



68. SJEZD ČESKÝCH A SLOVENSKÝCH CHEMICKÝCH SPOLEČNOSTÍ

PRAHA

4. – 7. září 2016

Pořádající organizace:

**Česká společnost chemická
Slovenská chemická spoločnosť**

Sborník příspěvků

ORGANIZAČNÍ VÝBOR SJEZDU

prof. RNDr. Jitka Ulrichová, CSc. (předsedkyně
organizačního výboru)

prof. Ing. Peter Šimon, DrSc. (místopředseda
organizačního výboru)

prof. Ing. Jan John, CSc., předseda ČSCH

prof. RNDr. Pavel Drašar, DSc.

doc. Ing. Filip Bureš, Ph.D.

doc. RNDr. Václav Slovák, Ph.D.

prof. Ing. Petra Šulcová, Ph.D.

prof. RNDr. Bohumil Kratochvíl, DSc.

RNDr. Helena Pokorná

Ing. Alena Vlková

Ing. Radmila Řápková

VĚDECKÝ VÝBOR SJEZDU

prof. RNDr. Pavel Drašar, DSc. (předseda vědeckého
výboru)

prof. Ing. Viktor Milata, DrSc. (místopředseda
vědeckého výboru)

prof. Ing. Jiří Brožek, CSc.

doc. Ing. Filip Bureš, Ph.D.

prof. RNDr. Hana Čtrnáctová, CSc.

prof. Ing. Ivan Gros, CSc.

prof. RNDr. Petr Hermann, Ph.D.

doc. Ing. Ondřej Lebeda, Ph.D.

doc. Ing. Jaromír Lederer, CSc.

prof. RNDr. Milan Meloun, DrSc.

doc. Ing. Tomáš Navrátil, Ph.D.

prof. Ing. Petra Šulcová, Ph.D.

RNDr. Pavel Zachař, CSc.

prof. RNDr. Radek Zbořil, Ph.D.

SEKCE SJEZDU A JEJICH GARANTI

- 1. Analytická chemie**
Tomáš Navrátil
- 2. Anorganická chemie**
Petr Hermann
- 3. Chemické vzdělávání a historie chemie**
Hana Čtrnáctová, Pavel Zachař
- 4. Jaderná chemie**
Ondřej Lebeda
- 5. Nanomateriálová chemie**
Radek Zbořil
- 6. Organické materiály**
Filip Bureš
- 7. Polymery**
Jiří Brožek
- 8. Průmyslová chemie**
Jaromír Lederer
- 9. Termická analýza**
Petra Šulcová
- 10. Analýza dat**
Milan Meloun
- 11. Ekonomika a řízení chemického průmyslu**
Ivan Gros

Zrcadlo chemie z Čech a Slovenska

Ačkoliv je někdy Praha (a Pražáci) kritizována někdy za „pragocentrismus“, je s podivem, že tato tendence nekoreluje s místem pořádání tradičního sjezdu slovenských a českých chemiků. Pokud budeme hovořit o „nedávné“ minulosti, pak si pamětníci jistě vybaví rok 1976, kdy se v Praze konalo Valné shromáždění ČSCH, spolu s 32. spolkovým sjezdem a roky 1982 a 1991, kdy se na VŠCHT konaly 38. a 47. sjezd českých a slovenských chemiků. V celé historii se pak konal v Praze sjezd 1. (1880) až 10. (1946) a poté pouze 25. (1966; uspořádaný mj. i na počest stého výročí spolku, ve dnech 4.–8.7. společně s Polarografickým kongresem, přičemž slavnostní zahájení se konalo dokonce ve Smetanově divadle), a sjezdy výše uvedené. Odmítnutí pragocentrismu zaznamenali organizátoři i úředně, kdy uctívá žádost o patronát nad sjezdem byla z úst pražského magistrátu oslyšena.

S povzdechnutím musíme vzpomenout památných sjezdů, kterých se účastnilo až na 2000 účastníků a zalitovat, že v dnešní době, kdy je nutno výkazním rivistům předkládat platná hlášení v jazyce českém a úhledném o tom, „kolik se okovalo koní a kolik se letos sklídilo brambor“, je účast na sjezdu chemiků privátní extempore, které si pravověrný chemik dopřeje pro vlastní potěchu, případně pro setkání se starými či mladými přáteli a kolegy, a které mu v onom bláznivém honění se za „bobříky“ mnoho nepomůže. Avšak nemělo by tomu tak být, sjezd by měl být výsostnou marketingovou příležitostí předvést „to nejlepší z kuchyně“ široké veřejnosti a obhájit to v široké diskusi, čímž dotyčný nejen získá „pouvoir“ k dalšímu činění, ale i věhlas a slávu a i to, že si o něm bardi budou dlouho vyprávět u táborových ohňů.

Nicméně i zde může člověka ohřát pohled na (zejména plenární) přednášející, kteří nelenili a na shromáždění věrných přednesou to nejlepší, co umí, a pokusí se to přiblížit posluchačstvu tak, aby si učitel odnesl kousek pro své studenty, průmyslník pro poučení o vztahu „haute chimie“, kvalifikované a obezřetné chemické výroby a dopadu na kvalitu lidského života, a skoro každý i vedomosti, jak varovat své syny a vnuky před tím, co „zlá chemie“ nabízí na pokoutném trhu ať již ku pěstění svalstva, mozku, či pseudopotěšení.

Radost pozorovatele je o to větší, zahlédne-li na sjezdu nejen koryfeje české chemie, ale i středoškolské studenty, prezentující výsledky, které vypracovali ve spolupráci s badatelskými institucemi, neboť tak by to mělo být, a takové je vlastně mimo jiné i poslání jak chemických spolků, tak společných sjezdů. Pokud navíc se zalesknou na hrudi chemiků z našich řad uznání a ba i metály, pozorovatel v poslední den sjezdu ulehne do lože spokojen ve svém doupení a ví, že dílo se daří.

Pavel Drašar

PL-01
PŘEKVAPIVÉ OBJEVY VE SVĚTĚ
NEKOVALENTNÍCH INTERAKCÍ

PAVEL HOBZA

*Ústav organické chemie a biochemie, AV ČR, 166 10 Praha
 a Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů,
 Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity
 Palackého v Olomouci, 771 46 Olomouc, Česká republika
 pavel.hobza@uochb.cas.cz*

Svět nekovalentních interakcí se zdál být na konci minulého století uzavřen a žádné převratné objevy se v této oblasti neočekávaly. Realita však byla jiná. První velký objev se týkal vodíkové vazby. Vodíková vazba Z-H...Y, kde Z a Y jsou elektronegativní prvky a atom Y má přebytek elektronů, se po téměř 100 letech dočkala nové definice¹. Tato byla odpovědí na objev nepravé vodíkové vazby charakterisované modrým (a nikoliv červeným, jak se doposud věřilo) posunem vibrační frekvence Z-H (cit.²). Následoval objev dvouvodíkové vazby Z-H...H-Q. V krystalu byly nalezeny struktury, kde jsou dva vodíky umístěny překvapivě blízko, často pod 2 Å. Vysvětlení bylo prosté, zatímco atom Z byl elektronegativnější než vodík, a proto byl náboj na H kladný, atom Q byl elektropositivnější, a proto byl náboj tohoto H záporný. Dvouvodíková vazba je tak způsobena elektrostatickou atrakcí mezi parciálně kladně a záporně nabitými vodíky³. Poslední objev je asi nejvíce překvapivý. Opět v krystalech byly nalezeny těsné kontakty mezi halogeny kovalentně vázanými na uhlík a elektronovými donory. Tato vazba byla nazvána halogenová a samozřejmě budila rozpaky⁴. Přeci víme, že halogeny jsou elektronegativnější než uhlík a proto musí být formálně záporně nabitý. Totéž ale platí pro elektronové donory a také ony nesou formálně záporný náboj. Podle Coulombova zákona je interakce dvou záporně nabitých atomů repulsní. Vysvětlení tohoto jevu bylo nalezeno v nerovnoměrném rozložení elektronové hustoty v kovalentně vázaných halogenových atomech, kde na vrcholu halogenu (na opačné straně kovalentní vazby) byla lokalizována oblast kladného potenciálu, tzv. σ -díra.

V přednášce budou zmíněny mechanismy těchto interakcí, jejich původ a také velmi široké aplikace v chemii, biologii a materiálových vědách.

LITERATURA

1. Arunan E., Desiraju G. R., Klein R. A., Sadlej J., Scheiner S., Alkorta I., Clary D. C., Crabtree R. H., Dannenberg J. J., Hobza P., Kjaergaard H. G., Legon A. C., Mennucci B., Nesbitt D. J.: *Pure Appl. Chem.* 83, 1637 (2011).
2. Hobza P., Havlas Z.: *Chem. Rev.* 100, 4253 (2000).
3. Liu Q., Hoffmann R.: *J. Am. Chem. Soc.* 117, 10108 (1995).
4. Politzer P., Lane P., Concha M. C., Ma Y., Murray J. S.: *J. Mol. Model.* 13, 305 (2007).

PL-02
ALDOLOVÁ REAKCE A ORGANOKATALÝZA:
PRINCIPY, MECHANISMUS A POUŽITÍ
V ENANTIOSELEKTIVNÍ SYNTÉZE

PAVEL KOČOVSKÝ

*Katedra Organické Chemie, Universita Karlova
 Hlavova 8, 12843, Praha 2, Česká republika
 Pavel.kocovsky@natur.cuni.cz*

Počátek třetího milénia byl ve znamení nové filozofie v organické syntéze, pro niž se ujal název organokatalýza. Ta je založena na přelomovém objevu, že malé organické molekuly mohou katalyzovat synteticky významné enantioselektivní reakce podobně jako enzymy nebo transitní kovy. K hlavním výhodám organokatalyzátorů patří jejich nízká toxicita, snadná dostupnost, nenáročné reakční podmínky a značná versatilita.

Aminokyselina prolin a od ní odvozené sekundární aminy se od přelomu tisíciletí prosadily jako mimořádně úspěšné chirální organokatalyzátory v enantioselektivních reakcích, při nichž jako intermediáty vystupují enaminy¹. Naproti tomu primární aminy začaly nacházet uplatnění teprve nedávno, nejspíše kvůli zažitým představám o jejich tendenci vytvářet stabilní iminy spíše než reaktivní enaminy.

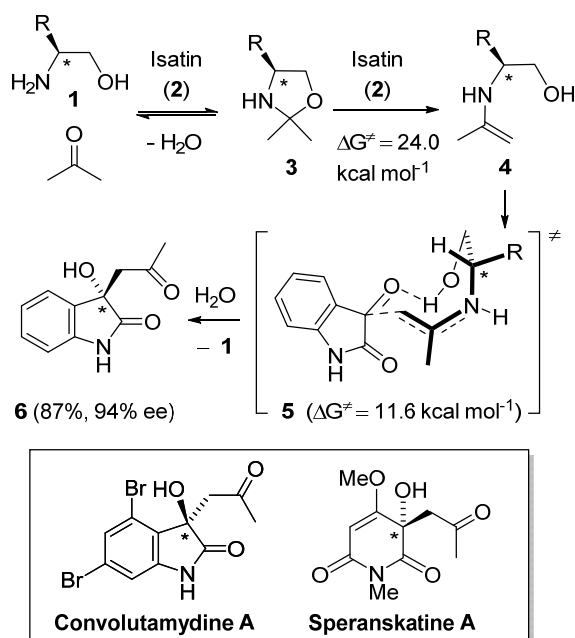
K počátečním úspěchům patří zejména organokatalytická aldolová reakce aldehydů, kde bylo dosaženo enantioselektivity do té doby vyhrazené pouze říší enzymů. Zdařila se i zkřížená reakce dvou nesterých aldehydů, které se liší např. svojí sterickou náročností: tak v kombinaci propionaldehydu s isobutraldehydem prvý přednostně generuje nukleofilní enamin (působením prolinu nebo jeho analogů), zatímco druhý reaguje jako elektrofil. Rovněž reakce mezi aldehydem a ketonem byla úspěšně zvládnuta, neboť zde opět aldehyd přednostně tvoří enamin, zatímco keton reaguje jako elektrofil.

Nejméně příznivá je však kombinace dvou nesterých ketonů a proto zatím existují jen nečetné příklady, navíc mnohdy nepřilíš úspěšné^{1,2}. Jedná se tedy o tvrdý oříšek pro syntetického chemika, spojený s řadou problémů, jako je vzájemná reakce identických partnerů a zkřížená reakce „v opačném směru“, ale i to, že produkt je mnohdy méně stabilní než výchozí komponenty, což posunuje rovnováhu katalytického procesu zpět k výchozím látkám. Dosažení dobré konverze a vysoké selektivity proto není triviální a poléhá jistým strukturálním omezením: jeden z partnerů (A) musí být reaktivnější jako elektrofil než jeho partner B a pokud možno neenolizovatelný; naproti tomu partner B musí být snadno enolizovatelný a tudíž i snadno generovat enamin jako nukleofilní intermediát. A toto vše musí fungovat v katalytickém módu, kde proti sobě mohou působit nejrůznější rovnovážné stavy.

Tento příspěvek bude zaměřen na mechanistické a výpočetní studie zkřížené enantioselektivní aldolové reakce mezi dvěma nesterými ketony, kde se nejlépe osvědčil leucinol **1** jako levný a benigní organokatalyzátor. Modelovým elektrofilním a zároveň neenolizovatelným partnerem byl zvolen isatin (**2**), jehož ketonická funkce je aktivována elektrony odčerpávající amidickou skupinou. Za nukleofilního partnera posloužil aceton, jenž snadno vytváří enamin a jehož ketoskupina je méně elektrofilní než ta u isatinu.

Bylo zjištěno, že reakce nejlépe probíhá při teplotě místnosti v CH_2Cl_2 obsahujícím stopu vody a 10–20 mol.% leucinu². Mechanistické a výpočetní studium odhalilo úvodní vznik oxazolidinu **3**, který zároveň slouží jako “resting state” katalyzátoru, a jehož vznik je dramaticky katalyzován isatinem, takže leucin je v jeho přítomnosti kvantitativně spotřebován během 10–15 min. Přeměna tohoto oxazolidinu na reaktivní *syn*-enamin **4**, rovněž katalyzovaná isatinem (působícím jako bidentátní donor/acceptor vodíkového můstku), je krokem určujícím rychlost reakce, což potvrdil jak výpočet ($\Delta G^\ddagger = 24,0 \text{ kcal mol}^{-1}$) tak isotopový efekt ($k_{\text{H}}/k_{\text{D}} = 2,7$ pozorovaný u reakce s *d*₆-acetonem). Reakce *syn*-enaminu **4** s isatinem pak poskytuje hydroxyketon (*S*)-**6** (přes TS[‡] **5**)³.

Tato katalytická reakce byla posléze použita k přípravě řady produktů, včetně biologicky aktivních přírodních látek konvolutamidyinu A a speraskantinu A. Navržený mechanismu též přispěl k přisouzení absolutní konfigurace některých z nich.



Tato práce vznikla za podpory EPSRC (UK), Axel Wenner-Grenovy nadace (Švédsko) a Grantové Agentury ČR (grant 14-31419S).

LITERATURA

- (a) Mase N., Barbas C. F., v knize: *Comprehensive Enantio-selective Organocatalysis – Catalysts, Reactions, and Applications* (P. I. Dalko, ed.), Vol. 3, s. 793. Wiley-VCH, Weinheim 2013. (b) R. B. Sunoj *ibid* Vol. 2, s. 465.
- Malkov A. V., Kabeshov M. A., Bella M., Kysilka O., Malyshev D. A., Pluháčková K., Kočovský P.: *Org. Lett.* 9, 5473 (2007).
- Kabeshov M. A., Kysilka O., Rulišek L., Sulejmanov Y., Bella M., Malkov A. V., Kočovský P.: *Chem. Eur. J.* 21, 12026 (2015).

PL-03

FOTOVOLTAICKÉ PROCESY NA NANOTUBULÁRNÍ TITANII A HYBRIDNÍCH CHROMOFORECH

JAN M. MACÁK

Centrum materiálů a nanotechnologií, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Nám. Čs. Legií 565, 530 02 Pardubice, Česká republika
jan.macak@upce.cz

Prezentace bude adresovat problematiku solárních článků 3. generace, které jsou založeny na kombinaci anorganických a organických materiálů. Tyto hybridní články mají celou řadu zajímavých vlastností a parametrů, jako např. průhlednost, flexibilita, schopnost efektivně využít i nízké intenzity osvětlení, apod., které je předurčují pro širší využití v porovnání s klasickými křemíkovými solárními články. Tyto vlastnosti budou diskutovány i s ohledem na aplikační příležitosti. Prezentovány budou zejména ty typy solárních článků, které se opírají o využití oxidu titaničitýho (v různých morfologiích) v kombinaci s vhodnými chromofory.

PL-04

KONTROLOVANÉ LÁTKY Z POHLEDU VĚDCE A KRIMINALISTY

MARTIN KUCHAR^{a,b,c}

^a Ústav chemie přírodních látek, ^b Laboratoř forenzní analýzy biologicky aktivních látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha, ^c Národní ústav duševního zdraví, Topolova 748, 250 67 Klecany
martin.kuchar@vscht.cz

Fenomén masového rozšíření Nových psychoaktivních látek (NPS) má v posledních letech eskalující trend. Setkáváme se s nimi jak v podobě legálně prodávaných přípravků označovaných „legal highs“, padělků léčiv, rostlinných směsí nahrazujících marihuanu nebo dokonce ve formě sběratelských předmětů. V současné době počet známých látek z kategorie NPS přesáhl 500, více než polovina z nich se objevila v letech 2013–2015. O zdravotních důsledcích vypovídá i epidemie intoxikací a úmrtí v roce 2015.

Zatímco v České republice se NPS prodávají jako levná náhrada metamfetaminu a v Anglii úspěšně nahradily kokain, tak v Maďarsku nahradily téměř kompletně tradiční trh klasických drog. Většina zachycených látek patří do několika strukturálně podobných skupin, které kopírují farmakofor klasických drog. Jedná se především o stimulanty, entaktogeny a halucinogeny. V poslední době se však setkáváme i s nebezpečnou skupinou syntetických opiátů a disociativních anestetik.

U většiny NPS však nejsou dostupné informace o mechanismu účinku, akutních a dlouhodobých rizicích užívání a o potenciálu vyvolávající závislosti. Řada látek byla poprvé v literatuře popsána až po jejich analýze na forenzním nebo toxikologickém pracovišti. Chybějící informace o jejich metabolismu a nedostupnost analytických standardů ztěžují identifikaci a správnou diagnostiku intoxikace. Začínají se tak objevovat mezioborové neuropsychofarmakologické práce, které

se zaměřují na komplexní charakterizaci NPS z pohledu toxicity, behaviorálních vlastností, zmapování jejich působení na receptorové úrovni a jejich identifikaci ve složité biologické matici.

Z kriminalistického hlediska jsou intenzivně studovány syntetické cesty přípravy NPS a identifikovány možné prekurzory výroby. Především v posledních dvou letech se syntéza NPS začíná přesouvat z asijského regionu do Evropy, kde byly ohlasy velké nelegální laboratoře syntézy NPS, případně manufaktury pro finalizaci NPS v podobě „legal highs“. Ultrastopová analýza NPS, zaměřená na určení profilu nečistot, nám může poskytnout informace nejen o nových syntetických přístupech a použitých prekurzorech, ale také propojit jednotlivé případy záchytů a odhalených nelegálních výroben.

Informace o používaných prekurzorech jsou využity při tvorbě legislativních opatření a regulací obchodu a nakládání s prekurzory drog. Informace jsou vyhodnoceny v pracovní skupině pod Evropskou komisí. Pěkným příkladem je zařazení látky známé jako APAAN v roce 2014 do kategorie 1 prekurzorů drog. Poněkud komplikovanější situace panuje v legislativních opatřeních, která se týkají samotných NPS. Kromě závazných mezinárodních úmluv, které pokrývají známé klasické omamné a psychotropní látky, jsou legislativní opatření ve vztahu k nakládání s NPS čistě na národní úrovni. Napříč Evropskou unií se tak setkáváme s různými legislativními přístupy, které vychází z národních právních zvyklostí. V Evropské unii převažuje taxativní model výčtu kontrolovaných látek, který přináší právní jistotu výrobcům, prodejším a distributorům chemických látek. Na druhou stranu je velmi nepružný a každá legislativní změna je časově velmi náročná. Naopak generický přístup, převažující ve státech s anglosaským právním systémem, je velmi pružný a je schopen podchytit známé, ale i nově objevené NPS. Látky jsou v tomto systému definovány obecně pomocí Markushových vzorců. Nevýhodou se však ukazuje určitá míra právní nejistoty a riziko, že řada potenciálně zajímavých látek, je takto vyloučena pro průmyslové a často i výzkumné využití.

Komplexní mezioborové studium NPS přináší potřebné podklady pro legislativní změny na národní, ale i mezinárodní úrovni. Součástí podpůrných informací jsou také epidemiologická data a hlášení národních kontaktních bodů včasného varování pod záštitou Evropského monitorovacího centra pro drogy a drogové závislosti (EMCDDA). Současné farmakologické studie vybraných NPS jsou zaměřeny například na methoxetamin, 2C-B, MDAI, piperaziny, katinony, syntetické kanabinoidy a opioidy. Ukazuje se, že tyto látky vykazují oproti klasickým drogám nižší prevalenci užívání, na druhou stranu však mnohem více poškozuji zdraví a vyznačují se značným adiktivním potenciálem. Během behaviorálních a toxikologických studií byl zjištěn mechanismus účinku řady NPS. Mezi nežádoucí účinky při užití patří například hypertermie, tachykardie a selhání oběhového systému. Vysoce potetní syntetické opiáty jsou naopak známé depresí dechu a komatózními stavy. Získaná data jsou dostupná v aktuálně vytvořeném informačním databázovém systému NPS, který slouží klinickým toxikologům a forenzním expertům.

Tato práce vznikla za podpory grantu MVČR VĚ20122015075.

LITERATURA

1. Páleníček T., et al.: Prog. Neuropsychopharmacol. Biol. Psychiatry 69 (1), 49 (2016).
2. Hájková K., Jurásek B., Sýkora D., Páleníček T., Mikšátková P., Kuchař M.: Anal. Bioanal. Chem. 408 (4), 1171 (2016).
3. Horsley R. R., Lhotkova E., Hajkova K., Jurasek B., Kuchar M., Palenicek T.: Brain. Res. Bull., v tisku.
4. Sbírka Zákonů České republiky, NŘV č. 243/2015 sb., 3001 (2015).
5. Annual report EMCDDA 2015, (2016).
6. www.nsddb.eu .

PL-05

P-GLYKOPROTEÍN – MEMBRÁNOVÝ TRANSPORTÉR SPŮSOBUJÍCÍ VIACLIEKOVÚ REZISTENCIU NÁDOROVÝCH TKANÍV. (IMPLIKÁCIE PRE NÁVRH EFEKTÍVNYCH CHEMOTERAPEUTÍK)

ALBERT BREIER^a, ZDENA SULOVÁ^b

^a Ústav biochémie a mikrobiológie FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ^b Ústav molekulárnej fyziológie a genetiky SAV, Dúbravská cesta 9, 840 05 Bratislava, Slovensko
albert.breier@stuba.sk

P-glykoproteín (P-gp) je transportná ATPáza plazmatickej membrány, ktorá dokáže účinne odstraňovať nenabitú látku hydrofóbnej povahy z vnútorného priestoru buniek. Bol ako prvý člen génovej rodiny ABC (*ATP-Binding Cassette*) transportérov objavený v roku 1976¹. Vo fyziológii živočíchov zohráva dôležitú úlohu pri látkovej výmene, sekrečných procesoch a ochrane špecializovaných tkanív proti toxickému poškodeniu. V prípade jeho expzie v nádorových tkanivách je najčastejšou molekulárnou príčinou utlmenia citlivosti neoplastických buniek na širokú škálu protinádorových terapeutík², ktorú poznáme z literatúry ako viacliekovú rezistenciu (*multidrug resistance*, MDR). Tento proteín je často označovaný ako promiskuitný z dôvodu jeho širokej substrátovej špecificity pre látky s rozličnou chemickou štruktúrou a rôznymi mechanizmami farmakologického účinku³. Medzi jeho substráty patria látky ako: kolchicín, etopozid, doxorubicín, vinblastín, ale aj rôzne lipidy a steroly, DNA interkaláčné látky (etýdiumbromid), lineárne a cirkulárne peptidy (valinomycín a gramicidín), bilirubín, srdcové glykozidy, rôzne imunosupresory, glukokortikoidy a tiež inhibitory HIV proteáz a nukleozidové inhibitory reverznej transkriptázy a mnohé ďalšie. Táto transportná ATPáza môže byť v nádorových bunkách príčinou niekoľko stonásobného zníženia ich citlivosti voči substrátom P-gp^{2,3}. Preto býva P-gp častou príčinou zlyhávania chemoterapie nádorových ochorení. Toto iniciuje záujem výskumníkov na otázky zabránenia jeho expzie v nádorových bunkách alebo inhibíciu jeho aktivity. Tieto otázky budú bližšie rozobraté v predloženej príspevku.

Naše laboratória sú podporené projektmi: APVV-14-0334, VEGA 2/0182/13, 2/0028/15, 2/0156/16 a Výskumnou agentúrou SR v rámci projektu: „Dobudovanie infraštruktúry pre

moderný výskum civilizačných ochorení“ (ITMS 26230120006).

LITERATURA

1. Juliano R. L., Ling V.: *Biochim. Biophys. Acta* 455, 152 (1976).
2. Breier A., Barancik M., Sulova Z., Uhrík B.: *Curr. Cancer Drug Targets* 5, 457 (2005).
3. Breier A., Gibalova L., Seres M., Barancik M., Sulova Z.: *Anticancer Agents Med. Chem.* 13, 159 (2013).

PL-06

MODERNÍ CHEMIE V KOSMETICE

PETR ŠTĚPÁNEK

Ústav chemie přírodních látek, *Technická 5, 166 28, Praha 6 L'OREAL Česká republika s.r.o, Plzeňská 11/213, Praha 5, Česká republika*
stepanee@vscht.cz

Ačkoli se snaha nebo trend „vypadat dobře“ zdá být fenoménem posledních dekád, je opak pravdou. Je zřejmé, že vzhled byl důležitý i pro ženy a muže předchozích civilizací.

Právě přípravky a postupy, které z dnešního pohledu nazýváme kosmetickými přípravky (KP), hrály vždy důležitou roli při uspokojování potřeb za účelem zlepšení vzhledu.

Kosmetika v sobě nejenom odráží specifika jednotlivých kultur, ale zároveň se měnila na základě rozvíjejících se znalostí o lidském organismu a vzrůstajícím povědomí o fyziologických a chemických vlastnostech látek a směsí, které se používají jako ingredience. Během času se tak změnila nejen složení, ale i funkce a smysl jejího použití. V jistém slova smyslu je možné pohlížet na složení KP, jako na důkaz o úrovni chemických znalostí v daném čase a místě.

I změny, kterými kosmetika prochází v poslední době, v sobě zobrazují tlak, který je uplatňován na další průmyslové obory. Bezpečnost spotřebitelů je považována za naprostou samozřejmost, nicméně čím dál víc je kladen důraz na environmentální a sociální aspekty produkce. V případě KP toto platí dvojnásobně, neboť toto odvětví nese samo osobě jistou dávku vjemu a emocí, což se může negativně projevit na názorech široké veřejnosti. Příkladem může být odpor k různým skupinám látek, zaměňování rizika s nebezpečím a v postatě obecně narůstající iracionální „chemofobie“.

Pokud se poohlédneme zpět, pak již v předhistorických dobách byly používány různé anorganické materiály ke zdobení kůže. Ze starého Egypta a Mezopotamie je pak doložena již celá řada přípravků určených ke zdobení pokožky, či péči o ní. Ostatně výraz „kosmetika“ vychází z řeckého *κοσμητικός* (*kosmētikos*), "zkušený v upravování a zdobení a z *κόσμος* (*kosmos*), což mimo jiné je možné vykládat jako „řád“ nebo „ornament“, či „ozdoba“.

KP pak měly v průběhu času různou důležitost, nicméně až 20. století přineslo velkou diverzifikaci nejen přípravků, jejich funkcí, ale i hodnocení bezpečnosti a ochrany spotřebitele. Před druhou světovou válkou nebyla kosmetika regulována podobně jako léčiva a kosmetologie byla spíše považována za prodej snů, než za solidní vědní obor. S rozvíjející se industrializací a pokroky učiněnými jak v chemickém prů-

myslu (petrochemie, organická chemie, polymery), v potravinářství a ve farmacii se objevila celá řada nových ingrediencí, formulací a funkcí KP.

Současně s tím se začínají objevovat i první snahy o regulaci (klasifikace a značení – FDA (1966)). V západní Evropě to pak byla směrnice 76/768/EEC, která umožnila sjednotit požadavky na KP, přičemž položila odpovědnost za bezpečnost KP na stranu výrobce. Tato mnohokrát revidovaná směrnice pak sloužila v EU jako legislativní základ po desítky let. Již v roce 1991 byl do této směrnice mimo jiné zanesen zákaz prodeje KP, které byly testovány na zvířatech. To vedlo v důsledku, k investování značné energie do vývoje alternativních metod. Díky tomuto přístupu evropský kosmetický průmysl získal v této oblasti vedoucí postavení, které se upevnilo i poté, co vešlo v platnost nové nařízení č. 1223/2009, ve kterém je zakotven i zákaz používání ingrediencí testovaných na zvířatech pro účely použití v KP¹. Tento aspekt je nutno brát jako politické rozhodnutí, které na určitou dobu znevýhodňuje evropské výrobce kosmetiky, neboť v současné době ještě neexistují spolehlivé alternativní metody k testům na zvířatech (toxicita po opakované dávce, reprodukční toxicita, toxikokinetika). Stejně jako chemický průmysl je i kosmetika z hlediska hodnocení bezpečnosti postavena před nové otázky jako je hodnocení vlivu látek s endokrinní aktivitou, či dlouhodobá expozice směsi látek v prahových koncentracích.

Co se týče vývoje nových typů KP je pozornost určena především na takzvanou funkční kosmetiku (*cosmeceuticals*). KP už nejsou zaměřeny pouze na změnu vzhledu, či ovlivňování vůně, jak tomu bylo v minulosti, ale přímo zlepšují vlastnosti zevních cílových částí těla (pokožka, kožní adnexa, zevní pohlavní orgány), zubů a sliznice dutiny ústní.

Díky velmi silnému konkurenčnímu prostředí je kosmetický průmysl nucen zvyšovat kvalitu a účinnost. Pokud se například soustředíme na šampon, pak přípravek poskytující pouze jeho základní funkci (odstranění nečistot z vlasů), je brán jako nedokonalý. Současný spotřebitel očekává i od takto jednoduchého KP komplexní akci, která v sobě nese v tomto případě i protichůdné efekty: čistící funkce (odstranění z povrchu vlasu), vyživující funkce (průnik do vlasu), pečující funkce (tvorba filmu na povrchu).

I když je paleta látek, jež je k dispozici, nepřehledná, zůstává volba vehikula a vhodné formulace, stále v mnoha případech na empirických zkušenostech formulátora, který musí správně porozumět interakcím jednotlivých ingrediencí, způsobu jejich dodání do cílové oblasti a očekávanému benefitu.

Pro hodnocení účinku KP byla v posledních dekádách vyvinuta celá řada biometrických technik umožňující měření účinků KP in vivo (měření mechanických vlastností kůže, topografie, měření hydratace a bariérových vlastností pokožky, analýza obrazu). Z oblasti klinického výzkumu pak byly převzaty techniky jako např. elektronová mikroskopie, IČ, Ramanova spektroskopie, magnetická rezonance, ale i analýza proteomu a genomu.

V současné době představuje kosmetický průmysl dynamickou součást evropského hospodářství. Evropské společenství je pak se 77.10⁹ EUR největším globálním výrobcem KP. Při odhadovaném objemu do investic do výzkumu 1,27.10⁹ EUR².

V přednášce budou prezentovány jak moderní metodiky používané pro hodnocení účinků KP, tak i trendy ve formulacích a ingrediencích.

LITERATURA

1. Paye M., Barel A. O., Maibach H. I., v knize: *Handbook of Cosmetic Science and Technology* 3. vyd., kap. 1, s. 1 Informa Healthcare USA, Inc., New York 2009.
2. Cosmetics Europe; Annual Report 2015 (2016); dostupný na www.cosmeticseurope.eu.

1L-01
**ON-SITE ANALYSIS USING DIVERSE PLATFORMS:
 PORTABLE CAPILLARY LIQUID
 CHROMATOGRAPHY AND PAPER-BASED
 MICROFLUIDIC DEVICES**

MIREK MACKA

University of Tasmania, Australian Centre for Research on Separation Science and School of Physical Sciences, Private Bag 75, Hobart 7001, Australia
 Mirek.macka@utas.edu.au

The demand for and impact of portable analytical technologies is set to grow rapidly influenced by factors such as rising medical care costs and need for rapid and on-site answers on one hand, and new trends such as wearable devices on the other. Miniaturisation of instrument components and data processors has opened up analytical techniques traditionally seen as bound to the lab bench, such as separation methods, to portability and thus on-site use. At the same time new concepts have been developed allowing low-cost analytical approaches, such as based on paperfluidics.

