory grantov FaF/22/2022, VEGA 1/0054/19, VEGA 1/0686/21 a APVV-19-0056.*

**LITERATÚRA**

- Francis G., Kerem Z., Makkar H. P. S., Becker K.: *British J. Nutrition* 88(06), 587 (2002).
- Lukáč M., Pisárčik M., Horáková R., Bajcura M., Horváth B., Devínsky F.: *Eur. Pharm. J.* 67, 22 (2020).

**11P-02****FYTOCHEMICKÁ ANALÝZA PLODŮ OSTRUŽINÍKU****JAN DEHNER, SANJA ČAVAR ZELJKOVIĆ, TIBOR  
BÉRES, NIKOLA ŠTEFELOVÁ, PETR TARKOWSKI***Centrum regionu Haná pro biotechnologický a zemědělský  
výzkum, Český institut výzkumu a pokročilých technologií  
(CATRIN), Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 27,  
783 71 Olomouc, Česká republika  
jan.dehner@upol.cz*

Ostružiny jsou ovocem hojně konzumovaným po celém světě. Pozornost přitahují i díky obsahu řady bioaktivních látek, které mohou mít pozitivní vliv na lidské zdraví<sup>1</sup>. Jsou to zejména anthokyany, flavonoidy a jiné fenolické látky, anebo vitaminy B, C a E (cit.<sup>2</sup>). Informace o chemickém složení nejsou pro mnoho kultivarů a divokých druhů ostružin dostačující. Chybí také porovnání chemického složení mezi více genotypy, které by zahrnovalo ostružiny pěstované za stejných environmentálních podmínek.

V této studii byly provedeny analýzy chemického složení dvou sklizní několika vybraných genotypů ostružin pěstovaných za stejných environmentálních podmínek. Provedené experimenty byly GC-MS stanovení mastných kyselin, HPLC-ELSD analýza cukrů, UHPLC-MS/MS analýza vitamínu C a fenolických látek a fotometrické stanovení celkových fenolických látek a antioxidační aktivity.

Nejzastoupenější mastnou kyselinou ve všech vzorcích v obou sklizních byla kyselina linolová, následovala kyselina olejová, palmitová a stearová; poměry zastoupení se u jednotlivých genotypů lišily.

Z cukrů byly stanoveny glukosa a fruktosa, poměr jejich zastoupení se ve všech vzorcích blížil 1:1, jejich obsah byl však u různých vzorků rozdílný, zejména u genotypů kultivarů byl pozorován obecně vyšší obsah cukrů než u divokých druhů.

Obsah vitamínu C, celkový obsah fenolických látek a antioxidační aktivita také ukázaly na významné rozdíly mezi genotypy kultivarů a divokých druhů. Tento trend byl obecně opačný než u cukrů, divoké druhy byly tedy bohatší na tyto pro zdraví prospěšné látky.

Analýza zastoupení fenolických látek odhalila látky jako katechin, kyselinu gallová, 2-O-β-D-glukosid kyseliny salicylové, kyselinu chlorgenovou, morin, kvercetin a další. Jejich obsah byl napříč vzorky velmi variabilní.

Poster podává chemickou charakterizaci vybraných genotypů ostružin a jejich vzájemné porovnání. Zejména byly pozorovány odlišnosti mezi ostružinami kultivarů a divokých druhů v obsahu cukrů, vitamínu C, fenolických látek a antioxidační aktivitě.

**LITERATURA**

- Holub J., v knize: *Květina České republiky 4.*, kap. *Rubus L.*, s. 54. Academia, Praha 1995.
- Dai J., Patel J. D., Mumper R. J.: *J. Med. Food* 10, 258 (2007).



### 11P-03 VÝVOJ NOVÉ GENERACE ROSTLINNÝCH RETARDÉRŮ RŮSTU

**MARKÉTA FUKSOVÁ<sup>a,b</sup>, JIŘÍ POSPÍŠIL<sup>\*a,b</sup>**

<sup>a</sup> Katedra chemické biologie, Univerzita Palackého, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, Česká republika,

<sup>b</sup> Laboratoř růstových regulátorů, Univerzita Palackého a Ústav experimentální botaniky ASCR, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, Česká republika  
marketa.fuksova@upol.cz

Gibereliny (GA) patří mezi nejdůležitější rostlinné hormony, které jsou zodpovědné za regulaci mnoha růstových a vývojových procesů v rostlinách. Mezi jejich funkce patří indukce klíčení přerušením vegetačního klidu semen, stimulace dlouhivého růstu stonku, iniciace kvetení a tvorba plodů<sup>1</sup>. Pro normální růst a vývoj rostlin je důležité, aby rostliny produkovaly a udržovaly optimální hladiny endogenních bioaktivních GA. Jejich nízká koncentrace způsobuje trpasličí fenotyp rostlin, který je velmi často spojen se zvýšenou sterilitou<sup>2</sup>. Naopak nadbytek určitých GA může (především u polních rostlin jako je rýže a obiloviny) způsobit jejich nadměrný růst, jehož výsledkem jsou dlouhé a slabé stonky. Rostliny se tak stávají velmi křehkými a náchylnými ke zlomení/poškození, což vede ke snížení výnosů plodin<sup>3</sup>. Biologickou aktivitu těchto fytohormonů (regulaci růstu rostlin) lze tedy řídit dvěma způsoby, a to (1) exogenním přidávkem GA (zvýšení endogenních hladin) nebo (2) aplikací retardérů růstu (snížení endogenních GA)<sup>4</sup>.

Hlavním cílem projektu je vyvinout novou generaci rostlinných retardérů růstu, tzv. „anti-giberelinů“. Tyto molekuly budou vystupovat jako účinní kompetitivní antagonisté bioaktivních GA, které budou mít v rostlinách silnější afinitu ke GA receptoru (GID1)<sup>5,6</sup> než přirozené GA. Naše deriváty by se měly specificky vázat na toto aktivní místo a zároveň by jejich strukturální modifikace měla znemožnit aktivaci GID1. V tomto příspěvku chceme představit poslední výsledky dosažené v rámci tohoto projektu.

*Projekt je řešen za finanční podpory Interní Agentury Univerzity Palackého (IGA\_PrF\_2022\_012), Nadačního Fondu UP a Nadačního Fondu Jaroslava Tupého.*

1. Brian P. W.: Biol. Rev. 34, 37 (1959).
2. Mander L.: Nat. Prod. Rep. 20, 50 (2003).
3. Fleet C. M., Sun T. A.: Curr. Opin. Plant Biol. 8, 77 (2005).
4. Rademacher W. R.: Annu. Rev. Plant Physiol. 51, 501 (2000).
5. Shimada A., Ueguchi-Tanaka M., Nakatsu T., Nakajima M., Naoe Y., Ohmiya H., Kato H., Matsuoka M.: Nature 456, 520 (2008).
6. Ueguchi-Tanaka M., Ashikari M., Nakajima M., Itoh H., Katoh E., Kobayashi M., Chow T. Y., Hsing Y. I. C., Kitano H., Yamaguchi: Nature 437, 693 (2005).

### 11P-04 VLIV FYTOKANABINOIDŮ NA EXPRESI CYTOCHROMU P450 1A1 V BUŇKÁCH HEPG2

**JAKUB HAVLÁSEK\*, JIŘÍ VRBA**

Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc  
jak.havilasek@seznam.cz

Konopí seté (*Cannabis sativa*) představuje významný zdroj farmakologicky zajímavých látek, tzv. fytokannabinoidů. Nejznámějším je  $\Delta^9$ -*trans*-tetrahydrokannabinol ( $\Delta^9$ -THC), avšak *C. sativa* obsahuje více než 140 dalších. Mezi často studované fytokannabinoidy patří také například kanabidiol (CBD), kannabinol (CBN), kanabichromen (CBC) nebo kanabigerol (CBG)<sup>1</sup>. Nedávná studie ukázala, že CBD, narozdíl od  $\Delta^9$ -THC a CBN, indukuje v lidských hepatomových buňkách HepG2 expresi cytochromu P450 1A1 (CYP1A1)<sup>2</sup>, který je zapojen do metabolismu a bioaktivity řady cizorodých látek, včetně karcinogenů.

Cílem naší studie bylo vyzkoušet vliv CBC a CBG na expresi CYP1A1 v buňkách HepG2 a porovnat účinek obou látek s účinkem CBD. Zdroj, popř. příprava testovaných sloučenin jsou uvedeny v cit.<sup>3</sup>. Cytotoxicita CBD, CBC a CBG byla hodnocena pomocí MTT testu po 24-hodinové inkubaci a při koncentracích 1–50  $\mu\text{mol l}^{-1}$ . Analýzy metodou kvantitativní real-time PCR potvrdily, že CBD zvyšuje po 24 hodinách a při netoxických koncentracích hladinu mRNA pro CYP1A1. Podobný účinek byl zjištěn také pro CBC, zatímco účinek CBG byl nevýznamný. Další experimenty budou zaměřeny na stanovení úrovně proteinu a enzymové aktivity CYP1A1.

*Tato práce vznikla za podpory grantu IGA\_LF\_2022\_025. Za laskavé poskytnutí testovaných sloučenin děkujeme Dr. Janu Storchovi (Ústav chemických procesů AV ČR, Praha).*

#### LITERATURA

1. Sampson P. B.: J. Nat. Prod. 84, 142 (2021).
2. Yamaori S., Kinugasa Y., Jiang R., Takeda S., Yamamoto I., Watanabe K.: Life Sci. 136, 87 (2015).
3. Vacek J., Vostalova J., Papouskova B., Skarupova D., Kos M., Kabelac M., Storch J.: Free Radic. Biol. Med. 164, 258 (2021).

**11P-05****ANALYTICAL SEPARATION OF POLYPHENOL SULFATES BY HPLC****LUCIE PETRÁSKOVÁ, KATERINA BRODSKY, KRISTÝNA KAŇOVÁ, KATEŘINA VALENTOVÁ***Institute of Microbiology of the Czech Academy of Sciences, Vídeňská 1083, CZ 142 20 Prague, Czech Republic petraskova@biomed.cas.cz*

Sulfation is an important reaction in nature. The biological activity of many molecules *in vivo* seems to be crucially related to their sulfation pattern. It is well known that sulfation of flavonoids, carotenoids, steroids, drugs, antibiotics, hormones, polysaccharides, and proteins occurs in the human body and often leads to profound effects on the bioactivity of these compounds<sup>1</sup>. Obtaining sufficient amounts of sulfated compounds identical to mammalian metabolites should allow us to unambiguously characterize human metabolites in terms of their stereochemistry and exact sulfation sites. The arylsulfotransferase-mediated syntheses lead to the reaction mixtures in which the new sulfated products must be identified<sup>2</sup>. The enzymatic reaction mixture typically includes a sulfate donor, a selected phenolic compound as acceptor (in the present study phenols: catechol, 4-methylcatechol, phloroglucinol; phenolic acids: protocatechuic acid, 2,3,4-trihydroxybenzoic acid, caffeic acid; flavonoids: luteolin, myricetin, ampelopsin, taxifolin, quercetin, isoquercitrin, rutin; flavonolignans: silybin, silychristin; 2,3-dehydroflavonolignans: dehydrosilybin, dehydrosilychristin) and the resulting mono-, di- and/or trisulfated derivatives. Separation of highly charged compounds such as sulfated phenolics by HPLC is a major challenge. Different stationary phases (C18 monolith, C18 Polar, pentafluorophenyl, ZIC-pHILIC) and mobile phases with/without ammonium buffer were compared. The separation results were strongly dependent on the pH of the mobile phase and the buffer strength.

*This research was funded by Czech Science Foundation, grant number 19-00043S.*

**LITERATURA**

1. Simpson L. S., Widlanski T. S.: *J. Am. Chem. Soc.* **128**, 1605 (2006).
2. Valentová K., Kaňová K., Di Meo F., Pelantová H., Chambers C., Rydlová L., Petrásková L., Křenková A., Cvačka J., Trouillas P., Křen V. *Int. J. Mol. Sci.* **18** (11), 2231 (2017).

**11P-06****PHYSICO-CHEMICAL STUDY OF THE ANTIOXIDANT ACTIVITY OF THE CORN SILK EXTRACTS****LUBOMÍR LAPČÍK<sup>a,b</sup>, PENG LI<sup>a</sup>, BARBORA LAPČÍKOVÁ<sup>a,b</sup>, SHWETA GAUTAM<sup>a</sup>, TOMÁŠ VALENTA<sup>a</sup>, DANIELA SUMCZYNSKI<sup>a</sup>, DAVID ŘEPKA<sup>b</sup>**

*<sup>a</sup> Tomas Bata University in Zlin, Department of Foodstuff Technology, Faculty of Technology, Nam. T.G. Masaryka 275, 762 72 Zlin, Czech Republic, <sup>b</sup> Palacky University Olomouc, Department of Physical Chemistry, Faculty of Science, 17. Listopadu 12, 17. Listopadu 12, 771 46 Olomouc, Czech Republic lapcikl@seznam.cz*

Antioxidants from natural sources act as free radical scavengers. These compounds help balance oxidation processes and prevent oxidative stress diseases in humans<sup>1</sup>.

Corn silk (*Stigma maydis*) is a dried thrum and stigma of the female flower *Zea mays L.* Corn silk extract contains many functional biological substances such as flavonoids, polysaccharides, and steroids<sup>2</sup>. Due to corn silk availability, price and the fact it has high-yield makes this perfect candidate for antioxidant study. In this work we investigated the antioxidant activity of corn silk extracts related to the substances and maturity of corn silk samples.

Spin trapping electron paramagnetic resonance technique (EPR), 1,1-diphenyl-2-picrylhydrazyl (DPPH), 2,2'-azino-bis(3-ethylbenzo-thiazoline-6-sulfonic acid) (ABTS) was used to measure radical scavenging effect. Ferric ion reducing antioxidant power and copper ion reductive capacity methods were also used for research of antioxidant properties.

The radical scavenging capacity depended on maturity stage of corn silk as well as on the used extraction process. It was found that the final maturity stage (mature stage) had the most potent radical scavenging effect. Another maturity stage was the earliest (silky stage) which did reach better results than second maturity stage (milky stage) with the worst radical scavenging effect.

*This work was supported by grants: Tomas Bata University in Zlin (project no. IGA/FT/2021/004 and IGA/FT/2022/005) and from Palacky University Olomouc (project no. IGA\_PrF\_2022\_020).*

**REFERENCES**

1. Popac P., Jomova K., Simunkova M., Kollar V., Rhodes J. C., Valko M.: *Trends Pharmacol. Sci.* **38**, 592 (2017).
2. Sarepoua E., Tangwongchai R., Suriharn B., Lertrat K.: *Food Chem.* **169**, 424 (2015).

**12L-01****BAKTERIE A FARMAKA V ODPADNÍ VODĚ  
PŘEČIŠTĚNÉ V POLOPROVOZNÍCH JEDNOTKÁCH  
TERCIÁRNÍHO ČIŠTĚNÍ****MICHAL BITTNER<sup>a</sup>, LUCIE BÁBORSKÁ<sup>b</sup>, BRYAN  
BROOKS<sup>c</sup>, MAREK HOLBA<sup>b</sup>, JAROSLAV LEV<sup>b</sup>,  
DAVID POLÁŠEK<sup>d</sup>, LUCIE BLÁHOVÁ<sup>a</sup>, LUDĚK  
BLÁHA<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, RECETOX, Kamenice 5, 625 00 Brno, <sup>b</sup>ASIO TECH, spol. s r.o., Kširova 552/45, 619 00 Brno, <sup>c</sup>Department of Environmental Science, Institute of Biomedical Studies, Center for Reservoir and Aquatic Systems Research, Baylor University, Waco, TX 76798, USA, <sup>d</sup>AQUA PROCON, s.r.o., Palackého tř. 12, 612 00 Brno  
michal.bittner@recetox.muni.cz

Cílem projektu „Polygon opětovného využití vody“ bylo ukázat potenciál různých technologií terciárního čištění odpadních vod pro opětovné využití vody s ohledem na hodnocení potenciálních zdravotních rizik. Recyklovaná odpadní voda byla uvažována k zavlažování a napájení hospodářských zvířat, obnově mokřadů, či umělému doplňování podzemních vod. Poloprovozní jednotky byly navrženy a zkonstruovány společností ASIO TECH spol. s r.o. (ČR) a byly použity pro terciární čištění odpadních vod z městské ČOV (500 000 EO, ČR). V tomto příspěvku bude uvedeno posouzení účinnosti odstranění pro pět kombinací technologií: 1) granulované aktivní uhlí (GAC) + UV záření (UV), výstup 1 000 l/h; 2) ultrafiltrace (UF), výstup 2 000 l/h; 3) UF + ozonizace, výstup 2 000 l/h, 4) UF + UV + GAC + nanofiltrace (NF), výstup 500 l/h; 5) UF + UV + GAC + reverzní osmóza (RO), výstup 500 l/h. Během ročního testování (03/2021 až 03/2022) byly měřeny různé parametry recyklované odpadní vody. V tomto příspěvku budou diskutovány především výsledky odstraňování 13 běžně používaných farmak a mikrobiálního znečištění včetně srovnání účinností v chladném a teplém období.

Tato práce vznikla v rámci řešení projektu Ministerstva průmyslu a obchodu „Polygon recyklace vod“ (CZ.01.1.02/0.0/0.0/19\_262/0020109), práce M. Bittnera byla také podpořena Fulbrightovou komisí.

**12L-02****EKOTOXICITA JEMNÝCH A ULTRAJEMNÝCH  
ČÁSTIC ZO SPAĽOVACÍCH PROCESOV****KLAUDIA KÖBÖLOVÁ<sup>a</sup>, HELENA BERKOVÁ<sup>b</sup>,  
VLADIMÍR ADAMEC<sup>b</sup>, JIŘÍ POSPÍŠIL<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Fakulta strojního inženýrství, VUT v Brně, Technická 2896, 616 69 Brno, <sup>b</sup> Fakulta chemická, VUT v Brně, Purkyňova 464, 612 00 Brno  
Kludia.Kobolova@vutbr.cz

Znečištění ovzdušia je jedným z najzávažnejších a najintenzívnejšie skúmaných environmentálnych problémov súčasnosti. Znečištění ovzdušia pevnými časticami (PM) má preukázateľne nepriaznivé účinky na ľudské zdravie aj na životné prostredie. Negatívne účinky znečisťujúcich látok môžu spôsobiť širokú škálu zdravotných problémov, od ľahkých až po vážne ochorenia a predčasnú úmrtnosť. Jedným

zo zdrojov znečistenia životného prostredia je i spaľovanie biomasy. V priebehu spaľovania sa vznikajú častice o rôznych veľkostiach a zloženiach. Ich tvorba závisí na vlastnosti paliva, typu spaľovacieho zariadenia a od podmienok spaľovania. Vzhľadom ku komplexnosti tvorby a rastu jemných častíc existuje množstvo faktorov, ktoré ovplyvňujú koncentráciu, veľkosť a toxicitu jemných častíc.

Cieľom práce je sledovanie možných ekotoxických účinkov uvoľnených PM zo spaľovania biomasy v krbovej kachli. Na základe dosiahnutých výsledkov testu akútnej toxicity na organizmus *Daphnia magna* bol preukázaný vo väčšine prípadov toxický účinok na akvatické prostredie (akvatický systém).

Príspevok vznikol v rámci projektu FSI-S-20-6280 (VUT v Brně).