In this presentation the increasingly effective applicability of analytical methods for portable on-site analysis will be illustrated using two examples: (1) Miniaturised capillary liquid chromatography (LC), and (2) Novel paperfluidics based analytical devices (μ PADs), with attention paid to their applicability in the areas of nutrition and food analysis.

For miniaturised capillary LC, our goal was to design a portable medium-pressure highly flexible modular 'LEGO-style' LC system based almost entirely from commercial off-the-shelf low-cost components and operated through a PC. The system weighing under 2 kg (plus data acquisition) is based on a breadboard assembled modular flexible microfluidic system with microsyringe pumps (5–100 μ L), complemented with other off-the-shelf components, including an LED-based photometric detector.

Paper-based microfluidic devices (μ PADs) are capable of achieving rapid qualitative and quantitative measurements of a variety of analytes at very low cost. We developed a novel, highly flexible and low-cost fabrication method using a desktop digital craft plotter/cutter and technical drawing pens with tip size of 0.5 and 1.0 mm. The pens were used with either commercial black permanent ink for drawing fluidic brakes, or with specialty in-house formulated aqueous inks. A functional test of these μ PADs was conducted by the screening of antioxidant activity.

This work was supported by Australian Research Council Future Fellowship (FT120100559).

REFERENCES

- Li Y., Dvořák M., Nesterenko P., Stanley R., Nuchtachvorn N., Kujovská Krčmová L., Aufarová J., Macka M.: *Anal. Chim. Acta* 896, 166 (2015).
- Nuchtachvorn N., Macka M.: *Anal. Chim. Acta* 919, 70 (2016).

1L-02
PERSPEKTIVY ELIMINAČNÍ VOLTAMETRIE

LIBUŠE TRNKOVÁ

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

Citlivost voltametrie je často limitována velkým podílem kapacitní složky proudu a malým potenciálovým rozsahem (oknem); omezený na jedné straně anodickým rozpouštěním kovu či anodickou oxidací aniontů, na druhé straně vybijením základního elektrolytu a rozpouštědla. Potlačení kapacitního (nabíjecího) proudu při nízkých koncentracích depolarizátoru bylo elegantním způsobem vyřešeno pomocí střídavých a pulzních metod^{1,2}. Avšak současné potlačení kapacitní složky proudu a rozšíření potenciálového okna umožňuje eliminační voltametrie s lineárním polarizačním napětím (Elimination Voltammetry with Linear Scan – EVLS), jejíž teorie a verifikace je známá téměř dvacet let. Díky matematickému způsobu eliminace vybraných proudových složek se EVLS řadí k matematicky podloženým transformacím voltammetrických signálů^{3–5}. Eliminační procedura pracuje na základě rozdílné závislosti dílčí složky proudu (difúzní, kapacitní, kinetická) na rychlosti polarizace (scan rate). Eliminací vybraného nebo vybraných proudů je možné z naměřených voltammetrických křivek získat další užitečné informace o elektroodovém procesu anorganických i organických systémů^{6–10}. V příspěvku jsou uvedeny perspektivní aplikace EVLS, jako je: (a) možnost objasnit mechanismy elektrochemických procesů látek, jejichž redukce probíhá ve velmi negativních potenciálech, často skrytých v procesu redukce základního elektrolytu, (b) rychlá diagnostika adsorpčního stavu zkoumaného analytu, (c) rozlišení překrývajících se voltammetrických signálů a (d) snížení detekčních limitů. V diskusi je upozorněno na obecné omyly a předsudky, které brání širšímu použití tohoto matematického softwaru.

LITERATURA

- Bard A. J., Faulkner L. R.: *Electrochemical Methods, Fundamentals and Applications*, J. Wiley, New York 2000.
- Kissinger P. T., Heineman W. R.: *Laboratory Techniques in Electroanalytical Chemistry*, Marcel Dekker, New York 1984.
- Dračka O.: *J. Electroanal. Chem.* 402, 19 (1996).
- Trnková L.: *Chem. Listy* 95, 518 (2001).
- Trnkova L., Kizek R., Dračka O.: *Electroanalysis* 12, 905 (2000).
- Trnková L., Jelen F., Postbieglová I.: *Electroanalysis* 15, 1529 (2003); 18, 662 (2006).
- Trnkova L., Postbieglova I., Holik M.: *Bioelectrochemistry* 63, 25 (2004).
- Trnkova L.: *J. Electroanal. Chem.* 582, 258 (2005).
- Trnkova L.: *Application of elimination voltammetry with linear scan in bioelectrochemistry*, v knize: Utilizing of bio-electrochemical and mathematical methods in biological research, kap. 4, s. 51, Signpost, Kerala (2007).

10. Pilarova I., Kejnovska I., Vorlickova M., Trnkova L.: *Electroanalysis* 26, 2118 (2014).

4. Znaleziona J., Ginterova P., Petr J., Ondra P., Válka I., Ševčík J., Chrastina J., Maier V.: *Anal. Chim. Acta* 874, 11 (2015).

1L-03

IDENTIFIKACE SYNTETICKÝCH KANABINOIDŮ PŘÍMOU SPEKROMETRIÍ DART-LTQ Orbitrap.

JINDRA VALENTOVÁ, LADISLAV HABALA, FERDINAND DEVÍNSKY

*Farmaceutická fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Odbojárov 10, 832 32 Bratislava, Slovensko
valentova@fpharm.uniba.sk*

V posledních letech na drogové scéně dominují nové psychoaktivní látky, nazývané designové drogy, které mají napodobit účinek nelegálních drog a díky změně v chemickém složení jsou mimo kontrolu drogové legislativy¹. Jednu z nejpočetnějších skupin designových drog tvoří syntetické kanabinoidy, které byly detekovány od r. 2008 v různých bylinných směsích (např. Spice, K2) a jsou prodávány jako legální náhrada marihuany^{2,3}.

Podle chemické struktury se syntetické kanabinoidy řadí do několika skupin. Široká rozmanitost struktur, malé strukturální obměny, tvorba izomerů a nezměněné metabolity vyžadují vysokorozlišovací hmotnostní metody pro jejich analytickou identifikaci⁴.

Pro detekci syntetických kanabinoidů v rostlinných i práškových maticích byla vytvořena metoda s použitím iontového zdroje přímé analýzy v reálném čase (DART) ve spojení s vysokorozlišovacím analyzátozem typu Orbitrap. Předností DART analýzy je, že nevyžaduje extrakci rostlinných a pevných matic, ani žádnou jinou úpravu vzorku. Hmotnostní spektra je možné získat za několik sekund.

Byly analyzovány práškové vzorky a bylinné směsi zachycené Kriminologickým expertizním ústavem v Bratislavě v rámci Slovenska. Vzorky obsahovaly jednotlivě anebo ve směsích různé typy syntetických kanabinoidů: STS-135, AM-2201, AM-2233, AM-1248, JWH-122, UR-144, RCS-4, F-AKB-48. Struktura byla potvrzena další fragmentací MS spekter. Hmotnostní spektra z přímé analýzy tuhých vzorků obsahovala nižší pozadí matrice v porovnání se spektry z extraktů bylinných směsí. DART-HRMS analýza umožnila identifikovat syntetické kanabinoidy, které nebyly zachyceny GC-MS analýzou vzorků.

Tato práce vznikla za podpory grantu CEBV-26240120034, VEGA-1/3046/2016

LITERATURA

1. European Drug Report 2014: Trends and developments. EMCDDA, Lisbon, (2014).
2. Seely K. A., Prather P. L., James L. P., Moran J. H.: *Marijuana-based drugs: Mol. Intervention* 11, 36 (2011).
3. Seely K. A., Lapoint J., Moran J. H., Fattore L.: *Prog. Neuro-Psychopharmacol. Biol. Psychiatry* 39, 234 (2012).

1L-04

MICRODIALYSIS SAMPLING – POSSIBILITY OF HAEMOGLOBINE ELIMINATION DURING THE NITRIC OXIDE DETECTION?

MARTINA BANCÍŘOVÁ^a, LUCA BOLELLI^b

*^aDepartment of Medical Chemistry and Biochemistry, Faculty of Medicine and Dentistry, Palacký University, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc, Czech Republic, ^bUniversity of Bologna, Via San Donato 15, Bologna, 40127, Italy
martina.bancirova@upol.cz*

Nitric oxide (NO) persists in solution for several minutes in micromolar concentrations before it reacts with oxygen to form much stronger oxidants like nitrogen dioxide. Nitric oxide is removed within seconds *in vivo* by diffusion through tissues to enter red blood cells and reacts with oxyhemoglobin. A saturated solution of nitric oxide is 2.0 mM and has a half-life of < 1 s in water. The half-life of NO is not a constant value and is inversely proportional to the concentration of nitric oxide, so the half-life becomes much longer as nitric oxide becomes more dilute. Physiological solutions are approximately up to 200,000 times more diluted. The half-life of 5.0 nM nitric oxide (the minimum concentration required to activate guanylate cyclase) is 70 hours (in the absence of haemoglobin).

One of the chemiluminescent (CL) detections is based upon the reaction between NO and the luminol-H₂O₂ system which is specifically reactive to NO. As a source of luminol-H₂O₂ system was used Bluestar[®] Forensic reagents. A saturated solution of NO and *Paramecium caudatum* solution were used as the sources of nitric oxide and connected with microdialysis sampling and chemiluminescent detection. Lyophilized solution of human haemoglobin was added in the wide range of dilutions. The changes in the chemiluminescent intensity were measured as a dependence on time during microdialysis sampling and as an immediate chemiluminescent intensity after addition of appropriate amount of the microdialysis samples. The measurements were done for different perfusion rates (0.1 – 20 µl per minute) with two basic types of microdialysis probes (stiff and flexible). The changes of the chemiluminescent intensities were compared for haemoglobin solutions with and without the microdialysis and compared with the haemoglobin solutions containing nitric oxide.

This work was financially supported by RVO: 61989592.

1L-05

ANALÝZA OXIDAČNÍCH PRODUKTŮ VYBRANÝCH BIOFLAVONOIDŮ

ROMANA SOKOLOVÁ^a, ILARIA DEGANO^b, ŠÁRKA RAMEŠOVÁ^a, JANA KOCÁBOVÁ^a, JAN FIEDLER^a, JÁN TARÁBEK^c

^a Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, v.v.i., Dolejškova 3, 18223 Praha, Česká republika, ^b University of Pisa, Department of Chemistry and Industrial Chemistry, Via Moruzzi 13, 56124 Pisa, Italy, ^c Ústav organické chemie a biochemie, v.v.i., Flemingovo n. 2, 16610 Praha, Česká republika
sokolova@jh-inst.cas.cz

Předmětem výzkumu je objasnění oxidačních vlastností bioflavonoidů. Tyto látky mají významné antioxidační a antimikrobiální vlastnosti, jsou známy jejich protizánětlivé a protinádorové účinky, byly používány jako barviva historických předmětů^{1,2}.

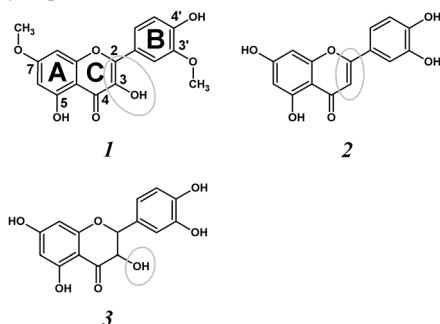


Schéma 1. Strukturální vzorec flavonolu rhamnazuinu 1, flavonu luteolinu 2 a flavanonu taxifolinu 3

Zástupcem flavonolů byl rhamnazin 1 (Schéma 1). Pokud sloučenina neobsahuje hydroxylovou skupinu C3-OH, jako je to v případě flavonu luteolinu 2, nebo dvojnou vazbu mezi atomy uhlíku C2 a C3 (flavanon taxifolin 3), oxidace probíhala jiným způsobem³⁻⁵. Elektroanalytické studium komplikovaného oxidačního mechanismu doplnily techniky *in situ* UV-Vis a IČ spektroeletrochemie a chromatografické metody HPLC-DAD a HPLC-ESI-MS/MS. Byl studován také rozklad vzdušným kyslíkem za přirozených podmínek.

Tato práce vznikla za podpory grantů České Akademie věd M200401201 a Grantové Agentury České Republiky (14-05180S).

LITERATURA

1. Ramešová Š., Sokolová R.: Chem. Listy 108, 507 (2014).
2. Amic A., Markovic Z., Markovic J. M. D., Stepanic V., Lucic B., Amic D.: Food Chem. 152, 578 (2014).
3. Ramešová Š., Degano I., Sokolová R.: Electrochim. Acta 133, 359 (2014).
4. Ramešová Š., Sokolová R., Degano I.: Electrochim. Acta 182, 544 (2015).
5. Kocábová J., Fiedler J., Degano I., Sokolová R.: Electrochim. Acta 187, 358 (2016).

1L-06

SPECTROSCOPIC DISCRIMINATION OF BEE POLLEN SAMPLES

ROMAN BLEHA^a, ANDRIY SYNYTSYA^a, TETIANA SHEVTSOVA^a, JÁN BRINDZA^b, JANA ČOPIKOVÁ^a

^a Department of Carbohydrates and Cereals, Faculty of Food and Biochemical Technology, University of Chemistry and Technology Prague, 16628 Prague, Czech Republic, ^b Institute of Biodiversity Conservation and Biosafety, Faculty of Agrobiodiversity and Food Resources, Slovak University of Agriculture, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, Slovak republic
blehar@vscht.cz

Bee pollen is a mixture of pollen grains, nectar and bee excreta. Unifloral bee pollens are usually uniform in their chemical composition, while polyfloral ones commonly have highly variable composition depending on the ratio between the individual sources^{1,2}. For sorting and quality estimation, it is important to identify regular botanical origin and botanical homogeneity of bee pollen.

Nine bee pollen samples of different botanical origin were obtained from various locations in Slovak Republic. From each sample a set of 100 bee pollen granules was randomly chosen for the FTIR ATR measuring. In addition, several colour fractions were defined for each sample and 10 bee pollen granules of each fraction were randomly chosen for the FT Raman measuring. IR and Raman marker bands of proteins, polysaccharides, pigments and nectar fructose were identified and used for bee pollen identification. Spectroscopic data were processed by multivariate statistical methods (HCA, PCA) using Statistica 10 (StatSoft, USA) and TQ Analyst (ThermoScientific, USA) software. FTIR ATR and FT Raman spectra showed high sensitivity to bee pollen composition; the latter also indicated plant pigments (carotenoids, flavonoids) as chemical markers of botanical origin. The combination of vibration spectroscopy and multivariate statistics is effective for bee pollen discrimination and thus may evaluate quality and authenticity of bee pollen.

Financial support from specific university research (MSMT No 20/2015 and 20-SVV/2016).

REFERENCES

1. Bianchi G., Murellia C., Ottaviano E.: Phytochem. 29, 739 (1990).
2. Xu X., Gao Y., Sun L.: Food Res. Int. 48, 650 (2012).

1L-07

PŘENOS XENOBOTIK PŘES BIOMIMETICKÉ MEMBRÁNY

**TOMÁŠ NAVRÁTIL^a, ŠTĚPÁNKA SKALOVÁ^{a,b},
IVANA ŠESTÁKOVÁ^a, VLASTIMIL VYSKOČIL^b, JIŘÍ
BAREK^b**

^a Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, ^b Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2, Česká republika
tomas.navratil@jh-inst.cas.cz

S xenobiotiky (léky, těžkými kovy a dalšími biologicky významnými látkami) přicházejí běžně do styku rostliny, zvířata a člověk. Pro zahájení jejich účinku musí být nejprve přeneseny do buněk těchto organismů, kde se účastní metabolických procesů. Každá z látek musí být nejprve transportována přes biologické (fosfolipidové) membrány (PLMs). Po vstupu do buňky mohou být transportovány do subcelulárních struktur (např. z cytosolu do vakuoly). Některé mohou i interagovat s DNA nebo být do ní interaklovány. Objasnění transportních mechanismů a charakterizace forem, v nichž jsou transportovány, hraje klíčovou roli pro pochopení distribuce biologicky významných látek v reálných buňkách.

Náš tým se zaměřuje především na aplikaci elektrochemických, biochemických a spektrálních metod aj. Řešení problému lze rozdělit do dvou základních skupin:

1. Vývoj spolehlivých a citlivých analytických metod pro detekci a stanovení specií transportovaných přes PLMs (včetně vývoje nových či modifikace tradičních elektrod),
2. Vývoj a aplikace metod pro identifikaci a charakterizaci transportních procesů přes PLMs.

V příspěvku budou prezentovány především výsledky získané našim týmem v tomto oboru za poslední období¹⁻⁶. Pozornost byla zaměřena především na transport těžkých kovů, jejich komplexů a fytochelatinů přes biomimetické membrány stabilizované na pevném povrchu⁶ nebo porézním nosiči¹⁻⁵.

Tato práce vznikla za finanční podpory Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.

LITERATURA

1. Parisova M., Navratil T., Sestakova I., Jaklova Dyrtrtova J., Marecek V.: *Int. J. Electrochem. Sci.* 8, 27 (2013).
2. Navratil T., Sestakova I., Stulik K., Marecek V.: *Electroanalysis* 22, 2043 (2010).
3. Novakova K., Navratil T., Sestakova I., Marecek V., Chylkova J.: *Chem. Listy* 108, 219 (2014).
4. Novakova K., Navratil T., Sestakova I., Le M. P., Vodickova H., Zamecnikova B., Sokolova R., Bulickova J., Gal M.: *Monatsh. Chem.* 146, 819 (2015).
5. Navratil T., Novakova K., Josypcuk B., Sokolova R., Sestakova I.: *Monatsh. Chem.* 147, 165 (2016).
6. Navratil T., Sestakova I., Marecek V.: *Int. J. Electrochem. Sci.* 6, 6032 (2011).

1L-08

KVALITA HOVĚZÍHO MASA Z EKOLOGICKÉHO A KONVENČNÍHO CHOVU U PLEMENE GALLOWAY

**MAGDA DOLEŽALOVÁ, SILVIE DAŇKOVÁ, LENKA
VEVERKOVÁ**

Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně,
Vavrečkova 275, 760 01 Zlín, Česká republika
mdolezalova@ft.utb.cz

Ekologické zemědělství je zvláštní druh zemědělského hospodaření, který dbá na životní prostředí a jeho jednotlivé složky stanovením omezení použití látek a postupů, které jsou zdrojem znečištění či kontaminace prostředí. Dále se zde zvýšeně dbá na vnější životní projevy a pohodu chovaných hospodářských zvířat.

Spotřeba hovězího masa v ČR dosáhla historického vrcholu v letech 1989–1990, a to přibližně 30 kg (v hodnotě „na kosti“) na průměrného obyvatele a rok. Od té doby jeho spotřeba významně klesá a v roce 2014 byla na hodnotě 8 kg, tedy jedná se o pokles spotřeby o více než dvě třetiny. Hovězí maso plemene Galloway je vysoce kvalitní maso s nízkým obsahem tuku a řadou zdraví prospěšných látek (polyenových nenasycených mastných kyselin, plnohodnotných bílkovin a esenciálních aminokyselin).

V této práci byly sledovány nutriční a senzorní parametry hovězího masa plemene Galloway v závislosti na způsobu chovu (ekologický versus konvenční chov). Vzorky byly pro dané analýzy odebrány bezprostředně po porážce patnáctiměsíčních mladých býčků z hovězího roštěnce (*musculus longissimus lumborum et thoracis*) a hovězí kýty (*musculus semimembranosus*). U odebraných vzorků byl analyzován obsah vody, tuku, mastných kyselin (GC/FID), dusíkatých látek, aminokyselin (IEC), dále bylo měřeno pH v průběhu zrání, hmotnostní ztráty během tepelné úpravy, mikrobiologický rozbor a senzorní analýza.

Bylo zjištěno, že obsah živin v mase nebyl významně ovlivněn způsobem chovu, ale naměřené hodnoty byly z výživového hlediska příznivější ve prospěch ekologicky produkovaného masa. Rozdíly byly také sledovány v celkovém obsahu tuku, ve šťavnatosti a konzistenci. Smysl „biomasa“ lze spatřovat především v souvislosti s jeho produkcí v rámci ekologického zemědělství s jeho šetrným přístupem nejen k životnímu prostředí, ale zejména ke zvířatům samotným.

LITERATURA

1. Daley C. A., Abbott A., Doyle P. S., Nader G. A., Larson S.: *Nutr. J.* 9, 10 (2010).
2. Jensen W. K., Devine C., Dikeman M., v knize: *Encyclopedia of Meat Sciences*. 1. vyd. Great Britain, Oxford 2004.
3. Ingr I.: *Potravinářská revue*. 2, 24 (2004).
4. Raes K., De Smet S., Demeyer D.: *Anim. Feed Sci. Tech.* 113, 1 (2004).

1L-09**SLEDOVÁNÍ VLIVU EXTRUZE NA RVA-KŘÍVKY
LABORATORNĚ PŘIPRAVENÝCH EXTRUDÁTŮ****PETRA SMRČKOVÁ, ROBERTA FILEPOVÁ, DAVID
ANTONIO CHENA ALDAO, EVŽEN ŠÁRKA***VŠCHT-Praha, Ústav sacharidů a cereálií,
Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika
Petra.Smrckova@seznam.cz*

Extruze je mechanicko-termický způsob zpracování vstupních surovin. Během extruze dochází ke stlačení vstupní směsi a k rychlému vypuštění skrz úzkou trysku do okolní atmosféry¹. Při teplotách mezi 120–180 °C a tlacích 55–250 barů dochází k pufování výrobků². K ověření vlastností extrudovaných výrobků byl použit jednošnekový laboratorní extrudér KE 19 Německé firmy Brabender. Byly připraveny vstupní směsi s 10 % přídavkem vody na hmotu. Parametry extruze byly nastaveny, tak že byla použita šnekovnice s kompresním poměrem 1:2, rychlost dávkování vstupní směsi byla 10 ot. / min, výstupní tryska měla průměr 4 mm a teplota podél extrudéru byla udržována konstantní (50, 90, 120, 140 °C). Otáčky šnekovnice byly měněny od 80 do 140 ot./min s krokem 20 ot./min. Získané vzorky byly proměřeny na reometru RVA 4500 (Perten, Švédsko) byla použita předdefinovaná metoda „cooked product RVA profile“ (lit.³). Při této metodě se vyhodnocuje maximální viskozita při 25 °C (cold paste viscosity), maximální viskozita před ochlazením (hot viscosity) vzorku a konečná viskozita na konci měření (final viscosity). Hodnoty těchto parametrů jsou spojovány s tepelně poškozenými škroby, kdy maximum „cold paste viscosity“ se vyskytuje pouze v tepelně upravených škrobech nikoliv v nativních škrobech. Maximum (hot viscosity) se spojuje s přítomností nezmazovatělych škrobových zrn ve vzorku a final maximum by mělo souviset s retrogradací škrobu⁴. Ve vzorcích extrudovaných hrachových škrobů, pšeničných škrobů a kukuřičných škrobů byly tyto parametry sledovány a dány do souvislosti s rychlostí otáčení šnekovnice.

Práce byla zpracována v rámci řešení projektu výzkumu a vývoje MZe QJ1310219 „Pšenice se specifickým složením a vlastnostmi škrobu pro potravinářské a průmyslové účely.“

LITERATURA

1. Kadlec a kol. : *Technologie potravin I*, s. 180, Praha 2002.
2. Šárka E., Čopikova J., Smrckova P.: *Listy cukrovarnické a řepařské 129*, 350 (2013).
3. Whalen P. J., v knize: *The RVA handbook (5.vydání), Extruded Products and Degree of Cook*, kap. 6, s. 75. AACC International, St. Paul, Minnesota 2015.
4. Masatcioglu M. T., Yalcin E., Hwan P. J., Ryu G. H., Celik S., Koxsel H.: *Innovative Food Sci. Emerging Technol.* 26, 302 (2014).

1L-10**Vliv katalytického vylučování vodíku
na rtuťových elektrodách na redukci
guaninových zbytků v DNA****MIROSLAV FOJTA^a, ALEŠ DAŇHEL^a, LUDEK
HAVRAN^a, LIBUŠE TRNKOVÁ^b***^a Biofyzikální ústav AVČR, v.v.i., Královopolská 132, 612 65
Brno, ^b Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy
univerzity, Kamenice 5, 625 00 Brno, Česká republika
fojta@ibp.cz*

Báze nukleových kyselin obsahují skupiny redukovatelné na rtuťových elektrodách (např. HMDE) nebo oxidovatelné na uhlíkových elektrodách. Cytosin a adenin podléhají HMDE ireversibilní elektrochemické redukci za vzniku katodického píku. O guaninu (G) je známo, že na HMDE rovněž redukován^{1–3}, dosud se však nepodařilo přímo pozorovat odpovídající elektrochemický signál. Jelikož k redukci G dochází při vysoce negativních potenciálech ($\leq -1,6$ V v neutrálním prostředí obsahujícím amonné ionty), je absence definovaného signálu obvykle přisuzována jeho překrytí proudy vznikajícími rozkladem základního elektrolytu. Díky tomu, že redukční produkt G (7,8-digydroguanin) lze anodicky oxidovat zpět na G okolo $-0,3$ V (kde dává pík označovaný jako pík G), je možno redukci G studovat nepřímo a využít zmíněný signál k analýze nukleových kyselin (včetně strukturních studií³). Skutečnost, že potenciálová oblast, kde je G redukován, se překrývá s oblastí vylučování vodíku, vedla k úvahám o chemickém mechanismu redukce G vodíkem generovaným na povrchu elektrody.

V naší předchozí práci⁴ jsme studovali elektrochemické vlastnosti DNA modifikované cisplatinou. Ukázali jsme, že redukce platinových aduktů je doprovázena katalytickým vylučováním vodíku a že tento proces podporuje redukci zbytků G v DNA. Podrobnější studie tohoto efektu ukázala, že v přítomnosti aduktů DNA s cisplatinou dochází k posunu potenciálu, jemuž je nutno vystavit DNA na povrchu HMDE, aby došlo k redukci G, k méně negativním hodnotám. Podobný jev jsme pozorovali také v případě, kdy byla na HMDE adsorbována nemodifikovaná DNA a cisplatin byla přítomna jako volný komplex v základním elektrolytu. Tato pozorování spolu s dalšími experimenty (např. vliv dostupnosti protonů v závislosti na pH) naznačují, že redukce G na rtuťových elektrodách probíhá přinejmenším částečně chemickou cestou reakcí s generovaným vodíkem. V práci diskutujeme alternativní mechanismy vzniku vodíkových radikálů na HMDE např. mechanismem vzniku a rozkladu amonného amalgámu¹.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR č. 16-01625S.

LITERATURA

1. Danhel A., Havran L., Trnkova L., Fojta M.: *Electroanalysis*, accepted (2016).
2. Studnickova M., Trnkova L., Zetek J., Glatz Z.: *Bioelectrochem. Bioenerg.* 21, 83 (1989).
3. Vidlakova P., Pivonkova H., Kejnovska I., Trnkova L., Vorlickova M., Fojta M., Havran L.: *Anal. Bioanal.*

Chem. 407, 5817 (2015).

4. Horakova P., Tesnohlikova L., Havran L., Vidlakova P., Pivonkova H., Fojta M.: Anal. Chem. 82, 2969 (2010).

1L-11

VÝVOJ NOVÝCH SPEKTROSKOPICKÝCH METOD PRO KLINICKOU DIAGNOSTIKU DIABETU MELLITU 1. TYPU

LUCIE HABARTOVÁ^a, HANA LOGEROVÁ^b, JAN VAVŘINEC^c, VLADIMÍR SETNÍČKA^a

^a Ústav analytické chemie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, ^b Ústav biochemie, buněčné a molekulární biologie, 3. Lékařská fakulta, Univerzita Karlova, Ruská 87, 100 00 Praha 10, ^c Klinika dětí a dorostu, Fakultní nemocnice Královské Vinohrady, Šrobárova 50, 100 34 Praha 10, Česká republika
hana.logerova@lf3.cuni.cz

Diabetes mellitus je označován jako civilizační onemocnění, jehož léčba je velmi náročná a současné diagnostické postupy jsou nedostačující pro jeho včasné odhalení¹. Příčiny a patogeneze různých typů diabetu jsou odlišné, nicméně ve všech případech je společným příznakem hyperglykémie, dyslipidémie a poruchy metabolismu proteinů^{1,2}.

Pro tuto pilotní studii byl zvolen diabetes mellitus 1. typu (DM1), který se manifestuje ve věku kolem 15 let, a je pro něj typický selektivní a postupný zánik β -buněk Langerhansových ostrůvků pankreatu vedoucí až k doživotní závislosti pacienta na dodávání inzulínu^{1,2}.

Patologické procesy podílející se na vzniku a rozvoji DM1 jsou spojeny s produkcí různých proteinů, např. antigenů na povrchu β -buněk či signálních molekul iniciujících a zprostředkujících zánětlivou reakci². Strukturu, resp. konformaci takových proteinů jsou potenciálně schopny rozpoznat vysoce citlivé metody molekulové spektroskopie – cirkulární dichroismus a Ramanova optická aktivita³. Tyto metody byly proto použity pro analýzu krevních vzorků diabetiků a kontrolních jedinců s cílem identifikovat rozdíly ve spektrální odpovědi a nalézt tak nové potenciální spektrální markery specifické pro toto závažné metabolické onemocnění. Pro prohloubení informací o struktuře studovaných látek byly chiroptické analýzy doplněny o konvenční infračervenou a Ramanovu spektroskopii.

Pozorované spektrální odlišnosti mezi pacienty s DM1 a kontrolními jedinci potvrdily vysoký potenciál kombinace chiroptické a konvenční molekulové spektroskopie v minimálně invazivní diagnostice DM1. Shoda mezi spektrálními pozorováními a klinickou diagnózou studovaných jedinců navíc naznačuje, že tyto metody by mohly být využitelné nejen v diagnostice DM1, ale i při sledování průběhu léčby diabetiků.

Tato práce byla financována z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT: 20-SVV/2016), Operačního programu Praha – Konkurenceschopnost (CZ.2.16/3.1.00/22197, /21573 a /24503) a Národního programu udržitelnosti (NPU MŠMT: LO1215 – 34807/2013

a LO1601 – 43760/2015).

LITERATURA

1. Levy D.: *Type 1 Diabetes*. Oxford University Press, Oxford 2011.
2. Holeček M.: *Regulace metabolismu cukrů, tuků, bílkovin a aminokyselin*. Grada, Praha 2006.
3. Berova N., Nakanishi K., Woody R. W. (Eds.): *Comprehensive Chiroptical Spectroscopy*. John Wiley & Sons Inc., New Jersey 2012.

1L-12

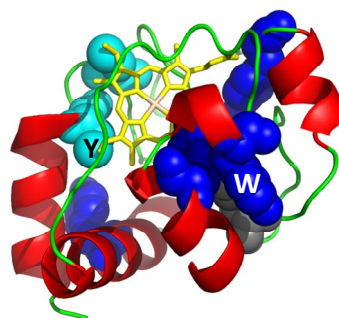
ELEKTROCHEMIE A EPR SPEKTROSKOPIE CYTOCHROMU C A JEHO STRUKTURNÍCH ANALOG

DAVID NOVÁK^a, MARTINA ZATLOUKALOVÁ^a, MILOŠ MOJVOVIĆ^b, ALEXANDRA PAVICEVIĆ^b, JAN VACEK^a

^a Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta Univerzity Palackého, Hněvotinská 3, 775 15 Olomouc, Česká republika, ^b Faculty of Physical Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia
david.novak00@gmail.com

Savčí cytochrom *c* je redoxně aktivní protein s integrovaným systémem hemu a hmotou okolo 12 kDa. Primárně zastává roli elektronového přenašeče, jakožto součást respiračního řetězce lokalizovaného v membránovém systému mitochondrií. Slabá elektrostatická interakce s membránami umožňuje cytochromu *c* opustit mitochondrii a zasahovat tak do dalších buněčných procesů, např. apoptózy.

Předložený příspěvek cílí na studium redoxních přeměn nativního cytochromu *c* včetně jeho strukturních analog s eliminovaným systémem hemu (apo-cytochrom *c*) nebo pouze atomem železa (porfyrin-cytochrom *c*). Výsledky elektrochemických analýz byly interpretovány společně s výsledky dosaženými pomocí spektroskopických a imunochemických nástrojů.



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

Elektrochemické záznamy nativního cytochromu *c* a jeho dvou strukturálních analog se od sebe liší, čehož může být využito při studiu redoxních vlastností, struktury a funkce dalších hemoproteinů. Závěrem byla provedena série analýz pomocí elektronové paramagnetické rezonance (EPR), jejíž výsledky jsou komplementární s výsledky elektrochemických analýz.

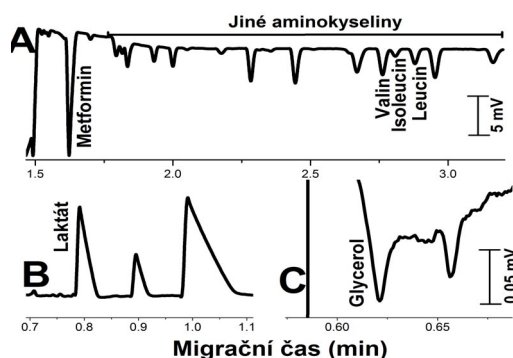
Výzkum redoxních přeměn proteinů cílící na biomedicínské aplikace je financován projektem GAČR 14-08032S a projektem MŠMT LD14033. Tento výzkum je částečně podporován projektem IGA_LF_2016_012 Univerzity Palackého v Olomouci.

1L-13 KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZA VE SPOJENÍ S MIKRODIALÝZOU JAKO ÚČINNÝ NÁSTROJ PRO FYZIOLOGICKÝ VÝZKUM

PETR TŮMA

*Univerzita Karlova v Praze, 3. lékařská fakulta, Ústav biochemie, molekulární a buněčné biologie, Ruská 87, 100 00 Praha 10, Česká republika
petr.tuma@lf3.cuni.cz*

Mikrodialýza představuje moderní málo invazivní techniku pro *in vivo* vzorkování tkání a orgánů¹. Miniaturní mikrodialyzační sonda vybavená semipermeabilní membránou je implementována do studované tkáně; během promývání sondy difundují metabolity z lokální oblasti tkáně přes semipermeabilní membránu do perfuzátu, který je sbírán pro následnou analýzu. Vysoká účinnost mikrodialýzy je zajištěna pouze při nízkém průtoku perfuzátu sondou, který se pohybuje kolem 0,5–2 $\mu\text{l min}^{-1}$. Schopnost pracovat s takto malým množstvím vzorku je charakteristická pro kapilární



Obr. 1. Soubor elektroforetických metod pro stanovení metabolitů v mikrodialyzátech tukové tkáně. A – CE separace aminokyselin a antidiabetika metforminu, BGE – 3,2 M kyselina octová + 20% methanol, pH 1,9²; B – CE separace laktátu, BGE – 20 mM CHES/NaOH, pH 9,5³; C – CE separace glycerolu⁴, BGE – 60 mM H₃BO₃/NaOH, pH 9,0; Podmínky: křemenná kapilára, vnitřní průměr 25 μm , celková délka 31,5 cm, k detektoru 18 cm, C⁴D s frekvencí 1 MHz; napětí +30 kV; úprava vzorku – 7,5 μl mikrodialyzátu smícháno s 21,5 μl acetonitrilu

elektroforézu, která je s mikrodialýzou v on- nebo off-line spojení. Další výhodou je použití bezkontaktní vodivostní detekce (C⁴D), pomocí níž lze citlivě detegovat nízkomolekulární metabolity bez nutnosti provádět složité derivatizační reakce.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 15-03139S.

LITERATURA

- Saylor R. A., Lunte S. M.: *J. Chromatogr. A* 1382, 48 (2015).
- Tůma P., Gojda J.: *Electrophoresis* 36, 1969 (2015).
- Tůma P., Samcová E., Štulík K.: *Anal. Chim. Acta* 685, 84 (2011).
- Tůma P., Málková K., Wedellová Z., Samcová E., Štulík K.: *Electrophoresis* 31, 2037 (2010).

1L-14 PERSPEKTIVY VYUŽITÍ KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZY V MEDICÍNĚ

JANA HORSKÁ^a, KATEŘINA VÍTKOVÁ^b, JURAJ ŠEVČÍK^a, JAN PETR^a

*^a Katedra analytické chemie, Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 77146, Olomouc,
^b Fakultní nemocnice Ostrava, 17. listopadu 1790/5, 708 52 Ostrava – Poruba, Česká republika
janahoska9@gmail.com*

Kapilární elektroforéza (CE) je významná separační technika, která se v posledních letech dostává do popředí při analýzách nízkomolekulárních látek. Jako předmět našeho zájmu jsme si vybrali tři aktuální témata na poli medicíny.

V prvním jsme se zabývali otázkou stanovení antileukemik. Bosutinib, canertinib, dasatinib, imatinib, vatalanib, erlotinib a pazopanib jsou klasifikovány jako inhibitory tyrosinových kináz, které odstartovaly éru tzv. cílené terapie¹. Všechny sedm léčiv bylo analyzováno pomocí kapilární zónové elektroforézy (CZE). Separaci se podařilo získat v optimalizovaném systému 100 mM fosfát/NaOH pH = 2,5 při napětí 25 kV do 8 min s následujícím migračním pořadím: vatalanib, imatinib, bosutinib, canertinib, dasatinib, pazopanib, erlotinib².

V druhém tématu jsme se zabývali analýzou alloxanu, látky běžně používané k vyvolání diabetu u laboratorních zvířat³, nicméně zajímavé z hlediska možné hypotézy jejího vzniku v procesu bělení mouky. Alloxan byl při analýze pomocí CZE separován spolu se svými potenciálními prekurzory (kyselina močová a kyselina barbiturová) a hydrolyzačním produktem (kyselinou alloxanovou). Po optimalizaci podmínek byly jako nejlepší nalezeny 50 mM borát/NaOH pH 8,0 při aplikovaném napětí 20 kV, kdy proběhla separace všech 4 analytů do 2 minut.

V posledním případě jsme vyvíjeli metodu na stanovení antiandrogenik (xemestane, toremifene, letrozole, anastrozole a mifepristone) ve vodách. Všechny antiandrogeny bylo možné rozseparovat pomocí micelární elektrokinetické chromatografie v systému 50 mM borát/NaOH

pH 9,5 s přísávkem 50 mM SDS a 10 % 1-propanolu. Všechny 5 analytů bylo separováno do 7 minut.

Autoři děkují projektu MŠMT (NPU LO 1305), projektu UP Olomouc (IGA_PrF_2016_016) a institucionální podpoře MZ ČR RVO-FNOs/2015 za finanční podporu výzkumu.

LITERATURA

- Huang Li J., Huang Y., Ye L., Zhou Z., Xiang G., Xu L.: *J. Pharm. Biomed. Anal.* 70, 7026 (2012).
- Horská J., Ginterová P., Ševčík J., Petr J.: *Chromatographia* 77, 1413 (2014).
- Szkudelski T.: *Physiol. Res.* 50, 537 (2001).

1L-15

ON-COLUMN DERIVATIZATION BY *o*-PHTHALALDEHYDE – PROS AND CONS

JUSTYNA PIECHOCKA^{a,b}, RAFAŁ GŁOWACKI^a

^a *University of Łódź, Faculty of Chemistry, Department of Environmental Chemistry, 163 Pomorska Street, 90-236 Łódź*

^b *Polish Chemical Society, 16 Freta Street, 00-227 Warszawa, Poland*

stachniuk.justyna@gmail.com

Most of biologically active sulfur-containing compounds lack of structural features necessary for a production of a signal compatible with commonly used HPLC detectors including UV-Vis and FLD. Moreover, common problems to be solved concern also their high hydrophilicity, low concentration, instability in isolated biological fluid and complexity of the matrix. Therefore, the chemical derivatization reaction is usually employed to overcome these problems because it mainly increases hydrophobicity, detectability as well as chemical stability of target analytes. Importantly, chemical derivatization reaction can be conducted in pre-column or post-column mode but more and more often on-column mode is exploited. This technical solution can be advantageous for numerous reasons.

In recent years, members of our scientific group have elaborated several HPLC based methods enabling determination of biologically active sulfur-containing compounds in different matrices such as wine, human urine and plasma after on-column derivatization by *o*-phthalaldehyde. The major features of these assays will be shortly presented but special attention will be paid on on-column derivatization step. Its advantages and drawbacks as well as capabilities of *o*-phthalaldehyde utilization will be also discussed¹⁻⁴.

REFERENCES

- Szlauer A., Mielimonka A., Głowacki R., Borowczyk K., Stachniuk J., Undas A.: *Thrombosis Res.* 136, 911 (2015).
- Głowacki R., Borowczyk K., Bald E.: *Amino Acids* 42, 247 (2012).
- Głowacki R., Bald E., Jakubowski H.: *Amino Acids* 41, 187 (2011).
- Głowacki R., Borowczyk K., Bald E., Jakubowski H.: *Anal. Bioanal. Chem.* 396, 2363 (2010).

1L-16

ANALYTICAL CHEMISTRY OF NANOMATERIALS

JÁN LABUDA

Institute of Analytical Chemistry, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinskeho 9, 812 37 Bratislava, Slovakia

jan.labuda@stuba.sk

Nanoparticles of metals, nanorods and nanotubes, fullerenes, and quantum dots help analytical chemistry at an improvement of selectivity and sensitivity of wide spectrum of methods for the detection and determination of number of analytes of chemical, clinical, pharmaceutical, environmental and technological interest. Two main aspects of the basic research are typically considered:

- how nanoparticles can be used to improve analytical procedures,
 - how to purify, characterize and detect nanoparticles in industrial bulk materials as well as in complex matrices such as environmental and biological samples.
- Needs of Analytical Chemistry towards Nanotechnology can be stated:
- to make reproducible nanomaterials for analysis, it is critical to be able to perform analyses at the nm scale.
 - new tools for analyzing targets in living cells and even in whole animals.

Among requirements of nanotechnology and engineered nanomaterials towards Analytical Chemistry, nanometrology, sampling and sample handling, validation, measurement uncertainty as well as good laboratory practices have to be mentioned. Methodologies for nanomaterials environmental risk assessment are subject of great interest of toxicology. Methods of their evaluation will be mentioned including tests based on interactions with biomolecules such as DNA and enzymes. As far to DNA damage, the comet assay is the most widely utilized method together with, plasmid nicking/agarose gel electrophoresis assay, alkaline precipitation assay and gas chromatography/mass spectrometry (GC/MS) or liquid chromatography/mass spectrometry (LC/MS).

Among effective tools of bioanalytical chemistry, DNA-based biosensors have been numerously demonstrated as effective warning devices for the tests of DNA affinity interactions with drugs and chemicals as well as the tests of effects prooxidants and UV light on DNA. Our results on the investigation of metallic nanomaterials and quantum dots known to influence the yield of UV irradiation will be reported as well.

This work was supported by the Scientific Grant Agency VEGA of the Slovak Republic (Project 1/0361/14) and the Competence Center for SMART Technologies for Electronics and Informatics Systems and Services, ITMS 26240220072, funded by the Research&Development Operational Programme from the ERDF.

1L-17**CHARAKTERIZACE NANOČÁSTIC KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZOU****JAN PETR, DANIEL BARON, JANA HORSKÁ, ANDREA ŠEBESTOVÁ**

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

Kapilární elektroforéza (CE) je známá separační technika, která se používá na analýzu celé řady látek. Velice zajímavou aplikací kapilární elektroforézy je oblast analýzy „větších“ objektů jako jsou buňky, mikroorganismy a v neposlední řadě nanočástice¹. Právě v případě nanočástic tato technika může sloužit jako účinný nástroj pro charakterizaci jejich chování v prostředí, které odpovídá záměru jejich použití (např. vnitřní prostředí buněk).

Impulzem pro naši práci byly otazníky vzešlé při vývoji metody pro CE separaci modifikovaných a nemodifikovaných nanočástic². Bylo pozorováno (pomocí CE i měřením z potenciálu), že nanočástice mohou získat úplně jiný povrchový náboj v prostředí běžných pufrů (jak elektroforetických, tak pufrů, které simulují prostředí buněk). To nás vedlo ke studiu uvolňování běžného stabilizačního činidla nanočástic, citrátů, v závislosti na množství přidaného pufru. Pilotní studie ukázala, že dochází k uvolnění (resp. iontové výměně) v závislosti na charakteru daného pufru, především na velikosti a náboji vyměňovaných iontů.

Různá modifikace povrchu nanočástic (resp. „iontového obalu“) pak vede i k dalším efektům v CE, především díky rozdílné pohyblivosti nanočástic v daném prostředí. Zde jsme studovali využití těchto efektů pro popis online prekoncentrací. Zabývali jsme se zakoncentrováním na rozhraní elektrolytů o rozdílné iontové síle („stacking“), na rozhraní elektrolytů o různém pH („dynamic pH junction“)³ a efekty při elektrokinetickém dávkování nanočástic. Všechny zmíněné způsoby kromě vlastní prekoncentrace poskytují další zásadní informaci pro charakterizaci nanočástic, protože zužují jejich zónu a tím de facto znemožňují interpretaci výsledků z pohledu distribuce velikosti částic.

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

LITERATURA

1. Petr J., Maier V.: *TrAC Trends Anal. Chem.* 31, 9 (2012).
2. Petr J., Teste B., Descroix S., Siaugue J.-M., Gareil P., Varenne A.: *Electrophoresis* 31, 2754 (2010).
3. Cacho C., Marková Z., Ševčík J., Zbořil R., Petr J.: *J. Chromatogr. A* 1364, 59 (2014).

1L-18**CONDUCTOMETRIC STUDY OF TRIPLE ION FORMATION OF IONIC LIQUIDS IN DICHLOROMETHANE****AGNIESZKA BORUŃ, ADAM BALD**

*University of Łódź, Department of Physical Chemistry, Pomorska 163, 90-236 Łódź, Poland
chmielewska.a@gmail.com*

In low permittivity solvent ($\epsilon_r < 10$) such as dichloromethane salts are strongly associated and exist as free ions, ion pairs or higher aggregates¹⁻³.

A new method of analysis of conductivity data based on low concentration Chemical Model (lcCM)⁴ to the solutions containing free ions, ion pairs, and triple ions will be presented.

Molar conductances of the ionic liquids 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate [emim][BF₄] and 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate [bmim][BF₄] in dichloromethane will be analyzed in the concentration range from $6 \cdot 10^{-4}$ to $1 \cdot 10^{-2}$ mol dm⁻³ and in the temperature range from (278.15 to 303.15) K at 5 K intervals.

The developed method allows the calculation of the triple ion formation constants K_T and the limiting molar conductances of triple ions $\Lambda_{o,T}$. The assumption of $\Lambda_{o,T} / \Lambda_o = 1/3$ (refl.⁵⁻⁷), where Λ_o is the limiting molar conductance of simple ions C^+ and A^- can be successfully used in the studied systems to determine the formation constants of the triple ions.

From the temperature dependence of the limiting molar conductances the Eyring's activation enthalpy of charge transport can be determined. In turn, the thermodynamic functions of triple ions formation such as Gibbs energy, entropy, and enthalpy can be calculated from the temperature dependence of the triple ion formation constants. The evaluated values of thermodynamic functions suggest that the spontaneity of the triple ions formation is mainly entropy driven process.

REFERENCES

1. Fuoss R. M., Kraus C. A.: *J. Am. Chem. Soc.* 55, 476 (1933).
2. Winstein S., Kleindienst P. E., Robinson G. C.: *J. Am. Chem. Soc.* 83, 885 (1961).
3. Beronius P., Lindbäck T.: *Acta Chem. Scand. A* 32, 423 (1978).
4. Barthel J. M. G., Krienke H., Kunz W.: *Physical Chemistry of Electrolyte Solutions: Modern Aspects*, Springer, New York 1998.
5. Fuoss R. M., Kraus C. A.: *J. Am. Chem. Soc.* 55, 2387 (1933).
6. Robinson R. A., Stokes R. M.: *Electrolyte Solutions*, Dover Publications Incorporation, Mineola, New York 2002.
7. Hojo M., Miyauchi Y., Tanio A., Imai Y.: *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* 87, 3847 (1991).

1L-19**CONDUCTOMETRIC STUDIES OF FORMATION OF COMPLEXES 15-CROWN-5 ETHER WITH NaBr AND NaCl IN H₂O – 2-METHOXYETHANOL MIXTURES AT 298.15 K****ZDZISŁAW KINART, ADAM BALD***Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Lodz, 90 – 236 Lodz, Pomorska 163/165, Poland zkinart@uni.lodz.pl*

Crown ethers are a group of compounds with particularly interesting properties, consisting in formation of selective complexes with metal cations. The aim of this study was to investigate the process of complexation of the sodium ions by the macrocyclic ligand 15-crown-5 in a mixture of H₂O – 2-methoxyethanol at 298.15 K using a conductometric method. In this work, we analyzed the generally used methods for determining of the constant of complex formation (K_f) and has been shown the need for their extensive modifications.

1L-20**ANALÝZA VYBRANÝCH LIEČIV NA ELEKTRODÁCH Z BÓROM DOPOVANÉHO DIAMANTU****LUBOMÍR ŠVORC, KRISTÍNA CINKOVÁ***Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko lubomir.svorc@stuba.sk*

Moderné elektroanalytické metódy môžu za určitých okolností predstavovať významnú alternatívu k separačným a spektrálnym metódam. V dôsledku toho je značná pozornosť venovaná hľadaniu nových elektródových materiálov so širokým rozsahom potenciálov, nízkym šumom ako aj odolnosťou voči pasivácii ich povrchu. Za perspektívny materiál v tejto oblasti je v posledných rokoch považovaný bórom dopovaný diamant (BDD)^{1,2}. Analýza liečiv a biologických vzoriek je dôležitou súčasťou farmaceutickej a klinickej chémie. BDD elektróda umožňuje stanoviť submikromolárne až nanomolárne koncentračné hladiny aj u liečiv a ich metabolitov, ktoré sa oxidujú pri veľmi kladných potenciáloch³⁻⁵. Elektroanalytické metódy využívajúce BDD elektródy vo voltampérometrickom alebo ampérometrickom móde predstavujú užitočnú, ekonomicky výhodnú a z hľadiska potrebných analytických parametrov vo veľa prípadoch plnohodnotnú alternatívu k prevládajúcim separačným a spektrálnym metódam. V príspevku bude zhrnutý prehľad nových elektroanalytických metód a postupov pre rýchlu a jednoduchú analýzu štruktúrne rozmanitých liečiv za využitia BDD elektród⁶⁻⁸. Diskutované budú aj perspektívy ich ďalšieho rozvoja v oblasti farmaceutickej a klinickej elektroanalýzy.

Autori ďakujú za podporu Vedeckej grantovej agentúre VEGA č. 1/0489/16, Grantovej schémy na podporu mladých

výskumníkov a Programu na podporu excelentných tímov mladých výskumníkov na STU v Bratislave.

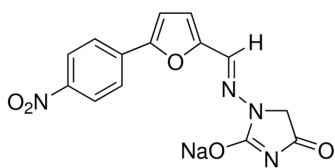
LITERATÚRA

1. Švorc L., Rievaj M., Bustin D.: *Sens. Actuators B* 181, 294 (2013).
2. Svítková J., Ignat T., Švorc L., Labuda J., Barek J.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 46, 248 (2016).
3. Cinková K., Zbojčková N., Vojs M., Marton M., Samphao A., Švorc L.: *Anal. Methods* 7, 6755 (2015).
4. Švorc L., Stanković D. M., Kalcher K.: *Diamond Relat. Mater.* 42, 1 (2014).
5. Švorc L., Vojs M., Michniak P., Marton M., Rievaj M., Bustin D.: *J. Electroanal. Chem.* 717-718, 34 (2014).
6. Cinková K., Švorc L., Šatková P., Vojs M., Michniak P., Marton M.: *Anal. Lett.* 49, 107 (2016).
7. Švorc L., Kalcher K.: *Sens. Actuators B* 205, 215 (2014).
8. Švorc L., Cinková K., Sochr J., Vojs M., Michniak P., Marton M.: *J. Electroanal. Chem.* 728, 86 (2014).

1L-21**VOLTAMETRICKÉ CHOVÁNÍ DANTROLENU NA AMALGÁMOVÝCH A BISMUTOVÝCH ELEKTRODÁCH****PAVLÍNA MARTINKOVÁ, RENÁTA ŠELEŠOVSKÁ, MICHAELA ŠTĚPÁNKOVÁ, JAROMÍRA CHÝLKOVÁ***Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika renata.selesovska@upce.cz*

Často diskutovanou problematikou posledních let je omezení používání kovové rtuti, resp. rtuťových elektrod (RE) v elektroanalytické chemii¹. Logickým trendem v této oblasti je tak vývoj nových elektrodoých materiálů. Požadavkem tzv. zelené analytické chemie je především minimální toxicita a minimální odpad při analýzách. Vzhledem k voltametrické analýze by elektroda nahrazující RE měla disponovat velmi blízkými elektrochemickými vlastnostmi, zejm. vysokým vodíkovým přepětím. Z hlediska obnovitelnosti povrchu, reprodukovatelnosti a dokonalé homogenity však zůstává RE jedinečnou. Nejčastěji zmiňovanými alternativami jsou elektrody amalgámové (AgSAE)² a bismutové (BiFE)³, které mohou RE nahradit v katodické oblasti díky poměrně vysokému přepětí vodíku a jejich výhodou je také možnost využití rozpouštěcích technik.

V rámci této práce bylo porovnáno voltametrické chování dantrolenu (obr. 1, DAN, sodná sůl 1-[(5-(*p*-nitro-fenyl)-furfuryl-idene)-amino]-hydantoinu, CAS: 14663-23-1) na RE, AgSAE a BiFE. Současně byly navrženy metody stanovení DAN pomocí uvedených pracovních elektrod a vypočteny příslušné statistické parametry jako limit detekce (LOD), mez stanovitelnosti (LOQ) a relativní směrodatná odchylka (RSD) opakovaného měření, resp. stanovení.



Obr. 1. Strukturální vzorec dantrolenu

Tato práce vznikla za podpory projektu Univerzity Pardubice č. SGS_2016_002.

LITERATURA

1. Navrátil T., Švancara I., Mrázová K., Nováková K., Šestáková I., Heyrovský M., Pelclová D.: *Mercury and mercury electrodes: the ultimate battle for the naked existence (a consideration)*. in *Sensing in electroanalysis*. (Kalcher K., Metelka R., Švancara I., Vytřas K., Eds.) 6, 23 (2011).
2. Yosypchuk B., Berek J.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 39, 189 (2009).
3. Švancara I., Prior C., Hočevar S., Wang J.: *Electroanal.* 22, 1405 (2010).

1L-22

KINETIKA ADSORPCE A DESORPCE N₂ (–196 °C) V PRŮBĚHU ZAPLŇOVÁNÍ MIKROPÓRŮ A MEZOPÓRŮ O RŮZNÝCH VELIKOSTECH

TOMÁŠ ZELENKA

Ostravská univerzita v Ostravě, přírodovědecká fakulta,
katedra chemie, institut environmentálních technologií,
30. dubna 22, 701 03 Ostrava 1, Česká republika
tomas.zelenka@osu.cz

Ačkoli adsorpce a desorpce dusíku při –196 °C zůstává standardní a rozšířenou metodou pro texturní charakterizaci porézních látek na mikro- a mezoporézní úrovni, experimentální studie zabývající se jeho kinetikou při adsorpci a desorpci v různě velkých pórech jsou, nicméně, velmi vzácné – a to zejména na reálných heterogenních uhlíkatých látkách. Cílem příspěvku je tedy posoudit možné změny v kinetice transportu N₂ při jeho adsorpci a desorpci v mikro- a mezopórech přírodního vzorku hnědého uhlí.

Na vzorku přírodního hnědého uhlí byla provedena adsorpce a desorpce N₂ (–196 °C) do relativního tlaku = 1 prostřednictvím volumetrického sorpčního analyzátoru PCTPro E&E (Setaram). Rovnice Horvath-Kawazoe¹ a Kelvinova rovnice² byly využity pro vyčíslení velikosti (průměru) zaplňovaných pórů. Crankův intračástečkový difúzní model³ byl aplikován na kinetická sorpční data pro výpočet difúzního parametru vypovídající o kinetice transportu N₂.

Bylo zjištěno, že kinetika transportu N₂ se odvíjí od velikosti mikropórů a mezopórů ve kterých adsorpce/desorpce probíhá⁴. Transport spojen se zaplňováním úzkých mikropórů o velikosti pod 1 nm je dlouhodobý a pomalý proces v důsledku komplikovaného průniku molekul N₂ do takto úzkých pórů. Rychlost transportu spojená se zaplňováním širších mikropórů o velikosti 1–2 nm roste a je maximální při

zaplňování velmi jemných mezopórů o velikosti 2–4 nm, kdy ještě nedochází k nevratné kapilární kondenzaci. Ta se projevuje v širších mezopórech o velikosti 4–50 nm. V tomto případě je rychlost transportu významně omezena vlivem z kondenzovaného N₂, který je dispergován v porézním systému. Během desorpce N₂ z porézního systému byl identifikován výrazný pokles a zpětný strmý nárůst rychlosti transportu vyskytující se u pórů o velikosti 3,5–4,5 nm. Příčinou je tzv. kavitace, která probíhá v lahvičkových typech pórů. Součástí příspěvku bude hlubší vysvětlení příčin souvisejících se změnami rychlosti transportu v různých velkých mikro- a mezopórech.

Tato práce vznikla za podpory projektu LO1208.

LITERATURA

1. Horváth G., Kawazoe K.: *J. Chem. Eng. Jpn.* 16, 470 (1983).
2. Cohan L. H.: *J. Am. Chem. Soc.* 66, 98 (1944).
3. Crank J.: *Mathematics of Diffusion*. Oxford University Press, London 1954.
4. Zelenka T.: *Microporous Mesoporous Mater.* 227, 202 (2016).

1S-01
NOVÝ PRÍSTUP K DIAGNOSTIKE RAKOVINY
PROSTATY – MALDI/TOF VS. BIOSENZOR

ŠTEFAN BELICKÝ, DOMINIKA PIHÍKOVÁ, ZUZANA
PAKANOVÁ, JÁN MUCHA, JÁN TKÁČ

*Chemický ústav Slovenskej akadémie vied, Dúbravská cesta 9,
 845 38, Bratislava, Slovenská republika
 stefan.belicky@savba.sk*

Rakovina prostaty (PCa) je najčastejšie nádorové ochorenie a tretia najčastejšia príčina úmrtí na nádorové ochorenia u mužov v Českej a Slovenskej republike. V jej raných štádiách je dobre liečiteľná, avšak často asymptomatická, čo robí včasnú diagnostiku problematickou. Zlatým štandardom pre určenie diagnózy je sledovanie koncentracie prostatického špecifického antigénu (PSA) v krvi, ale nevhodou testu je široká diagnostická šedá zóna a taktiež vysoký počet falošne pozitívnych výsledkov.

Veľká pozornosť je v poslednej dobe venovaná štúdiu glykozylácie proteínov a jej zmenám ako dôsledku rôznych ochorení, vrátane nádorových. V tejto práci sme sa špeciálne zamerali na terminálnu kyselinu sialovú (*N*-acetylneuraminovú – Neu5Ac), nakoľko zmeny v sialylácii proteínov sú spojené s tvorbou malígnych nádorov. Neu5Ac sa nachádza na *N*- aj *O*-glykónoch, viazaná na galaktózu prostredníctvom α 2,6 alebo α 2,3 glykozidickej väzby. Kým α 2,6 sialylácia sa bežne vyskytuje v ľudských tkanivách, α 2,3 sialylácia je takmer výlučne spojená s rakovinovými ochoreniami¹. MALDI-TOF analýzou bola zistená štruktúra glykánu PSA od zdravého darcu a derivatizáciou terminálnej Neu5Ac bolo možné určiť aj orientáciu väzby². Taktiež bol skonštruovaný PSA-špecifický imunosenzor, ktorý metódou Elektrochemickej impedančnej spektroskopie (EIS) sledoval zmeny glykozylácie prostredníctvom interakcie s lektínmi – proteínmi špecificky viažucimi sacharidové štruktúry³. Takáto miniaturizácia celého procesu má potenciál pre zlepšenie diagnostiky PCa, kedy bez nutnosti zložitých inštrumentálnych metód ako MALDI/TOF by bolo možné jednoznačne rozlíšiť proteíny rakovinového a nerakovinového pôvodu.

Táto práca bola financovaná FP7 programom Európskej únie pre výskum a vývoj technológií prostredníctvom Marie Curie ITN PROSENSE, č. grantu 317420, 2012 – 2016.

LITERATÚRA

1. Belicky S., Tkac J.: Chem. Pap. 69, 90 (2015).
2. Pihikova D., Pakanova Z., Nemcovic M., Barath P., Belicky S., Bertok T., Kasak P., Mucha J., Tkac J.: Proteomics, doi: 10.1002/pmic.201500463 (2016).
3. Pihiková D., Belický Š., Kasák P., Bertok T., Tkac J.: Analyst 141, 1044 (2016).

1S-02
CHARAKTERIZÁCIA VYBRANÝCH
MAKROMOLEKÚL ROZMEROVO-VYLUČOVACOU
CHROMATOGRAFIU S POUŽITÍM KOLÓN
MALÝCH ROZMEROV

ERIK BEŇO*, RÓBERT GÓRA, MILAN HUTTA

*Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, Mlynská
 dolina, SK-842 15 Bratislava, Slovenská republika
 beno@fns.uniba.sk*

Na charakterizáciu a určenie distribučných funkcií makromolekúl a polymérov (najmä distribúcie relatívnej mólovej hmotnosti) sa používa niekoľko inštrumentálnych analytických metód, z ktorých najrozšírenejšou je rozmerovo-vylučovacia chromatografia (SEC).

Vzhľadom na fakt, že makromolekuly majú malé difúzne koeficienty, ich chromatografická separácia by sa mala uskutočňovať použitím malých prietokov mobilnej fázy, avšak, v posledných rokoch došlo k rapidnému vývoju dvojdimenzionálnych separačných systémov, ktoré, naopak, vyžadujú rýchly priebeh separácie v druhej separačnej dimenzii. Jednu z možností potlačenia uvedeného kontrastu počas chromatografickej separácie poskytuje redukcia vnútorného priemeru kolóny.

Z dostupných publikácií vyplýva, že v súčasnosti sa na SEC separácie používajú v najväčšej miere kolóny s vnútorným priemerom (i.d.) v rozmedzí 6–10 mm a iba malý počet prác je venovaných možnostiam miniaturizácie v danej oblasti, čo by malo byť základným predpokladom výraznejšieho využitia SEC ako súčasti multidimenzionálnych separačných systémov. Práca sa zaoberá teoretickými aspektami použitia kolón malých rozmerov v SEC a možnosťami použitia tzv. „narrow-bore“ (3–6 mm i.d.) a „microbore“ (< 3 mm i.d.) kolón na vývoj rýchlej SEC metódy na charakterizáciu vybraných makromolekúl a začlenenie takej SEC metódy do dvojdimenzionálnych separačných systémov, v ktorých SEC vystupuje ako druhá separačná dimenzia v spojení, napríklad s reverzno-fázovou vysokoúčinnou kvapalinovou chromatografiou (RP-HPLC), iónovo-výmennou chromatografiou (IEC) alebo elektro-separačnými metódami.

Táto práca vznikla za podpory projektov APVV-0583-11, VEGA 1/0897/15 and VEGA 1/0899/16.

LITERATÚRA

1. Meyer V. R., v knihe: *Practical High-Performance Liquid Chromatography*, kap. 8, s. 157. J. Wiley, New York 2010.
2. Wu Ch., v knihe: *Handbook of Size Exclusion Chromatography and Related Techniques*, kap. 15, s. 473. Marcel Dekker, New York 2004.

1S-03**FAST SEPARATION IN NEW DESIGNER DRUGS SCREENING****LUCIE BOROVCOVÁ***, VOLODYMYR PAUK, KAREL LEMR

*Department of Analytical Chemistry-RCPTM, Faculty of Science, Palacký University, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Czech Republic
lucie.borovcova@volny.cz*

New designer drugs (NDDs) belong to a large group of newly illegally distributed abused compounds^{1,2}. Since their physiological effects are not well studied, they bring a serious health risk. The routine identification of NDDs by well-established GC-MS can fail as their mass spectra can be missing in databases, sometimes derivatization step is necessary. Immunochemical methods were developed only for limited number of NDDs. New alternatives for their screening are crucial to improve the diagnosis of intoxication or identification of unknown substances. Two effective analytical techniques: ultra-high performance liquid chromatography-mass spectrometry (UPLC-MS) and supercritical fluid chromatography-mass spectrometry (SFC-MS)³ can improve the screening of these illegal substances.

Experiments were carried out using Acquity UPC² and I-Class UPLC systems coupled to a Xevo TQS triple quadrupole with an ESI source (all Waters, UK). Different columns (5 stationary phases), various compositions of mobile phases and their gradients were tested for analysis of 15 new designer drugs by UPLC. The best separation was achieved with a BEH Phenyl 1.7 μm ; 2.1 x 100 mm column. The final mobile phase consisted of water (A) and acetonitrile (B), both containing 0.1% formic acid. Gradient elution was applied: 0 min – 95% A; 4 min – 5% A; 4.1 min – 95% A. Flow rate was set at 0.45 mL min⁻¹ and column temperature at 35 °C. All analytes were distinguished (separated and/or using SRM transitions) except isomers of fluoromethcathinone. Three isomeric pairs were resolved chromatographically by UPLC ($R > 1.5$), SFC resolved four isomeric pairs ($R > 1$).

Both methods offer fast analysis and were used in simple dilute-and-shoot protocol for NDDs screening in urine. Limits of detection and quantification were determined in units of ng mL⁻¹ in urine.

The authors gratefully acknowledge the support of the Ministry of Education, Youth and Sport of the Czech Republic (project Kontakt LH14064).