**12L-03****ODHAD ZDRAVOTNÍCH RIZIK ZE ZNEČIŠTĚNÍ  
OVZDUŠÍ ČESKÁ REPUBLIKA – ROK 2021****BOHUMIL KOTLÍK, HELENA KAZMAROVÁ**

Státní zdravotní ústav, Centrum zdraví a životního prostředí,  
Šrobárova 48, 100 42 Praha 10  
www.szu.cz, bohumil.kotlik@szu.cz

Vliv znečisťujících látek z ovzduší závisí nejen na jejich schopnosti působit na zdraví, ale také na velikosti expozice, tedy na tom po jakou dobu jak vysoké koncentraci látek jsou lidé vystaveni.

Základní metodické postupy odhadu zdravotních rizik byly zpracovány zejména Americkou agenturou pro ochranu životního prostředí a Světovou zdravotní organizací. V Česku byly základní metodické podklady vydány MZ ČR a MŽP.

Při hodnocení rizik se rozlišují dva typy účinků chemických látek. U látek, které nejsou podezřelé z účasti na karcinogenním působení se předpokládá tzv. **prahový účinek**. Toxické účinky těchto látek se projeví až po překročení kapacity fyziologických detoxikačních a reparačních obranných mechanismů organismu. Při hodnocení karcinogenů se vychází z teorie **bezprahového působení**. Ta předpokládá, že neexistuje žádná koncentrace, pod kterou by působení dané látky bylo nulové, jakákoliv expozice znamená určité riziko a velikost tohoto rizika se zvyšuje se zvyšující se expozicí. Výstupem je pak odhad teoretického navýšení pravděpodobnosti vzniku nádorového onemocnění pro jednotlivce, které může způsobit daná úroveň expozice hodnocené látky nad výskyt v neovlivněné populaci. **Zdravotní riziko vyjadřuje pravděpodobnost změny zdravotního stavu exponovaných osob.** Při hodnocení zdravotních rizik se standardně postupuje ve čtyřech následných krocích. Od identifikace zdravotní nebezpečnosti, přes odhad vztahu dávka/účinek, a nejsložitější krok tj. odhad expozice po konečný krok tj. charakterizaci rizika. Znamená integraci poznatků vyplývajících ze všech výše zmíněných kroků, včetně zvážení všech nejistot, závažnosti i slabých stránek použitých podkladových materiálů. Cílem je dospět, pokud to dostupné informace umožňují, ke kvantitativnímu vyjádření míry konkrétního zdravotního rizika za dané situace. Pro odhad expozice je používán použit přístup, který uvažuje celoživotní expozici 24 hodin denně pro dospělého člověka o hmotnosti 70 kg, který vdechne 20 m<sup>3</sup> vzduchu za den. Ze sledovaných ukazatelů znečištění ovzduší v sídlech

ČR jsou do hodnocení zahrnuty suspendované částice frakce  $PM_{10}$  a  $PM_{2,5}$ , oxid dusičitý a škodliviny, pro které byla definována míra karcinogenního potenciálu – arsen (As), nikl (Ni), benzen a benzo[*a*]pyren (BaP) – považované za indikátor karcinogenního potenciálu hodnocené směsi PAU. Hodnoty jednotkového rizika pro výpočet jsou přebírány z Air Quality Guidelines for Europe, 2th edition, z internetových stránek WHO a z dalších zdrojů (US EPA, HEAST). Informace o měřených koncentracích, o účinku hodnocených látek a dalších látek s potenciálními zdravotními dopady lze dohledat ve zpracovaných podkladech pro vládu ČR (<http://www.szu.cz/tema/zivotni-prostredi/ovzdu-si-a-zdravi>) nebo ve zprávách za systém Monitorování zdravotního stavu obyvatelstva – MZSO <http://www.szu.cz/tema/zivotni-prostredi/mzso>).

## 12L-04

### VLIV KONTRASTNÍCH LÁTEK NA BÁZI GADOLINIA A HEXAHYDRÁTU DUSIČNANU GADOLINITĚHO NA RŮST DVOU DRUHŮ SLADKOVODNÍCH MIKROŘAS

FREDERIKA MIŠÍKOVÁ<sup>a,\*</sup>, CHANTAL VAN DRIMMELEN<sup>b</sup>, MARION REVEL<sup>b</sup>, SUSANNE HEISE<sup>b</sup>, ANNA KREJČOVÁ<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika, <sup>b</sup> Faculty of Life Sciences, Hamburg University of Applied Sciences, Ulmenliet 20, 21033 Hamburg, Germany  
[frederika.misikova@student.upce.cz](mailto:frederika.misikova@student.upce.cz)

Již od 80. let 20. století se u lidí používají kontrastní látky na bázi gadolinia (GdCA) v diagnostice pomocí zobrazování magnetickou rezonancí (MRI). Jedná se o cheláty Gd, kde volný iont  $Gd^{3+}$  musí být navázán na organický ligand a vytvořit stabilní komplex z důvodu vysoké toxicity iontu v hydratované formě. V dnešní době jsou GdCA široce používány, a proto jejich koncentrace v životním prostředí narůstá. Díky jejich vysoké stabilitě jsou po aplikaci z těla pacienta vylučovány v nezměněné podobě a následně pokračují přes čistírných odpadních vod do vod povrchových, kde se hromadí<sup>1</sup> a mohou představovat riziko pro organismy v potravním řetězci<sup>2</sup>.

Sladkovodní mikrořasy, které jsou základem potravního řetězce, a proto mají zvláštní význam, jsou v prostředí vystaveny působení  $GdCA^2$ . Z tohoto důvodu je důležité studovat toxicitu GdCA pro mikrořasy, ale také volného iontu  $Gd^{3+}$ , protože stabilita chelátů Gd nezaručuje, že se iont z molekuly neuvolní<sup>1</sup>.

Provedená studie zkoumala vliv přítomnosti dvou různých GdCA a  $Gd(NO_3)_3$  v růstovém médiu na dva druhy mikrořas, které se běžně používají pro ekotoxikologické testy, *Raphidocelis subcapitata* a *Chlorella vulgaris*<sup>3</sup>. Test inhibice růstu řas byl proveden podle normy EN DIN ISO 8692:2012. Testovanými látkami byly GdCA, Gadovist<sup>®</sup> (Gadobutrol) 1,0 mmol/ml a Dotarem<sup>®</sup> (Acidum gadotericum) 0,5 mmol/ml, a  $Gd(NO_3)_3 \cdot 6 H_2O$  jako sůl Gd. Koncentrační úrovně  $Gd^{3+}$  byly 0,01; 0,1; 1; 10 a 100 mg/l.

Předběžné výsledky naznačují, že přítomnost vybraných GdCA v médiu nemá inhibiční účinek na růst žádného ze dvou druhů mikrořas. Naproti tomu přítomnost  $Gd(NO_3)_3$  ve vyšších koncentracích měla jasný inhibiční účinek na růst obou mikrořas. Celkově se zdá, že ekotoxicita GdCA jako

stabilních chelátů Gd je významně nižší než u anorganických forem Gd.

*Studie vznikla za podpory Erasmus+, SGS\_2022\_001 a HAW Hamburg. Poděkování patří také MRI pracovištím v Nemocnici Pardubického kraje, Multiscan s.r.o. a ve FN Hradec Králové.*

## LITERATURA

1. Telgmann L., Sperling M., Karst U.: Anal. Chim. Acta 764, 1 (2013).
2. Goecke F., Zachleder V., Vítová M., v knize: *Algal Biorefineries*, s. 339. Springer International Publishing, Switzerland 2015.
3. Herrmann H., Nolde J., Berger S., Heise S.: Ecotoxicol. Environ. Saf. 124, 213 (2016).

## 12L-05

### POSUZOVÁNÍ PROCESŮ A MOŽNOSTÍ VYUŽITÍ POMOCÍ POPISU VYBRANÝCH ZÁVISLOSTÍ

LADISLAV NOVOTNÝ

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 573, 532 10 Pardubice  
[nvt.l@seznam.cz](mailto:nvt.l@seznam.cz)

Rozvoj využití environmentálních procesů a souvisejících postupů je obvykle založen na shromažďování aplikovatelných experimentálních dat. Velmi efektivním vodítkem pro volbu experimentů a pro jejich vyhodnocování je teoreticko-experimentální studium a popis příslušných vzájemných vztahů sledovaných veličin a jejich závislosti. Rozšiřuje to nejen nové poznatky, ale i další možnosti aplikací. Dokumentují to i následující aktuálně rozpracovávané a ve stručnosti zmíněné příklady: 1. Množství (ne-li většina) organických bioaktivních látek vykazuje na rozhraních výraznou adsorpci. Diagram mezifázové závislosti napětí  $\gamma$  – potenciál  $E$  – koncentrace  $c$  má za nové aplikované urychlení transportu stavový charakter. Mezi prakticky významné důsledky i další souvislosti patří změny polarity posuvu potenciálu nulového náboje  $E_{q=0}$  s  $c$ , posuv desorpčních potenciálů  $\Delta E_d^2$  s  $\log c$  nebo určení potenciálu maxima adsorpce  $E_{max}$ . 2. Z modelových představ lze odvodit různé varianty izoterem, které mohou mít i přibuzný základ. Příkladem toho je izoterma nového typu  $f_1(Y) \cdot \exp[f_2(Y)] = f_3(X, Y)$  s obecně relativními nezávislými  $X$  a závislými  $Y$  proměnnými a s parametry charakterizujícími funkce  $f_1, f_2$  a  $f_3$ . Široce uplatnitelné jsou tyto izotermy např. v oblasti adsorpce látek, prokládání řady nelineárních závislostí různých (spřažených) veličin navzájem nebo na čase  $t$ , kinetiky růstu nanočástic apod. V posledně uvedeném případě nanočástic stříbra nAg bylo vedle toho možno aproximativně uplatnit pro jejich poloměr i přibližně odmocninovou závislost na čase  $t$ . Jindy (kupř. pro časové závislosti separace chinonů, zinku, nebo změny vodivosti  $k$  během elektrolýzy roztoků) vyhovovala potřebám proložení a využití i závislost typu relativní změny proměnné  $y$  ve formě  $y/y_0 = k_1 \cdot \ln t + k_2 \cdot (\ln t)^2 + k_3 \cdot (\ln t)^3 + \dots$

Jako další příklady užitečného uplatnění výše uvedených typů proložení nebo závislosti lze uvést vztahy mezi změnami pH a elektrodeponovaným množstvím zinku, mezi potenciálem stříbrných amalgámových (nebo příbuzných) elektrod a postupnými změnami kvality vod během jejich

čištění, nebo vzájemné vztahy mezi potenciálem katody, anody, složením roztoku, proudovými hustotami, časem atp. – během elektrolytického čištění vod. Kromě již zmíněných a dalších příkladů lze uvedené vztahy a závislosti použít i pro testování případné odlehlosti bodů.

*Tato práce vznikla za podpory projektu Univerzity Pardubice č. SD373001/82/30352 (2016).*

## 12L-06

### THE STUDY OF HEAVY METALS ADSORPTION PROCESS ON SLOVAK ALUMINOSILICATES

**MATEJ ŠURÁNEK, ZUZANA MELICHOVÁ**

*Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Matej Bel University, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica  
matej.suranek@umb.sk*

In the study, the removal of heavy metal ions (Cu(II); Ni(II); Pb(II)) from aqueous solutions using the adsorption process onto aluminosilicates (natural bentonites) has been investigated. The aluminosilicates were characterized by X-ray diffraction and infrared spectroscopy. Metal concentrations before and after adsorption were determined by atomic absorption spectrometry. The percentage adsorption and distribution coefficients were calculated for the adsorption system as a function of concentration. Experimental data were fitted by three adsorption isotherm models (Langmuir, Freundlich and Dubinin-Radushkevich). It was found that the Langmuir adsorption model fit very closely with experimental data. It is shown that bentonite is sensitive to pH changes, so that the amounts of heavy metal ions adsorbed increase as pH. It is evident that the adsorption phenomena depend on the surface charge density of the adsorbent and hydrated ion diameter depending upon the solution pH. Kinetic experiments showed that the sorption of metal ions best fitted the pseudo-second order kinetic model. The adsorption capacities of used bentonite samples follow the order of decreasing ionic radius. The experimental results show that the adsorption process of used heavy metal ions in the process of its removal from water solution is very favorable. These results suggested that the bentonitic clay hold great potential to remove the relevant heavy metal cations from water. Also, from the results of the thermodynamic analysis, standard free energy  $\Delta G^0$ , standard enthalpy  $\Delta H^0$  and standard entropy  $\Delta S^0$  of the adsorption process were calculated.

*This research was funded by the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic VEGA, Project No. 1/0291/19.*

#### REFERENCES

1. Maleki A., Hajizadeh Z., Sharifi V., Emdadi Z.: *J. Clean. Prod.* 215, 1233, (2019).
2. Pivarčiová L., Krajňák A., Roskopfová O., Galamboš M., Rajec P.: *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 304, 851 (2015).
3. Feizi M., Jalali M., Antoniadis V., Shaheen S. M., Ok Y. S., Rinklebe J.: *J. Hazard. Mater.* 379, 120567, (2019).
4. Hussain S., Ali S.: *J. Ecol. Eng.* 22, 104, (2021).
5. Scholtzová E., Tunega D., Madejová J., Pálková H., Komadel P.: *Vib. Spectrosc.* 66, 123 (2013).

**12P-01****ADSORPCIA TECHNECISTANU NA VZORKÁCH  
Zn-AKTIVOVANÉHO UHLÍKA****MAREK HUPIAN<sup>a</sup>, MICHAL GALAMBOŠ<sup>a</sup>, EVA  
VIGLAŠOVÁ<sup>a</sup>, MARTIN DAŇO<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Katedra jadrovej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, SR, <sup>b</sup> Katedra jaderné chemie, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze, Břehová 7, 911 00 Praha, ČR  
hupian2@uniba.sk

Technécium je umelo pripravený rádionuklid, ktorého najvýznamnejšia chemická forma je technécistanový anión, mimoriadne mobilný v životnom prostredí. Významné izotopy pre človeka sú <sup>99</sup>Tc, ktorý je environmentálny kontaminant s dlhou dobou polpremeny, a jeho krátkožijúci jadrový izomér, <sup>99m</sup>Tc, využívaný v nukleárnej medicíne.

Aktivovaný uhlík je dlhodobo vnímaný ako účinný adsorbent, vďaka jeho charakteristickým vlastnostiam, akými sú prítomnosť a variabilita funkčných skupín na povrchu, veľké hodnoty špecifického merného povrchu a porézna štruktúra. Používa sa napr. na odstraňovanie ťažkých kovov a rádionuklidov z vodných roztokov. Tento materiál sa pripravuje pyrolýzou a následnou aktiváciou pomocou fyzikálnych, resp. chemických aktívátorov.

Cieľom práce bol výskum adsorpčných vlastností materiálov na báze aktivovaného uhlíka, aktivovaných chemickými činidlami obsahujúcimi Zn vo vzťahu k technécistanu a ich porovnanie s neaktivovanou vzorkou. Všetky materiály boli pripravené pyrolýzou vláknitej celulózy.

Vzorky boli charakterizované štruktúrnymi a povrchovými metódami BET, FTIR, XRF a SEM-EDX. Adsorpčné experimenty boli realizované vo vsádzkovom usporiadaní a pri laboratórnej teplote. Sledované faktory, vplývajúce na proces adsorpcie boli: počiatočná hodnota pH roztoku, doba miešania tuhej a kvapalnej fázy a koncentrácia analytu v roztoku. Maximálne percentá adsorpcie sa dosahovali pri pH 2. Adsorpčná rovnováha sa ustálila pomerne rýchlo, maximálne do 1 h. Experimentálne údaje sme interpretovali adsorpčnými modelmi, konkrétne Langmuirovým a Freundlichovým modelom. Chemicky aktivované vzorky aktivovaných uhlíkov efektívne adsorbovali technécistan z vodných roztokov. Tieto materiály sú vďaka pomerne jednoduchej príprave a dostupnosti vstupnej suroviny vhodnou alternatívou ku komerčne dostupným adsorbentom pre túto aplikáciu.

**LITERATÚRA**

1. Daňo M., Viglašová E., Galamboš M., et al.: J. Radioanal. Nucl. Chem. 314 (2017).
2. Galamboš M., Daňo M., Viglašová E., et al.: J. Radioanal. Nucl. Chem. 304 (2015).

**12P-02****VLIV MODIFIKACE POVRCHU NANOČÁSTIC  
ŽELEZA NA JEJICH TRANSPORTNÍ VLASTNOSTI –  
EXPERIMENTY A MODEL****PETR PARMA<sup>a</sup>, JAN ŠEMBERA<sup>a</sup>, VERONIKA  
VESELSKÁ<sup>b</sup>, JAN FILIP<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Technická univerzita v Liberci, Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií (FM TUL), Studentská 2, 461 17 Liberec, <sup>b</sup> CATRIN – Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Environmentální nanotechnologie, Šlechtitelů 241/2, 779 00 Olomouc  
petr.parma@tul.cz

Inovace a vývoj nových sanačních postupů a technologií je aktuálním tématem dnešní doby. Jedním ze směrů inovace je využití nanočástic nulmocného železa (nano zerovalent iron = nZVI) pro jejich efektivní redukční vlastnosti a minimální zátěž životního prostředí. V souvislosti s využitím nZVI v *in-situ* sanačních technologiích je třeba důkladně popsat migraci daných nanočástic. Transportní vlastnosti nanočástic jsou monitorovány obvykle pomocí průrazových experimentů (BTC) na kolonkách o délce 10 až 20 cm. Ty poskytují zjednodušený pohled na transport nanočástic a ulehčují popis tohoto mechanismu matematickým modelem.

Magnetické vlastnosti nZVI umožňují jeho detekci elektromagnetickými senzory, měřícími změnu magnetické susceptibility, čímž se značně zjednodušuje jejich monitoring v prostoru a čase. Na tomto principu bylo na pracovišti Technické univerzity v Liberci vyvinuto kolonové zařízení umožňující on-line studium migrace feromagnetických nanočástic i na vzdálenost 180 cm (cit.<sup>1</sup>). S využitím této aparatury bylo ve spolupráci s Univerzitou Palackého v Olomouci (centrum CATRIN) zahájeno studium vlivu povrchové modifikace na transportní vlastnosti nanoželeza v modelovém pórovém prostředí se zaměřením na vliv stárnutí a agregace nanočástic, vliv organických povrchově aktivních látek a sulfidace povrchu. Experimentálně získaná data slouží jako vstupní údaje do matematického modelu, který simuluje vztah mezi transportními parametry a povrchovými vlastnostmi nZVI. Získané koncentrační profily nanoželeza podél osy kolony jsou porovnávány s matematickým modelem transportu nanočástic v pórovém prostředí zahrnujícím kromě transportních jevů, jako jsou advekce a disperze, také procesy ovlivňující mobilitu částic, jako jsou agregace a adsorpce na zrna hominy. Konečným cílem srovnávání je vypracovat metodu umožňující obecně kvantifikovat migrační schopnosti jednotlivých modifikovaných nanočástic.

**LITERATURA**

1. Parma P.: *Studium migrace modifikovaných nanočástic na bázi elementárního železa. Dizertační práce.* Technická Univerzita v Liberci, 2018.

### 13L-01 NOVÉ TECHNOLOGIE A MATERIÁLY POSOUVAJÍ MOŽNOSTI 3D TISKU

#### TOMÁŠ VÍT

<sup>a</sup> 3Dwiser s.r.o., Poděbradská 88/55, 198 00 Praha 9

<sup>b</sup> Vědeckotechnický park UP, Šlechtitelů 19, 783 71 Olomouc  
vit@3dwiser.com

3D tisk se stále více prosazuje ve vědě, výzkumu i výrobě, postupně také ve všech stupních výuky. Dávno neslouží jen ke zrodu křehkých prototypů či pohledových modelů – v mnoha oblastech jde o zralou technologii pro výrobu plně funkčních dílů a nástrojů, strojních sestav nebo lékařských pomůcek.