REFERENCES

- McGrane O., Simmons J., Jacobson E., Skinner C.: J. Clin. Toxicol. 1 108 (2011).
- Airuehia E., Walker L.Y., Nittler J.J.: Clin. Toxicol. 2 125 (2012).
- Pauk V., Žihlová V., Borovcová L., Havlíček V., Schug K., Lemr K.: J. Chromatogr. A 1423 (2015).

1S-04**ZMĚNY GLYKOSYLACE U PACIENTŮ S HEPATOCELULÁRNÍM A KOLOREKTÁLNÍM KARCINOMEM KVANTIFIKOVANÉ POMOCÍ FT-ICR A MRM****PETRA DAREBNÁ^{a,b}**, PETR NOVÁK^{a,b}, RADEK KUČERA^c, ONDŘEJ TOPOLČAN^c, MILOSLAV ŠANDA^d, RADOSLAV GOLDMAN^d, PETR POMPACH^{a,b}

^a Biocev - Mikrobiologický Ústav AV ČR, Průmyslová 959, 252 50 Vestec, ^b Karlova Univerzita v Praze, Albertov 6, 128 43 Praha 2, ^c Oddělení Nukleární Medicíny, Fakultní Nemocnice v Plzni, Dr. E. Beneše 1128/13, 305 99 Plzeň, Česká republika, ^d Oddělení Onkologie, Komplexní onkologické centrum, Reservoir Road 3800, N.W., 20057 Washington D.C.

Změny v glykosylaci proteinů jsou spojovány s nádorovými onemocněními, především s hepatocelulárním a kolorektálním karcinodem. Pomocí moderních analytických metod jako jsou kapalinová chromatografie a hmotnostní spektrometrie je možné tyto změny velice citlivě a přesně sledovat. V této studii byly využity dva hmotnostně spektrometrické přístupy, LC-MS/MS-MRM na trojitěm kvadrupólovém systému a ESI FT-ICR MS, ke kvantifikaci změn glykosylace u hepatocelulárního karcinomu, kolorektálního karcinomu a kolorektálního karcinomu s metastázemi do jater.

Sérové proteiny haptoglobin, hemopexin a komplement faktor H byly nabohaceny pomocí ethanolové precipitace a jednotlivé fukosylované glykoformy *N*-glykopeptidů byly porovnány s jejich nefukosylovanými glykoformami. Ve stejných vzorcích byly zároveň porovnány sialované glykoformy *O*-glykopeptidů hemopexinu. V naměřených datech byl pozorován nárůst fukosylovaných glykoforem u všech sledovaných proteinů a zároveň byl pozorován nárůst sialylovaných glykoforem hemopexinu u pacientů s hepatocelulárním karcinodem a hepatitidou typu C.

Oba zvolené přístupy, LC-MS/MS-MRM analýza na trojitěm kvadrupólovém systému a ESI FT-ICR MS analýza, poskytly srovnatelné výsledky vhodné pro kvantifikaci změn glykosylace i přes rozdíly v chromatografii, hmotnostní spektrometrii a analýze dat. Z naměřených dat je patrný rozdíl v glykosylaci sledovaných proteinů u pacientů s hepatocelulárním karcinodem a žloutenkou typu C v porovnání s kolorektálním karcinodem a kolorektálním karcinodem s metastázemi do jater.

1S-05

RAMANOVA SPEKTROSKOPIE PRO *IN VIVO* KLINICKOU DIAGNOSTIKU KARCINOMU PLIC**LUCIE HABARTOVÁ^a, MICHAL TATARKOVIČ^a, ŽOFIE HÁDKOVÁ^a, TOMÁŠ BRŮHA^b, JIŘÍ VOTRUBA^b, VLADIMÍR SETNIČKA^a**^a Ústav analytické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6,^b I. Klinika tuberkulózy a respiračních nemocí, Všeobecná fakultní nemocnice v Praze a I. Lékařská fakulta Univerzity Karlovy, Karlovo náměstí 32, 121 11 Praha 2, Česká republika

Lucie.Habartova@vscht.cz

V rámci vývoje nových minimálně invazivních či dokonce zcela neinvazivních postupů klinické diagnostiky vzrůstá v poslední době význam spektroskopických metod¹. Na rozdíl od rutinně využívané histologické analýzy tkání, jejíž výsledek často závisí na zkušenostech histopatologa, jsou spektroskopické analýzy reprodukovatelné, spolehlivé, rychlé a navíc nevyžadují téměř žádnou přípravu vzorku¹. Vibrační spektroskopie, tedy infračervená a Ramanova, poskytuje informace jak o složení vzorku, tak o jeho struktuře. V důsledku onemocnění dochází k chemickým a zároveň strukturálním změnám postižených tkání na molekulární úrovni a právě tyto změny je možné pomocí vibrační spektroskopie detekovat¹⁻³. Kombinace s optickými sondami ještě zvyšuje potenciál těchto metod pro jejich využití v diagnostice chorob¹.

Včasně a spolehlivě určení diagnózy je klíčovým faktorem pro úspěšnost léčby zvláště u nádorových onemocnění. Karcinom plic zaujímá celosvětově první místo v počtu úmrtí v důsledku zhoubných novotvarů. Současné metody jeho diagnostiky jsou však často velmi invazivní a vyžadují histopatologické potvrzení. Pro analýzu plicní tkáně v reálném čase v průběhu rutinního bronchoskopického vyšetření tak byla využita speciálně konstruovaná Ramanova mikrosonda. Po optimalizaci parametrů měření tak, aby nebylo vyšetření pro pacienta přílišnou zátěží, byla analyzována různá místa normální a patologické tkáně pacientů s karcinomem plic a zároveň jedinců s neurčitou patologií.

V získaných Ramanových spektrech byly identifikovány pásy charakteristické pro vibrace složek tkáně, tedy např. aminokyseliny, proteiny nebo lipidy. Kromě změn v intenzitách a průběhu těchto pásů byla zároveň pozorována zvýšená míra fluorescence v případech normální tkáně. Výsledky získané v této pilotní studii tak naznačují slibný potenciál Ramanovy mikrosondy v *in vivo* diagnostice karcinomu plic.

Tato práce byla financována z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT: 20-SVV/2016), Operačního programu Praha – Konkurenceschopnost (CZ.2.16/3.1.00/22197, /21573 a /24503) a Národního programu udržitelnosti (NPU MŠMT: LO1215 – 34807/2013 a LO1601 – 43760/2015).

LITERATURA

1. Talari A. C. S., Movasaghi Z., Rehman S., Rehman I. U.: *Appl. Spectrosc. Rev.* 50, 46 (2015).
2. Krafft C., Sergo V.: *Spectrosc. Int. J.* 20, 195 (2006)

3. Staniszewska-Slezak E., Malek K., Baranska M.: *Spectrochim. Acta, Part A* 147, 245 (2015).

1S-06

ELEKTROCHEMICKÝ DNA BIOSENZOR PRO VÝZKUM POŠKOZENÍ DNA**ANDREA HÁJKOVÁ**

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2, Česká republika

andrea.hajkova@natur.cuni.cz

Deoxyribonukleová kyselina (DNA) je velmi důležitá biomolekula, která nese genetické informace¹. Její strukturní změny, které způsobují vážné poškození lidského zdraví, mohou být vyvolány různými fyzikálními nebo chemickými činidly, které se vyskytují v životním prostředí nebo jsou vytvořeny v organismu jako vedlejší produkty metabolismu².

Elektrochemické DNA biosenzory byly úspěšně použity pro sledování poškození DNA, při detekci specifických mutací v sekvencích DNA a pro studium supramolekulárních interakcí DNA s různými organickými sloučeninami. Představují rychlé, levné, citlivé, jednoduché a reprodukovatelné elektrochemické nástroje pro sledování interakcí analyt-DNA a pro detekci oxidačního poškození DNA³.

V této práci byl připraven jednoduchý elektrochemický DNA biosenzor na bázi elektrody ze skelného uhlíku (GCE). Na povrch GCE byla elektrochemicky naadsorbována dvouřetězcová DNA izolovaná z lososího spermatu (dsDNA). Byly nalezeny optimální podmínky pro přípravu dsDNA/GCE biosenzoru⁴. Nejprve byl připravený dsDNA/GCE biosenzor použit pro detekci poškození dsDNA způsobeného interakcí s deriváty fluorenu (2-aminofluoren, 2-acetylaminofluoren, 2-aminofluoren-9-on a 2,7-diaminofluoren jsou strukturně velmi podobné látky, které jsou používány pro testování genotoxicity). Dále byl také zkoumán vliv oxidačního stresu na dsDNA, který je způsoben atakou hydroxylovými radikály. Ty byly generovány elektrochemicky na povrchu borem dopované diamantové elektrody nebo chemicky pomocí Fentonovy reakce. Pro výzkum byla použita přímá elektrochemická metoda založená na sledování oxidace bázi dsDNA (square-wave voltametrie) a nepřímé metody cyklická voltametrie a elektrochemická impedanční spektroskopie, které využívají aktivního redoxního indikátoru. Ve všech případech bylo pozorováno poškození dsDNA.

Tato práce vznikla v rámci specifického vysokoškolského výzkumu (SVV 260317) za finanční podpory Grantové agentury Univerzity Karlovy v Praze (GAUK 430214/2014/B-CH/PrF).

LITERATURA

1. Diculescu V. C., Paquim A. M. C., Brett A. M. O.: *Sensors* 5 (6-10), 377 (2005).
2. Labuda J., Vyskočil V., v knize: *Encyclopedia of Applied Electrochemistry*, Springer, New York 2014.
3. Vyskočil V., Hájková A., v knize: *Trends in*

Bioelectroanalysis, Springer, Cham 2016.

4. Hájková A., Barek J., Vyskočil V.: *Electroanalysis* 27 (1), 101 (2015).

1S-07

HIGHLY SENSITIVE MASS SPECTROMETRIC METHOD FOR DETERMINATION OF RETINOIC ACID USING METAL ORGANIC FRAMEWORKS

KRISTÍNA HAJTMANOVÁ^{a*}, LUKÁŠ KUČERA^b, ELADIA MARIA PEÑA-MÉNDEZ^c, JOSÉ ELIAS CONDE-GONZÁLEZ^c, PETR VAŇHARA^{b,d}, ALEŠ HAMPL^{b,d}, JOSEF HAVEL^{a,d}

^a Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5/A14, 625 00 Brno, ^b Department of Histology and Embryology, Faculty of Medicine, Masaryk University, Brno, Czech Republic, ^c Department of Chemistry, Faculty of Science, University of La Laguna, Campus de Anchieta, 38071 La Laguna, Tenerife, Spain, ^d International Clinical Research Center, St. Anne's University Hospital, Brno, Czech Republic, Pekařská 53, 656 91 Brno, Czech Republic
k.hajtmanova@mail.muni.cz

Retinoic acid (RA) is an active cellular retinoid metabolite and it is synthesized in cells from provitamin A. This metabolite has wide range of effects on vertebrate development and plays a crucial role during reproduction, proliferation, homeostasis, and physiopathology. It is frequently used to promote neural differentiation of pluripotent cells. All-trans RA is used in the differentiation therapy of acute promyelocytic leukemia. RA is thus biologically and clinically important molecule with a need of development of precise analytical determination allowing detection of very low amount of RA in complex biological samples^{1,2}.

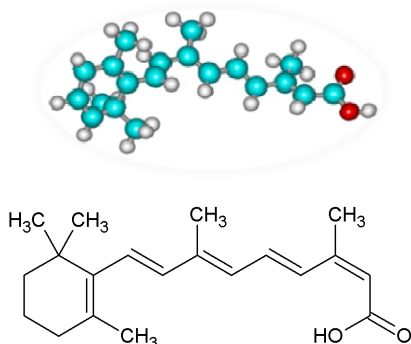


Fig. 1. All-trans retinoic acid

We employed here several mass spectrometric approaches, including either Matrix- or Surface- Assisted Laser Desorption Ionization Time Of Flight (MALDI- or SALDI-TOF), in order to reach highly sensitive determination of RA.

First we explored possibilities of the use common MALDI-TOF matrices 2,5-dihydroxybenzoic acid (DHB)³, α -cyano-4-hydroxycinnamic acid (CHCA), and sinapinic acid

(SA). The highest ionization of RA was observed using CHCA matrix and much lower detection limit was reached, (5 x) when compared with previously reported DHB³.

Next, we used several metal organic frameworks (MOFs) such as HKUST-1, Basolite F300, and Cobalt(II) oxopivalat for SALDI-TOF MS. MOFs represent highly advanced porous materials which are known to absorb various molecules and/or nanoparticles⁴.

Several experimental setups were outlined: (i) only pure MOFs were used for SALDI, to enhance RA desorption from the MOF crystals surface, or (ii) to test if pre-concentration of RA on MOFs is possible, or (iii) the combination of MOF (Basolite F300) with previously adsorbed gold nanoparticles, or (iv) the use of magnetic core-shell MOFs was examined, that showed the highest sensitivity in RA detection. The lowest detection limit (D.L.) was estimated to 10^{-13} mol. The use of MOFs as SALDI matrices for MS determination of RA is reported here for the first time. To validate our method, we determined RA in biologically very complex milieu of extracts of mouse embryonic fibroblasts.

The results achieved open new possibilities of highly sensitive determination of retinoic acid and retinoids in highly complex and analytically difficult samples. In summary, new, highly sensitive method for RA pre-concentration and determination using MOFs was developed. Low D.L. enables determining the levels of RA in variety of biological or biomedical scenarios.

Supported by the project no. LQ1605 from the National Program of Sustainability II (MEYS CR), project FNUSA-ICRC no. CZ.1.05/1.1.00/02.0123 (OP VaVpl) and Grant MAT2014-57465-R (Ministry of Economy and Competitiveness, Spain).

REFERENCES

1. Dueter G.: *Cell*. 134, 921 (2008).
2. Maden M.: *Nat. Rev. Neurosci.* 8, 755 (2007).
3. Bitsch F., Aichholz R., Kallen J., Geisse S., Fournier B., Schlaeppi J. M.: *Anal. Biochem.* 323, 139 (2003).
4. Conde-González J. E., Peña-Méndez E. M., Rybáková S., Pasan J., Ruiz-Perez C., Havel J.: *Chemosphere* 150, 659 (2016).

1S-08

SPEKTROSKOPIE POVRCHEM ZESÍLENÉ INFRAČERVENÉ ABSORPCE PRO STUDIUM TENKÝCH VRSTEV VITAMÍNŮ ADSORBOVANÝCH NA MĚDĚNÝCH SUBSTRÁTECH

ALŽBĚTA KOKAISLOVÁ^a, VÁCLAV PARCHAŇSKÝ^b, PAVEL MATEJKA^a

^a Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice, ^b Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemmingovo náměstí 2, 166 10 Praha 6 – Dejvice, Česká republika
alzbeta.kokaislova@vscht.cz

Spektroskopie povrchem zesílené infračervené absorpce (Surface-Enhanced Infrared Absorption – SEIRA spectroscopy)¹ umožňuje detekci látek adsorbovaných na

povrch plasmonických kovových substrátů a charakterizaci adsorbovaných vrstev především ve smyslu orientace adsorbovaných molekul vůči kovovému povrchu^{2,3}.

Změny podmínek měření, k nimž patří teplota substrátu, vedou k pozorovatelné variabilitě spektrálních charakteristik SEIRA spekter. Tyto změny mohou být způsobeny různými změnami vlastností systému substrát-adsorbát: (i) narušením původní mikro- a nanostruktury kovového substrátu, (ii) změnou frekvence povrchové plasmonové rezonance kovu a (iii) změnami v uspořádání vrstvy adsorbovaných molekul a jejich orientaci vůči povrchu substrátu. Znalost teplotně indukovaných změn může přinést hlubší porozumění vlastnostem adsorbovaných vrstev i mechanismu SEIRA.

Předmětem současné studie byla (i) analýza SEIRA spekter thiaminu a kyseliny nikotinové, adsorbovaných na elektrochemicky připravených velkoplošných měděných substrátech s využitím výsledků DFT výpočtů a (ii) analýza zdrojů variability v sadách SEIRA spekter těchto látek naměřených v průběhu jednoho ze dvou předem navržených teplotních programů, spočívajících v postupné změně resp. stabilizaci teploty substrátu, s využitím vícerozměrných statistických metod.

Stejně jako v případě SERS spekter⁴ byly jako hlavní zdroje teplotně indukovaných změn v sadách SEIRA spekter určeny změny orientace molekul vůči povrchu substrátu; za další zdroj změn je považována desorpce molekul vody vázané v adsorbované vrstvě molekul.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAP206/11/0951 a za účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 20/2015).

LITERATURA

1. Aroca R. F., Ross D. J.: *App. Spectrosc.* 58, 324A (2004)
2. Kokaislová A., Parchaňský V., Matějka P.: *J. Phys. Chem. C* 119, 26562 (2015).
3. Kokaislová A., Matějka P.: *Anal. Bioanal. Chem.* 403, 985 (2012).
4. Kokaislová A., Helešicová T., Ončák M., Matějka P.: *J. Raman Spectrosc.* 45, 750 (2014).

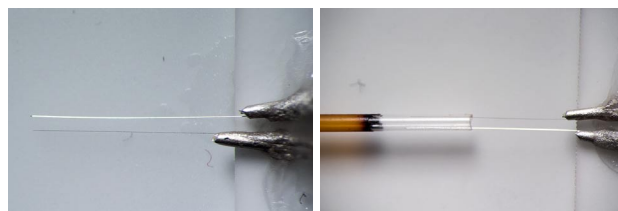
1S-09

MONOLITICKÁ KAPILÁRNÍ KOLONA S INTERGOVANÝM ELEKTROCHEMICKÝM DETEKTOREM

MARTINA KOMENDOVÁ, RADOVAN METELKA, JIŘÍ URBAN

*Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra analytické chemie, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika
martina.komendova@student.upce.cz*

Jednoduchá a rychlá kvantifikace neurotransmiterů v biologických vzorcích hraje klíčovou roli pro diagnostiku a kontrolu léčby mnoha neurologických onemocnění, jako například deprese, Parkinsonovy choroby, schizofrenie apod. Kombinace monolitických fází s elektrochemickou detekcí nabízí elegantní cestu k přípravě miniaturizovaného a levného



Obr. 1. Příprava integrovaného elektrochemického detektoru. Fixace pracovní a referenční elektrody k měděnému drátu (vlevo) a následná integrace vláken do kapilární kolony (vpravo)

analytického systému vhodného pro tyto účely.

Obrázek 1 shrnuje vlastní přípravu miniaturizovaného elektrochemického detektoru. Mikroelektrody byly nejprve fixovány na měděný drát zajišťující převod signálu a následně integrovány do kapilární kolony. Jako pracovní elektroda bylo použito uhlíkové vlákno o průměru 7 μm, na kterém byl studován vliv chemické modifikace povrchu vlákna epoxidovými skupinami. Vlákno bez této modifikace poskytovalo 800× vyšší signál ve srovnání s modifikovaným vláknem. Pro přípravu referenční elektrody jsme testovali (i) elektrochemickou depozici stříbra na uhlíkové vlákno a (ii) použití stříbrného mikrodrátu (25 μm). Z hlediska časové náročnosti a mechanické stability byl jako referenční elektroda použit stříbrný mikrodrát. Připravený elektrochemický detektor poskytoval lineární odezvu v rozsahu čtyř řádů a umožnil detekovat 110 pg nadávkovaného dopaminu. Spojení s monolitickou stacionární fází umožnilo separaci modelové směsi neurotransmiterů. V současné době testujeme použití připravené integrované kapilární kolony pro stanovení neurotransmiterů v moči.

Integrovaná monolitická kolona je prvním krokem při vývoji miniaturizovaných analytických systémů umožňujících úpravu vzorku, chromatografickou separaci a detekci. Takové systémy mohou být využity v personalizované medicíně a umožnit snížení jak časových tak finančních nároků.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (projekt č. 14-22426S).

1S-10

ELECTROCHEMICAL ANALYSIS OF CALIXARENES

ALAN LIŠKA^{a,b}, JIŘÍ LUDVÍK^a

*^a J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, AVČR, Dolejškova 2155/3, 182 23 Prague 8, ^b Dept. of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Charles University, Hlavova 2030, 128 40 Prague 2, Czech Republic
alan.liska@jh-inst.cas.cz*

Calixarenes are favourite framework in supramolecular chemistry with many possible applications¹. However, the basic skeleton itself is not electroactive. For this reason, a suitable substituent („redox probe“) must be introduced to enable electrochemical study and analysis of such systems. In our investigations of various nitroderivatives of calix[4]

arenes we have found, that electrochemical responses offer not only respective thermodynamic data, but also information concerning electron distribution, delocalization and intramolecular communication, which correlate with the shape and structure of the molecule (stereoelectrochemistry). Consequently, electroanalytical approach has been used also for the structure and other 3D analysis, mainly in terms of:

- a) the conformation: *cone-* / *paco-* / *1,3-alt*^{2,3};
- b) type of bridging units: methylene / thia;
- c) type of the redox probe: nitro / nitroso / 4-nitrophenylsulphonyl / *N*-hydroxyiminomethyl²⁻⁴;
- d) position of the redox probe(s), their interactions^{2,3,5}:
 - i) upper rim / lower rim / both rims,
 - ii) *para-* / *meta-* / both positions,
 - iii) on the adjacent / opposite benzene rings;
- e) rigidity / flexibility of the molecule in solution^{2,3};
- f) shape, character and reactivity of the radical intermediates, and their spin state⁶;
- g) complexation abilities towards ions in solution.

Interpretation of experimental data (DC-polarography, cyclic voltammetry, coulometry and UV-VIS, IR and EPR spectroelectrochemistry (together with their correlation with DFT calculations)) proved the pinched shape of the calix skeleton, conditions for their $C_{2v} - C_{4v} - C_{2v}$ interconversion, role of the type of bridging unit, existence of stable mono-, di-, tri and tetra anion tetraradical intermediates, their coordination ability etc.

The study was supported by the GA UK project 798214, GACR grant 13-21704S and institutional support RVO: 61388955.

REFERENCES

1. Flidrová, K., Liška, A., Ludvík, J., Eigner, V., Lhoták, P.: *Tetrahedron Lett.* 56, 1535 (2015).
2. Ludvík, J., Liška, A., Lhoták, P.: *ECS Transactions* 66 (26), 23 (2015).
3. Liška, A., Flidrová, K., Lhoták, P., Ludvík, J.: *Monatshefte für Chemie-Chemical Monthly* 146, 857 (2015).
4. Liška, A., Ludvík, J.: *Chem. Listy* 104, 23 (2010).
5. Liška, A., Vojtišek, P., Fry, A.J., Ludvík, J.: *J. Org. Chem.* 78, 10651 (2013).
6. Liška, A., Rosenkranz, M., Klíma, J., Dunsch, L., Lhoták, P., Ludvík, J.: *Electrochim. Acta* 140, 572 (2014).

1P-01**THE EFFECT OF NEUSILIN® ON THE PROPERTIES OF CARRIERS USED FOR THE DETECTION OF CHOLINESTERASE INHIBITORS****JIRÍ ZEMAN^a, DAVID VETCHÝ^a, ALEŠ FRANC^a, JAKUB VYSLOUŽIL^a, VLADIMÍR PITSCHMANN^b, LUKÁŠ MATĚJOVSKÝ^c**

^a Department of Pharmaceutics, Faculty of Pharmacy, University of Veterinary and Pharmaceutical Sciences Brno, Palackého tř. 1, 612 42 Brno, ^b Oritest Ltd., Staropramenná 17, 150 00 Prague, ^c Faculty of Environmental Technology, University of Chemistry and Technology, Technická 5, 160 00 Prague, Czech Republic
zemanj@vfu.cz

The detection of cholinesterase inhibitors (ChI) is nowadays very actual topic. The threat of terrorist attack with usage of organophosphate nerve agents such as soman, sarin, tabun, VX, etc. or just intoxication by pesticides such as malathion, parathion, etc. are both very dangerous problems for humans and the environment. In these situations, fast, easy and reliable detection of these compounds on site is the most important thing before any other actions could be taken. One of these detectors, which are small and easy to use, are the glass tubes. They are filled with carriers, detection reagent and vials with buffers¹. The whole mechanism of the detection is based on the enzymatic colorimetric Ellman's reaction. Meaning, that the carriers (preferably white) in the absence of ChI change their colour from white to yellow, which is detectable by the naked eye or spectrophotometrically at 412 nm. On the contrary, the carriers remain their white colour in the presence of ChI². The main disadvantage of this method is the indistinctive colour transition from white to yellow.

The aim of this study was to prepare white spherical carriers in form of pellets containing immobilized enzyme butyrylcholinesterase. The enzyme should have activity in range 1 to 100 nkat g⁻¹ and should be stable enough to endure long term storage. To increase the concentration of the immobilized enzyme and in this way to increase the activity and colour intensity of the Ellman's reaction, the material with high specific surface Neusilin® was utilized. The samples including one blank and four different contrations of Neusilin® were prepared by the extrusion-spheronization method and dried in hot air oven at 30 °C. For further measurement, pellets of size between 0.8–1.25 mm were used. After impregnation with the butyrylcholinesterase, parameters such as hardness, pycnometric density, intraparticle porosity, sphericity, activity and inhibition of the prepared carriers were measured. The increase in colour intensity and the improvement of other properties was observed in the samples containing Neusilin® compared to the samples without it.

This work was supported by the IGA 301/2016/FaF VFU Brno.

REFERENCES

1. Pitschmann V., Haláček E., Koblíha Z., Tušarová I.:

Chem. Listy 105, 334 (2011).

2. Ellman G. L., Courtney D. K., Andres V., Fearstone R. M.: Biochem. Pharmacol. 7, 88 (1961).

1P-02**STUDIUM CHEMICKÉ STABILITY ALLOXANU POMOCÍ KAPILÁRNÍ ZÓNOVÉ ELEKTROFORÉZY****KATEŘINA VÍTKOVÁ^a, JANA HORSKÁ^b, JANA JURČÍKOVÁ^a, ROMAN PAPOUŠEK^b, PETR BARTÁK^b, VÁCLAV PROCHÁZKA^a, JAN PETR^b**

^aFakultní nemocnice Ostrava, 17. listopadu 1790/5, 708 52 Ostrava – Poruba, ^bKatedra analytické chemie, Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká republika
katerina.vitkova@fno.cz

Alloxan je znám jako látka schopná uměle vyvolat diabetes. V poslední době se o ní rovněž diskutuje jako o látce, která se může vyskytovat v potravě, a tím způsobovat nárůst výskytu diabetu u současné populace. Na zvířecích modelech diabetu vyvolaných alloxanem bylo zjištěno, že se alloxan přeměňuje v redukčním cyklickém procesu na reaktivní formy kyslíku a tím způsobuje destrukci specifických pankreatických beta-buněk Langerhansových ostrůvků¹. Jak již publikovali ve své studii Patterson a kol.², alloxan je stabilní okolo pH 7,0 a nestabilní se stává v kyselém a zásaditém prostředí. Toto zjištění se jeví jako zásadní pro studium možných produktů a jejich další účinků v organismu.

V této práci jsme řešili otázku stability alloxanu v kyselém a zásaditém prostředí. Vzniklý produkt hydrolyzy, kyselina alloxanová, byl identifikován pomocí hmotnostní spektrometrie a dále byl stanoven pomocí kapilární zónové elektroforézy (CZE). Kyselá hydrolyza (pomocí 50 % HCl) a alkalická hydrolyza (pomocí 50 % NaOH) byla prováděna po dobu 5 min až 120 min. V průběhu hydrolyzy byl sledován úbytek alloxanu a vznikající kyselina alloxanová pomocí CZE v systému 50 mM borát/NaOH pH 8,0 při aplikovaném napětí 20 kV.

Autoři děkují Institucionální podpoře MZ ČR RVO-FNOs/2015 a projektu MŠMT (NPU LO 1305) za finanční podporu výzkumu.

LITERATURA

1. Takemoto K., Doi W., Masuoka N.: Biochim. Biophys. Acta 1862, 647 (2016).
2. Patterson J. W., Lazarow A., Levey S., Lemm F. J.: J. Biol. Chem. 177, 187 (1949).

1P-03**VLIV pH, TEPLOTY A KONCENTRACE NA ZETA POTENCIÁL BSA****MARTA BUKÁČKOVÁ, ROMAN MARŠÁLEK***Katedra chemie, Ostravská univerzita, Bráfova 7, Ostrava, Česká republika
P15151@student.osu.cz*

Práce se zabývá měřením zeta potenciálu hovězího sérového albuminu (BSA). Zeta potenciál je elektrochemický potenciál v koloidních systémech, který působí na rozhraní mezi povrchovou vrstvou částice a okolní kapalinou¹. Hraje velkou roli z hlediska chování částic v roztoku a jeho znalost je důležitá nejen pro dlouhodobou stabilitu roztoku, ale také pro možnost adsorpce na nanočástice. Nelze ho měřit přímo, ale lze ho dopočítat ze znalosti elektroforetické mobility za použití vhodného modelu, proto se k jeho měření využívá na příklad elektroforéza a měření rychlosti částic s použitím laserové Depplerovy velocimetrie. Zeta potenciál může být ovlivňován změnou několika parametrů. Největší vliv má změna pH roztoku. Na přístroji Zetasizer NanoZS byl měřen zeta potenciál při změně pH roztoku, teploty a koncentrace a naměřené hodnoty byly porovnány s daty publikovanými v jiných studiích.

V rámci experimentální práce byl měřen zeta potenciál vzorků o pH v rozmezí 2–11, které bylo upravováno pomocí hydroxidu sodného o koncentraci 0,25 mmol l⁻¹ a kyseliny chlorovodíkové o koncentraci 0,25 a 0,025 mmol l⁻¹. Na základě měření zeta potenciálu těchto vzorků byl určen izoelektrický bod, ve kterém je připravený vzorek nejméně stabilní. Dále byl také měřen zeta potenciál za měnící se teploty v intervalu 5–60 °C a při třech různých koncentracích 0,022, 0,044 a 0,088 mmol l⁻¹.

LITERATURA

1. Hunter R. J., Ottewill R. H., Rowell R. L.: *Zeta Potential in Colloid Science*, kap. 2, s. 11. Academic Press, New York 1981.

1P-04**SYNTECKÉ ZEOLITY JEJICH PŘÍPRAVA, CHARAKTERIZACE A VLASTNOSTI****LENKA VEVERKOVÁ, ROMAN SLAVÍK, MAGDA DOLEŽALOVÁ***Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Ústav inženýrství ochrany životního prostředí, Vavrečkova 275, 762 72 Zlín, Česká republika
lveverkova@ft.utb.cz*

Zeolity jsou minerály na bázi hlinitokřemičitanů. Tyto materiály mají ve své struktuře zabudovány ionty hliníku a křemíku, které tvoří tetraedry. Spojením těchto základních stavebních jednotek vznikají složitější útvary, které po opětovném spojování vytvářejí trojrozměrnou mikroporézní strukturu¹. Obecně lze zeolity rozdělit na přírodní a syntetické. Vlivem trojrozměrné struktury zeolitů dané

systémem kanálků a kavit se jejich specifický povrch mnohonásobně zvětšuje. Póry přesných rozměrů poskytují krystalickým hlinitokřemičitanům velkou adsorpční kapacitu a iontovýměnné vlastnosti. U jílových minerálů jako je klinoptilolit dochází k sorpčním procesům zejména na povrchu a proto vykazují nižší kationtovou výměnnou kapacitu². Ioniovýměnné vlastnosti zeolitů se odvíjejí z typických struktur jednotlivých zeolitů. Významnou roli má vnitřní rozložení kanálků a dutin ve struktuře¹. Tato jejich schopnost vázat některé těžké kovy je využitelná v životním prostředí³.

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

LITERATURA

1. Čejka J., Žilková N.: *Chem. Listy* 94, 278 (2000).
2. Pitter P. *Hydrochemie*. 2. přeprac. a rozš. vyd., 565 s., SNTL, Praha 1990.
3. Jacobs P. A., v knize: *Introduction to zeolite science and practice*, 2nd compl., s. 467. Elsevier Science 2001.

1P-05**ELECTROCHEMICAL AND SPECTROMETRIC STUDY OF REACTIVITY OF ORTHOPHTHALALDEHYDE WITH PRIMARY DIAMINES****JOËL DONKENG DAZIE^{a,b}, JIŘÍ LUDVÍK^{a,b}***^aJ. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the AS CR, v.v.i. Dolejškova 2155/3, 182 23 Prague 8, ^bUniversity of Chemistry and Technology Prague, FCHI; Technická 5, 166 28 Prague 6, Czech Republic
joel.donkeng@jh-inst.cas.cz, jiri.ludvik@jh-inst.cas.cz*

Orthophthalaldehyde (OPA) is an aromatic dialdehyde bearing two reducible aldehydic groups in position 1 and 2. OPA is broadly used for analytical detection and determination of amino acids^{1,2}. OPA is also used as

a disinfectant agent for medical devices that resist heating³. The reactivity of OPA with primary diamines is widely applied in organic synthesis for the synthesis of important heterocyclic compounds with biological relevance^{4,5}, therefore the detailed knowledge of the structure aspects and mechanism is of interest. The electrochemical reducibility of OPA was used for the study of its reactivity with eight primary diamines (1,2-diaminoethane, 1,2-diaminopropane, 1,3-diaminopropane, 1,4-diaminobutane, 1,2-*cis*-diaminocyclohexane, 1,2-*trans*-diaminocyclohexane, 1,8-diaminonaphthalene and *o*-phenylenediamine). The experiments were performed in phosphate buffer pH 9.9 with OPA hydrated in advance or unhydrated. For the identification of intermediates and products, NMR, MS analyses have been used. It was discovered that the reaction of OPA with primary diamines is governed by the distance between the two amine groups and by the presence of aromatic ring on the skeleton of diamine. As a result, the condensation products of OPA with diamines were isolated and identified and the reaction pathway was discussed. It was observed that the final products based on 1,2-diaminoethane, 1,2-diaminopropane, 1,2-*cis*-diaminocyclohexane and 1,2-*trans*-diaminocyclohexane were electroactive, whilst the reduction of the other products does not occur in the available potential range.

REFERENCES

1. Roth M.: Anal. Chem. 43, 880 (1971).
2. Molnar-Perl I. J.: Chromatogr A. 913, 283 (2001).
3. Alfa M. J., Sitter D. L. J.: Hosp. Infect. 26, 15 (1994).
4. Perlmutter H. D., Knapp P. S. J.: Org. Chem. 32, 2350 (1967).
5. Silverman R. B.: *The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action*, 2nd edition, Elsevier Academic Press, Oxford 2015.

1P-06

INFLUENCE OF SURFACE PROPERTIES ON THE DEPOSITION OF A POLYANILINE FILM AND DETECTION OF TUMOR MARKERS

TATIANA V. SHISHKANOVA*, **VÍTĚZSLAV SMETANA**, **LUKÁŠ MAREK**, **KLÁRA ŘEZANKOVÁ**, **PAVEL ŘEZANKA**

*University of Chemistry and Technology in Prague, 166 28 Prague 6, Technická 5, Czech Republic
tatiana.shishkanova@vscht.cz*

Potentiometric sensors are the main component of the majority of clinical analysers due to the possibility of their miniaturization and their selectivity. In recent years, there has been an increasing demand for mass screening methods for neuroblastoma. Neuroblastoma, a neuroblastic tumor derived from the perimordial neural crest, is most frequently diagnosed in infancy. Neuroblastoma is characterized biochemically by the elevation of urine catecholamine metabolites (known as tumor markers (TMs)), particularly homovanillic acid and vanillylmandelic acid¹. In our experience, many characteristics of polyaniline (PANI) films are attractive for the development of potentiometric sensors

for anionic species. It has been shown that the PANI film was able to facilitate the transfer of hydrophilic anionic species, to be the receptor layer, to act simultaneously as the carrier of the receptor attached to the surface of nanoparticles and transducer of the potentiometric signal^{2,3}. Taking into account the structural features of both the PANI backbone and the above-mentioned metabolites, it can be presumed that the PANI film could be useful for their detection.

The purpose of this work was to show and discuss the relations between the surface properties of an ion-selective membrane and the quality of the PANI film deposited onto its surface during chemical polymerisation. This study might be the key for the widespread application of PANI films for the recognition of TMs. It was found that the growth of PANI on plasticized PVC-membranes was influenced by the hydrophilicity of the substrate. Decreasing the level of plasticizer in the membrane increased the membrane hydrophilicity and adhesion of the PANI film. The proposed approach to detect TMs demonstrated a potential methodology for designing sensors able to detect TMs in a biological matrix.

This research was supported by the Grant Agency of the Czech Republic (Project P206/15/02815S) and by specific university research (MSMT No 20-SVV/2016).

REFERENCES

1. Manickum T.: J. Chromatogr. B 877, 4140 (2009).
2. Shishkanova T. V., Sapurina I., Stejskal J., Král V., Volf R.: Anal. Chim. Acta 553, 160 (2005).
3. Shishkanova T.V., Fitl P., Král V., Berek J.: J. Electroanal. Chem 761, 106 (2016).

1P-07

METÓDA STANOVENIA A SCREENING β -D-APIOZIDÁZ

ELENA POTOCKÁ, **PETER KIS**, **MÁRIA MASTIHUBOVÁ**, **VLADIMÍR MASTIHA**

*Laboratórium biokatalýzy a organickej syntézy, Chemický ústav, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovensko
elena.potocka@savba.sk*

Metodika na stanovenie β -D-apiozidázovej aktivity bola vypracovaná s použitím syntetického chromogénneho substrátu 4-nitrofenyl- β -D-apiofuranozidu pripraveného v našom laboratóriu. Skrining prebiehal na značnom množstve komerčných hrubých enzýmových preparátov ale aj niekoľkých rastlinných vzorkách. Doteraz bola táto enzýmová aktivita potvrdená len u malého množstva komerčných enzýmových preparátov s významným využitím vo vinárenskom priemysle^{1,2}. Výsledky potvrdzujú prítomnosť tejto aktivity aj v niekoľkých netypických enzýmových prípravkoch ako sú celulózy a lipázy, keďže predchádzajúce štúdie dokázali inducibilný charakter tohto enzýmu.

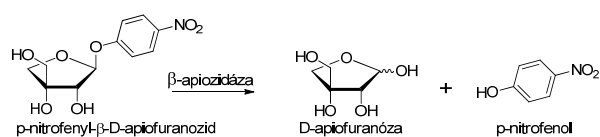


Schéma 1. Princíp metodiky stanovenia β-D-apiozidázovej aktivity

Tato práce vznikla za podpory grantov APVV-846-12 a VEGA č. 2/0157/16.

LITERATÚRA

1. Dupin I., Gunata Z., Sapis J. C., Bayonove C., Mbairaroua O., Tapiero C.: J. Agr. Food Chem. 40, 1886 (1992).
2. Günata Z., Dugelay I., Vallier M. J., Sapis J. C., Bayonove C.: Enzyme Microb. Technol. 21, 39 (1997).

1P-08

IN SITU GENERATION OF HIGH Au_m CLUSTER IONS FOR MASS CALIBRATION

LENKA KOLÁŘOVÁ^{a,*}, LUBOMÍR PROKEŠ^a, PETR VAŇHARA^{b,c}, CRISTINA FONT CALVARONS^b, VICTORIA SALVADO^d, ALEŠ HAMPL^{b,c} AND JOSEF HAVEL^{a,b,c}

^a Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5/A14, 625 00 Brno, ^b Department of Histology and Embryology, Faculty of Medicine, Masaryk University, Brno, ^c International Clinical Research Center, St. Anne's University Hospital Brno, Brno, Czech Republic, ^d Department of Chemistry, University of Girona, Girona, Spain
kolarovalenka@mail.muni.cz

Gold clusters can be generated by Laser Desorption Ionization (LDI) of various gold nanomaterials e.g. gold nanoparticles (AuNPs) of various geometry, or gold foil. In our study, Au_m clusters generated from flower-like AuNPs were used for internal calibration of peptides¹.

A simple and effective method for *in situ* generation of high and stable gold cluster ions (Au_m^+ and Au_m^-) were developed. Then, the application of these clusters in external/internal calibration of mass spectra in both positive and negative ion modes was evaluated. The high efficiency of generation of clusters from AuNPs up to m/z 5000 (ref.^{2,3}) has also been demonstrated although these high-mass gold clusters can be easily decomposed to low-mass clusters or even they can explode. Therefore, we aimed 1) to stabilize AuNPs by optimizing the matrices and the use of additives, 2) to extend the mass range towards high masses and 3) to obtain peaks with sufficient intensity and resolution to be usable for internal/external calibration of TOF or Q-TOF mass spectrometers.

Among the different additives examined, citric acid/ammonium citrate buffer stabilizes AuNPs in aqueous solution and allows a reproducible generation of high-mass Au_m clusters presenting high peak intensities and good resolution. We developed a simple and fast LDI method for the generation of gold clusters. These clusters present peaks,

across the whole mass range up to m/z 17 000 in positive and up to m/z 6 000 in negative ion mode, with sufficient signal to noise ratios without using interfering matrices.

Our results demonstrated that gold cluster ions can be used in precise *in situ* calibration in both low and high mass range. This calibration that can be carried out over high mass range without the use of interfering matrices is particularly suitable for MS of peptides and small proteins as well as for low molecular compounds such as metabolites, resulting in the development of more rapid and precise MS methods in biomedical research and diagnostics.

Supported by the project no. LQ1605 from the National Program of Sustainability II (MEYS CR) and by the project FNUSA-ICRC no. CZ.1.05/1.1.00/02.0123 (OP VaVpl).

REFERENCES

1. Kolářová L., Kučera L., Vaňhara P., Hampl A., Havel J.: Rapid Commun. Mass Spectrom. 29, 1585 (2015).
2. Peña-Méndez E. M., Hernández-Frenaund J. R., Panyala N. R., Houška J., Havel J.: Chem. List. 102, 1394 (2008).
3. Panyala N. R., Peña-Méndez E. M., Havel J.: J. Appl. Biomed. 7, 75 (2009).

1P-09

VISCOSITY COEFFICIENTS B OF KCl, NaCl, NaI, KNO₃, LiNO₃, NaBPh₄, AND Bu₄NI IN RICH OF WATER BINARY MIXTURES CONTAINING DIMETHYL SULFOXIDE (DMSO) AT 298.15 K

ZDZISŁAW KINART, ADAM BALD

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

Aqueous-organic mixtures are very often being used in various fields of chemistry. However, the literature review shows, that is a small amount of data involving studies of viscosimetric properties of strong electrolytes in these type of solvents. Such research is carried out for many years in the Department of Physical Chemistry of the University of Lodz. The viscosities of KCl, NaCl, NaI, KNO₃, LiNO₃, NaBPh₄ and Bu₄NI were determined in H₂O – DMSO mixtures (up to ca 0.15 mole fraction of DMSO) as a function of concentration (0.01 to 0.05 mol dm⁻³) at T = 298.15 K to obtain the Jones-Dole B coefficient.

$$\eta_r = \frac{\eta}{\eta_0} = 1 + Ac^{1/2} + Bc$$

Using the assumption of the equality, B (Bu₄N⁺) = B (BPh₄⁻) the values of B_± coefficients for individual ions have been calculated. All results have been discussed in terms of ion-solvent interactions.

Based on these data we analyzed the nature of changes in ionic value of coefficient B as a function of the composition of the studied water + dimethyl sulfoxide mixtures mainly in terms of ion-solvent interactions.

1P-10**VÝVOJ PŘÍPRAVY 2,3-DEHYDROSILYCHRISTINU****VERONIKA HOLEČKOVÁ, DAVID BIEDERMANN,
ALENA KŘENKOVÁ, VLADIMÍR KŘEN**MBÚ AV ČR, Videňská 1083, 140 20 Praha 4 - Krč, Česká republika
veronika.holeckova@biomed.cas.cz

Silymarin, extrakt z ostropestřce mariánského (*Silybum marianum*), působí hepatoprotektivně a chemoprotektivně, je klinicky využíván při onemocněních jater a vykazuje významnou antioxidační aktivitu. Hlavními složkami silymarinu jsou flavonolignany – silybin, isosilybin, silydianin, silychristin (**I**) a taxifolin¹. Oxidací silybinu lze připravit 2,3-dehydrosilybin. Dehydroderiváty obecně jsou biologicky účinnější než původní molekuly, mají například (až o řád) vyšší antioxidační, cytostatickou nebo i antiparazitickou aktivitu^{2,3}. 2,3-Dehydrosilychristin (**II**) má až o dva řády vyšší antioxidační aktivitu (DPPH) než silybin, a je asi nejsilnějším antioxidantem v silymarinu, kde se však vyskytuje jen ve stopovém množství. Tato látka má značný potenciál jako účinné chemoprotektivum, avšak biologické testy byly dosud limitovány jeho špatnou dostupností. Přesto, že jde o zdánlivě jednoduchou reakci, jeho příprava naráží na značné problémy.

Popsaná metoda přípravy 2,3-dehydrosilychristinu (**II**) spočívá v refluxování silychristinu v suchém pyridinu v přítomnosti vzduchu^{3,4}. Nevýhodou je časová náročnost (až 10 dní) a velmi nízké výtěžky – cca 15 %.

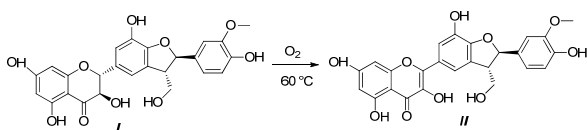


Schéma 1. Obecná rovnice přípravy 2,3-dehydrosilychristinu

Při vývoji přípravy 2,3-dehydrosilychristinu jsme zkoumali vliv rozpouštědla a báze (Schéma 1). Všechny reakce probíhaly za intenzivního míchání v O₂ atmosféře při 60 °C. Použity byly různé kombinace rozpouštědel (dimethylsulfoxid, methanol, aceton, dimethylformamid) a bázi (triethylamin, K₂CO₃, 4-dimethylaminopyridin, octan draselný).

Optimální reakční doba byla stanovena z časového průběhu reakce pomocí HPLC/PDA/MS (LCMS-2020, Shimadzu). Nejvyšší konverze byla zjištěna po 5 hodinách reakce, později docházelo k polymeraci a rozkladu reaktantů. Reakční dobu se takto podařilo zkrátit na 1/40 původní doby (5 h). Současně bylo dosaženo více než zdvojnásobení výtěžku reakce z 15 % na 35 % změnou rozpouštědla na methanol nebo dimethylsulfoxid za katalýzy 4-dimethylaminopyridinem.

Tato práce vznikla za podpory grantů LD 15081 a 15-03037S.

LITERATURA

1. Morazzoni P., Bombardelli E.: *Fitoterapia* 64, 3 (1995).
2. Gažák R., Svobodová A., Pšotová J., Křen V. *et al.*:

Bioorg. Med. Chem. 12, 5677 (2004).

3. Pyszková M., Biler M., Biedermann D., Valentová K. *et al.*: *Free Radic. Biol. Med.* 90, 114 (2016).
4. Zanarotti A.: *Heterocycles* 19, 1585 (1982).

1P-11**CONDUCTANCE AND IONIC ASSOCIATION OF IONIC LIQUIDS IN *N,N*-DIMETHYLACETAMIDE****AGNIESZKA BORUŃ, ADAM BALD**University of Łódź, Department of Physical Chemistry,
Pomorska 163, 90-236 Łódź, Poland
chmielewska.a@gmail.com

The poster presents the molar conductances of dilute solutions of the ionic liquids 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate [emim][BF₄] and 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate [bmim][BF₄] in *N,N*-dimethylacetamide over the temperature range from 283.15 to 318.15 K.

Conductance data were analyzed using the Barthel's low concentration Chemical Model (lcCM) and the ionic association constant K_A, the limiting molar conductances Λ₀, and distance parameters R were calculated.

The thermodynamic functions of ion association such as Gibbs free energy, enthalpy, and entropy of ion pair formation as well as the Eyring activation enthalpy of charge transport have been evaluated and discussed. Slight ionic association was observed for the ILs in DMA at all experimental temperatures. It was found that the Gibbs free energy values are negative and became more negative with temperature. The values of ΔG_A⁰ indicate that the spontaneity of the ion pair formation is higher in the case of salt containing the smaller cation, i.e., [emim][BF₄]. The values of entropy and enthalpy of association increase with increasing temperature for both electrolytes tested. The obtained high positive ΔH_A⁰ values suggest that the ion-pairing process is endothermic. Positive values of entropy prove that the transition from the free solvated ions into the ion pairs causes system less ordered. This is related to the partial desolvation of ions prior to the formation of ion pair. Because the Gibbs free energy is negative, entropic effects seem to dominate over the enthalpic effects, and thus the ion pair formation of ionic liquids in DMA is exoergic.

1P-12

X- AND Q-BAND ELECTRON PARAMAGNETIC RESONANCE INVESTIGATION OF MOLYBDATE COMPLEXES WITH SELECTED ALDOSES**MILAN MAZUR^a, MICHAL HRICOVÍNÍ^a, ZUZANA HRICOVÍNIOVÁ^b**

^aFaculty of Chemical and Food Technology, Slovak Technical University in Bratislava, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, ^bInstitute of Chemistry, Slovak Academy of Science, Dúbravská cesta 9, SK-845 38, Slovak Republic milan.mazur@stuba.sk

Electron Paramagnetic Resonance (EPR) spectroscopy is a very useful tool for the study of molybdate complexes, which are formed among molybdenum ions and various ligands. Such EPR spectra are extremely sensitive to the coordination environment in which the molybdenum ions are placed. In our contribution, the powdered solid-state samples of molybdate complexes with various aldoses were prepared^{1,2}. The type of coordination depends upon the solution pH, and steric arrangement of the hydroxyl groups. The EPR spectra were recorded on a field-modulated CW: i) X-band (≈ 9.4 GHz) EMX and ii) Q-band (≈ 33.9 GHz) EMX Plus, EPR spectrometers (Bruker BioSpin, Germany) at room temperature (RT) and at 98 K. The control samples prepared without molybdenum ions were EPR silent. In the case of all the molybdate complexes, the axially symmetric EPR spectra of Mo(V) ions (d^1 , $^2D_{3/2}$ and $S = 1/2$) were observed, including the central line, which was for some samples accompanied by several, less intensive resonance lines at both X- and Q-band frequencies. The main resonance can be attributed to the even molybdenum isotopes ($I = 0$, overall 74.62 % natural abundance), while the much weaker six lines belong to the hyperfine structure from the odd ^{95}Mo and ^{97}Mo isotopes ($I = 5/2$, 15.78 % and 9.60 % natural abundance). The line shape of X-band EPR spectra for given molybdate complexes recorded at both RT and 98 K was similar except of the signal/noise ratio. The composite Mo(V) EPR spectra were seen for molybdate-ribose complex. No other extra spectral features were observed in the Q-band EPR spectra. For all the samples, no EPR spectra of Mo(III) ions (d^3 , $^4F_{3/2}$ and $S = 3/2$) were detected at both X- and Q-band frequencies, neither at RT nor 98 K. Since, Mo(V) EPR spectra exhibit 'inverse' axial g-pattern ($g_{\perp} > g_{\parallel}$), this could indicate the slightly distorted (could be axially compressed) octahedral environment of the Mo(V) ions, which are surrounded by oxygen atoms.

This work was supported by the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic (Projects VEGA 1/0765/14, VEGA 1/0041/15 and VEGA 2/0100/14).

REFERENCES

1. Hricovíniová Z.: Carbohydr. Res. 341, 2131 (2006).
2. Hricovíniová Z.: Tetrahedron Asymm. 20, 1239 (2009).

1P-13

STUDIUM VNĚJŠÍCH FAKTORŮ, KTERÉ OVLIVŇUJÍ IZOLACI A STABILITU CD14+ MONOCYTŮ Z PERIFERNÍ KRVĚ**KAROLÍNA KŘENKOVÁ^a, MICHAL HALUZÍK^a, ALEXANDRA LOCHMANOVÁ^b**

^aOstravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie, 30. dubna 22, 702 00 Ostrava, ^bOstravská univerzita, Lékařská fakulta, Syllabova 19, 703 00 Ostrava, Česká republika
kkrenkova@seznam.cz, michal.haluzik@osu.cz, alexandra.lochmanova@osu.cz

Mononukleární buňky představují důležitý marker, který lze využít při monitorování a hodnocení celé řady patofyziologických stavů (zánětlivá reakce, kardiovaskulární onemocnění, nádorová onemocnění). Na základě množství mononukleárních buněk a identifikace a kvantifikace některých prozánětlivých faktorů jimi produkovaných, je možné také sledovat projevy a intenzitu zánětlivých reakcí, které provází obezitu a metabolický syndrom.

V loňském roce byla na našem pracovišti zavedena metodika izolace CD14+ mononukleárních buněk z periferní krve, která je založena na využití gradientové centrifugace. Vlastní separace CD14+ mononukleárních buněk probíhá na koloně s pevnou magnetickou maticí s navázaným antigenem xCD14+. Detekce a kvantifikace výše uvedené subpopulace mononukleárních buněk byla prováděna metodou průtokové cytometrie, která umožňuje dostatečné ověření správnosti izolačního postupu¹.

Bylo zjištěno, že existuje celá řada faktorů, které určitým způsobem ovlivňují úspěšnost izolačního postupu. Mezi nejdůležitější faktory patří: transport odebrané krve, doba od odběru krve do začátku vlastní izolace, volba velikosti kolony, použití pístu při separaci na koloně a technika odběru prstence mononukleárních buněk. Dále byly sledovány faktory ovlivňující uchovávání izolovaných CD14+ monocytů pro následnou analýzu.

Výše uvedené faktory byly cíleně monitorovány a bylo zhodnoceno, jakým způsobem ovlivňují separaci a stabilitu izolovaných CD14+ mononukleárních buněk.

Tato práce vznikla za podpory grantu SGS05/PřF/2016.

LITERATURA

1. *Isolation of mononuclear cells Methodology and applications.* Handbook 18-1152-69 AC 2007-05. GE Healthcare Bio-Sciences AB (2007)

1P-14

POROVNÁNÍ CITLIVOSTI POTENCIOMETRIE SE ZINKOVOU A SE ZINKOVOU AMALGAMOVOU ELEKTRODOU PRO POTŘEBY NANOFILTRACE**LADISLAV NOVOTNÝ, VERONIKA KOČANOVÁ, ABRAHAM KABUTEY, LIBOR DUŠEK**

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

Potenciometrie patří mezi nejrozšířenější elektroanalytické metody v široké praxi. Pokud je její citlivost pro daný účel vyhovující, patří mezi její přednosti operativní a dostupné využití, nejlépe v kombinaci s příslušnými iontově selektivními elektrodami ISE. V souvislosti s odstraňováním kovů z vod má proto značný význam i výzkum využitelnosti potenciometrického sledování jejich obsahu. Mezi taková témata spojená např. s nanofiltrací¹ patří v současnosti i odstraňování zinku z roztoků ZnSO₄ studované na našem pracovišti. Přímé určování obsahu ZnSO₄ pomocí Zn-ISE však dnes není možné, jelikož nebyla dosud vyřešena funkčně vyhovující Zn-ISE. Nedávno zveřejněné poznatky^{2,3} však ukázaly, že pozoruhodné výsledky může poskytnout i potenciometrie s některými vhodně upravenými amalgamovými elektrodami, v posledních letech rozšířenými v oblasti voltametrie⁴⁻⁷. Ukázalo se proto žádoucí shromáždit základní poznatky o porovnání citlivosti potenciometrie se zinkovou (ZnE) a s pevnou zinkovou amalgamovou elektrodou (ZnSAE), zejm. pokud jde o závislost jejich potenciálu *E* na čase *t* a na koncentraci ZnSO₄. Měření provedená v uspořádání dle⁸ například ukázala, že obě elektrody vykazovaly přibližně srovnatelnou citlivost, pokud byl povrch ZnE před každou sérií měření obnoven mechanickým leštěním. Funkčnost Zn-SAE také obnovování povrchu nevyžadovala. Výzkum v tomto směru dále pokračuje.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR SGS_2016_002.

LITERATURA

- Gherasim C. V., Hancková K., Palarčík J., Mikulášek P.: *J. Membr. Sci.* 490, 46 (2015).
- Novotný L., Petráňková R.: *Anal. Lett.* 49, 161 (2016).
- Novotný L., Kočanová V., Langášek P., Petráňková R.: *XXXV. Moderní elektrochemické metody, Jetřichovice, 18. – 22. 5. 2015*, Sborník přednášek (BEST Servis Ústí nad Labem, ed.), str. 108.
- Novotný L., Yosypchuk B.: *Chem. Listy* 94, 1118 (2000).
- Yosypchuk B., Novotný L.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 32, 141 (2002).
- Barek J., Fischer, Navrátil T., Pecková K., Yosypchuk B., Zima J.: *Electroanalysis* 19, 2003 (2007).
- Šelešovská R.: *Habilitační práce*. Univerzita Pardubice, Pardubice 2015.
- Novotný L.: ÚPV Praha, PUV 2014-30527 (2015).

1P-15

NOVÉ ATOMIZÁTORY TĚKAVÝCH SPECIÍ ZALOŽENÉ NA DIELEKTRICKÉM BARIÉROVÉM VÝBOJI PRO AAS A AFS**MILAN SVOBODA^a, VĚRA ŠINDELÁŘOVÁ^{a,b}, JAN KRATZER^a, ANTJE MICHELS^c, JOACHIM FRANZKE^c, JAKUB HRANIČEK^b, JIŘÍ DĚDINA^a**

^a Ústav analytické chemie AV ČR, v. v. i., Veveří 97, 602 00 Brno, ^b Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Hlavova 2030, 128 43 Praha 2, Česká republika, ^c Institute for Analytical Sciences, Otto-Hahn-Str. 6b, Dortmund, Germany, 44 227
svoboda750@biomed.cas.cz

Atomová absorpční (AAS) a fluorescenční spektrometrie (AFS) zažívají v posledních letech obrození v podobě vývoje instrumentace. Příkladem nově vyvíjených částí AAS a AFS spektrometrů jsou miniaturní plazmové atomizátory těkavých sloučenin, zejména hydridů, založené na dielektrickém bariérovém výboji (DBD).

Ve spojení s AAS se používají DBD atomizátory s planárním uspořádáním elektrod. Atomizátor má tvar pláště kvádrů bez podstav horizontálně umístěného do osy spektrometru s plošnými elektrodami na vnějších stěnách. Volné atomy analyty vznikají v oblasti atomizátoru, kterou přímo prochází paprsek spektrometru. Budou prezentovány optimální podmínky atomizace hydridů As, Se, Sb, Bi a Pb v planárním DBD atomizátoru. Analytické charakteristiky dosažené pro tyto analyty v planárních DBD atomizátorech (detekční limit, odolnost vůči interferencím) budou porovnány s těmi dosahovanými v konvenčních vyhřívaných křemenných atomizátorech pro AAS. Budou diskutovány pravděpodobné mechanismy atomizace těkavých hydridů v DBD atomizátorech.

Na rozdíl od AAS je detegování signálu u AFS limitováno úhlem cca 90° mezi výbojkou a detektorem. Dosavadní typy cylindrických designů DBD atomizátorů dovolují detegovat emisi fluorescence analytu nad ústím atomizátoru nicméně ne přímo v oblasti plazmatu tak, aby nedocházelo ke stínění, odrazu apod. paprsku výbojky či emise fluorescence stěnami atomizátoru. Dalším problémem je difuze kyslíku z okolní atmosféry způsobující snížení populace volných atomů analytu. Prezentovaný nově vyvinutý typ atomizátoru eliminuje svou konstrukcí uvedené problémy a tím dovoluje zvýšení citlivosti a zvýšení odstupu signálu od šumu. Dále bude prezentováno srovnání s běžnými atomizátory pro AFS a AAS a možnosti *in-situ* záchytu analytu v cylindrických atomizátorech.

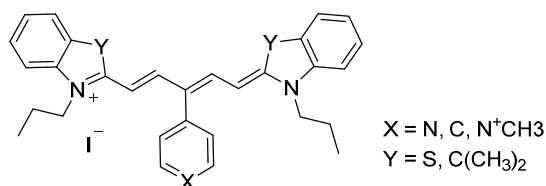
Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR (P206/14-23532S) a Ústavu analytické chemie AV ČR, v. v. i. (RVO: 68081715).

1P-16
POLYMETHINIUM SALTS AND
ELECTROCHEMICAL DETECTION OF HEPARIN

TATIANA V. SHISHKANOVA*, VÍTĚZSLAV
 SMETANA, LUKÁŠ MAREK, TOMÁŠ BŘIZA,
 VLADIMÍR KRÁL

University of Chemistry and Technology in Prague, 166 28
 Prague 6, Technická 5, Czech Republic
 tatiana.shishkanova@vscht.cz

Cancer causes immeasurable human suffering and puts enormous strain on financial resources of developed societies. The early diagnosis of cancer may be based on the determination and identification of tumor markers (TM) to achieve an early diagnosis and thus to improve the prognosis of disease therapy. The electrochemical devices for detection of TM have satisfactory sensitivity and selectivity; they are fast, inexpensive, easily operated, small, portable and simple. They are not affected by sample turbidity, quenching or interference from absorbing and fluorescing compounds commonly occurring in biological samples. Their application in multianalyte assays reduces the sample consumption and cost per sample, increases sample throughput and improves test efficiency. Their easy miniaturization facilitates the development of disposable sensors and methodologies for ultra-small samples.



Scheme 1. Polymethinium salt derivatives proposed for heparin binding

Our recent spectroscopic studies showed that cyanine dyes (pentamethinium salts) display high affinity and selectivity for anionic analytes¹. Poly(vinylchloride) membrane involving polymethinium salt derivatives (Scheme 1) was supported on a carbon electrode. Interfacial adsorption and desorption of heparin (model of sulphated tumor markers) facilitated by the polymethinium salt derivatives were studied by cyclic voltammetry and electrochemical impedance spectroscopy methods. The high sensitivity was attained with addition of gold nanoparticles into the polymeric matrix.

This research was supported by the Grant Agency of the Czech Republic (Project P206/15/02815S).

REFERENCE

1. Rimpelova S., Briza T., Kralova J., Zaruba K., Kejik Z., Cisarova I., Martasek P., Ruml T., Kral V.: *Bioconjugate Chem.* 24, 1445 (2013).

1P-17
FAST SYNTHESIS AND SEPARATION OF THE
ARSENOGLUTATHIONE COMPLEXES

INGA PETRY-PODGÓRSKA^a, BARBORA
 BALCAROVÁ^b, TOMÁŠ MATOUŠEK^a

^a Institute of Analytical Chemistry of the CAS, v.v.i., Veverí 97, 602 00 Brno, ^b Clinical and Toxicological Analysis, Faculty of Science, Charles University in Prague, Albertov 6, 128 43 Praha, Czech Republic
 podgorska@iach.cz

Glutathione (GSH) is a tripeptide that plays an important role in protecting cell components from free radicals, peroxides, lipid peroxides and heavy metals. It supports enzymatic methylation of inorganic arsenic (iAsIII) to methylarsonous acid (MAsIII), methylarsonic acid (MAsV), dimethylarsonous acid (DMAsIII), and dimethylarsinic acid (DMAsV)¹. Complexes of arsenic compounds and glutathione are very unstable and tend to undergo a decomposition to simple organoarsenic species and free glutathione during chromatographic separation².

In our work we have focused on synthesis and fast separation of the arsenoglutathione complexes. The synthesis was carried out by simple mixing a stock solutions of the iAsIII, MMAsV and DMAsV with glutathione. The molar ratios of the GSH to As species were from 50:1 to 300:1.

Initially the chromatographic separation was carried out with gradient mode in a reverse phase (RP) C18 column. The inductively coupled plasma mass spectrometer (ICP-MS) served as a detector of arsenic in the eluted fractions. The content of the organic solvent in the analyzed mixture influenced the signal of the arsenic in the ICP-MS. Therefore we established satisfactory conditions for the separation in the isocratic mode, which enabled good quantification of the three arsenoglutathione complexes.

We observed that the ratio of GSH to arsenic compounds and the time of the reaction influenced the yield of the synthesis of the particular arsenoglutathione specie. The synthesis of the DMAsGS resulted in the lowest yield, compared to MAs(GS)₂ and As(GS)₃.

This work was supported by CAS, institutional support RVO:68081715 and by MŠMT, project Kontakt II- LH15174.

REFERENCES

1. Ding L., Saunders R. J., Drobná Z., Walton F. S., Xun P., Thomas D. J., Stýblo M.: *Toxic. App. Pharm.* 264, 121 (2012).
2. Raab A., Meharg A. A., Jaspars M., Genneyb D. R., Feldmann J.: *J. Anal. At. Spectrom.* 19, 183 (2004).

1P-18**STANOVENIE BIOGÉNNYCH AMÍNŮV
V POTRAVINÁCH****JOZEF SOKOL, MÁRIA MALIAROVÁ, KATARÍNA
KULICHOVÁ***Univerzita sv. Cyrila a Metóda, Fakulta prírodných vied
v Trnave, J. Herdu 2, 917 01 Trnava, Slovensko
jozef.sokol@ucm.sk*

Biogénne amíny predstavujú skupinu dusíkatých organických látok s nízkou molekulovou hmotnosťou obsahujúcich charakteristické aminoskupiny. Ich štruktúra môže byť alifatická, aromatická alebo heterocyklická. Sú to biologicky aktívne látky a väčšina z nich má významný fyziologický účinok a slúžia ako zdroj dusíka a prekurzory syntézy hormónov a nukleových kyselín a bielkovín. Mnohé z nich sa v malých množstvách bežne vyskytujú v potravinách rastlinného ako aj živočíšneho pôvodu, predovšetkým vo fermentovaných potravinách a nápojoch. Vznikajú mikrobiálnou dekarboxyláciou zodpovedajúcich aminokyselín alebo amináciou a transamináciou aldehydov a ketónov. Ich prítomnosť vo zvýšených koncentráciách v potravinách môže predstavovať riziko pre ľudské zdravie z hľadiska fyziologického ako aj toxikologického. Známe sú napr. alergie, hypertenzia, migréna, dýchacie ťažkosti, bolesti hlavy. Preto z uvedených dôvodov sú predmetom záujmu z hľadiska medicínskeho, potravinárskeho, ako aj analytického.