Vývoj v oblasti 3D tisku je velmi dynamický, technologie jsou stále dostupnější, uživatelsky přívětivější, přístup k 3D tiskárnám lze snadněji rozšířit napříč celou organizací a co víc – i metody dříve velmi nákladné jsou najednou v dosahu menších týmů. Spolu s novými, pokročilými materiály přinášejí také úplně nové možnosti.



Podíváme se na některé zajímavé metody 3D tisku z termoplastů, vysoce odolných kompozitů se spojitou uhlíkovou výztuží, běžných i biokompatibilních pryskyřic či kovů, které se v Česku právě prosazují.



### 13L-02 NOVINKY V OBLASTI ANALÝZY PORÉZNÍCH MATERIÁLŮ SORPCÍ PLYNŮ

#### MICHAL DUDÁK

ANAMET s.r.o., Kováků 3210/26, Praha 5, 150 00

dudak@anamet.cz

Klasická metoda charakterizace porézních materiálů pomocí sorpce plynů prochází rozvojem společně s vývojem nových materiálů. Součástí přednášky bude vysvětlení nových směrů vývoje v této oblasti u německého výrobce přístrojů 3P Instruments. Konkrétně jde o možnosti udržování libovolné kryogenní teploty pro zpřesnění výsledků měření u nízkopovrchových materiálů při analýze pomocí kryptonu, dále studium kineticky inhibované sorpce v oblasti ultramikropórů pro různé plyny a teploty a snaha o odvození adsorpčních parametrů plynů pro různé teploty.

V druhé části přednášky bude uveden přehled novinek a trendů z poslední konference 3P Adsorption week 2022. Půjde o snahu standardizace reportování adsorpčních dat v digitálním formátu a databáze sorpčních referenčních dat organizace NIST. Volně šířitelný open-source software pro vyhodnocení adsorpčních dat pomocí většiny běžných modelů včetně DFT, QSDFT a dalších. Budou citovány možnosti paralelních analytických metod použitelných při sorpčních analýzách. Fenomény jako negativní adsorpce, nekontrolované zavádění heterogenity vzorku při vakuovém odplynění za zvýšených teplot či nová metoda měření jednosložkových adsorpčních izoterm na průtočném systému 3P mixSorb.

### 13L-03 VYUŽITÍ SPALOVACÍCH ANALYZÁTORŮ FIRMY ELEMENTAR PRO STANOVENÍ OBSAHU CHNS+O V PRODUKTECH DEPOLYMERIZACE PLASTŮ

#### JAN SVOBODA

ANAMET, s. r. o., Kováků 26, Praha 5, 150 00

Přes všeobecnou prospěšnost nejrůznějších druhů plastových materiálů lidstvo řeší i odvrácenou stranu jejich používání – nakládání s plastovým odpadem. V rozvinutém světě se daří nejrůznější druhy plastových výrobků po skončení jejich životnosti separovat a následně recyklovat. Vzniklý recyklát nemá stejné vlastnosti jako původní materiál. Proto jsou vyvíjeny a průmyslově využívány technologie, jejichž cílem je ze směsí polymerů vytvářet uhlovodíky s kratším řetězcem, které by mohly být využity v petrochemické výrobě nebo přeměněny na analogy fosilních paliv pro spalovací motory. Takto vzniklá směs uhlovodíků však má jiný poměr obsahu uhlíku, vodíku a kyslíku než surová ropa a obsahuje také nezanedbatelné stopy síry, dusíku a halogenů. Pro bezpečné zpracování takto vzniklé primární suroviny v rafinerii je tedy nutné poměry uvedených prvků přesně určit. Odzkoušenou a přesnou metodou je spalovací elementární analýza. Firma Elementar pro tuto aplikaci nabízí kombinaci přístrojů vario EL cube a rapid OXY cube. Vario EL cube je přístroj pro stanovení poměrů C, H, N a S spalovací metodou. Dedikovaným přístrojem pro stanovení obsahu O v organických matricích je rapid OXY cube pracující na principu pyrolýzy vzorku. Oba přístroje v základní konfiguraci pracují s teplotně vodivostním

detektorem, pro stanovení stopového obsahu síry a kyslíku je možné použít IR detektor. Oba je možné použít pro analýzu pevných látek nebo je vybavit automatickým podavačem kapalných vzorků.

### 13L-04

#### NABÍDKA LABORATORNÍCH DIGESTOŘÍ NĚMECKÉHO VÝROBCE WALDNER

##### JINDŘÍŠKA DOLINOVÁ

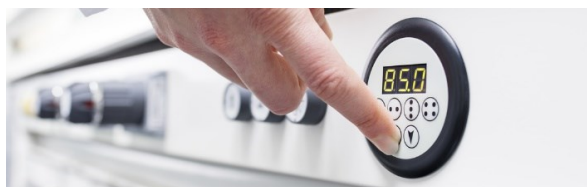
HPST, s.r.o., Na Jetelce 69/2, 190 00 Praha 9  
jindriska.dolinova@hpst.cz

Německý výrobce a celosvětový dodavatel laboratorního nábytku a laboratorních technologií WALDNER Laboreinrichtungen GmbH & Co. KG neustále rozšiřuje a inovuje svou nabídku laboratorních digestoří. Digestoře chrání pracovníky v laboratoři mnoha různými způsoby. Pomáhají předcházet uvolňování zdraví škodlivých látek do prostoru

a zároveň tvoří bezpečnou bariéru mezi obsluhou a chemikáliemi a laboratorním vybavením uvnitř digestoře. Dokonalá ergonomie, výšková nastavitelnost, průhlednost stěn digestoří, vysoký důraz na bezpečnost práce a inteligentní funkční detaily jsou jen jedny z mála benefitů, které digestoře Waldner přináší koncovému uživateli.

Konstrukce digestoří maximalizuje jejich pracovní vnitřní prostor, což je nejcennější část laboratorního pracovního prostoru pro pracovníky laboratoří. Konstrukce digestoří minimalizuje tlakovou ztrátu a odpor proti proudění vzduchu, což snižuje nároky na kapacitu a výkon vzduchotechnické jednotky a zajišťuje příjemné pracovní podmínky pro uživatele v souvislosti s prouděním vzduchu laboratoří. Možnost zakoupení digestoře s dodatečným ventilátorem (modely Secuflow), pomocí kterého je zabezpečen odtah těžkých par z pracovní desky digestoře nabízí bezpečnější pracovní prostředí pro uživatele a snižuje požadavek na výkon vzduchotechnické jednotky. Umístění servisních prvků ve vnitřních stěnách digestoří napomáhá optimalizovat maximální využití pracovní plochy uvnitř digestoře.

Digestoře jsou nabízeny v několika technických provedeních s různým rozsahem volitelného příslušenství. Zvláštní kapitolou jsou pak digestoře pro speciální aplikace (vysokoteplotní aplikace, práce s koncentrovanými kyselinami, práškovými materiály) nebo digestoře s nastavitelnou výškou pracovní plochy.



Obr. 1. Ovladač k nastavitelné výšce pracovní plochy

### 13L-05

#### FTIR-FPA A FTIR-QCL MIKROSKOPIE: PRŮLOMOVÉ TECHNIKY V OBLASTI INFRAČERVENÉHO ZOBRAZOVÁNÍ

##### DAVID MATOUŠEK, JAN NEUMAN

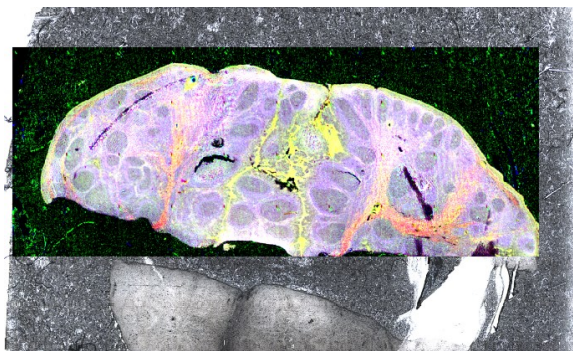
Optik Instruments s.r.o. (Bruker Optics), Purkyňova 649/127,  
612 00 Brno

V posledních letech došlo k výraznému pokroku v oblasti infračervené mikroskopie. Ačkoliv je tato technika osvědčená a široce využívaná, v mnohých aplikacích naráží na nedostatečné prostorové rozlišení a nízkou rychlost měření.

Technologie plošného focal-plane-array detektoru (FPA) přináší nové možnosti zobrazování větších ploch v infračerveném módu – umožňuje totiž měření až 128 x 128 pixelů zároveň, což v praxi znamená změnění 16.348 spekter s rozlišením až 1.25  $\mu\text{m}$  na jedno měření. Ačkoliv tato technologie existuje už delší dobu, teprve až současná výpočetní technika je schopná pracovat s velkými datovými sety (obsahujícími miliony infračervených spekter) a využít tak naplno potenciál technologie FPA.

Novější technologií v oblasti infračerveného zobrazování je technologie kvantového kaskádového laseru (QCL). Principem je, že QCL mikroskopy využívají jako zdroj infračerveného záření QCL laser namísto klasického globaru. Kvantový kaskádový laser umožní emitovat záření o mnohem vyšší intenzitě s nastavitelnou vlnovou délkou. Díky tomuto intenzivnímu zdroji záření je možné využít mnohem vhodnější detekční zařízení jako jsou například FPA bolometry, využívané např. v termokamerách. Tyto detekční systémy jsou schopné dosáhnout dosud nevídaných rychlostí měření (až 90.000 měření/sekundu), což vede k možnosti extrémně rychlého mapování nebo dokonce k tzv. LIVE infračervenému zobrazování – je možné pozorovat změny chemismu v prostoru v reálném čase. S prostorovým rozlišením se s touto technologií dostaneme až na 0.2  $\mu\text{m}$ .

Výše zmíněné technologie otevírají zcela nové možnosti v aplikacích jako je chemické zobrazování tkání (viz obr. 1), sledování dynamických chemických procesů v mikroměřítku v reálném čase, sledování změn chemismu v prostoru.



Obr. 1. FTIR-QCL mapa mikrotomového řezu organickou tkání a barevná diferenciací míst s rozdílným chemismem



**13L-06**  
**IS REAXYS ABLE TO SUPPORT RESEARCH AND TEACHING IN ALL AREAS OF CHEMISTRY?**

**PIOTR GOLKIEWICZ**

*Life Sciences Customer Consultant at Elsevier*

Chemists in every field search for chemistry literature and data. Rapid and easy access to experimental facts to empower the full range of chemistry research and education is becoming the main objective of modern scientific information tools.

The traditional way of getting information via reading full text articles becomes obsolete in the world of advanced, AI based technology.

Reaxys ([www.reaxys.com](http://www.reaxys.com)) is built on expert-curated chemistry information and enriched with cutting-edge technology. It is also the leading database for bioactivity data. Scientists in corporate R&D and academia gain actionable insights that lead to innovation, while saving time and money. Reaxys also supports teaching excellence in chemistry education.

Reaxys excerpts and quickly retrieves the most relevant chemical information, so you can decide how and which compounds to make with confidence, find state-of-the-art routes to synthesize molecules with superior properties, discover novel molecules with improved activities against specified targets and stay current with updates on new chemistry publications and patents.

What does it mean Modern Chemistry Database?

Modern chemistry database speaks the language of chemistry, from an interdisciplinary view. Reaxys uses machine learning to help researchers find, connect, and use chemistry data from across disciplines and information sources.

It is fast and easy – without sacrificing relevance. Reaxys excerpts and organizes relevant chemical information, for easier consumption. It includes a flexible query builder with >500 property search fields.

It is useful for every researcher and student. With an intuitive interface and workflows that can improve research skills, Reaxys is for every chemist, from first-year students to expert users.

What new content and functionalities were added to Reaxys in the last 2 years?

Since 2020 Reaxys was expanded with new content, more substances, reactions, properties and bioactivities. New modules include new and upgraded Reaxys Medicinal Chemistry with over 40 M bioactivities. Finally, new AI based Predictive Retrosynthesis Tool is able to predict chemical reactions that were never published with unprecedented probability score.

**13L-07**  
**METROHM ČESKÁ REPUBLIKA s.r.o., seznamte se!**

**PETER BARATH**

*Metrohm Česká republika s.r.o.*  
*office@metrohm.cz*

Společnost Metrohm AG byla založena v roce 1943 ve švýcarském Herisau panem Bertholdem Suhnerem. Nejdříve se soustředila na vývoj a výrobu rádií, o které bylo v tehdejší válečné Evropě velký zájem, ale v poválečném období se společnost přeorientovala na výrobu pH metrů a o několik let později na výrobu prvních titrátů. Společnost Metrohm AG pojí s Českou republikou nesmazatelné pouto díky polarografii, za kterou obdržel prof. Heyrovský Nobelovu cenu. Polarografie totiž spadá po mnoho desetiletí do portfolia společnosti Metrohm. Jelikož neměl zakladatel Berthold Suhne žádné děti a neměl tedy společnost komu předat, rozhodl se v roce 1982 založit Metrohm nadaci, která se stala výhradním vlastníkem společnosti Metrohm AG. Tím zakladatel zajistil společnosti nezávislost a jistotu do budoucnosti. Nadace společnosti si klade za cíl rozvoj regionu Apenzell, kde podporuje společenské, kulturní a vzdělávací projekty. Zejména pak vzdělávání hraje tu nejdůležitější roli v podání nadace, která se stará o rozvoj mladých studentů, kteří pak často spojují svoji pracovní kariéru právě se společností Metrohm AG. Ze společnosti Metrohm AG se postupem času stala globální značka premiové kvality. A aby se dařilo udržet tento vysoký standard, společnost Metrohm AG se rozhodla zřizovat dceřinné pobočky po celém světě včetně České republiky.



Obr. 1. **Metrohm Česká republika na veletrhu Laborexpo**

Metrohm Česká republika s.r.o. byla založena v roce 2010 mateřskou společností Metrohm AG z důvodu poskytnutí co možná nejkvalitnějších služeb všem klientům na českém trhu, kteří se zajímají o oblasti titrace, iontové chromatografie, elektrochemie a spektrometrie. Filozofie společnosti Metrohm Česká republika je založena na neustálém vzdělávání všech zaměstnanců tak, aby byli schopni poskytovat ty nejkvalitnější služby v oblasti servisu, technické podpory a další edukace klientů. Pro naše zákazníky vyvíjíme analytické aplikace, které jsou šité přímo na míru potřebám konkrétního uživatele a konkrétní technologie. Pro vývoj aplikací nám slouží naše aplikační laboratoř, kde si následně mohou všichni klienti otestovat jak vyvinuté metody, tak i kvalitu samotných přístrojů. Věci je totiž lepší jednou zkusit, než tisíckrát jen slyšet.

---

**SEZNAM PLENÁRNÍCH PŘEDNÁŠEK**


---

|       |                                      |   |
|-------|--------------------------------------|---|
| PL-01 | <u>K. Bouzek</u> , <u>M. Paidar</u>  | Energetický vektor vodík a jeho role v udržitelné energetice a dekarbonizaci průmyslu   |
| PL-02 | <u>A. Gavenda</u>                    | Trendy ve farmaceutickém průmyslu: budoucnost terapie s využitím malých molekul   |
| PL-03 | <u>J. Hlaváč</u>                     | Syntéza v roztoku či na pevné fázi – dilema organického chemika   |
| PL-04 | <u>V. Křen</u>                       | Enzymové modifikace přírodních látek  |
| PL-05 | <u>I. Šalitroš</u>                   | Komplexy železa a kobaltu s magnetickou bistabilitou – materiály s laditelnými magnetickými vlastnostmi pro technologie 21. století |
| PL-06 | <u>V. Vyskočil</u>                   | Chemické listy – jejich současnost a budoucí perspektivy  |
| PL-07 | <u>J. Mareš</u> , <u>L. Valerián</u> | Vybrané vyšetřovací úkony u trestného činu vraždy   |

---

**SEZNAM PŘÍSPĚVKŮ PODLE SEKČÍ**


---

**Sekce 1 – Analytická chemie**

## Přednášky

|       |  |  |
|-------|--|--|
| 1L-01 | <u>P. Barták</u> , <u>P. Bednář</u> , <u>J. Skopalová</u> , <u>J. Nádvořnicková</u> , <u>R. Jerga</u> , <u>D. Štolbová</u>   | Analytická derivatizace látek aneb obskurnosti v plynové chromatografii  |
| 1L-02 | <u>K. Jelšíková</u> , <u>E. Bláhová</u> , <u>K. Petráňová</u> , <u>J. Klouda</u> , <u>J. Skopalová</u> , <u>K. Schwarzová-Pecková</u>  | Vývoj elektroanalytických metod pro detekci žlučových kyselin a jejich konjugátů   |
| 1L-03 | <u>N. Košútová</u> , <u>T. Bertók</u> , <u>K. Kozics</u> , <u>A. Gábelová</u> , <u>E. Jané</u> , <u>M. Hřeš</u> , <u>L. Pažitná</u> , <u>J. Katrlík</u> , <u>J. Tkáč</u>       | Isolation and characterisation of exosomes as a potential prostate cancer biomarker  |
| 1L-04 | <u>Z. Kramplová</u> , <u>O. Metvieiev</u> , <u>R. Šelešovská</u> , <u>A. Purdešová</u> , <u>M. Vojs</u>  | Voltammetric determination of pesticide dichlofluanid on a boron-doped diamond electrode                                   |
| 1L-05 | <u>S. Kříženecká</u> , <u>J. Tolaszová</u> , <u>H. Šafránková</u> , <u>N. Bartoňová</u>  | Stanovení glyfosátu a jeho derivátu AMPA pomocí LC-MS/MS přímým nástřikem – je to vůbec možné a splnit legislativní limit? |
| 1L-06 | <u>K. Lemr</u> , <u>M. Nytko</u>   | Iontová mobilita: z letiště k hmotnostnímu spektrometru  |
| 1L-07 | <u>V. Hrdlička</u> , <u>M. K. Choinška-Młynarczyk</u> , <u>J. Skopalová</u> , <u>V. Kolivoška</u> , <u>R. Šelešovská</u> , <u>J. Langmaier</u> , <u>T. Navrátil</u>            | Voltametrické techniky při monitoringu farmakologicky významných léčiv nervového systému                                   |
| 1L-08 | <u>J. Petr</u> , <u>D. Baron</u> , <u>P. Švecová</u> , <u>N. Niaei</u> , <u>S. Hassanpour</u> , <u>T. D. Nguyenová</u> , <u>T. Pluháček</u>                                    | Kapilární elektroforéza: „-omics“ experimenty  |
| 1L-09 | <u>K. Schwarzová-Pecková</u> , <u>M. Zelenský</u> , <u>P. Čámbal</u> , <u>J. Fischer</u> , <u>S. Mandal</u> , <u>O. Williams</u> , <u>A. Taylor</u> , <u>S. Baluchová</u>      | Hladké povrchy borem dopovaných diamantových elektrod a jejich využití pro elektroanalýzu                                  |
| 1L-10 | <u>R. Bettencourt Da Silva</u>   | Evaluation of the uncertainty of quantitative and qualitative chemical information   |
| 1L-11 | <u>N. Mikulová</u> , <u>R. Jerga</u> , <u>M. Zajacová</u> , <u>Cechová</u> , <u>P. Bednář</u> , <u>P. Cankař</u> , <u>J. Stýskala</u> , <u>P. Barták</u> , <u>J. Skopalová</u> | Elektrolytické přeměny morfinu   |

|       |  |   |
|-------|--|---|
| 1L-12 | <i>J. Sokol, M. Maliarová, T. Jankech, A. Purdešová</i>                                      | Stanovenie avenantramidov v odrodách ovsa metódou kvapalinovej chromatografie                                 |
| 1L-13 | <i>R. Šelešovská, O. Matvieiev, M. Vojs</i>  | Tištěné senzory s borem dopovanou diamantovou elektrodou modifikovanou zlatými nanočásticemi v elektroanalýze |
| 1L-14 | <i>P. Tůma</i>   | Elektroforetické separace s laditelným elektroosmotickým tokem  |
| 1L-15 | <i>P. Tůma, F. Opekar</i>  | Vzduchem řízené rozhraní pro on-line elektroforetickou analýzu klinických vzorků                              |
| 1L-16 | <i>K. Vítková, A. Polanská, J. Jurčíková, M. Benešik, K. Křesalová, T. Šopíková, M. Moša</i> | Výzkum bakteriofágů aneb po stopách resistantních bakteriálních kmenů v nemocnici                             |
| 1L-17 | <i>V. Vyskočil</i>   | Role elektrochemických DNA biosenzorů při ochraně lidského zdraví   |