Na stanovenie biogénnych amínov sa využívajú predovšetkým chromatografické metódy, a to najmä vysokoúčinná kvapalinová chromatografia (HPLC), plynová chromatografia, prípadne ionexová chromatografia. Tenkovrstvová chromatografia tiež ako semikvantitatívna metóda. Najviac rozšírená je HPLC. Biogénne amíny sa bežne separujú na kolónach s reverznými fázami ako C18. Pri použití UV detektorov, alebo fluorescenčných detektorov vzorky sa musia upravovať derivatizáciou. Pri použití HPLC-MS tento krok odpadá a dosahuje sa vyššia citlivosť, menej často sa využíva aj elektrochemická detekcia.

Biogénne amíny v práci sa stanovovali optimalizovanou HPLC metódou s UV detekciou. Analýzy boli Stanovenia stanovovali v rôznych biologických matriciach, ako mäso, mäsové výrobky, ryby, syry, ovocie a zelenina. Extrakcia amínov zo vzoriek sa vykonávala. Vzorky boli extrahované 10% kyselinou trichlóroctovou a následne prefiltrované cez filtračný papier a membránový filter. Na derivatizáciu vzoriek bol použitý danzylchlorid, ktorý bol pridaný k 1 ml extraktu vzorky a roztok uhličitanu sodného. Po premiešaní vzorky boli inkubované pri teplote 60 °C po dobu 15 minút. Následne odparené a rozpustené v acetonitrile. HPLC analýza bola vykonávaná na kolóne s reverznou fázou C18 v, mobilná fáza bola 0,02 M kyselina octová a acetonitril v pomere. Vzorky boli detegované UV-VIS detektorom pri 254 nm. Sledovalo sa sedem biogénnych amínov, ako tryptamín, fenyetylamin, putrescín, kadaverín, histamín, tyramín a spermidín.

Z nami nameraných hodnôt biogénnych amínov vo vzorkách sa nachádzali len niektoré míny a ich hodnoty boli nízke, čo nepredstavuje riziko pre zdravie spotrebiteľa.

U vzoriek zeleniny sme namerali piatich vzorkách vysoké hodnoty PUT v porovnaní s ostatnými. Aj keď biogénne amíny nemajú doposiaľ stanovené limity, je potrebné sledovať ich hladiny, pretože sa môžu vyskytovať vo vysokých koncentráciách vo fermentovaných potravinách a taktiež v pokazených potravinách, čo môže byť ukazovateľom čerstvosti, alebo pokazenosti potravín.

Podporené grantom Vega 1/00733/13.

2L-01**SLOUČENINY KOVŮ 4. SKUPINY S CYKLOPENTADIENYLOVÝMI A DUŠÍK OBSAHUJÍCÍMI LIGANDY****MICHAL HORÁČEK**

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

Zajímající se o přípravu a potencionální využití hybridních sloučenin kovů 4. skupiny obsahující kombinaci typově odlišných ligandů jsme v našich pracích popsali jednoduchou metodu přípravy komplexů obsahující substituovaný cyklopentadienylový kruh a *C,N*-chelující¹ či β -diketiminátový ligand s methoxy skupinami². Získané sloučeniny obsahující β -diketiminátový ligand byly testovány jako katalyzátory pro polymerizaci ethyleny s různými aktivátory (MAO, MMAO and $Al^iBu_3/(Ph_3C)[B(C_6F_5)_4]^2$).

Tento příspěvek demonstruje variabilitu koordinačních schopností kovů 4. skupiny ve sloučeninách obsahujících cyklopentadienylové a různé dusík obsahující ligandy s proměnlivými sterickými a elektronickými vlastnostmi. Oproti již zmíněným *C,N*-chelujícím a β -diketiminátovým ligandům jsme pracovali i se stericky náročným 2,6-diisopropylanilinem a *N,N*-chelujícím derivátem anilinu (Scheme 1)³. Tyto studie vedly k přípravě dimerních sloučenin obsahující tyto ligandy v můstku mezi dvěma atomy kovu. Potvrdila se rovněž odlišnost ve stabilitě amidových a imidových komplexů rostoucí v řadě od titanu k hafniu.

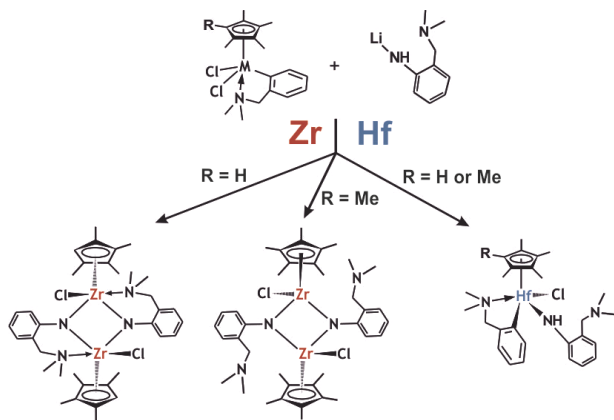


Schéma 1. Rozdílné reakční produkty zirkonia a hafnia při reakci s $Li[NHC_6H_4-2-(CH_2NMe_2)]$

LITERATURA

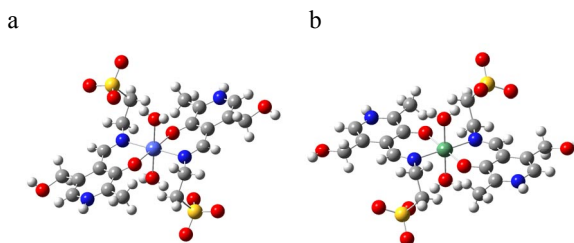
- Havlík A., Lamač M., Pinkas J., Padělková Z., Růžička A., Gyepes R., Horáček M.: *J. Organomet. Chem.* 719, 64 (2012).
- Havlík A., Lamač M., Pinkas J., Varga V., Růžička A., Olejník R., Horáček M.: *J. Organomet. Chem.* 786, 71 (2015).
- Havlík A., Lamač M., Pinkas J., Růžička A., Horáček M.: *RSC Adv.* 73(5), 59154 (2015).

2L-02**IR SPEKTRA KOMPLEXŮ KOVŮ PRVNÍ PŘECHODNÉ ŘADY: EXPERIMENTÁLNÍ A DFT STUDIE****MARTIN PIŽL^{a,b}, IRENA HOSKOVCOVÁ^a, STANISLAV ŽALÍŠ^b**

^a Ústav anorganické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, ^b Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Česká republika
pizlma@vscht.cz

Infračervená spektroskopie patří k často používaným metodám při charakterizaci koordinačních sloučenin¹. Podrobný rozbor IR spekter poskytne spolehlivé údaje o struktuře komplexů i tehdy, když není možné použití jiných metod.

Ke studiu vibračních vlastností byly vybrány dva jednojaderné komplexy – kobaltnatý (obr. 1a) a nikelnatý (obr. 1b), jejichž ligandy jsou odvozeny od vitamínu B6².



Obr. 1. Struktury a) $[Co(HPL-Tau)_2(H_2O)_2]$ a b) $[Ni(HPL-Tau)_2(H_2O)_2]$

Kobaltnatý komplex byl použit k testování za účelem nalezení nevhodnější metodiky pro modelování struktur komplexů a jejich vibračních vlastností (IR). Byl otestován vliv funkcionálu (tj. B3LYP, BP86, PBE0, M062X a N12) a vliv difúzních funkcí na bázi sadu triple- ζ 6-311G(d) pro H, C, N, O, S a 6-311G(3df) pro Co/Ni. Také byl otestován vliv anharmonických efektů³ pro vybrané vibrace (imin, koordinaovaná voda).

Nejllepší popis struktur komplexů byl dosažen použitím PBE0 s difúzními funkcemi na bázi AO. Následně vypočtená IR spektra jsou v kvalitativní shodě s experimentem. V oblasti pod 1000 cm^{-1} pro kobaltnatý a nikelnatý komplex není potřeba používat škálovací faktor na rozdíl od oblastí nad 1000 cm^{-1} . Výpočty IR spekter se zahrnutím anharmonických efektů zlepšují shodu s experimentálním spektrem, avšak je zapotřebí i anharmonické výpočty naškálovat.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 20/2016) a z MSMT grantu LD14129.

LITERATURA

- Nakamoto K.: *Applications in Coordination Chemistry*, v knize *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds*, J. Wiley 2008.
- Casas J. S., Couce M. D., Sordo J.: *Coord. Chem. Rev.* 256, 3036 (2012).

3. Bloino J., Biczysko M., Barone V.: *J. Phys. Chem. A* **119**, 11862 (2015).

2L-03

SINGLE MOLECULE MAGNETS BASED UPON MONONUCLEAR Co(II) COMPLEXES

ROMAN BOČA, CYRIL RAJNÁK

*Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, University of SS Cyril and Methodius, 91701 Trnava, Slovakia
roman.boca@ucm.sk*

Single molecule magnets (SMM) exhibit a slow magnetic relaxation due to the magnetic anisotropy of molecular units. The rate of this effect, which is of the quantum mechanical origin, is influenced by the barrier to spin reversal that for the Kramers systems with the odd number of unpaired electrons is proportional to the axial zero-field splitting parameter D and the square of the spin: $U_{\text{eff}} = |D|(S^2 - 1/4)$. Thus, for the high-spin Co(II) systems the accepted theory predicts $U_{\text{eff}} = 2|D|$. Though $D < 0$ (easy axis) must hold true, there are reports about the slow magnetic relaxation for systems with $D > 0$ (easy plane) where the barrier to spin reversal does not exist any longer; however also the rhombic zero-field splitting parameter E might be on.

For tetra-coordinate Co(II) complexes the D-parameter can adopt positive and negative values as well and the barrier to spin reversal is typically around 30 cm^{-1} (ref.¹⁻³). Another characteristic parameter is the extrapolated relaxation time τ_0 based upon the Arrhenius-like equation $\tau = \tau_0 \exp(U_{\text{eff}}/kT)$ that adopts values between $10^{-6} - 10^{-11} \text{ s}$.

The SMM behavior was studied by magnetometry in the oscillating fields. In the present studies a SQUID apparatus (Quantum Design, MPMS-XL7) has been utilized with the AC option and frequencies operating between 0.1 to 1500 Hz. Typical records of the frequency dependence of the in-phase and out-of-phase magnetic susceptibilities are shown in Fig. 1.

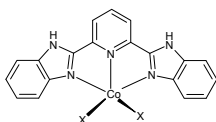
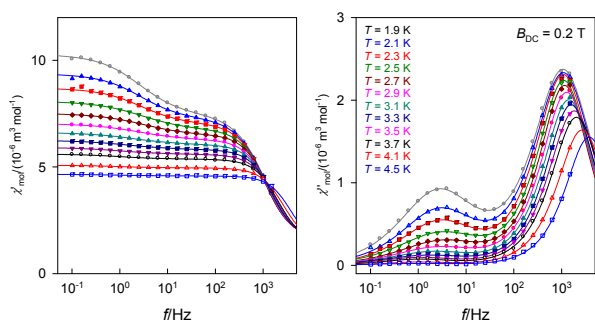


Fig. 1. Frequency dependence of the components of the AC magnetic susceptibility for the complex $[\text{Co}(\text{bzimpy})\text{Cl}_2]$ at a small bias field

In fact, a number of tetra- and pentacoordinate Co(II) complexes have been identified as SMMs: $[\text{Co}(\text{PPh}_3)_2\text{X}_2]$, $[\text{Co}(\text{bq})\text{X}_2]$, $[\text{Co}(\text{dmphen})\text{X}_2]$, $[\text{Co}(\text{bcp})\text{X}_2]$, $[\text{Co}(\text{L}^3)\text{Cl}_2]$ and $[\text{Co}(\text{Me}_6\text{tren})\text{Cl}_2]$ with $\text{X} = \text{Cl}^-$, Br^- , I^- , and eventually NCS^- (ref.⁴⁻⁹). The unusual but frequent observation is an evidence for two or more relaxation branches: the low-frequency branch is characterized by the relaxation times of the order of seconds.

Slovak grant agencies (APVV-14-0078, APVV-14-0073, VEGA 1/0522/14 and VEGA 1/0534/16) are acknowledged for the financial support.

REFERENCES

- Craig G. A., Murrie M.: *Chem. Soc. Rev.* **44**, 2135 (2015).
- Gomez-Coca S., Aravena D., Morales R., Ruiz E.: *Coord. Chem. Rev.* **289-290**, 379 (2015).
- Frost J. M., Harriman K. L. M., Murugesu M.: *Chem. Sci.* **7**, 2470 (2016).
- Boča R., Miklovič J., Titiš J.: *Inorg. Chem.* **53**, 2367 (2014).
- Smolko L., Černák J., Dušek J., Miklovič J., Titiš J., Boča R.: *Dalton Trans.* **44**, 17565 (2015).
- Rajnák C., Packová A., Titiš J., Miklovič J., Moncol J. R., Boča R.: *Polyhedron* **110**, 85 (2016).
- Rajnák C., Titiš J., Fuhr O., Ruben M., Boča R.: *Inorg. Chem.* **53**, 8200 (2014).
- Packová A., Miklovič R., Boča R.: *Polyhedron* **102**, 88 (2015).
- Smolko L., Černák J., Dušek M., Titiš J., Boča R.: *New. J. Chem.*, v tisku.

2L-04

HYDROSILYLAČNÍ REAKCE INDUKOVANÉ N→Si INTRAMOLEKULÁRNÍ KOORDINACÍ

MIROSLAV NOVÁK, ROMAN JAMBOR, ZDEŇKA RŮŽIČKOVÁ

*Univerzita Pardubice, Fakulta Chemicko-technologická, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika
st20148@student.upce.cz*

Je všeobecně známo, že organosilany hrají významnou roli v mnoha oblastech organické syntézy. Organosilany $\text{R}_3\text{Si-H}$ se využívají jako činidla pro hydrosilylační reakce násobných systémů, redukce velké řady funkčních skupin, přípravy silanolů $\text{R}_3\text{Si-OH}$, atd.¹

Naše pokusy o přípravu N→Si intramolekulárně koordinovaných organosilanů obecného vzorce $\text{LPh}_n\text{SiH}_{4-n}$ ($n = 1, 2$; L = C,N-chelatující ligand obsahující iminovou CH=N funkční skupinu) nicméně selhaly. Z reakčních směsí byly však izolovány organokřemičité amidy silindolového typu jako produkty spontánních hydrosilylačních reakcí iminové CH=N funkční skupiny (Schéma 1)².

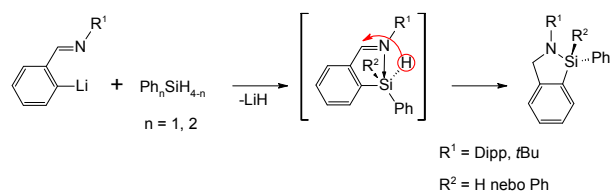


Schéma 1.

Neočekávaná tvorba těchto sloučenin nás vedla k aplikaci těchto reakcí také na *N,N*-chelatající ligandy odvozené od indolu, kde trichlorosilan HSiCl_3 byl sledován jako vhodné hydrosilylační činidlo. Hydrometalační reakce byly dále studovány jako obecný trend v chemii prvků 14. skupiny³.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR (číslo projektu: 15-07091S).

LITERATURA

1. a) Brook M. A.: *Silicon in Organic, Organometallic and Polymer Chemistry*. Wiley, 8, 171 (2000); b) Lickiss P. D.: *Adv. Inorg. Chem.* 42, 147 (1995).
2. Novák M., Dostál L., Alonso M., de Proft F., Růžička A., Jambor R.: *Chem. Eur. J.* 20, 2542 (2014).
3. Novák M., Dostál L., Turek J., Alonso M., de Proft F., Růžička A., Jambor R.: *Chem. Eur. J.* 22, 5620 (2016).

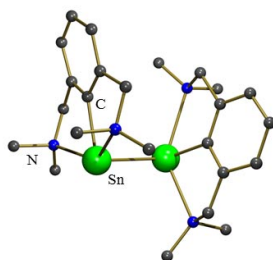
2L-05

CHEMIE NÍZKOVALENTNÍCH SLOUČENIN PRVKŮ 14. SKUPINY

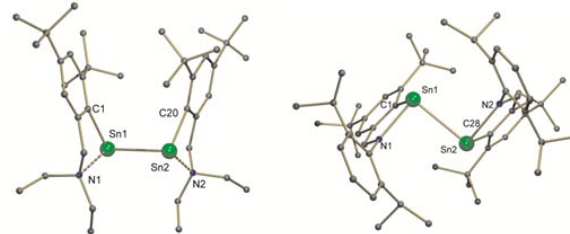
ROMAN JAMBOR

Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice, Česká republika
roman.jambor@upce.cz

Bylo prokázáno, že použití *N,C,N*-chelatajících ligandů v chemii prvků 14. skupiny vede k izolaci netradičních intramolekulárně koordinovaných distannů, ve kterých má centrální atom formální oxidační stav +I (cit.¹).

Schéma 1. Distann stabilizovaný pomocí *N,C,N*-ligandu

Další studium prokázalo, že tyto sloučeniny mohou být také stabilizovány stericky náročnými *C,N*-chelatajícími ligandy².

Schéma 2. Distann stabilizované pomocí *C,N*-ligandů

Vzájemné srovnání struktur těchto sloučenin obsahujících oba typy zmíněných ligandů a porovnání jejich reaktivit bude prezentováno.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA 15-07091S.

LITERATURA

1. Jambor R., Kasna B., Kirschner K. N., Schurmann M., Jurkschat K.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 47, 1650 (2008).
2. Novák M., Bouška M., Dostál L., Růžička A., Hoffmann A., Herres-Pawlis S., Jambor R.: *Chem. A Eur. J.* 21, 7820 (2015).

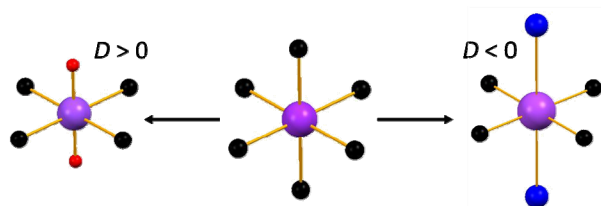
2L-06

MAGNETIZMUS JEDNOJADROVÝCH Mn(III) KOMPLEXOV SCHIFFOVÝCH BÁZMAREK MACHATA^a, IVAN NEMEC^a, RADOVAN HERCHEL^a, RAPHAEL MARX^b, JORIS VAN SLAGEREN^b, ZDENĚK TRÁVNÍČEK^a

^a Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, RCPTM, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká republika, ^b Institut für Physikalische Chemie, Universität Stuttgart, Pfaffenwaldring 55, 705 69 Stuttgart, Německo
marek.machata@upol.cz

Jednomolekulový magnet (SMM, z anglického názvu „single-molecule magnet“) je paramagnetická koordinační zlúčenina vykazujúca pomalú relaxáciu magnetizácie molekulového pôvodu. SMM musí mať magnetickú anizotropiu axiálneho charakteru, ktorá vytvára bariéru brániacu otočeniu spinu¹.

V tejto práci prezentujeme prípravu, štruktúrne a magnetické vlastnosti jednojadrových, hexakoordinovaných Mn^{III} komplexov: $(\text{Pr}_3\text{NH})[\text{Mn}(\text{L}1)_2]$ (**1**), $[\text{Mn}(\text{L}2)(\text{L}3)\text{Cl}]$ (**2**)^{2a} a $[\text{Mn}(\text{HL}4)_2](\text{ClO}_4)$ (**3**)^{2b}, Pr_3NH^+ = tripropylamóniový kation, $\text{H}_2\text{L}1$ = 2- $\{(E)\text{-}[(2\text{-hydroxyfenyl)imino]metyl}\}$ -6-metoxifenol, $\text{HL}2$ = 2- $\{(Z)\text{-}N\text{-}[2\text{-}(\text{dimetylamino)etyl}]\text{etanimidoyl}\}$ fenol, $\text{HL}3$ = 2'-hydroxyacetofenón a $\text{H}_2\text{L}4$ = 2- $\{(Z)\text{-}[(3\text{-hydroxypropyl)imino]metyl}\}$ fenol.



Obr. 1. Vzťah medzi charakterom axiálnej distorzie oktaédra vo vysokospinových systémoch s d^1 konfiguráciou a znamienkom parametra D

Magnetické vlastnosti **1-3** boli študované experimentálne (magnetometriou u **1-3**, HF-EPR u **1** a **2**) a výpočtovými metódami (CASSCF-NEVPT2). Výsledkom je určenie axiálneho (D) a rhombického (E) parametra anizotropie. Zlúčeniny **2** a **3** vykazujú axiálny typ magnetickej anizotropie ($D < 0$), kdežto u zlúčeniny **1** je $D > 0$. Tento rozdiel je možné vysvetliť rozdielnou dĺžkou axiálnych väzieb kov-ligand (z dôvodu efektu Jahn-Tellera) u študovaných systémov (u **2** a **3** predĺženie, u **1** kompresia).

Podakovanie za finančnú podporu – LO1305, PrF_2016_007.

LITERATÚRA

- Gómez-Coca S.: Coord. Chem. Rev. 289, 379 (2015).
- (a) Kar P., Drew M. G. D., Ghosh A.: Inorg. Chim. Acta 349, 405 (2013), (b) Zhang C., Wu D., Sun J., Kong X.: Acta Cryst. E 10, 56 (2000).

2L-07

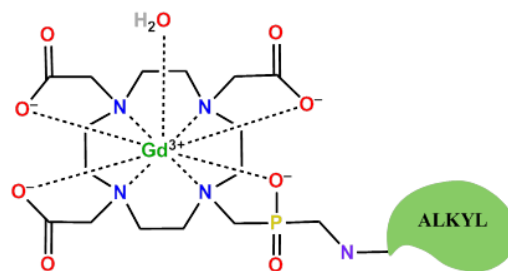
pH RESPONZÍVNE KONTRASTNÉ LÁTKY PRE angioMRI

PETER URBANOVSKÝ^a, JAN KOTEK^a, PETER HERMANN^a, MAURO BOTTA^b, FABIO CARNIATO^b, DANIEL JIRÁK^c

^a Katedra Anorganickej chémie, Karlova Univerzita, Hlavova 8, 128 43 Praha, Czech Republic, ^b Università degli Studi del Piemonte Orientale "A. Avogadro", Viale Teresa Michel 11, Alessandria, 151 00, IT, ^c Inštitút klinickej a experimentálnej medicíny, Vídeňská 9, 140 21 Praha, Czech Republic urbanop@natur.cuni.cz

Schopnosť trojmocného gadolína, iónu s maximálnym možným spinom, skracovať relaxačný čas vody T_1 je využívaná v magnetickej tomografii (MRI) pre získanie kontrastného snímku. Avšak pre vysokú toxicitu Gd^{3+} a nízku citlivosť MRI je nutné, aby ión bol pacientovi podávaný vo forme komplexu. Termodynamicky stabilné a kineticky inertné komplexy vytvárajú ligandy odvodené od polyaminokarboxylátov s 8 donorovými atómami (9. koordinačné miesto obsadzuje molekula vody), od ktorých odvodené medikamenty sú používané v klinickej praxi. Relaxivita týchto kontrastných látok (t.j. miera ich účinnosti) je nízka pre pomalú rýchlosť výmeny koordinovanej molekuly vody a rýchly lokálny pohyb komplexu. Cieľom dizajnu molekuly ligandu je možné upraviť relaxačné parametre kontrastnej látky a ďalej získať špecifickú kontrastnú látku s charakteristickými vlastnosťami.

Kontrastné látky odvodené od molekuly DO3AP^R (viď obrázok) spĺňajú vyššie uvedené podmienky a sú ďalej modifikovateľné. S postrannou aminoalkylovou pendantnou skupinou vytvárajú makrokomplex so sérovým albumínom (najzastúpenejšia bielkovina v krvi), čím sa kontrastná látka dlhšie zdržuje a je lokalizovaná v krvi. Lokálny pohyb molekuly je tým spomalený a relaxivita niekoľkonásobne zvýšená. Navyše vznik makrokomplexu je závislý na protonizácii postrannej aminoskupiny (na pH prostredia) a jeho vznik/rozpad je reverzibilný. Správnym dizajnom ligandu je možné nastaviť pK_A aminoskupiny tak, aby táto disociácia nastávala až v nádoroch, kde je pH prostredia nižšie.



Táto práca bola sponzorovaná GA ČR (č. 13–08336S).

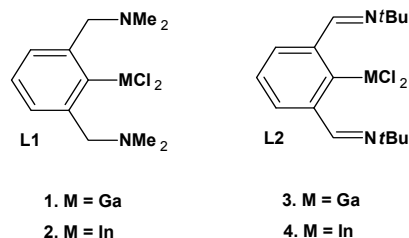
2L-08

PŘÍPRAVA PRVKŮ 13. SKUPINY V NÍZKÉM OXIDAČNÍM STAVU

TOMÁŠ ŘÍČICA, ROMAN JAMBOR, ZDENKA RŮŽIČKOVÁ

Univerzita Pardubice, Katedra obecné a anorganické chemie, Studentská 95, 532 10 Pardubice, Česká republika tomas.ricica@student.upce.cz

V nedávnej dobe boli pripravené organokovové sloučeniny prvků 14-té a 15-té skupiny v nízkých oxidačních stavoch $RSnSnR$ ($R = \{2,6-(Me_2NCH_2)_2C_6H_3\}^1$ a RM ($R = C_6H_3-2,6-(CH=NtBu)_2$; $M = Sb, Bi$)²). Pro stabilizaci těchto sloučenin byly využity N,C,N-chelataující ligandy. Z tohoto důvodu byla naše práce dále zaměřena na přípravu nízkých oxidačních stavů u prvků 13-té skupiny (gallia a india).



- | | |
|-----------|-----------|
| 1. M = Ga | 3. M = Ga |
| 2. M = In | 4. M = In |

Obr. 1. Výchozí organokovové dichloridy $RMCl_2$ ($R = \{2,6-(Me_2NCH_2)_2C_6H_3\}$; $M = Ga$ (**1**), In (**2**)) a $RMCl_2$ ($R = C_6H_3-2,6-(CH=NtBu)_2$; $M = Ga$ (**3**), In (**4**))

Byly připraveny výchozí organokovové dichloridy RMCl_2 ($\text{R} = \{2,6\text{-(Me}_2\text{NCH}_2)_2\text{C}_6\text{H}_3\}$; $\text{M} = \text{Ga}$ (1), In (2)) a RMCl_2 ($\text{R} = \text{C}_6\text{H}_3\text{-2,6-(CH=NtBu)}_2$; $\text{M} = \text{Ga}$ (3), In (4)) (obr. 1). Následné redukce byly provedeny pomocí KC_8 . Byly připraveny sloučeniny s různou strukturou v závislosti na použitých N,C,N-chelatajících ligandech ve sloučenině. Sloučeniny byly charakterizovány pomocí XRD analýzy, EPR a NMR-spektroskopie.

Tato práce vznikla za podpory grantu SG360003.

LITERATURA

- Jambor R., Kašná B., Kirschner K. N., Schurmann M., Jurkschat K.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 47, 1650 (2008).
- Vránová I., Alonso M., Jambor R., Růžička A., Erben M., Dostál L.: *Chem. Eur. J.* 22, 7376 (2016).

LITERATURA

- Boyd R. W., Fischer G. L.: *Encyclopedia of Materials: Science and Technology*, Elsevier 2001.
- Tiekink E. R. T., Vittal J. J., Zaworotko M. J.: *Organic Crystal Engineering. Frontiers of Crystal Engineering*, J. Wiley 2010.

2L-09

MOLEKULÁRNÍ SYSTÉMY S POTENCIÁLNÍM VYUŽITÍM V NELINEÁRNÍ OPTICE A JEJICH STUDIUM POMOCÍ RENTGENOVÉ DIFRAKCE A VIBRAČNÍ SPEKTROSKOPIE

IRENA MATULKOVÁ, IVANA CÍSAŘOVÁ, IVAN NĚMEC

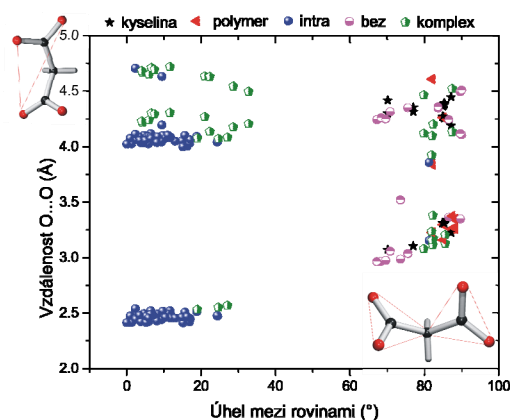
*Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2, Česká republika
matulkov@natur.cuni.cz*

Existence vysokovýkonných zdrojů koherentního záření umožnila pozorovat a objevit mnoho efektů v oblasti nelineární optiky. Pro sledování nových efektů je třeba připravit značné množství vhodných materiálů. Naše pozornost je především věnována kationtům snadno polarizovatelných organických molekul s delokalizovanými elektrony.

Díky vhodnému zapojení vodíkových vazeb typu O-H...O, N-H...O a N-H...N, které v některých případech potlačily přirozenou tendenci kationtů s vysokými dipólovými momenty vytvářet centrosymetrické páry, se podařilo připravit řadu krystalických sloučenin vykazujících generování druhé harmonické frekvence. V tomto příspěvku bude věnována pozornost strukturální rozmanitosti vybraných solí guanilyurey a diaminopyrimidinů¹ s kyslíkatými anorganickými nebo organickými kyselinami (obr. 1).

Hydrogenianionty anorganických oxokyselin, ale také organických dikarboxylových kyselin vytvářejí ve strukturách řetězce, vrstvy nebo 3D sítě, které izolují jednotlivé kationty a tím zabraňují jejich vzájemným kontaktům. Vzhledem ke značnému počtu donorových i akceptorových skupin i na

samotných organických bazích lze ve strukturách pozorovat i necentrosymetrická uspořádání – jejich párů, řetězců, či vrstev.



Obr. 1. Strukturální rozmanitost kyseliny malonové i malonátů
Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 14-05506S.

LITERATURA

- Matulková I., Mathauserová J., Císařová I., Němec I., Fábry J.: *J. Mol. Struct.* 1103, 82 (2016).

2L-10

ANORGANICKÉ ANIONTY – KLÍČOVÉ NÁSTROJE KRYSTALOVÉHO INŽENÝRSTVÍ MOLEKULÁRNÍCH MATERIÁLŮ PRO NELINEÁRNÍ OPTIKU

IVAN NĚMEC, IRENA MATULKOVÁ, IVANA CÍSAŘOVÁ, ROBERT GYEPES, MATOUŠ KLODA

*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra anorganické chemie, Hlavova 8, 128 40 Praha 2, Česká republika
agnemec@natur.cuni.cz*

Motivací pro intenzivně probíhající výzkum na poli nových materiálů pro nelineární optiku (NLO) je především neobyčejně široký rozsah technických aplikací těchto materiálů, které pokrývají oblast od generování nových laserových frekvencí až po optické výpočetní procesy a uchování dat¹.

Velmi slibnými materiály pro NLO aplikace jsou především molekulové krystaly obsahující vybrané organické polarizovatelné molekuly (kationty). Tato skupina látek je klasickým příkladem úspěšného využití vodíkových vazeb a postupů krystalového inženýrství² pro získávání materiálů s požadovanými fyzikálními vlastnostmi. Z tohoto pohledu jsou zcela nezastupitelné anorganické anionty, které díky velké geometrické variabilitě a škále různých rolí jako donory či akceptory vodíkových vazeb, výrazně zvyšují šance na získání nových NLO materiálů splňujících striktní symetrické podmínky.

V příspěvku budou prezentovány ilustrativní příklady přípravy a charakterizace nových materiálů vycházejících z vybraných, především heteroaromatických molekul a vhodných anorganických oxoaniontů. Bude prezentována kombinace teoretických (kvantově-chemické výpočty) a experimentálních metod (tj. difrakčních, spektroskopických a kalorime-

trických) umožňujících základní predikci a následnou detailní charakterizace získaných krystalických materiálů. U těchto materiálů budou diskutovány i pozorované perspektivní NLO efekty.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 14-05506S.

2L-11

HEPTAKOORDINOVANÉ KOMPLEXY Mn(II), Fe(II), Co(II) a Ni(II) S 15-ČLENNÝM PYRIDÍNOVÝM MAKROCYKLIČKÝM LIGANDOM; SYNTÉZA, ŠTRUKTÚRA, MAGNETICKÉ A REDOXNÉ VLASTNOSTI

PETER ANTAL, BOHUSLAV DRAHOŠ, RADOVAN HERCHEL, ZDENĚK TRÁVNÍČEK

*Katedra anorganické chemie, Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Přírodovědecká Fakulta, Univerzita Palackého, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká republika
peter.antal@upol.cz*

V rámci systematického štúdia vzťahu medzi štruktúrou a magnetickými, prípadne redoxnými vlastnosťami komplexov vybraných prechodných prvkov s 15-člennými pyridínovými makrocyclickými ligandmi^{1,2} bol pripravený ligand s dvoma 2-metylpyridínovými ramenami a jeho komplexy so zložením $[M(L)](\text{ClO}_4)_2$, kde $L = 3,12\text{-bis}(2\text{-metylpyridín})\text{-}3,12,18\text{-triaz}\text{-}6,9\text{-dioxobicyklo}[12.3.1]\text{oktadeca-}1,14,16\text{-trién}$ (Schéma 1), a $M = \text{Mn(II) I, Fe(II) II, Co(II) III}$ a Ni(II) IV (cit.³). V uvedených komplexoch sú centrálné atómy heptakoordinované, pričom koordinačný poléder má tvar deformovanej pentagonálnej bipyramídy. Pre komplexy *II, III* a *IV* boli zistené vysoké hodnoty magnetickej anizotropie ($D(\text{Fe}) = -7,4(2) \text{ cm}^{-1}$, $D(\text{Co}) = 34(1) \text{ cm}^{-1}$ a $D(\text{Ni}) = -12,8(1) \text{ cm}^{-1}$, $E/D = 0,136(3)$), pričom pri komplexe *III* bola vo vonkajšom magnetickom poli pozorovaná pomalá relaxácia magnetizácie ($\tau_0 = 9,90 \cdot 10^{-10} \text{ s}$, $U_{\text{eff}} = 24,3 \text{ K}$ ($16,9 \text{ cm}^{-1}$)). Tento komplex možno zaradiť do malej skupiny poľom indukovaných jednomolekulových magnetov (field-induced single-molecule-magnets) s pentagonálne bipyramidálnym chromoforom. Výsledky meraní cyklickej voltametrie roztokov komplexov *I-IV* preukázali schopnosť ligandu *L* stabilizovať nižšie oxidačné stavy centrálnych atómov.

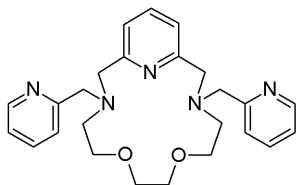


Schéma 1. Štruktúrny vzorec ligandu **L**

Táto práca vznikla s podporou Ministerstva školství, mládeže a telovýchovy České republiky (grant NPU LO1305).

LITERATÚRA

1. Drahoš B., Herchel R., Trávníček Z.: Inorg. Chem. 54, 3352 (2015).

2. Drahoš B., Herchel R., Trávníček Z.: RSC Adv. 6, 34674 (2016).

3. Antal P., Drahoš B., Herchel R., Trávníček Z.: Inorg. Chem. v tlači.

2L-12

PRÍPRAVA A VLASTNOSTI TETRACHLORIDOŽELEZITANOV VYBRANÝCH PROTONIZOVANÝCH DERIVÁTOV PYRIDÍNU

MÁRIO IZAKOVIČ, ZUZANA LUKAČOVIČOVÁ, IVETA ONDREJKOVIČOVÁ, MARIAN KOMAN

*Oddelenie anorganickej chémie, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko
mario.izakovic@stuba.sk*

Práca sa zaoberá štúdiom prípravy tetrachloridoželezitanov s vybranými pyridínovými derivátmi zloženia $[\text{LH}][\text{FeCl}_4]$, ktoré sú charakterizované elementárnou analýzou, IČ a UV-Vis spektroskopiou. Štruktúra komplexných zlúčenín $[\text{denaH}][\text{FeCl}_4]$ a $[\text{2hympH}][\text{FeCl}_4]$ je vyriešená RTG monokryštálovou štruktúrnou analýzou.

Tetrachloridoželezitany $[\text{LH}][\text{FeCl}_4]$ ($L = \text{nia, dena, 2hymp, 4hym, mpc}$) [*nia* = amid kyseliny nikotínovej; *dena* = dietylamid kyseliny nikotínovej; *2hymp* a *4hym* = 2- a 4-(hydroxymetyl)pyridín; *mpc* = metylester kyseliny 3-pyridylkarbamátovej] vznikajú reakciou bezvodého chloridu železitého s konc. kyselinou chlorovodíkovou a príslušným derivátom pyridínu v mólovom pomere $n(\text{FeCl}_3) : n(L) = 3 : 1$ pri laboratornej teplote.

Komplexná zlúčenina $[\text{denaH}][\text{FeCl}_4]$ má iónovú štruktúru. Katióny $[\text{denaH}]^+$ sú vzájomne viazané silnými intermolekulovými vodíkovými väzbami. Väzby sa uplatňujú medzi atómom dusíka N pyridínového kruhu jedného katiónu a atómom kyslíka O zo skupiny $-\text{CON}(\text{C}_2\text{H}_5)_2$ susediaceho katiónu (N–H...O), čím sa vytvárajú polymérne „cik-cak“ jednorozmerné reťazce (vzdialenosť N...O je 2,624 Å a väzbový uhol N–H...O je 174,17 °. Blízke hodnoty medziatómových vzdialeností a väzbových uhlov vykazuje tetrachloridoželezitan 4-piperidinylypyridínia $[\text{4-pypH}][\text{FeCl}_4]$, ktorého štruktúra bola publikovaná¹.

V IČ spektrách $[\text{LH}][\text{FeCl}_4]$ sa nachádza absorpčný pás v oblasti 2600 cm^{-1} až 2900 cm^{-1} charakteristický pre katióny $[\text{LH}]^+$. Absorpčný pás charakteristický pre anión $[\text{FeCl}_4]^-$ sa nachádza v oblasti 370 cm^{-1} až 385 cm^{-1} . V UV-Vis absorpčných spektrách $[\text{LH}][\text{FeCl}_4]$ sú tri absorpčné pásy s λ_{max} okolo 240 nm, 310 nm a 360 nm zodpovedajúce energeticky najnižším prechodom prenosu náboja (CT) aniónu $[\text{FeCl}_4]^-$ vo vysokospinovom elektrónovom stave. V oblasti 500 nm až 800 nm sú viditeľné zakázané $d \rightarrow d$ prechody. Absorpčné maximum pri 530 nm je charakteristické pre anión $[\text{FeCl}_4]^-$.

Táto práca vznikla s podporou Vedeckej grantovej agentúry MŠVVaŠ SR a SAV (projekt VEGA 1/0543/15) a Agentúry na podporu výskumu a vývoja (projekt APVV-14-0078).

LITERATURA

1. James B. D., Juraja S. M., Liesegang J., Reiff W. M., Skelton B. W., White A. H: *Inorg. Chem. Acta* 312, 88 (2001).

2L-13

HYBRIDNÍ FOSFINO FERROCENOVÉ LIGANDY S METHYLENOVÝMI SPOJKAMI

MARTIN ZÁBRANSKÝ, IVANA CÍSAŘOVÁ, PETR ŠTĚPNIČKA*

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

Ferrocen je perspektivním organokovovým stavebním blokem pro design ligandů se zajímavými vlastnostmi¹. Specifický tvar molekuly ferrocenu a prakticky volná rotace cyklopentadienylových ligandů umožňují fosfinovým ligandům od něj odvozených zaujmout celou řadu prostorových uspořádání svých donorových skupin. Tato flexibilita může být dále zvýšena například zavedením methylenové skupiny mezi jednu z donorových skupin a ferrocenové jádro. Takové bifunkční hybridní² ferrocenové fosfíny, které navíc obsahují polární sekundární donorové skupiny, jsou proto zajímavé jak pro jejich relativně pestrou koordinační chemii³, tak pro možné využití při katalýze ve vodných prostředích⁴. Zmínky o takových ligandech jsou však zatím jen ojedinělé⁵.

Nově byl při přípravě homologických fosfinoferrocenových ligandů použit betain **1** jako ferrocenylmethylační činidlo⁶. Podařilo se tak nově připravit například sulfon **4** a nitril **5**. Reakcemi látky **4** s halogenidy zinečnatými byly získány zajímavé vícejaderné komplexy. Hydrolýzou nitrilu **5** byl pak získán nový fosfinkarboxylový ligand.

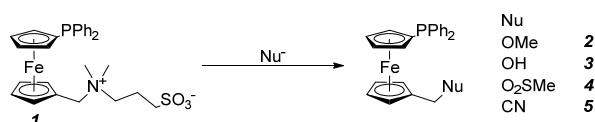


Schéma 1. Reakce ferrocenového betainu **1** s různými nukleofily

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

LITERATURA

1. Štěpnička P., v knize: *Ferrocenes: Ligands, Materials and Biomolecules*, kap. 5, s. 177. J. Wiley, Chichester 2008.
2. (a) Bader A., Lindner E.: *Cord. Chem. Rev.* 108, 27 (1991). (b) Slone C. S., Weinberger D. A., Mirkin C. A.: *Progr. Inorg. Chem.* 48, 233 (1999).
3. (a) Štěpnička P.: *Eur. J. Inorg. Chem.*, 3787 (2005). (b) Škoch K., Císařová I., Štěpnička P.: *Inorg. Chem.* 53, 568 (2014).
4. Shaughnessy K. H., DeVasher R. B.: *Curr. Org. Chem.* 9, 585 (2005).
5. (a) Štěpnička P., Císařová I.: *Dalton Trans.* 42, 3373

(2013). (b) Štěpnička P., Zábanský M., Císařová I.: *ChemistryOpen* 1, 71 (2012).

6. Zábanský M., Císařová I., Štěpnička P.: *Dalton Trans.* 44, 14494 (2015).

2L-14

COORDINATION POLYMERS OF LANTHANIDES AND URANYL WITH 4-(DIPHENYLPHOSPHORYL)-BENZOIC ACID

PETER BARTOŠ*, MAREK NEČAS

Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kotlářská 267/2, CZ-611 37 Brno, Czech Republic
man@chemi.muni.cz

Coordination chemistry of lanthanides and actinides is typical of high coordination numbers, which can be achieved by central atoms and of strong affinity to hard donor atoms. The high coordination numbers can be useful in creation of coordination polymers where chaining is needed and strong affinity to oxygen donor atom makes polydentate ligands containing carboxylate and phosphoryl groups ideal partners for this purpose^{1,2}.

New coordination polymers of 4-(diphenylphosphoryl)-benzoic acid (**J**) were prepared by solvothermal synthesis in methanol at 140 °C. The metal-ligand molar ratio 1:2 was chosen. While reactions of (**J**) and La(III), Pr(III), Nd(III) and Sm(III) nitrates gave a series of isostructural layered 2D-coordination polymers (Figure 1), Eu(III) nitrate afforded a 1D-coordination polymer. The reaction of uranyl nitrate with (**J**) yielded the 1D-coordination polymer, too. In this case, molecules of solvent were incorporated into the structure of the coordination polymer in the form of bridging methanolate.

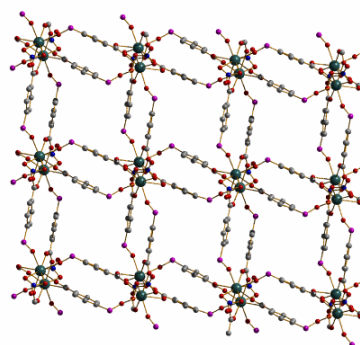


Fig. 1. Crystal structure of 2D-coordination polymer from the reaction of (**J**) and Ln(NO₃)₃ (Ln = La, Pr, Nd, Sm). Hydrogen atoms and free phenyl groups were omitted for clarity

This research has been financially supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech republic under the project CEITEC 2020 (LQ1601).

REFERENCES

1. Spíchal Z., Nečas M., Pinkas J.: *Inorg. Chem.* 44, 2074 (2005).
2. Spíchal Z., Pinkas J., Nečas M.: *Polyhedron* 48, 99 (2012).

2P-01
SYNTÉZA A ŠTÚDIUM ANTIRADIKÁLOVEJ
AKTIVITY MEĎNATÝCH KOMPLEXOV
S LIGANDAMI TYPU REDUKOVANÝCH
SCHIFFOVÝCH BÁZ

LUCIA LINTNEROVÁ, JINDRA VALENTOVÁ,
FERDINAND DEVÍNSKY

Katedra chemickej teórie liečív, Farmaceutická fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Kalinčiaková 8, 832 32 Bratislava, Slovensko
lucialintnerova@pharm.uniba.sk

Cieľom nášho výskumu bola príprava meďnatých komplexov pripravených zo súboru ligandov odvodených od aminokyselín dvoch typov (Schéma 1) a následné štúdium antiradikálových účinkov. Ide o tzv. SOD mimetickú aktivitu, tj. vychytávanie superoxidových radikál-aniónov, teda napodobe účinku enzýmov superoxid-dismutáz¹.

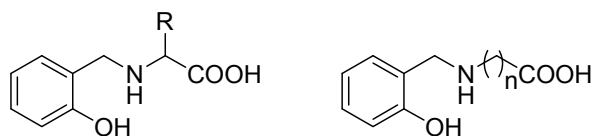


Schéma 1. Štruktúra ligandov typu redukovaných báz odvodených od biogénnych (vľavo) a nebiogénnych (vpravo) aminokyselín

Ligandy typu redukovaných Schiffových báz boli pripravené z metylesterov príslušných aminokyselín. Reakciou so salicylaldehydom vznikli Schiffove bázy. Redukciou s NaBH₄ bol následne pripravený stabilný sekundárny amin. Po hydrolyze metylesteru sme získali cieľové ligandy, ktoré boli použité v kombinácii s octanom alebo dusičnanom meďnatým na prípravu komplexov.

Pripravené komplexy boli testované na antiradikálový účinok, pričom sme využili spektrofotometrickú metódu založenú na kompetitívnej reakcii farbiva INT, 2-(4-jódofenyl)-3-(4-nitrofenyl)-5-fenyl-2H-tetrazólium chloridu, s KO₂ ako zdrojom radikálov². Testované komplexy sú schopné inhibovať vznik INT-formazánu, detekovaného ako absorbancia pri 500 nm. Boli stanovené IC₅₀ hodnoty, ktoré sa pohybovali v mM až μM rozsahu.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. APVV-0516-12 a grantom FaF UK/11/2016.

LITERATÚRA

1. Vančo J., Marek J., Trávníček Z., Račanská E., Muselík J., Švajlenová O.: J. Inorg. Biochem. 102, 595 (2008).
2. Vančo J., Švajlenová O., Račanská E., Muselík J., Valentová J.: J. Trace Elem. Med. Bio. 18, 155 (2004).

2P-02
SALICYLÁTOMEĎNATÉ KOMPLEXY S KOFEINOM:
EPR CHARAKTERIZÁCIA A DFT VÝPOČTY

JOZEF ŠVOREC, MIROSLAVA PUCHOŇOVÁ, JÁN
PAVLÍK, DUŠAN VALIGURA

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

Kyselina salicylová a jej deriváty tvoria často súčasť protizápalových, antipyretických alebo analgetických liečiv patriacich do skupiny nesteroidných protizápalových látok¹. Metyl alebo metoxy deriváty kyseliny salicylovej sa v súčasnosti študujú najmä kvôli svojim antioxidačným vlastnostiam, vďaka čomu tvoria aktívnu súčasť v niektorých liekoch². Meďnaté komplexy takýchto protizápalových látok vykazujú často ešte lepšiu biologickú aktivitu. Napríklad, meďnaté komplexy kyseliny salicylovej a 3-metoxysalicylovej preukazujú vlastnosti potenciálneho mimetika superoxid-dismutázy³.

V tejto práci budeme prezentovať EPR spektrá meďnatých komplexov s aniónmi kyseliny 3- a 5-metylsalicylovej alebo 4-metoxysalicylovej s kofeínom. V týchto komplexoch sú molekuly kofeínu umiestnené mimo primárnej koordinačnej sféry, čo vedie k pozorovaniu dobre rozlíšených práškových EPR spektier vďaka lepšej izolácii paramagnetických centier v kryštálovej štruktúre komplexov. Experimentálne EPR parametre budú diskutované s výsledkami získanými pomocou DFT výpočtov.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA (1/0388/14) ako aj autori (M. P.) ďakujú STU za finančnú podporu v rámci grantovej schémy na podporu mladých výskumníkov (1622).

LITERATÚRA

1. Weder J. E., Dillon C. T., Hambley T. W., Kennedy B. J., Lay P. A., Biffin J. R., Regtop H. L., Davies N. M.: Coord. Chem. Rev. 232, 95 (2002).
2. Ohta T., Imagawa T., Ito S.: Mol. Pharmacol. 75, 307 (2009).
3. O'Connor M., Kellett A., McCann M., Rosair G., McNamara M., Howe O., Creaven B. S., McClean S., Foltyn-Arfa Kia A., O'Shea D., Devereux M.: J. Med. Chem. 55, 1957 (2012).

2P-03
SYNTÉZA A VLASTNOSTI KOMPLEXŮ Co(II), Ni(II)
a Cu(II) S PYRIDOXALTAURINÁTEM

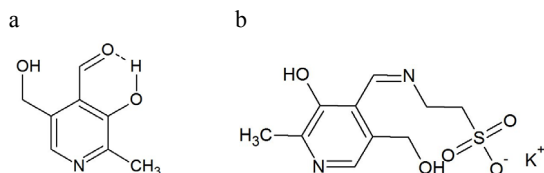
MIROSLAVA GURICOVÁ, ZDENĚK SMĚKAL,
IRENA HOSKOVCOVÁ

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

Pyridoxal (obr. 1) je jednou z forem vitamínu B₆ a účastní se metabolismu mnoha důležitých látek. Samotný

pyridoxal vystupuje jako ligand, stejně jako od něj odvozené iminy, Schiffovy báze¹, jejichž vznik je významně katalyzován ionty přechodných kovů.

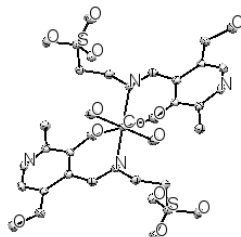
Zabývali jsme se interakcí iontů Co(II), Ni(II) a Cu(II) s pyridoxalem a taurinem a se Schiffovou bází, která vzniká jejich kondenzací, pyridoxylidetaurinát, KH(PL-Tau).



Obr. 1. a) pyridoxal, PL, b) pyridoxylidetaurinát, KH(PL-Tau)

Metodou kontinuálních variací jsme zkoumali interakci iontů Co(II), Ni(II) a Cu(II) s ligandem v roztoku voda : ethanol = 1 : 2. Za těchto podmínek netvoří KH(PL-Tau) s žádným z kovů stabilní sloučeninu. Je-li přítomen M(II), pyridoxal a taurin, tvoří vznikající Schiffova báze s kovovým iontem komplexy, v nichž je poměr M : L = 1 : 1.

Syntéza komplexů provedená za podobných podmínek vedla k látkám s poměrem M : L = 1 : 2, celkového složení [Co(HPL-Tau)₂(H₂O)₂], [Ni(HPL-Tau)₂(H₂O)₂] a [Cu(HPL-Tau)₂(H₂O)]. U prvních dvou byla stanovena krystalová struktura, vlastnosti komplexu Cu odpovídají údajům uvedeným v práci².



Obr. 2. Struktura komplexu [Co(HPL-Tau)₂(H₂O)₂]

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 20/2016)

LITERATURA

1. Casas J. S., Couce M. D., Sordo J.: *Coord. Chem. Rev.* 256, 3036 (2012).
2. Sun Y., Zheng D., Song H.: *X-ray Struct. Anal.* 21, x195 (2005).

2P-04

REAKCE VYSOKOPECNÍ STRUSKY S VODOU

MARTIN MUCHA

Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě,
30. dubna 22, 701 03 Ostrava, Česká republika
martin.mucha@osu.cz

Vysokopecní struska vzniká jako sekundární produkt při výrobě surového železa ve vysoké peci. Její složení (chemické a mineralogické) závisí na mnoha faktorech. Obecně se jedná

o směs křemičitanových minerálů, uhličitánů, případně oxidů kovů. Využití nachází především ve stavebním průmyslu jako záspový materiál nebo jako náhrada cementu v betonech¹. Další zkoumanou možností využití strusek je odstranění iontů těžkých kovů z vod. Vysokopecní strusky podléhají při kontaktu s vodou hydrolyze, která může negativně ovlivňovat jejich využití^{1,2}. Objasnění mechanismu hydrolyzy může pomoci k lepšímu využití strusek v různých oblastech.

V této práci byla zkoumána hydrolyza pomalu chlazené vysokopecní strusky dodané firmou ArcelorMittal Ostrava a.s. Struska byla suspendována v demineralizované vodě a byly sledovány změny hodnot pH v závislosti na čase. V roztocích po filtraci suspenzí byly stanoveny obsahy kationů Ca²⁺ a Mg²⁺ metodou FAAS a obsah reaktivního SiO₂ technikou s molybdenanem amonným. Struktura vyloučených strusek byla charakterizována metodou FTIR, technikou difúzní reflektance.

Bylo zjištěno, že po kontaktu strusky s demineralizovanou vodou dochází k prudkému nárůstu hodnoty pH suspenze (již během první minuty po smíchání je dosaženo hodnoty pH větší než 9). K ustálení hodnoty pH suspenzí nedochází ani po 7 dnech od smíchání, kdy byla naměřena hodnota pH 10,2. Obsah reaktivního SiO₂ v roztocích po kontaktu se struskou rovněž v čase roste (po 7 dnech roztoky obsahovaly 13 mg/L SiO₂). Obsahy Ca²⁺ a Mg²⁺ byly po 7 dnech kontaktu 17 mg/L resp. 4 mg/L. Bylo zjištěno, že nárůst hodnoty pH koresponduje především s obsahem rozpuštěného SiO₂ v roztocích. Teoretická hodnota pH odpovídající nedisociované kyselině křemičité při zjištěné koncentraci SiO₂ činí 10,9. Rozdíl oproti reálné naměřené hodnotě je pravděpodobně způsoben částečnou disociací kyseliny křemičité příp. může souviset se vznikem nových minerálů v materiálu, jejichž vznik byl potvrzen změnami ve FTIR spektrech.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT LO1208 "TEWEP" a programu VaVpl – číslo grantu CZ.1.05/2.1.00/19.0388.

LITERATURA

1. Lembák M.: *Problematika racionálního využití průmyslových odpadů ve stavebnictví a při zakládání do podzemních důlních děl*. VŠB-TUO, Ostrava 1999.
2. Dimitrova S. V., Mehanjiev D.R.: *Water Res.* 34, 1957 (2000).

2P-05

BIOLOGICKY AKTIVNĚ PALÁDNATÉ KOMPLEXY DERIVÁTU KURKUMÍNU NA LUDSKÉ NÁDOROVÉ KMEŇOVÉ BUNKY HRUBÉHO ČREVA A PEČENE

NATALIA MIKLÁŠOVÁ^a, EVA FISCHER-FODOR^b, ROMAN MIKLÁŠ^a, FERDINAND DEVÍNSKY^a

^aFarmaceutická fakulta UK v Bratislave, Odbojárov 10, 832 32 Bratislava, Slovakia, ^bInstitute of Oncology „Prof. Dr. I. Chiricuta“, 34-36 Republicii, RO-400015, Cluj-Napoca, Romania
miklasova@fpharm.uniba.sk

Na základě niekoľkých našich štúdií publikovaných skôr^{1,2} boli syntetizované a štruktúrne charakterizované nové

paládnaté komplexy obsahujúce 1,7-bis(2-metoxifynyl)hepta-1,6-dién-3,5-dión (Schéma 1).

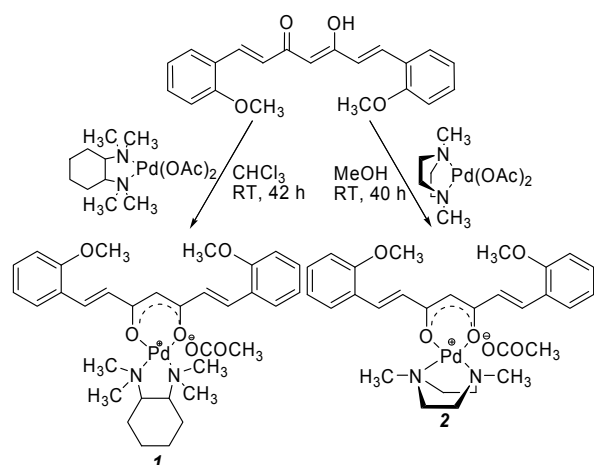


Schéma 1. Syntéza paládnatých komplexov 1 a 2

Komplexy boli testované *in vitro* na ľudských nádorových bunkových líniiach hrubého čreva a pečene, normálnych pečenejých bunkách a krvných progenitorových bunkách. Na základe biologických testov, komplexy 1 a 2 (obsahujúce kurkuminoid ako ligand) vykazujú silný protinádorový účinok proti ľudskému kolorektálnemu karcinómu a pečenejým metastázam so zameraním sa na populácie rakovinových kmeňových buniek.

Tato práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. APVV-0516-12 a grantu VEGA 1/0346/16.

LITERATÚRA

- Miklášová N., Fischer-Fodor E., Mikláš R., Kucková L., Kožíšek J., Liptaj T., Soritau O., Valentová J., Devínsky F.: *Inorg. Chem. Commun.* 46, 229 (2014)
- Fischer-Fodor E., Mikláš R., Krausz L. T., Virag P., Moldovan D. C., Perde Schrepler M., Berindan-Neagoe I., Devínsky F., Miklášová N.: *Studia UBB Chemia* 2, 93 (2015).

2P-06

¹⁹F-MRI KONTRASTNÍ LÁTKY VYUŽÍVAJÍCÍ IONTY *d*-KOVŮ

FILIP KOUCKÝ, JAN KOTEK, IVANA CÍSAŘOVÁ

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze, Hlavova 8, 128 43 Praha 2, Česká republika
kouckyf@natur.cuni.cz

Zobrazování pomocí metody ¹⁹F-MRI (zobrazování magnetickou rezonancí) vyžaduje kontrastní látky s krátkými relaxačními časy T_1 a T_2 . Kromě používaných fluoroderivátů organických molekul je celkem běžné použití koordinačních sloučenin paramagnetických kovů f -bloku¹. V současnosti se

ukazuje i málo probádaná cesta za použití *d*-kovů jako velice slibná. U nikelnatých komplexů bylo dosaženo ve skupině koordinační a bioanorganické chemie PrF UK velice krátkých relaxačních časů².

Při využití makrocyclických ligandů a vhodného iontu kovu lze ladit délku relaxačních časů T_1 a T_2 . Pro studium relaxačních vlivů Cu^{2+} a Ni^{2+} byl syntetizován ligand (Schéma 1) založený na symetricky 1,8-substituovaném cyklu (1,4,8,11-tetraazacyklotetradekan). Jako pendantní rameno byla použita trifluoroethylou skupinou modifikovaná fosfinová kyselina. Připravené komplexy byly charakterizovány rentgenovou difrakcí a relaxačními měřeními NMR.

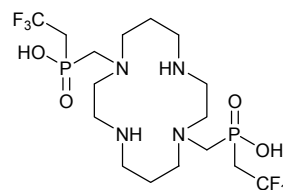


Schéma 1. Studovaný ligand

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR P205-16-031565

LITERATURA

- Chalmers K. H., De Luca E., Hogg N. H. M., Kenwright A. M., Kuprov I., Parker D., Botta M., Wilson J. I., Blamire A. M.: *Chem. – Eur. J.* 16, 134 (2010).
- Blahut J., Hermann P., Gálisová A., Herynek V., Císařová I., Tošner Z., Kotek J.: *Dalton Trans.* 45, 474 (2016).

2P-07

MAGNETICKÁ VÝMENNÁ INTERAKCIA V MEĎNATÝCH KOMPLEXOCH SPROSTREDKOVANÁ VODÍKOVÝMI VÄZBAMI

JÁN PAVLIK^a, MIROSLAVA PUCHOŇOVÁ^a, JÁN MONCOL^a, DUŠAN VALIGURA^{b,a}

^a Oddelenie anorganickej chémie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava 1,

^b Katedra chémie, Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave, Nám. J. Herdu 2, 917 01 Trnava, Slovensko

jan.pavlik@stuba.sk

Popri tradičnom ponímaní vodíkových väzieb ako účinného stabilizátora makromolekulových štruktúr sa v nedávnej dobe začala diskutovať aj ich schopnosť sprostredkovať magnetickú výmennú interakciu¹. V prezentovanej práci sme študovali dva novopripravené meďnaté komplexy $[\text{Cu}(\mu\text{-menia})(3\text{-Mesal})_2(\text{menia})(\text{H}_2\text{O})_2]_2$ (1) a $[\text{Cu}(\mu\text{-nia})(5\text{-Mesal})_2(\text{H}_2\text{O})_2]_2$ (2), kde *menia* je *N*-metylnikotínamid, *nia* je nikotínamid a *5-Mesal* je 5-metylsalicyláto anión. Zo štruktúrneho hľadiska sú tieto diméry spojené vodíkovými väzbami do supramolekulových reťazcov. Makroskopické magnetické vlastnosti systémov 1 a 2 boli interpretované troma alternatívnymi prístupmi, pričom najlepšia zhoda s experimentom bola dosiahnutá pri predpoklade, že sú tvorené antiferomagnetickými dimermi. Za pomoci DFT výpočtov sa ukázalo, že magnetická komunikácia

cia prebieha predovšetkým medzi centrami zo susediacich štruktúrnych dimérov a vnútrómolekulová interakcia je zanedbateľná. Oba systémy tak vykazujú výrazný rozdiel medzi molekulovým a magnetickým štruktúrnym motívom. Parametre extrahované z DFT výpočtov a z fitovania experimentálnych funkcií sú vzájomne vo veľmi dobrej zhode. Pomocou výpočtov na úrovni CASSCF a DDCI bol študovaný aj detailný mechanizmus magnetickej interakcie^{2,3}. Výsledky naznačujú, že jej cesta pravdepodobne nevedie priamo cez vodíkové väzby, tie však plnia úlohu „tmeliva“, ktoré drží medznaté centrá vo vzájomnej blízkosti.

Táto práca vznikla vďaka podpore grantov VEGA 1/0522/14, APVV-14-0078, APVV-14-0073 a SCIEX-SVK 14.065.

LITERATÚRA

- Costa J. S., Bandeira N. A. G., Le Guennic B., Robert V., Gamez P., Chastanet G., Ortiz-Frade L., Gasque L.: *Inorg. Chem.* 50, 5696 (2011).
- Desplanches C., Ruiz E., Rodriguez-Fortea A., Alvarez S.: *J. Am. Chem. Soc.* 124, 5197 (2002).
- Le Guennic R., Ben Amor N., Mayanau D., Robert V.: *J. Chem. Theory Comput.* 5, 1506 (2009).

2P-08

PREPARATION OF ALUMINUM PHOSPHIDE BY REACTIVE SPARK PLASMA SINTERING

JAN ŠULC^a, LIBOR MASTNÝ^b, TOMÁŠ FRANTIŠEK KUBATÍK^c, MAREK JANATA^c, VLASTIMIL BROŽEK^c

^a GYMNÁZIUM Botičská 424/1, 128 00 Prague 2,

^b University of Chemistry and Technology Prague, Technická 5, 166 28 Prague, ^c Institute of Plasma Physics CAS v.v.i., Za Slovankou 3, 18200 Prague, Czech Republic
brozek@ipp.vas.cz

The work is aimed at obtaining compact aluminum phosphide, to measure its physical and mechanical properties. Aluminum phosphide is known for its extremely high toxicity based on its hydrolytic decomposition to phosphine, but also gaining importance in the context of the substituted nanoribbon in semiconductor technology. Information, especially about the physical and mechanical properties, are highly controversial.

By Spark Plasma Sintering method (SPS) – also called Field Assisted Sintering Technique (FAST) – were prepared a highly compact and virtually non-porous materials that allow more accurately measure the particular physical characteristics of this compounds. On preparations of AIP were studied some high temperature and mechanical properties, especially micro-hardness. Compact moldings of AIP were prepared by reactive sintering of a mixture of aluminum powder and red phosphorus. For comparison the chemical behavior of AIP other samples were prepared by reacting white phosphorus dissolved in carbon disulfide with powder aluminium long term reaction at 70 °C.

From the digital recording of the temperature, volume and pressure during sintering at 300 °C and 450 °C and a pressure of 5 MPa it was shown that a mixture of Al + P

under these conditions does not react; temperature increase to 500 °C and pressure of 30 MPa provoked an immediate reaction. In addition the release of gaseous phosphorus eluded leaks between the matrix and the piston to the evacuated space. In this case, the two-phase products of aluminum phosphide was formed in an aluminum matrix without modifying the phase composition phosphide of AIP or its lattice parameter. Vickers microhardness was measured at the device Innovatest NEXUS 4504 Series, showed a maximum value of 9.12 GPa. This value was confronted with the calculation of the theoretical value of hardness by Povarennykh¹ empirical equation. The consistent result confirms the high acceptance of the model valid primarily for the binary compound fcc structure type, which plays a special role coefficient proportion of covalent bond, the degree of decoupling non-bonding electrons and packing coefficient of atoms in the crystal lattice associated with a coordination number. For the calculation is also important formal valence and assuming purely ionic bond and a major determinant of the shortest internuclear distance in the crystallographic plane (hkl) hardness measurement.

REFERENCE

- Povarennykh A. S.: *The hardness of minerals*, Ed. AN USSR, Kiev (1973).