## Sekce 1 – Analytická chemie

### Postery

|       |  |  |
|-------|--|--|
| 1P-01 | <i>P. Beňovič, A. Purdešová, J. Sokol</i>  | Problematika karnozínu z pohľadu bio-analytickej chémie  |
| 1P-02 | <i>P. Distler, M. Mindová, J. Šebesta, J. John, B. Grüner, D. Baval, R. J. M. Egberink, W. Verboom, V. A. Babain</i> | Studium radiační stability extrakčních systémů na bázi N-donorových činidel BTP, BTBP a BTPPhen  |
| 1P-03 | <i>R. Jerga, P. Barták, J. Skopalová</i>   | Nové metody určování pálivosti chilli papriček   |
| 1P-04 | <i>J. Masác, F. Čacho</i>  | Stanovenie fosforu vysokorozlišovacou elektrotermickou molekulovou absorpčnou spektrometriou   |
| 1P-05 | <i>O. Matvieiev, R. Šelešovská</i>   | Determination of neuropharmaceutical drug mephenoxalone in human serum using screen-printed sensors with boron doped diamond electrode |
| 1P-06 | <i>M. K. Choińska-Młynarczyk, J. Skopalová, T. Navrátil</i>  | Voltametrické stanovení psilocinu a psilocybinu s použitím 3D tištěných elektrod   |
| 1P-07 | <i>K. Salvadori, A. Krupková, T. Strašák, L. Štátná Červenková, P. Matějka, P. Cuřínová</i>                          | Multiplication of urea sites – impact on binding phosphates  |
| 1P-08 | <i>A. Skok*, A. Vishnikin, M. Hedjazi, Ya. Bazel</i>   | Fluorescenčné stanovenie Bi(III) s astrafloxínom   |

## Sekce 2 – Elektrochemie

### Přednášky

|       |   |  |
|-------|---|--|
| 2L-01 | <i>P. Čambal, S. Baluchová, A. Taylor, K. Schwarzová-Pecková*</i> | Elektrochemické vlastnosti monokrystalických borem dopovaných diamantových elektrod s krystalovou orientací {113}, {115} a {118}     |
| 2L-02 | <i>L. Koláčná, M. Maďar, V. Kubiček, J. Ludvík</i>                | Co <sup>2+</sup> , Zn <sup>2+</sup> , Ni <sup>2+</sup> , Cu <sup>2+</sup> komplexy azamakrocyklů – elektrochemická studie            |
| 2L-03 | <i>L. Korecká, G. Kastrati, Z. Bílková</i>                        | Využití enzymů a nanomateriálů jako signál generujících molekul v elektrochemických imunosenzorech                                   |
| 2L-04 | <i>A. Liška*, J. Ludvík, M. Haas</i>                              | Elektrochemický přístup k ladění vlastností nových fotoiniciátorů založených na acylsloučeninách prvků 14. skupiny                   |
| 2L-05 | <i>A. Liška, J. Klíma, J. Budka, J. Ludvík</i>                    | Elektrochemická, EPR a kvantově chemická studie reduktivního štěpení aromatických nosyl esterů – nová cesta k přípravě arylsulfínátů |
| 2L-06 | <i>K. Lušpai, L. Šimková, J. Klíma, A. Liška, J. Ludvík</i>       | Analýza EPR spektra derivátů cibalackrotu – aneb když ověřený postup selže, nastupuje vylučovací metoda                              |
| 2L-07 | <i>L. Šimková, J. Svoboda, D. Dunlop, A. Liška, J. Ludvík</i>     | Redoxní vlastnosti a cytotoxická aktivita cyklopentadienylových titanocen dihalogenidů   |

|       |  |  |
|-------|--|--|
| 2L-08 | <i>X. Li, I. Tříšková, <u>L. Trnková</u></i>   | From cyclic voltammetry to elimination voltammetry with linear scan  |
| 2L-09 | <i>M. Zatloukalová</i>   | Stabilizační lipidové matrice pro elektrochemickou analýzu biologicky aktivních látek  |
| 2L-10 | <i><u>M. Zelenský</u>, J. Hrabovský, M. Zúkerstein, J. Sládek, N. Bulgakova, A. Taylor, V. Mortet, K. Schwarzová-Pecková</i> | Komplexní charakterizace chemicky-mechanicky leštěných borem dopovaných diamantových elektrod s kontrolovaným obsahem sp <sup>2</sup> uhlíku pomocí laseru |
| 2L-11 | <i>L. Melich, J. Podhájský, B. Hosnedlová, R. Průša, <u>R. Kizek</u></i>   | Elektrochemická charakterizace chytrého nanotransportéru pro cílenou léčbu   |
| 2L-12 | <i><u>T. Mikysek</u>, M. Sýs, R. Sokolová, M. Bártová, M. Novák</i>  | Katecholázová aktivita vybraných biomimetických komplexů mědi  |

## Sekce 2 – Elektrochemie

### Postery

|       |   |   |
|-------|---|---|
| 2P-01 | <i>M. Zelinka, D. Dobrovodský, <u>A. Daňhel</u></i>         | Voltametrie 6-diazo-5-oxo-l-norleucinu (DON): strukturální subjednotky nových protinádorových léčiv                         |
| 2P-02 | <i>A. Michalcová, <u>B. Kratochvíl</u>, E. Stránělová</i>   | Pórézní stříbrné elektrody – možná cesta ke zlepšení detekčního limitu pro určení organických nečistot v životním prostředí |
| 2P-03 | <i><u>I. Tříšková</u>, A. Liška, J. Ludvík, L. Trnková*</i> | Elektrochemická oxidace methylovaných derivátů guaninu  |
| 2P-04 | <i><u>J. Donkeng Dazie</u>, J. Urban, J. Ludvík</i>         | Elektrochemické vlastnosti furfuralu a 5-hydroxymethylfurfuralu a jejich reaktivita s primárními aminy                      |

## Sekce 3 – Anorganická a bioanorganická chemie

### Přednášky

|       |   |  |
|-------|---|--|
| 3L-01 | <i><u>A. Akusevich</u>, I. Parchovianská, M. Parchovianský, A. Prnová, R. Klement</i> | Ce <sup>3+</sup> -doped phosphors prepared by sintering of microspheres of YAg-Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> glass-ceramic composites |
| 3L-02 | <i><u>B. Drahoš*</u></i>  | Zajímavé magnetické vlastnosti komplexů přechodných kovů s makrocyclickými ligandy   |
| 3L-03 | <i><u>P. Jelínek</u></i>  | New perspectives in chemistry: On-surface synthesis and scanning probe microscopy  |
| 3L-04 | <i><u>K. Kotrle</u>, I. Nemeč, E. Čížmár, P. Antal, R. Herchel</i>                    | Kobaltaté komplexy ve tvaru trigonální prizmy: Cesta k lepší magnetické anizotropii?   |
| 3L-05 | <i><u>L. Koudelka</u>, P. Mošner, L. Montagne</i>                                     | Struktura a vlastnosti niobáto-fosfátových skel draselných   |
| 3L-06 | <i>L. Pazderová, <u>V. Kubiček</u>, J. Kotek, P. Lubal, P. Hermann</i>                | Cyklam nesoucí bis(fosfonátové) pendantní rameno – nosič izotopů mědi pro radiomedicínské aplikace                                     |
| 3L-07 | <i><u>J. Kuchár*</u>, E. Samolová, M. Ilavská</i>                                     | Heterobimetalické komplexy Cu(II)/Mn(II) s trans-1,8-deriváty cyclamu na štúdium magnetokalorického efektu                             |
| 3L-08 | <i>J. Orava</i>   | Metallic glasses: Structural and functional materials – principles of manipulating the energy states                                   |
| 3L-09 | <i><u>M. Pražáková*</u>, B. Drahoš, D. Ndyaié, ě. Tóth</i>                            | Nové potenciální kontrastní látky založené na komplexech Mn(II) s makrocyclickými ligandy  |
| 3L-10 | <i>L. Masaryk, <u>P. Štarha</u></i>   | Reaktivita polosendvičových komplexů platinových kovů vůči vybraným biomolekulám   |
| 3L-11 | <i><u>E. Zahradníková</u>, C. Pichon, J.-P. Sutter, B. Drahoš*</i>                    | Structure and magnetism of Co(II) halide/pseudohalide complexes with 17-membered pyridine-based macrocyclic ligand                     |

**Sekce 3 – Anorganická a bioanorganická chemie**

## Postery

- 3P-01 O. F. Fellner\*, R. Herchel, I. Nemeč Magnetic anisotropy in Co(II) single-ion magnets with coordination number on the border between six and seven
- 3P-02 L. Habala, B. Oboňová, J. Valentová Metal complexes of hydrazones and related ligands as bioactive compounds
- 3P-03 P. Halaš, O. F. Fellner, I. Nemeč, R. Herchel Large magnetic anisotropy in Co(II) complexes derived from sulfonylated ligands
- 3P-04 M. Harmošová, M. Kello, E. Samolová, I. Potočňák Biologically active Zn(II) complexes with 5-chloro-7-nitro-8-hydroxyquinoline
- 3P-05 M. Chylyi\*, L. Loghina, A. Kaderavkova, M. Vlcek The synthesis method influence on the  $\text{CeF}_3$  nanocrystal's shape and size
- 3P-06 P. Janoš, J. Ederer, O. Životský, J. Luňáček, I. Šafařík Enzyme-mimetic properties of cerium- and iron-oxides and their composites
- 3P-07 M. Kepeňová, M. Kello, M. Litecká, I. Potočňák Antiproliferative active Cu(II) complexes with nitroderivatives of 8-hydroxyquinoline
- 3P-08 G. Kuzderová, Z. Vargová, M. Rendošová, R. Gyepes, P. Olejníková, D. Sabolová, M. Kello Koordinačné zlúčeniny striebra s potenciálne terapeutickými bioaktívnymi ligandami
- 3P-09 L. Lintnerová\*, J. Korcová, P. Herich, J. Valentová Synthesis, sod mimetic and dna cleaving properties of copper(II) complexes derived from methoxybenzylamines
- 3P-10 L. Loghina\*, M. Chylyi, A. Kaderavkova, M. Vlcek Substituted thiourea as a comprehensive agent in high-precision method for the quantum dots shell increment
- 3P-11 M. Matíková Maňarová, E. Samolová, P. Čmorejová, M. Vilková Vanadium(V) complexes with quinoline derivatives
- 3P-12 N. Miklášová\*, P. Herich, J. Barroso-Flores, J. Korcová, J. Leskovská, P. Takáč, J. Valentová Palladium(II) complexes with bioactive bisdemethoxycurcumin: Cytotoxicity, DNA and HSA-binding
- 3P-13 B. Oboňová, L. Habala Syntéza a štúdium antiradikálových vlastností komplexných zlúčenín medi a redukovaných schiffových zásad
- 3P-14 E. Samsonova, P. Kutálek, P. Knotek, E. Černošková, J. Schwarz Photoinduced expansion and microlens formation of Ge-As-S glass surface
- 3P-15 A. Sztula Deriváty 1,10-fenantrolínu pro přípravu fotoaktívnych koordinačných sloučenin
- 3P-16 B. Vranovičová, K. Mital'ová Interakcie železa s aminokyselinami ako biomolekulami

**Sekce 4 – Organická a bioorganická chemie**

## Přednášky

- 4L-01 L. Brulíková, J. Chasák, M. Dak, V. Šlachtová, D. Cappelletti, M. Šebela, K. Berka, V. Bazgier New agents for the treatment of drug-resistant mycobacterium tuberculosis
- 4L-02 M. Budovská, R. Michalková, J. Mojžiš, V. Víglaský Syntéza a antiproliferačný potenciál bis-indolových substancí
- 4L-03 R. Cibulka\*, A. Pokluda, E. Zubova, M. März, M. Krupička Přepólování pomocí flavinů: Od inspirace přírodou k aplikacím v organické syntéze
- 4L-04 V. Čírkva Fotochemická příprava helicenů
- 4L-05 M. Gašparová, D. Kendrová, Z. Tokárová Cyklizácia tiofén dikyanonitrilov na zlúčeniny ftalokyanínového typu
- 4L-06 T. Mašek, V. Chmela, L. Prener, S. Dekoune, U. Jahn From phenolics to alkaloids – adventures in total synthesis
- 4L-07 P. Králová, M. Soural Divergentně orientovaná syntéza vycházející z 2/4-nitrobenzensulfonamidů jako klíčových intermediátů
- 4L-08 M. Jabczun, V. Nosek, J. Mišek New methods for synthesis of sulfonimidamides and related compounds

|       |   |   |
|-------|---|---|
| 4L-09 | <u>J. Orvoš</u> , R. Fischer  | Study of a new approach to bis(hetero)aryl diazenes   |
| 4L-10 | R. Antal, Z. Brůža, S. Perdomo,<br>J. Kuneš, <u>M. Pour</u> *               | Elektrondeficitní dendraleny: Syntéza a reaktivita  |
| 4L-11 | <u>M. Urban</u> *, G. Gonzalez, J. Hodoň,<br>M. Strnad                      | Pentacyclic triterpenes with strong neuroprotective activity in SH-SY5Y cells in two neurodegeneration models |
| 4L-12 | V. A. Bhosale, M. Nigríni,<br>M. Dračinský, I. Čisarová, <u>J. Veselý</u> * | Enantioselective desymmetrization of 3-substituted oxetanes   |

## Sekce 4 – Organická a bioorganická chemie

### Postery

|       |   |  |
|-------|---|--|
| 4P-01 | <u>D. Chrenko</u> , J. Pospíšil   | 2,3-Dihydrobenzofurany jakožto okouzující sekundární metabolity rostlin  |
| 4P-02 | <u>R. Illycka</u> , J. Pospíšil   | Syntéza neolignanového skeletu pomocí katalýzy založené na využití tranzitních kovů  |
| 4P-03 | <u>N. Kabaňová</u> , Z. Tokárová  | Syntéza, struktúra a zmeny fyzikálno-chemických vlastností benzimidazolového derivátu aplikovaného ako chemosenzor pre toxický organický reagent |
| 4P-04 | <u>K. Knittelová</u> , D. Malinák, R. Andrys,<br>K. Musilek   | Novel modified pralidoxime derivates as potential reactivators of organophosphate-inhibited cholinesterases                                      |
| 4P-05 | <u>Z. Kohoutová</u> , D. Malinák,<br>T. Hofmanová, R. Andrys, L. Prchal,<br>J. Svobodová, K. Musilek                        | Synthesis and <i>in vitro</i> evaluation of non-symmetrical monoquaternary ammonium salts as potential reactivators of inhibited cholinesterases |
| 4P-06 | <u>M. Kolářik</u> , L. Brulíková  | New thiazolidinedione derivatives as potential antibacterial agents  |
| 4P-07 | <u>V. Kolaříková</u> , L. Petrásková,<br>V. Křen, K. Valentová  | Sulfated metabolites of flavonoids   |
| 4P-08 | <u>J. Kristek</u> , J. Pospíšil   | Heterocyklické sulfonamidy ako chirálne H-donory a Brønstedové kyseliny s laditeľnými vlastnosťami pre organokatalýzu                            |
| 4P-09 | E. Řezníčková, S. Krajčovičová,<br>M. Peřina, M. Kovalová, M. Sural,<br>V. Kryštof  | Modulace FLT3 a CDK9 v buňkách akutní myeloidní leukémie pomocí technologie PROTAC   |
| 4P-10 | <u>D. Malinák</u> , T. Zorbaz,<br>T. Hofmanová, R. Andrys, M. Psoťka,<br>J. Svobodová, L. Prchal, Z. Kovarik,<br>K. Musilek | Halogen-substituted pyridinium oximes reactivating cholinesterases inhibited by nerve agents   |
| 4P-11 | <u>E. Prchalová</u> , D. Malinák,<br>J. Svobodová, L. Fresser, R. Andrys,<br>Z. Heger, K. Musilek                           | <i>In vitro</i> evaluation of bodipy labeled bisquaternary ammonium salts used as reactivators of inhibited acetylcholinesterase                 |
| 4P-12 | R. Sokol, L. Jedinák, P. Cankař   | A preliminary study of asymmetric Diels-Alder reaction with axially chiral amides  |
| 4P-13 | <u>J. Stýskala</u> , F. Nevrlka, L. Tranová   | Regioselektivní substituce purinových derivátů v poloze N <sup>7</sup> terciárními zbytky  |
| 4P-14 | <u>N. Štátná</u> , F. Zálešák, J. Pospíšil  | <i>De novo</i> syntéza heteroaryl sulfonamidů  |
| 4P-15 | <u>D. Vysloužilová</u> , J. Pospíšil  | Syntéza přírodních fyto-sloučenin patřících do rodiny coumestanů   |
| 4P-16 | P. Králová, <u>K. Žáková</u> ,<br>L. Pospíšilová, M. Sural*   | Syntéza 2,3-disubstituovaných chinolin-4-karbonitrilů pomocí Truce-Smile přesmyku fenacyl-4-nitrobenzensulfonamidů                               |

**Sekce 5 – Fyzikální chemie a materiálová chemie****Přednášky**

|       |   |  |
|-------|---|--|
| 5L-01 | <i>S. Bashir, P. Škorňa, E. Scholtzová</i>  | Theoretical DFT-D3 study of interactions between montmorillonite clay and different polymers   |
| 5L-02 | <i>K. Storchmannová, J. Juračka, D. Martinát, M. Šrejber, V. Bazgier, K. Berka*</i>                               | Interaction of small molecules with biological membranes   |
| 5L-03 | <i>A. Bikbashev, M. Kubíková, T. Stryšovský, L. Kvítek</i>  | Metody získávání nanočástic oxidu železnato-železitého o různých morfologiích  |
| 5L-04 | <i>P. Hájovská*, A. Heydari, V. Jančovičová, I. Lacík</i>   | Methacrylated gelatin/alginate-based bioink precursors for 3D bioprinting  |
| 5L-05 | <i>J. Jemelka, K. Pálka, J. Jančálek, M. Kurka, S. Šlang, M. Vlček</i>  | Příprava tenkých vrstev systému As-S-Se metodou spin-coating z roztoku chalkogenidového skla As <sub>2</sub> S <sub>3</sub> dopovaného elementárním Se |
| 5L-06 | <i>J. Jůza, M. Nevalová, D. Michálová, Z. Starý</i>   | Měření povrchového a mezifázového napětí viskózních materiálů: metoda visící kapky a relaxace tvaru  |
| 5L-07 | <i>Z. Kinari*, R. Tomáš</i>   | Physicochemical properties of selected imidazolium chloride ionic liquids in tetraethylene glycol  |
| 5L-08 | <i>Z. Kolská, S. Lupinková, V. Švorčík</i>  | Příprava a charakterizace nanostrukturovaných povrchů pro různé aplikace   |
| 5L-09 | <i>R. Mach, P. Lazar</i>  | Teoretické studium rentgenové fotoelektronové spektroskopie 2D materiálů   |
| 5L-10 | <i>A. Řezníčková*, H. Y. Nguyenova, V. Lacmanova, A. Michalčová, F. Průša, A. Kutová, V. Švorčík, P. Slepíčka</i> | Roubování stříbrných nanokuliček a nanodestiček na plazmatem ošetřený PET: Vliv tvaru nanočástic na antibakteriální aktivitu                           |
| 5L-11 | <i>V. Švorčík, Z. Kolská, O. Lyutakov</i>   | Materiálové struktury pro využití CO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O a slunce. Příprava a charakterizace   |
| 5L-12 | <i>R. Ostruszka, D. Pulpánová, P. Novák, D. Jiráček, K. Šišková*</i>  | Bimetalické nanokompozity obsahující fluorescentní Au nanoklastry a superparamagnetické Fe(III) částice  |

**Sekce 5 – Fyzikální chemie a materiálová chemie****Postery**

|       |   |  |
|-------|---|--|
| 5P-01 | <i>R. Ambati</i>  | Corrosion of partially submerged samples in molten flinak salt   |
| 5P-02 | <i>M. Chevallier, I. Císařová, P. Němec, J. Stibůrek, M. Fridrichová</i>                        | Krystalové inženýrství molekulárních materiálů pro nelineární optiku – soli <i>N,N</i> -dimethylbiguanidu  |
| 5P-03 | <i>L. Hochvaldová, L. Válková, K. Plecho, L. Kvítek, A. Panáček</i>                             | Plasmonic nanosilver-modified surfaces for photothermal therapy  |
| 5P-04 | <i>K. Kořuhová, M. Jerigová</i>   | Forenzní analýza povýstrelových splodin pomocí hmotnostnej spektrometrie sekundárných iónov  |
| 5P-05 | <i>D. Krishnan*, M. Korenko, F. Šimko</i>   | Electrical conductivity of the molten systems of (LiF – CaF <sub>2</sub> ) <sub>eut</sub> – NdF <sub>3</sub> and (LiF – NaF) <sub>eut</sub> – NdF <sub>3</sub> |
| 5P-06 | <i>M. Kubíková, T. Stryšovský, K. Šimkovičová, Z. Kovářová, A. Panáček, R. Pucek, L. Kvítek</i> | Katalytická hydrogenace CO <sub>2</sub>  |
| 5P-07 | <i>D. Lorenc, E. Noskovicova, M. Koys</i>   | Towards gas detection by THz four-wave mixing in bulk media  |
| 5P-08 | <i>E. Matušková, J. Honzík, J. Vinklár</i>  | Promising alternatives of cobalt-free promoters in UPR: Evaluation of gelation and exotherm behaviour  |
| 5P-09 | <i>E. Noskovičová, J. Orság, D. Lorenc</i>  | Dizajn MPOF vlákna pre THz štvorvlnové zmiešavanie   |
| 5P-10 | <i>J. Nováková, E. Noskovičová, D. Lorenc, M. Jerigová, D. Velič</i>                            | Geometry of laser post-ionization secondary ion mass spectrometer  |
| 5P-11 | <i>J. Orság, D. Velič</i>   | Fluorescenčná spektroskopía supramolekulového komplexu cyklodextrín-kumarín C500   |

|       |  |   |
|-------|--|---|
| 5P-12 | <i>E. Otyepková, L. Descamps</i>   | Studium povrchových vlastností pevných látek pomocí iGC   |
| 5P-13 | <i>A. Panacek*, L. Hochvaldova, D. Panacek, L. Kvitek, R. Vecerova, M. Kolar</i> | Restoration of antibacterial activity of inactive antibiotics via combined treatment with silver based antibacterial nanomaterials at non-toxic concentrations to human cells |
| 5P-14 | <i>L. Plačková, M. Předota, O. Kroutil</i>                                       | Molecular dynamics simulations of sodium sulfate in water   |
| 5P-15 | <i>R. Prucek, F. Kubeš, B. Štefková, A. Pánaček, L. Kvitek</i>                   | Detekce glyfosátu pomocí povrchem zesílené Ramanovy spektroskopie za použití nanočástic stříbra zlata   |
| 5P-16 | <i>D. Sarvaš, D. Velič, M. Jerigová</i>  | Infračervená spektroskopie tepelné degradace vitamínu C   |
| 5P-17 | <i>P. Závodská*, V. Jaques, M. Klučáková, M. Pekař, T. Zikmund, J. Kaiser</i>    | Analysis of porosity evolution in permanent grassland soil through the seasons  |
| 5P-18 | <i>A. Žižlavská, R. Prucek</i>   | Zelená syntéza stříbrných nanočástic extraktem z vinných listů  |
| 5P-19 | <i>A. Panacek*, L. Hochvaldova, D. Panacek, L. Kvitek, R. Vecerova, M. Kolar</i> | Restoration of antibacterial activity of inactive antibiotics via combined treatment with silver based antibacterial nanomaterials at non-toxic concentrations to human cells |

## Sekce 6 – Biochemie

### Přednášky

|       |   |   |
|-------|---|---|
| 6L-01 | <i>M. Fojta, H. Pivoňková, M. Hermanová</i>                       | Redukce oligonukleotidů tvořících cytosinové tetraplexy na rtuťové elektrodě  |
| 6L-02 | <i>M. Hermanová, H. Pivoňková, M. Outilá, J. Špaček, M. Fojta</i> | Chování guaninových kvadruplexů na površích elektrod                          |
| 6L-03 | <i>L. Trizna, M. Budovská, L. Janovec, V. Víglašký</i>            | Nové akridin-bis-tiomočovinné ligandy s vysokou selektivitou k i-motívom DNA  |
| 6L-04 | <i>J. Vacek</i>   | Kyselina arachidonová a její nitrovaná forma: chemismus a biologická aktivita |

## Sekce 6 – Biochemie

### Postery

|       |  |  |
|-------|--|--|
| 6P-01 | <i>A. Gucký, M. Kožurková, S. Hamuláková</i>             | Synthesis and spectroscopic study of novel coumarin derivatives as DNA-interacting agents                      |
| 6P-02 | <i>K. Krochtová, J. Taššik, L. Janovec, M. Kožurková</i> | 2,9-disubstituted acridine derivatives – interaction with DNA and topoisomerase I                              |
| 6P-03 | <i>J. Olajoš, M. Antalík</i>                             | Extracellular electron transport by proteins   |
| 6P-04 | <i>S. Sovová*, D. Radová, D. Sabolová, Z. Kudličková</i> | Determination of the binding affinities of novel indole-chalcone hybrids with bovine serum albumine and CT DNA |

## Sekce 7 – Chemické vzdělávání a historie chemie

### Přednášky

|       |  |   |
|-------|--|---|
| 7L-01 | <i>H. Cídllová*, J. Horská</i>   | Inovace předmětu aplikovaná chemie a moderní metody chemického výzkumu na pedagogické fakultě masarykovy univerzity |
| 7L-02 | <i>H. Čtrnáctová</i>   | Výuka chemie na ZŠ a SŠ z hlediska kurikulárních dokumentů  |
| 7L-03 | <i>P. Distler</i>  | Interaktivní mooc kurz „Význam radiochemie a jaderné chemie pro naši společnost“                                    |
| 7L-04 | <i>M. Krátký</i>   | Příběh objevování vitaminů  |
| 7L-05 | <i>I. Lorencová</i>  | Chemik Emil Votoček a nově nalezené archiválie  |
| 7L-06 | <i>K. Petřelová, K. Sadílková</i>  | Webové stránky „Chemie žije“ – interaktivní mapa chemického průmyslu  |
| 7L-07 | <i>V. Švandová, P. Pospíšil, J. Hrubá</i>                                    | Webové portály na podporu výuky chemie a studentů učitelství  |
| 7L-08 | <i>P. Šmejkal, L. Mika, C. Pirola, A. Pedretti, C. Jolival, N. Koupilová</i> | Nanome – výuka chemie ve virtuální realitě  |
| 7L-09 | <i>T. Felzl, P. Šmejkal</i>  | MoleGraph – školní měřicí systém svépomocí  |
| 7L-10 | <i>M. Teplá</i>  | Dynamická vizualizace ve výuce a její vliv na žáky  |



**Sekce 7 – Chemické vzdělávání a historie chemie**

## Postery

|       |  |  |
|-------|--|--|
| 7P-01 | <u>D. Baránková</u> , R. Křapáček,<br>K. Trčková | Didaktická hra ve výuce anorganické chemie   |
| 7P-02 | <u>L. Grambličková</u>                           | Vplyv respirátorov na rozpoznávanie emócií žiakov základných škôl na Slovensku     |
| 7P-03 | J. Kropáček*, <u>M. Mucha</u>                    | Možnosti zařazení tématu nanotechnologie a nanomateriály do výuky na střední škole |
| 7P-04 | <u>M. Pekař</u>                                  | Gustav Jaumann a historie (nejen) reologie   |
| 7P-05 | <u>H. Tkačiková</u> , K. Trčková                 | Chemie je všude, kam se doma podíváš   |

**Sekce 8 – Termická analýza**

## Přednášky

|       |   |   |
|-------|---|---|
| 8L-01 | <u>J. Barták</u> , M. Včeláková, P. Pilný   | Povrchové napětí v taveninách a podchlazených taveninách chalkogenidových sklotvorných materiálů  |
| 8L-02 | <u>Z. Cibulková</u> , T. Dubaj, P. Šimon  | Determination of materials residual stability after combined ageing   |
| 8L-03 | <u>E. Kinnertová</u> , V. Slovák  | Studium polykondenzace resorcinolu s formaldehydem pomocí teplotně modulované DSC   |
| 8L-04 | <u>L. Kořená</u> , V. Slovák  | Srovnání vody a benzenu jako testovacích kapalin pro DSC termoporometrii mezoporézních uhlíků   |
| 8L-05 | <u>M. Majerová</u> , M. Škrátek, A. Prnová,<br>A. Dvurečenskij, J. Maňka,<br>D. Galusek | Vplyv teplotného žihania na magnetické vlastnosti Bi dopovaných gelenitových skiel  |
| 8L-06 | <u>A. Prnová</u> , J. Michalík, B. Pecušová,<br>R. Klement, J. Valúchová, D. Galusek    | Study of thermal and pl properties of Er <sup>3+</sup> doped aluminate glasses, impact of crystallinity on PL properties  |
| 8L-07 | <u>J. Šhánělová</u> , P. Honcová, J. Málek  | Stanovení rychlosti růstu krystalů a nukleace ve skelných materiálech   |
| 8L-08 | <u>P. Šimon</u> , Z. Cibulková, T. Dubaj  | Considerations on the isoconversional principle   |
| 8L-09 | V. Slovák   | Kvantitativní využití TG-MS k analýze uvolněných plynů – metodologické poznámky   |
| 8L-10 | <u>S. Sorokina</u> , B. Smetana,<br>L. Drozdová, S. Zlá, M. Kawuloková                  | Experimental and theoretical study of specific heats and phase transformation temperatures of alloys based on Fe-C-Cr-Ni depending on composition and temperature |
| 8L-11 | P. Šulcová  | Činnost odborné skupiny termické analýzy  |
| 8L-12 | <u>A. Vykýdalová</u> , J. Rychlý,<br>E. Matysová, Z. Špitálský                          | Influence of flame retardants on the flammability of epoxides studied by cone calorimetry   |
| 8L-13 | <u>M. Zavadil</u> , V. Plaček   | Termická analýza elastomerů   |
| 8L-14 | <u>G. Zelenková</u> , V. Slovák   | Termoporometrie: Jak je možné charakterizovat velké mezopóry?   |
| 8L-15 | <u>O. Zobač</u> , L. Karpíšková, A. Kroupa  | Využití měrné tepelné kapacity intermetalik při modelování fázového diagramu Al-Ge-Mg metodou calphad   |

**Sekce 9 – Porézní materiály**

## Přednášky

- 9L-01 *M. Almáši* Metal-organic frameworks of MOF-76 family for environmental applications, heterogeneous catalysis and energy storage
- 9L-02 *D. Bůžek\*, V. Zlámalová, S. Adamec, J. Demel, K. Lang* Využití metal-organických sítí (MOFů) v environmentální praxi – cesta spásy nebo nesplnitelný sen?
- 9L-03 *J. Dědeček, H. Jirglová, M. Lemishka, A. Kornas, K. Mlekodaj, Š. Sklenák, E. Tabor* Activation of molecular oxygen by its splitting over binuclear transition metal ion sites stabilized in aluminosilicate zeolite matrices
- 9L-04 *J. Demel, D. Bůžek, K. Škoch, M. G. S. Londeborough* Aktivovaný borán – nový druh porézního polymeru
- 9L-05 *P. Gemeiner, T. Buchlová, M. Pavličková, M. Hatala, P. Veteška* Tlačené elektrody na báze biocharu a tetraisopropoxidu titaničitého pre farbivom senzibilizované solárne články
- 9L-06 *A. Hašková, B. Bashta, K. Zítová, E. Vrbková, E. Vyskočilová, J. Sedláček* Porézní hypersesíťované polyacetyleny s iontovými segmenty pyridiniového typu
- 9L-07 *L. Havelková, B. Bashta, J. Sedláček* Funkcionalizované porézní organické polymery pro sorpční a katalytické aplikace
- 9L-08 *J. Lang, J. Bednárek* Impregnation of porous materials with ionic liquids and their application in sorption of pollutants and antimicrobial tests
- 9L-09 *M. Pavličková, M. Hatala, J. Vida, T. Homola, P. Gemeiner* Tlačené flexibilní grafén oxidové vrstvy redukováné nízkoteplotnou plazmou
- 9L-10 *D. Šorm, B. Bashta, L. Sekerová, E. Vrbková, E. Vyskočilová, J. Sedláček* Hypersesíťované porézní polyacetyleny s achirálními a chirálními organometalickými segmenty
- 9L-11 *T. Zelenka* Metoda fyzisorpce plynů: neobvyklé tvary izoterem

**Sekce 9 – Porézní materiály**

## Postery

- 9P-01 *B. Bashta, J. Sedláček, J. Sokol, J. Brus* Hyper-cross-linked polyacetylene polymers with schiff base segments. Texture and properties modification via template approach
- 9P-02 *M. Hatala, M. Pavličková, P. Gemeiner, O. Sarakhman, L. Švorc* Tlačou zhotovené vrstvy obsahující biochar pre senzorické aplikácie
- 9P-03 *D. Princík, V. Zeleňák* Metal-organic frameworks containing fluorinated ligands
- 9P-04 *L. Zauška, M. Almáši* Mesoporous silicas with pei-modified surface for heavy metal ions capture from wastewater: effect of morphology

**Sekce 10 – Průmyslová chemie**

## Přednášky

- 10L-01 *R. Kalousková, V. Benešová, A. Sokolohorskyj, L. Malinová, J. Brožek* Syntetické polymery v knihovních fondech
- 10L-02 *J. Hubáček, J. Lederer, P. Kuran* Dehalogenace kapalných produktů z pyrolýzy plastů pro petrochemické využití

**Sekce 10 – Průmyslová chemie**

## Postery

- |        |   |  |
|--------|---|--|
| 10P-01 | <u>Z. Hajdúchová</u> , E. Kuzielová,<br>M. Slaný, M. Žemlička | Structure of high-temperature phases in the multicomponent cement pastes studied by infrared spectroscopy in the MID-IR region |
| 10P-02 | E. Kuzielová, <u>J. Jurišová</u> , R. Novotný,<br>M. Žemlička | Factors influencing the hydration course of blended cement under conditions simulating real geothermal wells in Slovakia       |
| 10P-03 | <u>O. Krupková</u> , L. Dušek                                 | Degradace textilních barviv z odpadních vod oxidačními procesy   |
| 10P-04 | <u>M. Olšovský</u> , M. Krištof, P. Kuna,<br>Š. Budzák        | Energetické materiály splňující REACH  |

**Sekce 11 – Chemie přírodních látek**

## Přednášky

- |        |   |   |
|--------|---|---|
| 11L-01 | <u>G. Albarico</u> *, K. Urbanová,<br>M. Houdkova, M. Bande, E. Tulin,<br>L. Kokoška* | Chemical composition and antibacterial activity of essential oils from native plant species of leyte, philippines |
| 11L-02 | <u>T. Béres</u> , D. Kaczorová, S. Čavar<br>Zeljkovič, P. Tarkowski                   | Analýza sekundárních metabolitů konopí  |
| 11L-03 | <u>P. Klouček</u>   | Silice v potravinářství a zemědělství – slepá ulice nebo světlo na konci tunelu?                                  |
| 11L-04 | <u>D. Tarkowská</u> *, T. Trojanská,<br>M. Strnad                                     | Steroidní saponiny v rostlinách – biologický význam a analýza   |
| 11L-05 | <u>P. Tarkowski</u>   | Konopí – hrozba nebo šance?   |
| 11L-06 | <u>K. Valentová</u> , J. Viktorová  | Modulace mnohočetné lékové rezistence flavonoidy  |

**Sekce 11 – Chemie přírodních látek**

## Postery

- |        |  |  |
|--------|--|--|
| 11P-01 | <u>M. Bajcura</u> , T. Popelka, M. Lukáč,<br>M. Pisárčík                                     | Štúdium povrchových vlastností a deskriptorů lipofility saponinů izolovaných z <i>Primulae radix</i> |
| 11P-02 | <u>J. Dehner</u> , S. Čavar Zeljković,<br>T. Béres, N. Štefelová, P. Tarkowski               | Fytochemická analýza plodů ostružiníku   |
| 11P-03 | <u>M. Fuksová</u> , J. Pospíšil*   | Vývoj nové generace rostlinných retardérů růstu  |
| 11P-04 | <u>J. Havlásek</u> *, J. Vrba  | Vliv fytoKANABINOIDŮ na expresi cytochromu P450 1A1 v buňkách HepG2                                  |
| 11P-05 | <u>L. Petrásková</u> , K. Brodsky,<br>K. Káňová, K. Valentová                                | Analytical separation of polyphenol sulfates by HPLC   |
| 11P-06 | L. Lapčík*, P. Li, B. Lapčíková,<br>S. Gautam, T. Valenta,<br>D. Sumczynski, <u>D. Řepka</u> | Physicochemical study of the antioxidant activity of the corn silk extracts                          |

**Sekce 12 – Chemie životního prostředí**

## Přednášky

- |        |   |  |
|--------|---|--|
| 12L-01 | <u>M. Bittner</u> , <u>L. Báborská</u> , <u>B. Brooks</u> ,<br><u>M. Holba</u> , <u>J. Lev</u> , <u>D. Polášek</u> ,<br><u>L. Bláhová</u> , <u>L. Bláha</u> | Bakterie a farmaka v odpadní vodě přečištěné v poloprovozních jednotkách terciárního čištění                             |
| 12L-02 | <u>K. Kőbőlová</u> , <u>H. Berková</u> , <u>V. Adamec</u> ,<br><u>J. Pospíšil</u>   | Ekotoxicita jemných a ultrajemných částic zo spaľovacích procesov  |
| 12L-03 | <u>B. Kotlík</u> , <u>H. Kazmarová</u>  | Odhad zdravotních rizik ze znečištění ovzduší Česká republika – rok 2021   |
| 12L-04 | <u>F. Mišíková*</u> , <u>Ch. Van Drimmelen</u> ,<br><u>M. Revel</u> , <u>S. Heise</u> , <u>A. Krejčová</u>  | Vliv kontrastních látek na bázi gadolinia a hexahydrátu dusičnanu gadolinitého na růst dvou druhů sladkovodních mikrořas |
| 12L-05 | <u>L. Novotný</u>   | Posuzování procesů a možností využití pomocí popisu vybraných závislostí   |
| 12L-06 | <u>M. Šuránek</u> , <u>Z. Melichová</u>   | The study of heavy metals adsorption process on slovak aluminosilicates  |

**Sekce 12 – Chemie životního prostředí**

## Postery

- |        |   |  |
|--------|---|--|
| 12P-01 | <u>M. Hupian</u> , <u>M. Galamboš</u> ,<br><u>E. Viglašová</u> , <u>M. Daňo</u> | Adsorpcia technecianu na vzorkách Zn-aktivovaného uhlíka   |
| 12P-02 | <u>P. Parma</u> , <u>J. Šembera</u> , <u>V. Veselská</u> ,<br><u>J. Filip</u>   | Vliv modifikace povrchu nanočástic železa na jejich transportní vlastnosti – experimenty a model |

**Sekce 13 – Sponzoři**

## Přednášky

- |        |                                       |  |
|--------|---------------------------------------|--|
| 13L-01 | <u>T. Vít</u>                         | Nové technologie a materiály posouvají možnosti 3D tisku   |
| 13L-02 | <u>M. Dudák</u>                       | Novinky v oblasti analýzy porézních materiálů sorpcí plynů   |
| 13L-03 | <u>J. Svoboda</u>                     | Využití spalovacích analyzátorů firmy Elementar pro stanovení obsahu CHNS+O v produktech depolymerizace plastů |
| 13L-04 | <u>J. Dolinová</u>                    | Nabídka laboratorních digestoří německého výrobce WALDNER  |
| 13L-05 | <u>D. Matoušek</u> , <u>J. Neuman</u> | FTIR-FPA a FTIR-QCL mikroskopie: Průlomové techniky v oblasti infračerveného zobrazování                       |
| 13L-06 | <u>P. Golkiewicz</u>                  | Is reaxys able to support research and teaching in all areas of chemistry?                                     |
| 13L-07 | <u>P. Barath</u>                      | METROHM ČESKÁ REPUBLIKA s.r.o., seznamte se!   |

---

**AUTORSKÝ REJSTŘÍK**

---

- Adamec S. 9L-02  
Adamec V. 12L-02  
Akusevich A. 3L-01  
Albarico G. 11L-01  
Almáši M. 9L-01, 9P-04  
Ambati R. 5P-01  
Andrys R. 4P-04, 4P-05, 4P-10, 4P-11  
Antal P. 3L-04  
Antal R. 4L-10  
Antalík M. 6P-03
- Babain V. A. 1P-02  
Báborská L. 12L-01  
Bajcura M. 11P-01  
Baluchová S. 1L-09, 2L-01  
Bande M. 11L-01  
Baránková D. 7P-01  
Barath P. 13L-07  
Baron D. 1L-08  
Barroso-Flores J. 3P-12  
Barták J. 8L-01  
Barták P. 1L-01, 1L-11, 1P-03  
Bartoňová N. 1L-05  
Bártová M. 2L-12  
Bashir S. 5L-01  
Bashta B. 9L-06, 9L-07, 9L-10, 9P-01  
Bavol D. 1P-02  
Bazel Ya. 1P-08  
Bazgier V. 4L-01, 5L-02  
Bednárek J. 9L-08  
Bednář P. 1L-01, 1L-11  
Benešík M. 1L-16  
Benešová V. 10L-01  
Beňovič P. 1P-01  
Béres T. 11L-02, 11P-02  
Berka K. 4L-01, 5L-02  
Berková H. 12L-02  
Bertók T. 1L-03  
Bettencourt Da Silva R. 1L-10  
Bhosale V. A. 4L-12  
Bikbashev A. 5L-03  
Bílková Z. 2L-03  
Bittner M. 12L-01  
Bláha L. 12L-01  
Bláhová E. 1L-02  
Bláhová L. 12L-01  
Bouzek K. PL-01  
Brodsky K. 11P-05  
Brooks B. 12L-01  
Brožek J. 10L-01  
Brulíková L. 4L-01, 4P-06  
Brus J. 9P-01  
Brůža Z. 4L-10  
Budka J. 2L-05  
Budovská M. 4L-02, 6L-03  
Budzák Š. 10P-04
- Buchlová T. 9L-05  
Bulgakova N. 2L-10  
Bůžek D. 9L-02, 9L-04
- Cankař P. 1L-11, 4P-12  
Cappoen D. 4L-01  
Čavar Zeljković S. 11L-02, 11P-02  
Cibulka R. 4L-03  
Cibulková Z. 8L-02, 8L-08  
Cídllová H. 7L-01  
Círka V. 4L-04  
Císařová I. 4L-12, 5P-02  
Cmorejová P. 3P-11  
Cuřínová P. 1P-07
- Čacho F. 1P-04  
Čambal P. 1L-09, 2L-01  
Černošková E. 3P-14  
Čižmár E. 3L-04  
Čtrnáctová H. 7L-02
- Dak M. 4L-01  
Daňhel A. 2P-01  
Daňo M. 12P-01  
Dědeček J. 9L-03  
Dehner J. 11P-02  
Dekoune S. 4L-06  
Demel J. 9L-02, 9L-04  
Descamps L. 5P-12  
Distler P. 1P-02, 7L-03  
Dobrovodský D. 2P-01  
Dolinová J. 13L-04  
Donkeng Dazie J. 2P-04  
Dračínský M. 4L-12  
Drahoš B. 3L-02, 3L-09, 3L-11  
Drozdová E. 8L-10  
Dubaj T. 8L-02, 8L-08  
Dudák M. 13L-02  
Dunlop D. 2L-07  
Dušek L. 10P-03  
Dvurečenskij A. 8L-05
- Ederer J. 3P-06  
Egberink R. J. M. 1P-02
- Fellner O. F. 3P-01, 3P-03  
Feltl T. 7L-09  
Filip J. 12P-02  
Fischer J. 1L-09  
Fischer R. 4L-09  
Fojta M. 6L-01, 6L-02  
Fresser L. 4P-11  
Fridrichová M. 5P-02  
Fuksová M. 11P-03
- Gábelová A. 1L-03
- Galamboš M. 12P-01  
Galusek D. 8L-05, 8L-06  
Gašparová M. 4L-05  
Gautam S. 11P-06  
Gavenda A. PL-02  
Gemeiner P. 9L-05, 9L-09, 9P-02  
Golkiewicz P. 13L-06  
Gonzalez G. 4L-11  
Grambličková L. 7P-02  
Grüner B. 1P-02  
Gucký A. 6P-01  
Gyepes R. 3P-08
- Haas M. 2L-04  
Habala L. 3P-02, 3P-13  
Hajdúchová Z. 10P-01  
Hájovská P. 5L-04  
Halaš P. 3P-03  
Hamuláková S. 6P-01  
Harmošová M. 3P-04  
Hassanpour S. 1L-08  
Hašková A. 9L-06  
Hatala M. 9L-05, 9L-09, 9P-02  
Havelková L. 9L-07  
Havlásek J. 11P-04  
Hedjazi M. 1P-08  
Heger Z. 4P-11  
Heise S. 12L-04  
Herchel R. 3L-04, 3P-01, 3P-03  
Herich P. 3P-09, 3P-12  
Hermann P. 3L-06  
Hermanová M. 6L-01, 6L-02  
Heydari A. 5L-04  
Hireš M. 1L-03  
Hlaváč J. PL-03  
Hodoň J. 4L-11  
Hofmanova T. 4P-05, 4P-10  
Hochvaldová L. 5P-03, 5P-13, 5P-19  
Holba M. 12L-01  
Homola T. 9L-09  
Honcová P. 8L-07  
Honziček J. 5P-08  
Horská J. 7L-01  
Hosnedlová B. 2L-11  
Houdkova M. 11L-01  
Hrabovský J. 2L-10  
Hrdlička V. 1L-07  
Hrubá J. 7L-07  
Hubáček J. 10L-02  
Hupian M. 12P-01
- Chasák J. 4L-01  
Chevallier M. 5P-02  
Chmela V. 4L-06  
Choińska-Młynarczyk M. K. 1L-07, 1P-06

- Chrenko D. 4P-01  
Chylii M. 3P-05, 3P-10
- Ilavská M. 3L-07  
Ilnycka R. 4P-02
- Jabczun M. 4L-08  
Jahn U. 4L-06  
Jančálek J. 2L-02, 5L-05  
Jančovičová V. 5L-04  
Jané E. 1L-03  
Jankech T. 1L-12  
Janoš P. 3P-06  
Janovec L. 6L-03, 6P-02  
Jaques V. 5P-17  
Jedinák L. 4P-12  
Jelínek P. 3L-03  
Jelšíková K. 1L-02  
Jemelka J. 2L-02, 5L-05  
Jerga R. 1L-01, 1L-11, 1P-03  
Jerigová M. 5P-04, 5P-10, 5P-16  
Jirák D. 5L-12  
Jirgllová H. 9L-03  
John J. 1P-02  
Jolivalc C. 7L-08  
Juračka J. 5L-02  
Jurčíková J. 1L-16  
Jurišová J. 10P-02  
Jůza J. 5L-06
- Kabaňová N. 4P-03  
Kaczorová D. 11L-02  
Kaderavkova A. 3P-05, 3P-10  
Kaiser J. 5P-17  
Kalousková R. 10L-01  
Káňová K. 11P-05  
Karpíšková L. 8L-15  
Kastrati G. 2L-03  
Katrlik J. 1L-03  
Kawuloková M. 8L-10  
Kazmarová H. 12L-03  
Kello M. 3P-04, 3P-07, 3P-08  
Kendrová D. 4L-05  
Kepeňová M. 3P-07  
Kinart Z. 5L-07  
Kinnertová E. 8L-03  
Kizek R. 2L-11  
Klement R. 3L-01, 8L-06  
Klíma J. 2L-05, 2L-06  
Klouček P. 11L-03  
Klouda J. 1L-02  
Klučáková M. 5P-17  
Knittelova K. 4P-04  
Knotek P. 3P-14  
Köböllová K. 12L-02  
Kohoutova Z. 4P-05  
Kokoška L. 11L-01  
Koláčná L. 2L-02  
Kolar M. 5P-13, 5P-19  
Kolářik M. 4P-06  
Kolaříková V. 4P-07  
Kolikoška V. 1L-07
- Kolská Z. 5L-08, 5L-11  
Korcová J. 3P-09, 3P-12  
Korecká L. 2L-03  
Korenko M. 5P-05  
Kornas A. 9L-03  
Kořená L. 8L-04  
Košutová N. 1L-03  
Kotek J. 3L-06  
Kotlík B. 12L-03  
Kotrle K. 3L-04  
Kotuhová K. 5P-04  
Koudelka L. 3L-05  
Koupilová N. 7L-08  
Kovalová M. 4P-09  
Kovarik Z. 4P-10  
Kovářová Z. 5P-06  
Koy M. 5P-07  
Kozics K. 1L-03  
Kožurková M. 6P-01, 6P-02  
Krajčovičová S. 4P-09  
Králová P. 4L-07, 4P-16  
Kramplová Z. 1L-04  
Krátký M. 7L-04  
Kratochvíl B. 2P-02  
Krejčová A. 12L-04  
Krishnan D. 5P-05  
Kristek J. 4P-08  
Krištof M. 10P-04  
Krochtová K. 6P-02  
Kropáček J. 7P-03  
Kroupa A. 8L-15  
Kroutil O. 5P-14  
Krupička M. 4L-03  
Krupková A. 1P-07  
Krupková O. 10P-03  
Kryštof V. 4P-09  
Křapáček R. 7P-01  
Křen V. 1P-04, 4P-07  
Křesalová K. 1L-16  
Kříženecká S. 1L-05  
Kubeš F. 5P-15  
Kubiček V. 2L-02, 3L-06  
Kubíková M. 5L-03, 5P-06  
Kudličková Z. 6P-04  
Kuchár J. 3L-07  
Kuna P. 10P-04  
Kuneš J. 4L-10  
Kuran P. 10L-02  
Kurka M. 2L-02, 5L-05  
Kutálek P. 3P-14  
Kutová A. 5L-10  
Kuzderová G. 3P-08  
Kuzielová E. 10P-01, 10P-02  
Kvítek L. 5L-03, 5P-03, 5P-06, 5P-13, 5P-15, 5P-19
- Lacík I. 5L-04  
Lacmanova V. 5L-10  
Lang J. 9L-08  
Lang K. 9L-02  
Langmaier J. 1L-07  
Lapčík L. 11P-06
- Lapčíková B. 11P-06  
Lazar P. 5L-09  
Lederer J. 10L-02  
Lemishka M. 9L-03  
Lemr K. 1L-06  
Leskovská J. 3P-12  
Lev J. 12L-01  
Li P. 11P-06  
Li X. 2L-08  
Lintnerová L. 3P-09  
Liška A. 2L-04, 2L-05, 2L-06, 2L-07, 2P-03  
Litecká M. 3P-07  
Loghina L. 3P-05, 3P-10  
Londesborough M. G. S. 9L-04  
Lorenc D. 5P-07, 5P-09, 5P-10  
Lorencová I. 7L-05  
Lubal P. 3L-06  
Ludvík J. 2L-02, 2L-04, 2L-05, 2L-06, 2L-07, 2P-03, 2P-04  
Lukáč M. 11P-01  
Luňáček J. 3P-06  
Lupínková S. 5L-08  
Lušpai K. 2L-06  
Lyutakov O. 5L-11
- Maďar M. 2L-02  
Mach R. 5L-09  
Majerová M. 8L-05  
Málek J. 8L-07  
Maliarová M. 1L-12  
Malinak D. 4P-04, 4P-05, 4P-10, 4P-11  
Malinová L. 10L-01  
Mandal S. 1L-09  
Maňka J. 8L-05  
Mareš J. 1P-07  
Martinát D. 5L-02  
März M. 4L-03  
Masác J. 1P-04  
Masaryk L. 3L-10  
Mašek T. 4L-06  
Matějka P. 1P-07  
Matíková Mařarová M. 3P-11  
Matoušek D. 13L-05  
Matusková E. 5P-08  
Matvieiev O. 1L-13, 1P-05  
Matysová E. 8L-12  
Melich L. 2L-11  
Melichová Z. 12L-05  
Metvieiev O. 1L-04  
Michalcová A. 5L-10, 2P-02  
Michalík J. 8L-06  
Michálková D. 5L-06  
Michalková R. 4L-02  
Míka L. 7L-08  
Miklášová N. 3P-12  
Mikulová N. 1L-11  
Mikysek T. 2L-12  
Mindová M. 1P-02  
Míšek J. 4L-08  
Mišíková F. 12L-04  
Mital'ová K. 3P-16

- Mlekodaj K. 9L-03  
 Mojžiš J. 4L-02  
 Montagne L. 3L-05  
 Mortet V. 2L-10  
 Moša M. 1L-16  
 Mošner P. 3L-05  
 Mucha M. 7P-03  
 Musilek K. 4P-04, 4P-05, 4P-10, 4P-11
- Nádvorníková J. 1L-01  
 Navrátil T. 1L-07, 1P-06  
 Ndayaie D. 3L-09  
 Nemeč I. 3L-04, 3P-01, 3P-03  
 Němec P. 5P-02  
 Neuman J. 13L-05  
 Nevoralová M. 5L-06  
 Nevrlka F. 4P-13  
 Nguyenova H. Y. 5L-10  
 Nguyenová T. D. 1L-08  
 Niaei N. 1L-08  
 Nigríni M. 4L-12  
 Nosek V. 4L-08  
 Noskovičová E. 5P-07, 5P-09, 5P-10  
 Novák M. 2L-12  
 Novák P. 5L-12  
 Nováková J. 5P-10  
 Novotný L. 12L-05  
 Novotný R. 10P-02  
 Nytká M. 1L-06
- Oboňová B. 3P-02, 3P-13  
 Olajoš J. 6P-03  
 Olejníková P. 3P-08  
 Olšovský M. 10P-04  
 Opekar F. 1L-15  
 Orava J. 3L-08  
 Orság J. 5P-09, 5P-11  
 Orvoš J. 4L-09  
 Ostruszka R. 5L-12  
 Otyepková E. 5P-12  
 Outlá M. 6L-02
- Paidar M. 1P-01  
 Pálka K. 2L-02, 5L-05  
 Panacek D. 5P-13, 5P-19  
 Panáček A. 5P-03, 5P-06, 5P-13, 5P-15, 5P-19  
 Parchovianská I. 3L-01  
 Parchovianský M. 3L-01  
 Parma P. 12P-02  
 Pavličková M. 9L-05, 9L-09, 9P-02  
 Pazderová L. 3L-06  
 Pažitná L. 1L-03  
 Pecušová B. 8L-06  
 Pedretti A. 7L-08  
 Pekař M. 5P-17, 7P-04  
 Perdomo S. 4L-10  
 Peřina M. 4P-09  
 Petr J. 1L-08  
 Petráňová K. 1L-02  
 Petrásková L. 4P-07, 11P-05
- Petrželová K. 7L-06  
 Pichon C. 3L-11  
 Pilný P. 8L-01  
 Pirola C. 7L-08  
 Pisárčík M. 11P-01  
 Pivoňková H. 6L-01, 6L-02  
 Plaček V. 8L-13  
 Plačková L. 5P-14  
 Plecho K. 5P-03  
 Pluháček T. 1L-08  
 Podhájský J. 2L-11  
 Pokluda A. 4L-03  
 Polanská A. 1L-16  
 Polášek D. 12L-01  
 Popelka T. 11P-01  
 Pospíšil J. 4P-01, 4P-02, 4P-08, 4P-14, 4P-15, 11P-03, 12L-02  
 Pospíšil P. 7L-07  
 Pospíšilová L. 4P-16  
 Potočník I. 3P-04, 3P-07  
 Pour M. 4L-10  
 Pražáková M. 3L-09  
 Prener L. 4L-06  
 Prchal L. 4P-05, 4P-10  
 Prchalova E. 4P-11  
 Princík D. 9P-03  
 Prnová A. 3L-01, 8L-05, 8L-06  
 Pucek R. 5P-06, 5P-15, 5P-18  
 Průša F. 5L-10  
 Průša R. 2L-11  
 Předota M. 5P-14  
 Psotka M. 4P-10  
 Pulpánová D. 5L-12  
 Purdešová A. 1L-04, 1L-12, 1P-01
- Radová D. 6P-04  
 Rendošová M. 3P-08  
 Revel M. 12L-04  
 Rychlý J. 8L-12
- Řepka D. 11P-06  
 Řezníčková A. 5L-10  
 Řezníčková E. 4P-09
- Sabolová D. 3P-08, 6P-04  
 Sadílková K. 7L-06  
 Salvadori K. 1P-07  
 Samolřová E. 3L-07, 3P-04, 3P-11  
 Samsonova E. 3P-14  
 Sarakhman O. 9P-02  
 Sarvaš D. 5P-16  
 Sedláček J. 9L-06, 9L-07, 9L-10, 9P-01  
 Sekerová L. 9L-10  
 Shánělová J. 8L-07  
 Scholtzová E. 5L-01  
 Schwarz J. 3P-14  
 Schwarzová-Pecková K. 1L-02, 1L-09, 2L-01, 2L-10  
 Šimkovičová K. 5P-06  
 Sklenák Š. 9L-03  
 Skok A. 1P-08  
 Skopalová J. 1L-01, 1L-02, 1L-07, 1L-11, 1P-03, 1P-06
- Sládek J. 2L-10  
 Slaný M. 10P-01  
 Slepíčka P. 5L-10  
 Slovák V. 8L-03, 8L-04, 8L-09, 8L-14  
 Smetana B. 8L-10  
 Sokol J. 1L-12, 1P-01, 9P-01  
 Sokol R. 4P-12  
 Sokolohorský A. 10L-01  
 Sokolová R. 2L-12  
 Sorokina S. 8L-10  
 Soural M. 4L-07, 4P-09, 4P-16  
 Sovová S. 6P-04  
 Starý Z. 5L-06  
 Stibůrek J. 5P-02  
 Storchmannová K. 5L-02  
 Stránělová E. 2P-02  
 Strašák T. 1P-07  
 Strnad M. 4L-11, 11L-04  
 Stryšovský T. 5L-03, 5P-06  
 Stýskala J. 1L-11, 4P-13  
 Sumczynski D. 11P-06  
 Sutter J.-P. 3L-11  
 Svoboda J. 2L-07, 13L-03  
 Svobodova J. 4P-05, 4P-10, 4P-11  
 Sýs M. 2L-12  
 Sztula A. 3P-15
- Šafařík I. 3P-06  
 Šafránková H. 1L-05  
 Šalítrůš I. 1L-05  
 Šebela M. 4L-01  
 Šebesta J. 1P-02  
 Šelešovská R. 1L-04, 1L-07, 1L-13, 1P-05  
 Šembera J. 12P-02  
 Šimko F. 5P-05  
 Šimková L. 2L-06, 2L-07  
 Šimon P. 8L-02, 8L-08  
 Šišková K. 5L-12  
 Škoch K. 9L-04  
 Škorná P. 5L-01  
 Škrátek M. 8L-05  
 Šlachtová V. 4L-01  
 Šlang S. 2L-02, 5L-05  
 Šmejkal P. 7L-08, 7L-09  
 Šopíková T. 1L-16  
 Šorm D. 9L-10  
 Špaček J. 6L-02  
 Špitálský Z. 8L-12  
 Šrejber M. 5L-02  
 Štarha P. 3L-10  
 Šťastná Červenková L. 1P-07  
 Šťastná N. 4P-14  
 Štefelová N. 11P-02  
 Štefková B. 5P-15  
 Štolbová D. 1L-01  
 Šulcová P. 8L-11  
 Šuránek M. 12L-06  
 Švandová V. 7L-07  
 Švecová P. 1L-08  
 Švorc L. 9P-02

- Švorčík V. 5L-08, 5L-10, 5L-11  
Tabor E. 9L-03  
Takáč P. 3P-12  
Tarkowská D. 11L-04  
Tarkowski P. 11L-02, 11L-05, 11P-02  
Taššik J. 6P-02  
Taylor A. 1L-09, 2L-01, 2L-10  
Teplá M. 7L-10  
Tkáč J. 1L-03  
Tkačíková H. 7P-05  
Tokárová Z. 4P-03, 4L-05  
Tolaszová J. 1L-05  
Tomaš R. 5L-07  
Tóth É. 3L-09  
Tranová L. 4P-13  
Trčková K. 7P-01, 7P-05  
Trizna L. 6L-03  
Trnková L. 2L-08, 2P-03  
Trojanská T. 11L-04  
Třísková I. 2L-08, 2P-03  
Tulin E. 11L-01  
Tůma P. 1L-14, 1L-15
- Urban J. 2P-04  
Urban M. 4L-11  
Urbanová K. 11L-01
- Vacek J. 6L-04  
Valenta T. 11P-06  
Valentová J. 3P-02, 3P-09, 3P-12
- Valentová K. 11L-06, 4P-07, 11P-05  
Valerián L. PL-07  
Válková L. 5P-03  
Valúchová J. 8L-06  
Van Drimmelen Ch. 12L-04  
Vargová Z. 3P-08  
Včeláková M. 8L-01  
Vecerova R. 5P-13, 5P-19  
Velič D. 5P-10, 5P-11, 5P-16  
Verboom W. 1P-02  
Veselská V. 12P-02  
Veselý J. 4L-12  
Veteška P. 9L-05  
Vida J. 9L-09  
Víglaský V. 4L-02, 6L-03  
Viglašová E. 12P-01  
Viktorová J. 11L-06  
Vilková M. 3P-11  
Vinklárek J. 5P-08  
Vishnikin A. 1P-08  
Vít T. 13L-01  
Vítková K. 1L-16  
Vlček M. 2L-02, 5L-05, 3P-05, 3P-10  
Vojs M. 1L-04, 1L-13  
Vranovičová B. 3P-16  
Vrba J. 11P-04  
Vrbková E. 9L-06, 9L-10  
Vykydalová A. 8L-12  
Vyskočil V. PL-06, 1L-17  
Vyskočilová E. 9L-06, 9L-10  
Vysloužilová D. 4P-15
- Williams O. 1L-09
- Zahradníková E. 3L-11  
Zajacová Cechová M. 1L-11  
Zálešák F. 4P-14  
Zatloukalová M. 2L-09  
Zauška E. 9P-04  
Zavadil M. 8L-13  
Závodská P. 5P-17  
Zeleňák V. 9P-03  
Zelenka T. 9L-11  
Zelenková G. 8L-14  
Zelenský M. 1L-09, 2L-10  
Zelinka M. 2P-01  
Zikmund T. 5P-17  
Žitová K. 9L-06  
Zlá S. 8L-10  
Zlámalová V. 9L-02  
Zobač O. 8L-15  
Zorbaz T. 4P-10  
Žubova E. 4L-03  
Zukerstein M. 2L-10
- Žáková K. 4P-16  
Žemlička M. 10P-01, 10P-02  
Životský O. 3P-06  
Žižlavská A. 5P-18



## OBSAH

|                      |     |
|----------------------|-----|
| Úvodník              | 182 |
| Plenární přednášky   | 183 |
| Sekce 1 – přednášky  | 189 |
| Sekce 1 – postery    | 198 |
| Sekce 2 – přednášky  | 202 |
| Sekce 2 – postery    | 208 |
| Sekce 3 – přednášky  | 210 |
| Sekce 3 – postery    | 216 |
| Sekce 4 – přednášky  | 224 |
| Sekce 4 – postery    | 230 |
| Sekce 5 – přednášky  | 238 |
| Sekce 5 – postery    | 244 |
| Sekce 6 – přednášky  | 254 |
| Sekce 6 – postery    | 256 |
| Sekce 7 – přednášky  | 258 |
| Sekce 7 – postery    | 265 |
| Sekce 8 – přednášky  | 268 |
| Sekce 9 – přednášky  | 275 |
| Sekce 9 – postery    | 281 |
| Sekce 10 – přednášky | 283 |
| Sekce 10 – postery   | 284 |
| Sekce 11 – přednášky | 286 |
| Sekce 11 – postery   | 289 |
| Sekce 12 – přednášky | 292 |
| Sekce 12 – postery   | 295 |
| Sekce 13 – přednášky | 296 |
| Seznam příspěvků     | 299 |
| Autorský rejstřík    | 310 |

## CONTENTS

|                       |     |
|-----------------------|-----|
| Editorial             | 182 |
| Plenary Lectures      | 183 |
| Section 1 – Lectures  | 189 |
| Section 1 – Posters   | 198 |
| Section 2 – Lectures  | 202 |
| Section 2 – Posters   | 208 |
| Section 3 – Lectures  | 210 |
| Section 3 – Posters   | 216 |
| Section 4 – Lectures  | 224 |
| Section 4 – Posters   | 230 |
| Section 5 – Lectures  | 238 |
| Section 5 – Posters   | 244 |
| Section 6 – Lectures  | 254 |
| Section 6 – Posters   | 256 |
| Section 7 – Lectures  | 258 |
| Section 7 – Posters   | 265 |
| Section 8 – Lectures  | 268 |
| Section 9 – Lectures  | 275 |
| Section 9 – Posters   | 281 |
| Section 10 – Lectures | 283 |
| Section 10 – Posters  | 284 |
| Section 11 – Lectures | 286 |
| Section 11 – Posters  | 289 |
| Section 12 – Lectures | 292 |
| Section 12 – Posters  | 295 |
| Section 13 – Lectures | 296 |
| Contents              | 299 |
| Author's Index        | 310 |

**CZECH CHEMICAL SOCIETY SYMPOSIUM SERIES • ročník/volume 20 (2022), čís./no. 4 • 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: V. Vyskočil • REDAKTORI/ EDITORS: J. Barek, E. Benešová, P. Drašar, P. Holý, P. Chuchvalec, M. Jurásek, Z. Kolská, B. Kratochvíl, J. Masák, J. Podešva, P. Šmejkal; Bulletin: P. Drašar; Webové stránky: V. Vyskočil • TECHNICKÁ REDAKTORKA/EDITORIAL ASSISTANT: R. Řápková • Redakce čísla (ISSUE EDITOR) M. Soural, P. Tarkowski • 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, e-mail: chem.listy@csvts.cz • PLNÁ VERZE NA INTERNETU/FULL VERSION ON URL: <http://www.ccsss.cz> • TISK: TG TISK s.r.o., 5. května 1010, 563 01 Lanškroun • SAZBA, ZLOM: ČSCH, Chemické listy • Copyright © 2022 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 24.8.2022.**

## Tinius Olsen



**Olsen**



- Univerzální zkušební stroje pro mechanické zkoušky plastů a kompozitních materiálů
- Zkoušky v tahu, tlaku, ohybu



## 3P Micro



Characterization of  
particles • powders • pores



- Automatický analyzátor adsorpce
- BET a velikost pórů 0,4-400 nm
- Až 3 nezávislé měřící a 4 odplyň. stanice

### + 3x cryoTune

- Ekonomický kryostat pro 82-323 K
- kompatibilní s dalšími adsorpčními analyzátory



## Elementar



- Analyzátory pro organickou elementární analýzu vario cube (C, H, N, S) a rapid OXY cube (O)
- Pevné a kapalné vzorky klasických fosilních paliv, plastů a jejich pyrolyzních produktů



## XOS Petra MAX



- Více prvkový rentgenový analyzátor
- Stanovení S, P, Cl, K, Ca, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu a Zn
- Uhlovodíkové a vodné matrice, biopaliva, katalyzátory



74. sjezd  
chemiků

Navštivte nás na 74. sjezdu chemiků. Budeme tam!  
Za náš tým nás představí Ing. Tomáš Kotrla, tel. +420 734 275 307



**BLOCK**<sup>®</sup>  
Isolator Technology

Jsme výrobce a dodavatel izolátorové technologie, zařízení pro čisté prostory a nerezového nábytku. V této oblasti působíme od roku 2004. Sídlíme v České republice, kde máme vlastní špičkové odborníky, nositele know-how a vlastní výrobu. Nabízíme jak standardní řady výrobků, tak zakázkovou výrobu podle konkrétních požadavků zákazníka.

Jsme členem mezinárodní skupiny BLOCK<sup>®</sup>, která sdružuje firmy cílící své komplexní služby, projekty a sofistikované dodávky převážně do oblasti čistých prostor.

[www.blocktechnology.cz](http://www.blocktechnology.cz)



✕ Köttermann

Naše sesterská skupina Köttermann navrhuje a vyrábí laboratorní nábytek a zařízení již od roku 1946. Veškeré tyto produkty jsou vyráběny v Německu. Společnost BLOCK Technology a.s. je distributorem výrobků Köttermann pro Česko a Slovensko.



[www.koettermann.cz](http://www.koettermann.cz)





# POJĎTE S NÁMI TVOŘIT BUDOUCNOST

## **Výzkum a vývoj v oblasti farmacie, kosmetiky a výživy.**

Contipro je ryze česká farmaceutická společnost s obratem přes 1 mld. Kč, která věnuje většinu svého úsilí výzkumu a vývoji inovativních materiálů a produktů založených především na kyselině hyaluronové a jejích derivátech. Contipro patří mezi největší výrobce kyseliny hyaluronové na světě. Tato přirozená multifunkční látka skrývá obrovský potenciál. Ve špičkově vybavených laboratořích Contipra ho objevuje více než 120 pracovníků.

- ✦ Aplikovaný výzkum v oblasti buněčné biologie
- ✦ Certifikovaná analytická laboratoř
- ✦ Modifikace polymerů
- ✦ Vývoj aktivních látek pro farmacii a kosmetiku
- ✦ Nanovlákná, mikrovlákná a další inovativní formy biopolymerů
- ✦ Vlastní vývoj specializovaných přístrojů

Hledáme chemiky, biology i fyziky. Podívejte se na přehled volných pozic a [www.contipro.cz/kariera](http://www.contipro.cz/kariera)



# Měření, regulace, detekce a rozvody plynů a kapalin

přesné hmotnostní  
průtokoměry  
a regulátory průtoku

  
**Bronkhorst**  
[dex.cz/bronkhorst](http://dex.cz/bronkhorst)



vysoce citlivé sondy pro  
měření koncentrace  
CO<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>

**VAISALA**  
[dex.cz/vaisala](http://dex.cz/vaisala)



ventily a šroubení, včetně  
ultračistého provedení,  
hadice a filtry

  
**HAM-LET**  
ADVANCED CONTROL TECHNOLOGY  
[dex.cz/hamlet](http://dex.cz/hamlet)



# DEX<sup>®</sup>

[www.dex.cz](http://www.dex.cz)



Jistota v kvalitě

## Software pro jednodušší řízení laboratoře a řízení jakosti

Řešení pro farmaceutické, chemické a potravinářské společnosti a ISO 17025 akreditované laboratoře nabízíme ve třech verzích...



### On premise

Vysoce-konfigurovatelné řešení vše v jednom, tj. LIMS, QMS, DMS a statistika



### Cloud

Před-konfigurované řešení v cloudu, založené na EffiChem best practices



### SaaS

Validované, rychle zprovoznitelné, cenově dostupné řešení na EffiChem IT infrastruktuře



### QMS/DMS

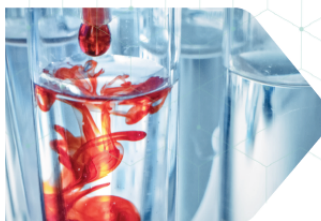
#### Systém řízení jakosti, dokumentace a školení

Řízené dokumenty, záznamy o školení, odchylky, CAPA, stížnosti, audit, řízení rizik, a další dle požadavků.

### LIMS

#### Laboratorní informační a manažerský systém

Vzorky, specifikace, výsledky, měřidla, referenční standardy, chemikálie a další.



### STAT

#### Statistické vyhodnocování dat

Validace metod, nejistoty, regulační diagramy, kalibrace, mezilaboratorní porovnání.

### Hlavní benefity našeho řešení

Integrita dat, Bezpapírová evidence, Automatizace a Individuální přístup.

EffiChem, s.r.o.,

Purkyňova 649/127, Brno 612 00, Česká republika  
email: [effichem@effichem.cz](mailto:effichem@effichem.cz), [www.effichem.cz](http://www.effichem.cz)

# Laboratorní technologie a nábytek

# WALDNER



Moderní digestoře  
Servisní moduly pro rozvody médií a elektřiny  
Unikátní prvky modulárního laboratorního nábytku Scala

## HPST WEBINÁŘE

### Záznamy českých webinářů

#### Plánování laboratoří

III. Projektování laboratoří a přepážkové systémy

#### Laboratorní nábytek

II. Servisní panely, laboratorní stoly a nábytek

#### Laboratorní digestoře

I. Laboratorní digestoře a prvky pro odtah vzduchu

IV. Novinky v nabídce digestoří a certifikace produktů Waldner

V. Ovladače digestoří

VI. Servisní prvky digestoří

Laboratorní digestoře v nabídce výrobce Waldner

Laboratorní digestoře - normativy, testy a měření výrobce Waldner

Přednášející: Jindřiška Dolinová

<https://eshop.labicom.cz/webinare/laboratorni-nabytek-waldner>

Odborné informace  
na jednom místě!



Pro více informací kontaktujte:

Jindřiška Dolinová, +420 734 705 713, [jindriska.dolinova@hpst.cz](mailto:jindriska.dolinova@hpst.cz)

 HPST



ASTRA

ARION

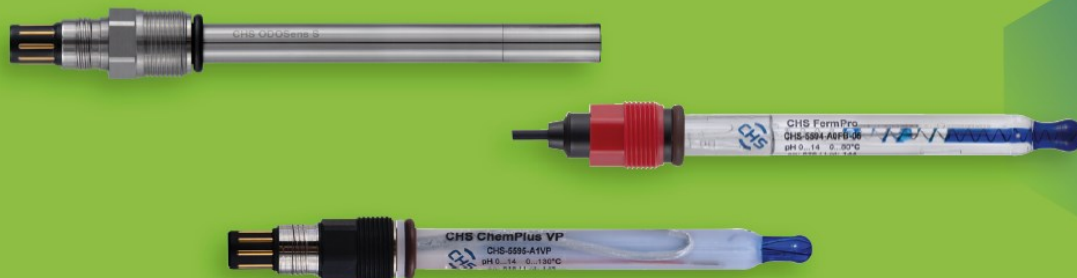
CHROM-SHELL

MET-AMINO

LIDN

SPE-EXTRA

ARION



> LIQUID MEASUREMENTS

> FLASH/TLC-MS SYSTEMS



[www.arionchromatography.com](http://www.arionchromatography.com)

> CHROMATOGRAPHY PRODUCTS



[www.chromservis.eu](http://www.chromservis.eu)





# lach:ner

Lach-Ner is producer and supplier of pure and laboratory chemicals with a strong distribution network, especially in Central and Eastern Europe.

We offer a wide range of basic laboratory chemicals. For the completeness of the assortment, we also offer a portfolio of our partners:



Alfa Aesar



tel.: +420 315 618 315  
e-mail: [info@lach-ner.com](mailto:info@lach-ner.com)  
[www.lach-ner.com](http://www.lach-ner.com)

MERCK

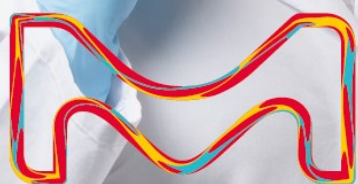
# feel sciencesational

## Bolder chemistry to empower your discovery

**Scientific discovery takes courage, curiosity, competence and, often, collaboration. That's why, besides empowering your work through innovative products, we also collaborate closely to support your progress.**

Every year, we partner with over 100 academic and industry researchers globally. We help fast-track breakthroughs through partnerships with the brightest minds in chemistry – and highlight these new technologies on the web and in our publications. Become part of the network by talking to us as we support the chemistry events that are important to you.

Discover how we help you to stay sciencesational on:  
**[SigmaAldrich.com/sciencesational](https://SigmaAldrich.com/sciencesational)**



The life science business of Merck operates as MilliporeSigma in the U.S. and Canada.

**Sigma-Aldrich®**  
Lab & Production Materials

# MIRA XTR DS

RUČNÍ RAMANŮV SPEKTROMETR



## Evoluce identifikace drog, výbušnin a mnoho dalšího - bez fluorescence

Mira XTR DS kombinuje menší velikost, vyšší rozlišení a nižší spotřebu energie 785nm Ramanova systému s pokročilými patentovanými algoritmy pro eXTRakci Ramanových dat i z fluorescenčních vzorků – není potřeba 1064nm laser.

- 785nm laser pro bezpečné měření reaktivních vzorků
- Vyšší citlivost a rozlišení v menším měřítku než u 1064nm přístrojů
- Největší knihovna spekter pro ruční přístroj – více než **20 000 spekter**
- Možnost použití SERS senzorů pro identifikaci látek o stopové **ppb koncentraci**
- Bezkontaktní měření na vzdálenost až **2 metry s auto-fokusací vzorku**
- Široké portfolio příslušenství pro měření kapalin a pevných látek

Požádejte o bezplatné testování přístroje na vašem pracovišti na [office@metrohm.cz](mailto:office@metrohm.cz)



# NETZSCH

Proven Excellence.

PREPARE  
+ MEASURE  
+ CHARACTERIZE

---

RESULTS  
+ NETZSCH

---

EXCEPTIONAL  
RESULTS

---

---

NETZSCH Analyzing & Testing  
[www.netzsch.com/ta](http://www.netzsch.com/ta)

REFRACTORY TESTING

HYPHENATED TECHNIQUES

SEEBECK COEFFICIENT &  
ELECTRICAL CONDUCTIVITY

THERMAL DIFFUSIVITY &  
CONDUCTIVITY

FIRE TESTING

DYNAMIC MECHANICAL  
THERMAL ANALYSIS

RHEOLOGY

DIFFERENTIAL SCANNING  
CALORIMETRY

SIMULTANEOUS THERMO-  
GRAVIMETRY-DIFFERENTIAL  
SCANNING CALORIMETRY

THERMOGRAVIMETRIC  
ANALYSIS

DILATOMETRY

DIELECTRIC ANALYSIS

THERMOMECHANICAL  
ANALYSIS

MULTIPLE MODE  
CALORIMETRY

ACCELERATING RATE  
CALORIMETRY



# Nicolet RaptIR: Dravec ve světě FT-IR mikroskopie

... Ostrý zrak...

... Přesné zamíření...

... Rychlý zásah...



**Novinka  
2022!**

FT-IR mikroskop Nicolet RaptIR je navržen tak, aby byl přesný a rychlý jako opravdový dravec. Tím vám pomůže zefektivnit analýzu vzorků: použitelné výsledky budete mít v rukou mnohem rychleji než se srovnatelnými systémy. Najít odpověď, kterou potřebujete, je často zdouhavý a obtížný proces a jakýkoli ušetřený čas znamená obrovský rozdíl na cestě za řešením vašeho problému. Tento FT-IR mikroskop se špičkovými měřicími parametry je vhodný nejen pro všechny uživatele, ale také napříč všemi průmyslovými a vědeckými odvětvími: najde své uplatnění v oblastech tak různorodých, jako je farmacie, životní prostředí, forenzní věda, restaurování umění, polymery či výzkum materiálů.



**NICOLET CZ**  
MOLECULAR SPECTROSCOPY



[www.nicoletcz.cz](http://www.nicoletcz.cz)

+420 272 760 432

# POHLÉDNĚTE NA SVĚT NAŠÍ OPTIKOU



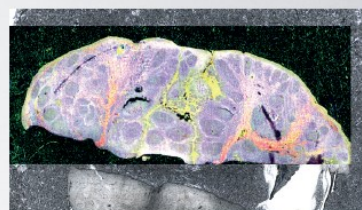
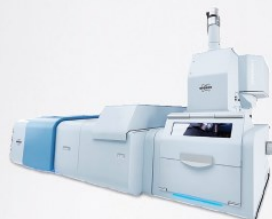
FTIR A RAMANOVY SPEKTROMETRY A MIKROSKOPY | NIR A PROCESNÍ SPEKTROMETRY | ANALYZÁTORY PLYNŮ

## Přehled nejzajímavějších funkcí a technologií:

### IČ zobrazování v reálném čase (mikroskop HYPERION II)

- Revoluce v IČ mikroskopii
- FTIR-QCL technologie (kvantový kaskádový laser)
- Akvizice 90.000 spekter simultánně!
- Prostorové rozlišení až 0.2  $\mu\text{m}$

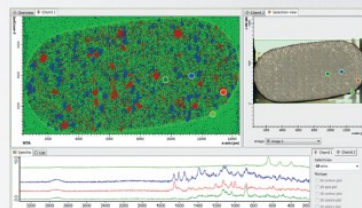
FTIR-QCL imaging vzorku tkáně



### Hybridní Ramanův mikroskop (SENTERRA II)

- Kombinace disperzní a FT-Ramanovy spektrometrie na 1 zařízení
- Kombinace až 4 různých laserů
- Rychlé mapování až 100 spekter/s

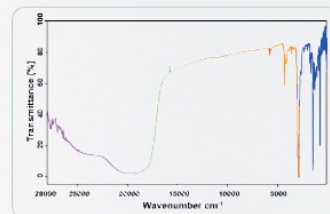
Mapování tablety Ramanovým mikroskopem SENTERRA II



### Flexibilní multispektrální analýza (spektrometr INVENIO-X)

- Kombinace až 3 dělčů, 4 zdrojů a 7 detektorů na jednom zařízení
- Automatizované měření a přepínání mezi komponentami v regionech UV, VIS, NIR, MIR, FIR
- Automatické spojování spekter z různých regionů

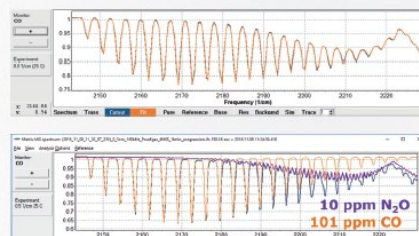
FTIR spektrometr INVENIO-X a multispektrální měření



### Bezkalibrační analýza plynů (analyzátoři MATRIX-MG a OMEGA)

- Unikátní software OPUS GA s algoritmem nelineárního fitování
- Přesná kvantifikace plynů na základě 1 referenčního spektra
- Referenční spektra 300 nejčastějších plynů součástí přístroje

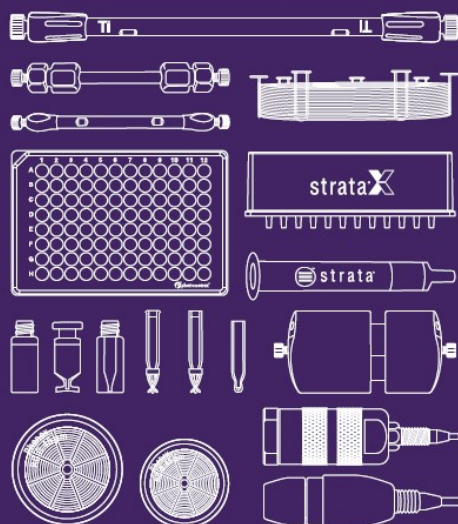
Analýzátor OMEGA a bezkalibrační kvantifikace CO



[www.optikinstrument.cz](http://www.optikinstrument.cz)

Vaše oblíbené chromatografické produkty v České republice a na Slovensku nyní přímo od Phenomenex!

# Projděte si celou nabídku našich chromatografických produktů.



Pro cenovou nabídku nás kontaktujte ještě dnes.

Phenomenex  
c/o: Beckman Coulter  
Murmanská 1475/4, 10000 Praha 10, Česká republika  
Tel: +420 272 017 077 • Fax: +420 274 021 210  
Česká republika: cz-info@phenomenex.com  
Slovenská republika: sk-info@phenomenex.com

PA76490421\_CZ

Prozkoumejte naše technické tipy v češtině, přeložené technické poznámky, náš chat v češtině a mnohem víc.



[www.phenomenex.com/21-chromatography-resources-cz](http://www.phenomenex.com/21-chromatography-resources-cz)

phenomenex®

# Rukavice SHIELD Scientific

3 různé odolnosti

2 vrstvy materiálu

1 značka kvality



**SHIELDskin CHEM™  
NEO NITRILE™ 300**

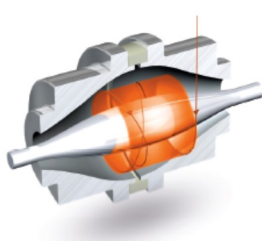
**SHIELDskin  
ORANGE NITRILE™**

**ecoSHIELD™  
Eco Nitrile PF 250**

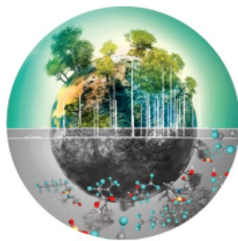


# Pragolab

Špičkové služby a přístroje z oboru analytické chemie pro český a slovenský trh.



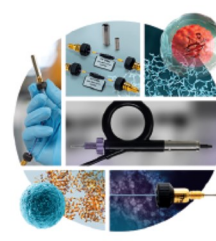
**HMOTNOSTNÍ  
SPEKTROMETRIE**



**SEPARAČNÍ TECHNIKY**



**SW CHROMELEON**



**SPOTŘEBNÍ MATERIÁL**

LC-MS IC IC-MS iontová chromatografie kolony spojovací materiál plynová chromatografie ICP-OES příprava vzorku elementární analýza elektrochemie testery akumulátorů EIS SEA analýza povrchů separační techniky DVS reologie atomová spektroskopie GC temperace kapalinová chromatografie UV-VIS spektrometrie GC-MS lyofilizátory konfokál B.E.T. lims mikroskopie materiálografie metalografie technická čistota optická mikroskopie elektronová mikroskopie koncentrátoři CHNSO analýza AAS analýza částic HPLC hmotnostní spektrometrie centrifugy extruze ICP-MS servis AIR monitoring XPS widefield textura spotřební materiál NMR DLS automatické dávkování iGC TOC analýza RVC stopped-flow cirkulární dichroismus XRF XRD

[www.pragolab.cz](http://www.pragolab.cz)

[pragolab@pragolab.cz](mailto:pragolab@pragolab.cz)

# Reaxys®

## AI-enhanced predictive retrosynthesis

### Fast. Robust. Easy to use.



#### Superior technology

- 3 neural networks
- Monte Carlo tree search
- Results in 10 minutes



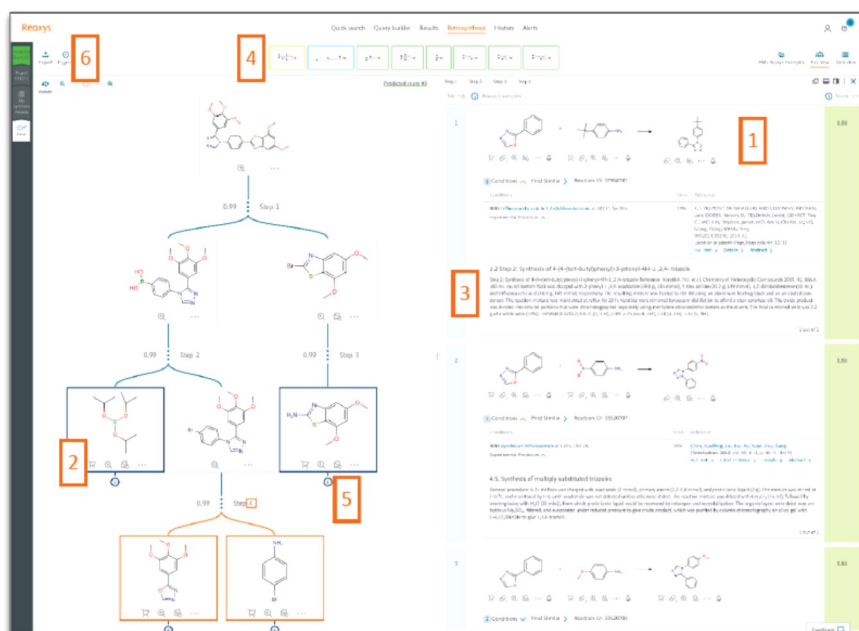
#### Unmatched data set

- >15M single step reactions
- >100M virtual negative reactions
- >400k auto-extracted rules



#### Customizable

- Integrate reaction data
- Select preferred vendors
- Integrate starting materials



#### Scientifically robust predictions

1. Link to the literature that informed the routes
2. End in purchasable starting materials
3. Access experimental procedures to execute plans



#### Intuitive experience

4. Published, predicted & custom routes in one view
5. Tailor results by editing synthesis routes
6. Export easily to collaborate on route design



### Reaxys Predictive Retrosynthesis

[elsevier.com/solutions/reaxys/predictive-retrosynthesis](https://elsevier.com/solutions/reaxys/predictive-retrosynthesis)

Reaxys is a trademark of Elsevier Ltd.  
Copyright © 2022, Elsevier. January 2022.



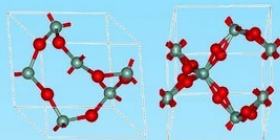
# NEWS FLASH

## Nový stolní WDXRF a XRD přístroj za skvělou cenu a vysokým výkonem.



### Rigaku Supermini200 WDXRF

- Stolní sekvenční vlnově – disperzní fluorescenční spektrometr o vysokém výkonu
- Možnost analýzy na úrovni jednotlivých prvků od fosforu (F) až po uran (U) na téměř každém materiálu
- Nízká pořizovací cena a provozní náklady
- Vysoké rozlišení a nízké detekční úrovně (LLD)
- Bez kapalinového chlazení – žádný externí kapalinový chladič, bez nutnosti instalace speciálního chladicího okruhu



### Rigaku MiniFlex XRD

- Nový přístroj páté generace
- Víceúčelový RTG difraktometr
- Kvalitativní a kvantitativní analýza polykrystalických látek
- Integrovaná, 600-ti W rentgenová lampa poskytuje dvounásobný výkon oproti ostatním stolním spektrometrům a umožňuje tak rychlejší analýzu a celkové zvýšení výkonu výrobního/testovacího procesu
- Na přání zákazníka je možné integrovat měnič vzorků



Rigaku Innovative Technologies Europe s.r.o.  
Novodvorska 994 | 142 21 Prague 4 Czech Republic  
Tel: +420 239 043 333 | email: prague@rigaku.com



## Need free lab space for your research?

Just apply for the chance to win your personal time in our high-end Laboratory World.

The most talented young researchers will be selected for Shimadzu's "lab4you" program.

For your thesis and research, you may gain access to the whole spectrum of analytical instrumentation for HPLC/UHPLC and mass spectrometry. Just bring the samples prepared at your faculty. Benefit from the advice of an on-site product specialist.

Your profile for application:

- Master student, postgraduate or postdoc at an European university
- Approved topic of your research.

Apply for the opportunity to win private labtime for your research

[www.shimadzu.eu/lab4you](http://www.shimadzu.eu/lab4you)





# Trainee

## Oddělení Chemického Výzkumu a vývoje

Hledáme absolventa/ku s chemickým vzděláním se zaměřením na obor Analytické chemie a Organické syntézy.

### Trainee program:

je koncipován na 1 - 2 roky, kdy účastník tohoto programu prochází odbornou praxí na vybraných odděleních, kde získává zkušenosti s ohledem na budoucí zaměření. Účastník programu má během programu definován základní úkol/projekt. Během programu má trainee podporu přiděleného mentora.

### Profil Trainee VaV (Výzkum a vývoj) s chemickým zaměřením:

- Čerstvý absolvent/ka vysoké školy s chemickým vzděláním se zaměřením na obor Analytické chemie a Organické syntézy
- Znalost anglického jazyka
- Komunikační dovednosti, zodpovědný, zvědavý, důkladný a časově organizovaný/á

### Pozice:

V rámci programu „trainee“ bude uchazeč součástí oddělení Chemického Výzkumu a vývoje. Bude spolupracovat na aktivitách tohoto oddělení a to převážně v laboratorním zařízení. Součástí práce traineeho je také práce a studium dokumentace a odborných článků, školit se v nejrůznějších laboratorních technikách.

Garantem tohoto programu bude vedoucí oddělení technologie s dlouholetými zkušenostmi v tomto oboru.

### Oddělení Výzkumu a vývoje

Oddělení VaV se zabývá výzkumem inovativních aktivních farmaceutických substancí (API), který začíná přípravou v laboratorních podmínkách, hledání vhodné syntetické cesty, vývojem a validací analytických a fyzikálně-chemických metod až po transfer do komerční výroby. Po celou dobu vývoje aktivní substance VaV zodpovídá za technickou podporu, přípravu příslušné dokumentace pro podání registrační změny u státních autorit a registračních úřadů (SUKL, FDA, EMA).

### CENTRIFUGY

mikrocentrifugy a malé centrifugy multifunkční centrifugy vysokootáčkové centrifugy velkokapacitní centrifugy ultracentrifugy



### MIKRODESTIČKOVÁ INSTRUMENTACE

spektrofotometry, fotometry fluorometry, luminometry, dávkovače, promývačky třepací termostaty pro mikrodestičky automatické pipetovací stanice magnetické purifikátory KingFisher®



### GEL-IMAGING a COLONY COUNTING

gelová dokumentace a analýza chemiluminiscence, fluorescence elektroforézy, zdroje pro elfo počítače kolonií a analýza inhibičních zón



### KONCENTRÁTORY VZORKŮ

vakuové centrifugační koncentrátory stolní lyofilizátory velkoobjemové lyofilizátory vakuové sušárny



### MYČKY a AUTOKLÁVY

laboratorní myčky velkokapacitní myčky laboratorní autoklávy



### PŘÍPRAVA ČISTÉ VODY

reverzní osmóza deionizační systémy kompaktní laboratorní systémy polopropozní systémy



### PIPETY

#### LABORATORNÍ PLASTIK

pipety FinnTimer a ClipTip kompletní sortiment špiček dávkovače a pipetovací nástavce spotřební plastik Nalgene, Nunc a Matrix plastik pro environmentální výzkum



### BIOHAZARDY, IZOLÁTORY LAMINÁRNÍ BOXY

biohazard boxy tř. II laminární boxy biohazardy tř. III a izolátory lamimární moduly monitoring prostředí



### BEZODTAHOVÉ DIGESTOŘE

digestoře a vážící boxy filtrační systémy pro místnosti monitoring laboratorního prostředí



### DEKONTAMINAČNÍ SYSTÉMY H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>

VHP generátory pro dekontaminaci aerosolové generátory dekontaminace prostor a zařízení



### INKUBÁTORY, TERMOSTATY

CO<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> inkubátory termostaty do +100 °C, +300 °C anaerobní a hypoxické boxy sušárny do +500 °C klimatické a růstové boxy systémy pro monitoring teploty



### MRAZICÍ A CHLADICÍ BOXY, KRYO BOXY

mrazicí boxy do -86 °C až -180 °C řízené zamrazování LN<sub>2</sub> -180 °C mrazicí boxy -5 °C až -40 °C chladicí boxy 0 °C až +15 °C



### CHOV LABORATORNÍCH ZVÍŘAT

IVC individuálně ventilované boxy chovné nádoby, izolátory, ochranné a přestýlací boxy mycí a bariérová technologie komplexní projekty

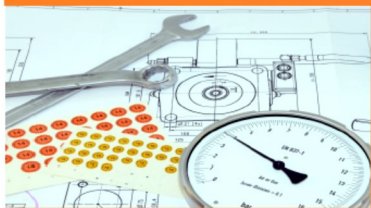


### OSTATNÍ LABORATORNÍ VYBAVENÍ

třepačky a velkokapacitní třepačky lázně a blokové lázně homogenizátory a dilutory peristaltické pumpy a plničky



Dodáním přístroje naše péče nekončí ... jsme již 31 LET S VÁMI 1991 - 2022



autorizovaný servis  
validace - IQ/OQ/PQ

akreditovaná kalibrační laboratoř  
TRIGON PLUS  
kalibrace měřicích řetězců  
a indikačních teploměrů

poradenství / projektová řešení  
metrologické a preventivní služby

akreditovaná zkušební laboratoř  
TRIGON PLUS  
měření zařízení  
s řízenou čistotou vzduchu

ThermoFisher  
SCIENTIFIC

TECNIPLAST  
Innovations through passion

obchodní a servisní zastoupení firem

THERMOFisher Scientific, divize LPD . Tecniplast  
Alliance Bio Expertise . Arctiko . Baker Ruskin . Bioquell . CLST  
Erlab . EuroBioConcept . Evermed . Getinge Lancer . HMC Europe  
Labogene . Synbiosis . Syngene

TRIGON PLUS s.r.o.

Západní 93, 251 01 Čestlice  
tel.: 272 680 190 mail@trigonplus.cz  
www.trigonplus.cz