2P-09

VLIV MINERALIZÁTORŮ NA PIGMENTOVĚ - APLIKAČNÍ VLASTNOSTI KASITERITOVÝCH PIGMENTŮ

LUCIE KAROLOVÁ, ŽANETA DOHNALOVÁ, JANA LUXOVÁ

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko – technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika
lucie.karolova@student.upce.cz

Kasiteritové pigmenty patří mezi významné keramické pigmenty¹. Jejich nespornou výhodou je snadná příprava a dostupnost výchozích surovin². Základ kasiteritových pigmentů tvoří tetragonální mřížka oxidu cínitého. Parciální substitucí cínitých iontů za ionty vhodných barvicích příměsí dochází k barevné změně v původně nebarevném systému³. Předkládaný výzkum se zabývá kasiteritovými pigmenty, kde jako barvicí příměsí byly použity ionty Co²⁺ a Tb⁴⁺ a jako nábojově kompenzující ionty byly do reakční směsi přidávány ionty P⁵⁺.

Pigmenty typu Sn_{0,752}Co_{0,08}P_{0,16}Tb_{0,008}O₂ byly připraveny klasickým keramickým způsobem. Za účelem podpory reakce v tuhé fázi a snížení kalcinační teploty bylo při přípravě pigmentů využito vybraných mineralizátorů (Na₂B₄O₇, MgCl-MgO, LiF, Li₂CO₃, CaCl₂) v množství 5 hm.%. Reakční směsi byly kalcinovány v elektrické peci při teplotách 1200–1500 °C po dobu 3 hodin.

V rámci této práce byl zkoumán vliv jednotlivých mineralizátorů a teploty syntézy na pigmentově-aplikační vlastnosti finálních sloučenin. Syntetizované pigmenty byly aplikovány do transparentní bezolovnaté keramické glazury s označením P 074 91 a byly hodnoceny z hlediska barevných

vlastností s využitím barevných souřadnic L^* , a^* , b^* a rovněž s využitím cylindrických souřadnic pro určení jejich sytosti S a barevného tónu H° . Získané produkty byly také hodnoceny z hlediska distribuce velikosti částic⁴.

Tato práce vznikla za podpory IGA Univerzity Pardubice SGS_2016_014.

LITERATURA

1. Buxbaum G., Pfaff G., v knize: *Industrial Inorganic Pigments*, Wiley-VCH, Weinheim 2005.
2. Eppler E. D., Eppler R. A.: *Ceram. Eng. Sci. Proc.* 18, 139 (1997).
3. Batzill M., Diebold U.: *Prog. Surf. Sci.* 79, 47 (2005).
4. Šulcová P., Dohnalová Ž., v knize: *Anorganické pigmenty, vlastnosti a metody hodnocení*, Univerzita Pardubice, Pardubice 2015.

2P-10

ŠTRUKTÚRNE MODIFIKÁCIE SALICYLÁTOMEĎNATÝCH KOMPLEXOV S N-METYLNIKOTÍNAMIDOM

**MIROSLAVA PUCHOŇOVÁ, JÁN MONCOL,
VLADIMÍR JORÍK, DUŠAN VALIGURA**

*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Oddelenie anorganickej chémie UACHaM, STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko
miroslava.puchonova@stuba.sk*

Analýza vzájomných súvislostí medzi štruktúrou, zložením a syntézou je nevyhnutná pre poznanie a skúmanie ďalších vlastností komplexov, medzi ktoré patrí aj ich potenciálna biologická aktivita. Z tohto aspektu je zaujímavý spôsob koordinácie ligandov, vzájomné interakcie v štruktúre ako aj vznik modifikácií jednotlivých zlúčenín vzhľadom na zmenu podmienok prípravy. Vychádzajúc z predchádzajúceho poznania zamerali sme sa na salicylátomeďnaté komplexy s N-metylnikotínamidom (menia).

Tvorba meďnatých komplexov s metylsalicylátovým aniónom (Mesal) v prítomnosti menia viedla k vzniku komplexných zlúčenín s molekulami rozpúšťadla umiestnenými mimo primárnej koordinačnej sféry zloženia $[\text{Cu}(4\text{-Mesal})_2(\text{menia})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{EtOH}$ (**I**) a $[\text{Cu}(5\text{-Mesal})_2(\text{menia})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{MeOH}$ (**II**). Molekuly komplexov sú prostredníctvom molekúl rozpúšťadla spojené cez systém vodíkových väzieb do 1-D supramolekulových reťazcov¹.

Komplex $[\text{Cu}(5\text{-Mesal})_2(\text{menia})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{EtOH}$ (**III**) s 5-metylsalicylátovým aniónom sa získal obmenou podmienok syntézy a na základe nepriamych metód (podobnosť IR spektier v oblasti systému vodíkových väzieb) sa predpokladá podobný motív štruktúry ako v prípade 4-metylsalicylátového aniónu. Predbežné štruktúrne parametre komplexu $[\text{Cu}(5\text{-Mesal})_2(\text{menia})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (**IV**) poukazujú na istú štruktúrnu podobnosť s komplexom (**II**) – miesto molekúl metanolu zabezpečujú supramolekulový systém vodíkových väzieb molekuly vody $[\text{Cu}(5\text{-Mesal})_2(\text{menia})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (**IV**). Odlišnosť je v tom, že systém vodíkových väzieb vedie k 3D supramolekulovej sieti miesto 1D reťazcov².

Všetky látky boli charakterizované elementárnou analý-

zou, IR spektrami, elektrónovými a EPR spektrami.

Tato práce vznikla za podpory grantu VEGA 1/0388/14 a STU Grantovej schémy na podporu Mladých výskumníkov a Excelentných tímov.

LITERATÚRA

1. Puchonová M., Repická Z., Moncol J., Ružičková Z., Mazúr M., Valigura D.: *J. Mol. Str.* 1092, 1 (2015).
2. Moncol J., Múdra M., Lönnecke P., Hewitt M., Valko M., Morris H., Švorec J., Melnik M., Mazur M., Koman M.: *Inorg. Chim. Acta* 360, 3213 (2007).

2P-11

MAGNETOSTRUCTURAL CORRELATIONS IN SCHIFF-BASE COPPER(II) COMPLEXES DERIVED FROM AMINOACIDS

**ZITA PUTEROVÁ-TOKÁROVÁ^a, JOZEF KOŽÍŠEK^b,
ROMAN BOČA^a**

^a *Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences UCM, Nám. J. Herdu 2, 917 01 Trnava,* ^b *Department of Physical Chemistry, FChPT, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia*

Magnetic properties of six copper(II) complexes of the formula $[\text{CuL}_3(\text{H}_2\text{O})_2]$ or $[\text{CuL}_4(\text{H}_2\text{O})]$ were investigated. These contain a Schiff-base L derived from salicylaldehyde and aminoacids. The ligand L is represented by four bonding isomers (**1** through **4**) and it is either tridentate (L_3) or tetradentate (L_4). The fifth ligand contains sulfonato group instead of the carboxyl one.

Structurally, two complexes are monomers (**1** and **4**), one is a dimer (**5**), and two are polymers (**2** and **3**). Single X-ray structure for complex **2** containing γ -aminobutyric acid (GABA) confirmed the coordination via unusual 7-membered ring (Fig. 1). The magnetic behavior of **1-5** is more complex: **1** behaves as an antiferromagnetic Heisenberg diad, **2** and **4** are ferromagnetic chains (Fig. 2), **3** is a combined ferromagnetic/antiferromagnetic ladder (ribbon), and **5** exhibits a complex 3D-ordering with unusual temperature evolution of the effective magnetic moment.

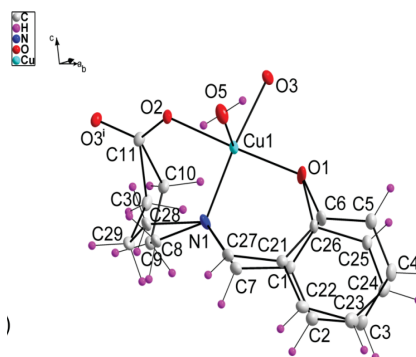


Fig. 1. X-ray structure of compound **2** containing GABA

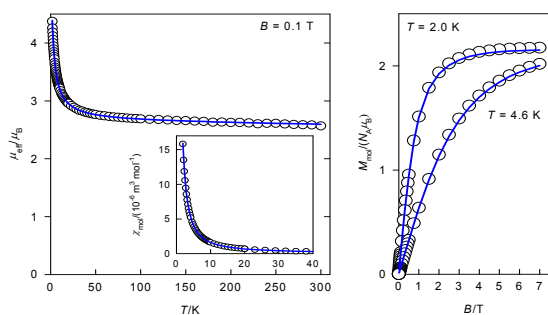


Fig. 2. **Magnetic functions of 2 containing GABA**, left – temperature dependence, right – field dependence

If the tetradentate Schiff base ligand *N*-2-hydroxy-3-methoxybenzaldehyde- α -amino-*iso*-butyrate complexed with copper(II) the tetranuclear complex $[\text{Cu}_4(3\text{-MeOSAIB})_4]\text{H}_2\text{O}$ (**6**) with cubane structure is formed (Fig. 3). According to the number of Cu...Cu contacts and bridging angles Cu–O–Cu, classified as 4+2 (type II) cubane. The open angle Cu1–O1–Cu2 ($\alpha = 114^\circ$) facilitates a strong antiferromagnetic coupling that is in competition with ferromagnetic interactions through the path Cu1–O2–Cu2 ($\alpha^* = 88^\circ$); the resulting coupling constant is $J_4/hc = 80.5 \text{ cm}^{-1}$ (4x) (Fig. 4).

Slovak grant agency VEGA 1/0534/16 is acknowledged for financial support.

REFERENCES

1. Puterová Z., Valentová J., Bojková Z., Kožíšek J., Devínsky F.: Dalton Trans. 40, 1484 (2011).
2. Puterová-Tokárová Z., Mrázová V., Kožíšek J., Valentová J., Vranovičová B., Boča R.: Polyhedron 70, 52 (2014).
3. Puterová-Tokárová Z., Mrázová V., Boča, R.: Polyhedron 61, 87 (2013).

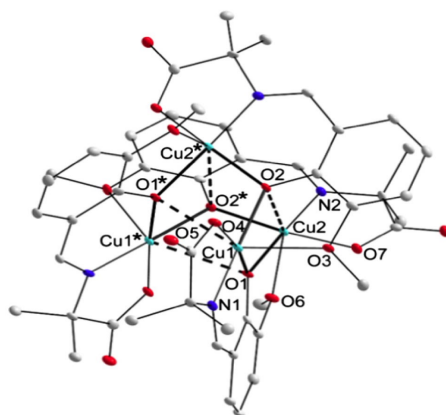


Fig. 3. X-ray structure of compound **6** expressing 6+2 cubane motif

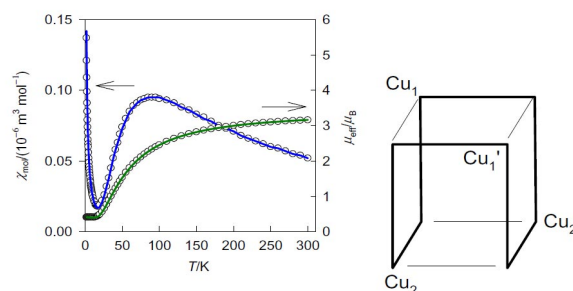


Fig. 4. **Magnetic functions of 2** – left (temperature dependence – blue, field dependence – green), simplified structural motif – right

2P-12

KRYŠTÁLOVÁ ŠTRUKTÚRA A MAGNETICKE VLASTNOSTI 3D ZLÚČENINY OBSAHUJÚCA KYANIDOVÉ Cu(II)–CN–Cr(III) MOSTÍKY

MARTIN VAVRA^a, MICHAL HEGEDŮS^a, KATARÍNA RÁČZOVÁ^b, ERIK ČÍŽMÁR^b

^a Ústav chemických vied PF UPJŠ, Moyzesova 11, 041 54 Košice, ^b Ústav fyzikálnych vied PF UPJŠ v Košiciach, Park Angelinum 9, 041 54 Košice, Slovensko
martin.vavra@upjs.sk

Oktaedrický komplexný anión $[\text{Cr}(\text{CN})_6]^{3-}$ má veľmi dobré predpoklady na to, aby vytváral zlúčeniny s najvyššou rozmernosťou, analogicky k štruktúre známej Berlínskej modrej, pretože obsahuje vo všetkých vrcholoch atómy dusíka s voľnými elektrónovými pármami.

Zo sústavy Cu(II)-*bapa*-Cr(III) sa nám podarilo izolovať a štruktúrne charakterizovať zlúčeninu s netypickou 3D štruktúrou zloženia $\{[\text{Cu}(\text{bapa})]_3[\text{Cr}(\text{CN})_6]_2\}_n \cdot 6n\text{H}_2\text{O}$ (**1**).

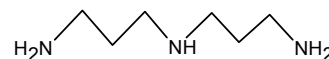
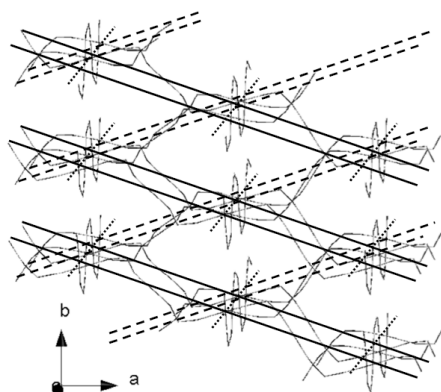


Schéma 1. *N*-donorový tridentátne ligand *bapa*

Základ tejto zaujímavej štruktúry tvoria reťazce, v ktorých sa pravidelne striedajú komplexné častice $[\text{Cu}(\text{bapa})]$ a $[\text{Cr}(\text{CN})_6]$. Susedné dva reťazce však nie sú navzájom rovnobežné, ale zvierajú medzi sebou uhol 38° , čím sa štruktúra širi do dvoch smerov (plná a čiarkovaná čiara na obr. 1). Navyše, tieto reťazce sú navzájom prepojené ďalšími časticami $[\text{Cu}(\text{bapa})]$, ktoré vytvárajú reťazce orientované kolmo na skôr spomínaný súbor reťazcov (bodkovaná čiara na obr. 1). Týmto prepojením získava štruktúra tejto látky najvyššiu 3D rozmernosť.

Vzájomná orientácia elektrónových orbitálov pravidelne sa striedajúcich centrálnych atómov s rozdielnou hodnotou spinu ($1/2$ pre Cu(II) resp. $3/2$ pre Cr(III)) vedie k prítomnosti feromagnetickú výmennej interakcii. Pri teplote 3 K dochádza k feromagnetickému usporiadaniu na dlhú vzdialenosť.

Tato práca vznikla s finančnou podporou grantu APVV-14-0078.



Obr. 1. Orientácia reťazcov v 3D štruktúre látky I

2P-13

POUŽITIE CHEMOMETRICKÝCH METÓD PRI ŠTÚDIU J-MAGNETOŠTRUKTÚRNYCH KORELÁCIÍ

BEATA VRANOVIČOVÁ, ROMAN BOČA

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

Pri skúmaní J-magnetoštruktúrnych korelácií v koordinačných zlúčeninách prechodných kovov sme použili chemometrické metódy¹. Spracovaním zozbieraných štruktúrnych a magnetických údajov o dvojjadrových komplexoch železa, ktoré obsahovali O-mostikujúce ligandy sme modernými štatistickými metódami v programe SigmaPlot 10.1 a použitím chemometrických metód v programe Statgraphics získali mnohopočetné korelačné vzťahy².

Použitím týchto metód sa potvrdila výrazná korelácia medzi dvojicou premenných – konštantou izotropnej výmennej interakcie J (magnetický údaj) a parametrom P (štruktúrny údaj). P [Å] je parameter definovaný ako najkratšia vzdialenosť medzi centrálnym atómom a mostíkovým atómom pozdĺž cesty supervýmennej interakcie Fe-O-Fe (cit.³).

Tato práce vznikla za podpory grantu VEGA 1/0534/16.

LITERATÚRA

1. Kahn O.: *Molecular Magnetism*. VCH, Weinheim, 1993.
2. Vranovičová B., Boča R.: *Nova Biotechnologica et Chimica Polyhedron* 12, 2 (2013).
3. Gorun S. M., Lippard S. J.: *Inorg. Chem.* 30, 1625 (1991).

2P-14

OBJEMOVÉ VLASTNOSTI ROZTAVENÝCH FLUORIDOVÝCH SYSTÉMOV MF–K₂TaF₇ (MF = LiF, NaF, KF)

JARMILA MLYNÁRIKOVÁ, MIROSLAV BOČA, EVA HADZIMOVA

Ústav anorganickej chémie SAV, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovensko
 jarmila.mlynarikova@savba.sk

V príspevku je diskutovaný vplyv prídavku katiónu alkalického kovu na hustotu a objemové vlastnosti študovaných systémov MF–K₂TaF₇ (MF = LiF, NaF a KF). Na základe výpočtu molárneho objemu, dodatkového molárneho objemu, parciálneho molárneho objemu a dodatkového parciálneho molárneho objemu K₂TaF₇ a MF v nekonečne zriedenom roztoku sa zistila objemová kontrakcia, ktorá vzniká na základe dvoch príspevkov; a to objemovej kontrakcie vyvolanej reakciou [TaF₇]²⁻ a F⁻ aniónov a z príspevku katiónovej objemovej kontrakcie spôsobenej prídavkom katiónu.

Meraním objemových vlastností tavenín sa dá do určitej miery študovať otázka „štruktúry“ tavenín. Za experimentálnych podmienok pri zmene teploty a zloženia môže vplyvom rôznych faktorov dochádzať k štruktúrnym zmenám, ktoré sa následne prejavujú aj zmenou závislosti molárneho objemu, parciálneho molárneho objemu a dodatkového molárneho objemu od zloženia. Rozborom týchto zmien možno dospieť k predpokladom o vnútornom usporiadaní taveniny a existencii niektorých druhov iónov^{1,2}.

Táto práca bola podporená grantovou agentúrou Vega 2/0114/16.

LITERATÚRA

1. Mlynáriková J., Boča M., Gurišová V., Macková I., Netriová Z.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 124, 973 (2016).
2. Mlynáriková J., Boca M., Kipsova L.: *J. Mol. Liq.* 140, 101 (2008).

2P-15

FORMATION OF NEW RUBIDIUM OXOFLUOROALUMINATE IN RbF–Al₂O₃ SYSTEMFRANTIŠEK ŠIMKO^a, AYDAR RAKHMATULLIN^b, MARTIN KONTRÍK^a, PIERRE FLORIAN^b, ZUZANA NETRIOVÁ^a, CATHERINE BESSADA^b

^a Institute of Inorganic Chemistry, SAS, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovakia, ^b CEMHTI UPR3079 CNRS, Univ. Orléans, F-45071 Orléans, France
 uachivaz@savba.sk

In the last quarter of the 20th century, one important area of solid state ionics is the search of new solid ionic conductors. This has led to the synthesis of a number of solid electrolytes with high conductivity due to various ions, in particular to monovalent alkali-metal cations¹. Solid electrolytes based on potassium aluminate (KAlO₂), with conduction

by potassium ions, are among most promising. Their high ionic conductivity ($\sim 0.002 \text{ S cm}^{-1}$ at $150 \text{ }^\circ\text{C}$), high mp (above $1300 \text{ }^\circ\text{C}$), and simple technology make them applicable in various electrochemical devices operating in a wide temperature range². Much less attention has been focused to new materials with high conductivity due to the larger alkali-metal cation, like rubidium and cesium. Thereof, the scientific objectives of the present work are focused on the synthesis and chemistry of the new rubidium-oxofluoroaluminate compound with high conductivity properties and on the description of the ionic structure of RbF-Al₂O₃ native fluoride system.

The binary system RbF-Al₂O₃ was defined as a stable diagonal section of the ternary reciprocal system RbF-AlF₃-Al₂O₃-Rb₂O. The part of phase diagram with Al₂O₃ content to 35 mol.% was determined by means of thermal analysis method and the individual phase fields were identified by X-ray diffraction and Magic Angle Spinning NMR spectroscopy. The combination of these methods provides a more precise identification of the different phases formed on cooling. The pure reference compounds α -Rb₃AlF₆, RbAlO₂, Rb₂Al₂₂O₃₄, and RbAlF₄ were prepared and characterized by X-ray powder diffraction and various solid state NMR techniques including MQMAS, REDOR and D-HMQC. The formation of a new phase Rb₂Al₂O₃F₂ was observed.

This work was supported by the Bilateral project N° SK-FR-2013-0039 (PHC STEFANIK project N° 31799NM) and Slovak Grant Agency (VEGA-2/0116/14).

REFERENCES

1. Shekhtman G. Sh., Volegova E. I., Burmakin E. I., Antonov B. D.: *Inorg. Mater.* **46**(5), 534 (2010).
2. Burmakin E. I., Voronin V. I., Akhtyamova L. Z., Berger I. F., Shekhtman G. S.: *Russ. J. Electrochem.* **40**, 619 (2004).

3L-01

ČESKÁ SPOLEČNOST CHEMICKÁ – 150 LET

PAVEL ZACHAŘ

*Ústav analytické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika
Pavel.Zachar@vscht.cz*

Již v 17. a 18. století se tvořily v Evropě odborné vědecké společnosti. Jednak vznikaly vědecké instituce zahrnující široké spektrum vědních oborů, od humanitních přes přírodovědné až po technické, tedy instituce typu akademie věd, jednak se vytvářely společnosti s vyhraněnějším odborným zaměřením typu profesních spolků.

Mezi první vědecké společnosti širokého záběru patří „Academie Françoise“ (1635), „Royal Society of London“ (1660) a „Academie Royale des Sciences, Paris“ (1666).

Na našem území vznikla společnost tohoto typu až o sto let později. Tato společnost, a společnosti následující měnily v průběhu času název i strukturu: „Böhmische gelehrte Privat-gessellschaft“ (1775), „Böhmische Gessellschaft der Wissenschaften – Česká společnost nauk“ (1784), „Königlich-Böhmische Gessellschaft der Wissenschaften – Královská česká společnost nauk“ (1790). Uvedená společnost pod stejným názvem existovala i po vzniku Československa, v době Protektorátu i v prvních poválečných letech. Teprve v letech 1952 – 1953 docházelo podle sovětského vzoru k vytvoření jediné instituce, „Československé akademie věd“, spojením Královské české společnosti nauk a „České akademie věd a umění“, původně „České akademie císaře Františka Josefa pro vědy, slovesnost a umění“ (1888/1890), jejíž vznik financoval mecenáš, architekt Josef Hlávka. Československá akademie věd existovala do roku 1993, kdy po rozdělení Československa vznikly samostatné instituce „Akademie věd České republiky“ a „Slovenská akademie věd“. Prestižní postavení členů zaniklých společností „Královská česká společnost nauk“ a „Česká akademie věd a umění“ nahradila do jisté míry v roce 1994 nově vytvořená „Učená společnost České republiky“.

Mezi profesně nejstarší evropské spolky se zaměřením na přírodní vědy patřily spolky lékařů a lékárníků, kteří se často zabývali chemií, biologií a dalšími přírodními vědami. Tyto spolky neměly často dlouhého trvání. Mezi přírodovědné společnosti s delším trváním lze zařadit např. „Collegium Naturae Curiosorum“ Schweinfurt, později Halle (1652), která se postupně transformovala na společnosti „Academia Imperialis Leopoldina Naturae Curiosorum“ a „Deutsche Akademie der Naturforscher Leopoldina“.

K nejstarším specializovaným chemickým společnostem s nepřerušovanou tradicí patří „Chemical Society of London“ (1811) – od roku 1980 jako „Royal Society of London“, dále „Société Chimique de France“ (1857) a „Deutsche Chemische Gessellschaft zu Berlin“ (1867) – od roku 1949 jako „Gessellschaft Deutscher Chemiker“.

Nejstarším přírodovědným spolkem na našem území byl německý studentský spolek „Lotos“ (1848), plným názvem: „Deutscher Naturwissenschaftlich-Medizinischer Verein für Böhmen – Lotos“. Jeho zakladatelem byl přírodovědec Friedrich Anton Kolenati (Kolenatý). Původně studentský spolek se brzy přeměnil na spolek sdružující české i německé vědce.

Ve spolku však vzrůstal německý vliv (zejména po vzniku českého spolku Isis) a od roku 1895 byl Lotos spolkem výhradně německým. Členy tohoto spolku byli např. moravský rodák, německý fyzik Ernst Mach, pražský rodák, německý chemik Fridrich Reinitzer a český matematik, fyzik a kartograf Karel Kořistka – první rektor pražského polytechnického ústavu, tj. pozdějšího ČVUT (rektoři 1864–5 Karel Kořistka, 1865–6 chemik Karel Napoleon Balling, 1866–7 Karel Kořistka). Spolek Lotos existoval až do roku 1950.

V roce 1866 vznikl český přírodovědný studentský spolek „Isis“, který čítal 63 zakládajících členů, především studentů pražské polytechniky, zejména chemiků.

„Spolek chemiků českých“ vznikl r. 1872. Mezi významné zakládající členy spolku patřili: Vojtěch Šafařík a František Štolba, profesori Českého polytechnického ústavu Království českého (ČVUT), Karel Preis, v té době docent (později profesor) Českého polytechnického ústavu Království českého a Vilém Baur, středoškolský profesor na české reálce v Praze. Spolek chemiků českých svou činností bezprostředně navázal na činnost studentského přírodovědného spolku Isis, a proto Česká společnost chemická jako pokračovatel obou těchto institucí klade svůj vznik do roku 1866, a je tedy jednou z nejstarších chemických společností ve světě.

Spolek chemiků českých postupně transformoval na „Českou společnost chemickou pro vědu a průmysl“ (1907) sloučením Spolku chemiků českých a Společnosti pro průmysl chemický v Království českém, „Československou společnost chemickou“ (1920), „Československou společnost chemickou při ČSAV“ (1952) a „Českou společnost chemickou“ (1993), která je dnes členem Asociace českých chemických společností (1998).

LITERATURA

- Hanč O.: 100 let Československé společnosti chemické, její dějiny a vývoj 1866 – 1966, Academia Praha 1966
- Hanč O.: Československá společnost chemická, Slovenská chemická spoločnosť 1966 – 1975, Academia Praha 1976
- Bláha K., Tomko J.: Československá společnost chemická při ČSAV, Slovenská chemická spoločnosť při SAV 1976 – 1985, Academia Praha 1987
- Webové stránky (cit. 14.6.2016):
https://fr.wikipedia.org/wiki/Acad%C3%A9mie_fran%C3%A7aise
https://en.wikipedia.org/wiki/Royal_Society
[https://de.wikipedia.org/wiki/Gelehrte_Gesellschaft_\(Prag\)](https://de.wikipedia.org/wiki/Gelehrte_Gesellschaft_(Prag))
https://cs.wikipedia.org/wiki/%C4%8Cesk%C3%A1_akademie_v%C4%9Bd_a_um%C4%9Bn%C3%AD
<http://www.scholarly-societies.org/history/1652cnc.html>
https://en.wikipedia.org/wiki/Chemical_Society
https://fr.wikipedia.org/wiki/Soci%C3%A9t%C3%A9_chimique_de_France
https://de.wikipedia.org/wiki/Deutsche_Chemische_Gesellschaft
[https://cs.wikipedia.org/wiki/Lotos_\(spolek\)](https://cs.wikipedia.org/wiki/Lotos_(spolek))
<http://www.csch.cz/>

3L-02

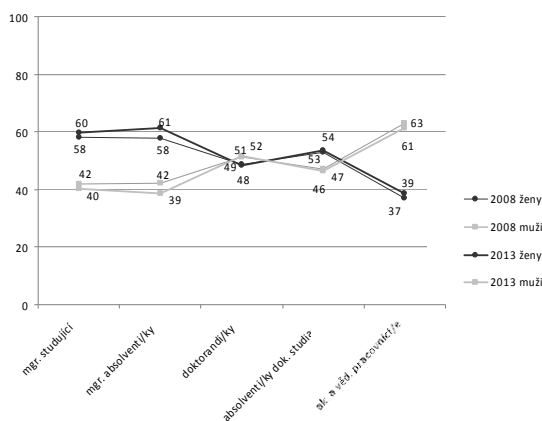
STUDIUM A DALŠÍ PŮSOBNÍ ŽEN NA VYSOKÉ ŠKOLE CHEMICKO-TECHNOLOGICKÉ V PRAZE, PROMĚNY V PRŮBĚHU POSLEDNÍCH 100 LET

**ANNA MITTNEROVÁ, KATEŘINA GRECOVÁ,
KAMILA ZDEŇKOVÁ, PAVLA ŠMEJKALOVÁ,
VERONIKA POPOVÁ**

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

Dnešní studentky VŠCHT Praha si jen těžko dovedou představit, že ještě před 100 lety nebylo ženám umožněno studovat na vysokých školách technických. Začátkem dvacátého století však sílilo emancipační hnutí a připuštění žen k řádnému studiu podporoval i rektor České vysoké školy technické, profesor Julius Stoklasa. Tehdejší snahy vystihuje článek v Národní politice z roku 1912 (cit.¹). Se vznikem samostatného Československa se situace změnila, v rámci Českého vysokého učení technického byla ustavena jako jedna ze sedmi vysokých škol Vysoká škola chemicko-technologického inženýrství (VŠCHTI), na které již ve školním roce 1920/21 studovalo 48 žen, což bylo 5 % ze všech posluchačů².

Jednou z prvních studentek byla Julie Hamáčková³, která byla již v roce 1918 zapsána jako mimořádná posluchačka na chemickém odboru ČVUT. Po absolvování studia a zahraniční stáže se stala vedoucí nově založené provozní laboratoře v čistírně odpadních vod v Praze Bubenči. Po válce se vrátila opět na školu. V roce 1954 byla jako první žena na vysokých školách technických jmenována profesorem chemie vody, v roce 1955 jí byla udělena vědecká hodnost doktora chemických věd a vyznamenání za vynikající práci. V letech 1955–56 vykonávala funkci proděkana a v letech 1957–59 děkana Fakulty technologie paliv a vody. Profesorka Julie Hamáčková je považována za zakladatelku české hydrochemie.



Obr. 1. Zastoupení mužů a žen od studentů k akademickým pozicím na VŠCHT Praha v letech 2008 a 2013; Legenda k obrázku osa x: Studenti/ky magisterských studijních programů, Absolventi/ky magisterských studijních programů, Studenti/ky doktorských studijních programů, Absolventi/ky doktorských studijních programů, Akademici a vědečtí pracovníci/pracovnice

V meziválečném období se procentuální zastoupení žen mezi posluchači a aspiranty nepřehouplo přes 10 %. Situace se začala rapidně měnit až v padesátých letech, kdy ve školním roce 1955/56 vzrostl počet posluchaček na 30 % a na této hodnotě setrval i během dalších let socialistické éry.

Po revoluci v roce 1989 začal počet studentek na VŠCHT Praha opět stoupat. V roce 2014 bylo provedeno v rámci projektu TRIGGER⁴, financovaného Evropskou komisí ze 7. Rámcového programu, statistické šetření⁵, ve kterém byly zjišťovány počty žen a mužů a jejich zastoupení na různých pozicích, výsledky šetření jsou uvedeny na obr. 1.

Po 100 letech nastupuje na magisterské studium na VŠCHT Praha 60 % studentek, naši společnosti se nicméně nepodařilo zajistit, aby i na vysokých akademických pozicích docentů a profesorů bylo procentuální zastoupení žen vyšší, než jak naznačují výsledky statistického zjištění. Co brání ženám a jaká opatření jim mohou pomoci, aby pokračovaly ve své akademické a vědecké dráze i po získání doktorského titulu, se řeší i na dalších čtyřech evropských univerzitách, které jsou partnery projektu TRIGGER. VŠCHT Praha ve spolupráci s Národním kontaktním centrem – gender a věda Sociologického ústavu AV ČR řeší tuto tematiku i v komplementárním projektu PEDICEV⁶, podpořeném z programu EUPRO II MŠMT. Cílem projektu je podpořit na jednotlivých univerzitách rozvoj institucionálních procesů, které napomohou k dosahování genderové vyváženosti ve složení výzkumných a pedagogických týmů, a k zajišťování rovných a spravedlivých podmínek pro uplatnění žen a mužů na všech stupních kariérních pozic. Novým prvkem je i posuzování témat vědeckého výzkumu a následného inovačního procesu z genderového hlediska.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR EUPRO II LE14016 a projektu 7.RP EU TRIGGER GA No. 611034.

LITERATURA

1. Stoklasa J.: *Studium žen na české vysoké škole technické v Praze*, Národní politika ISSN: 1805-2444, Ročník: 1912 Výtisk: 4. 2. 1912 Stránka 1.
2. Schätz M.: *Historie výuky chemie, osobnosti a události*, ISBN 80 7080-442-4(2002).
3. Osobní sdělení pamětníků prof. Jany Zábranské a prof. Michala Dohányose z Ústavu technologie vody a prostředí, FTOP, VŠCHT Praha.
4. Projekt 7.RP EU TRIGGER, „Transforming Institutions by Gendering Content and Gaining Equality in Research“ <http://triggerproject.eu/>
5. Vohlídalová M.: *Postavení mužů a žen na VŠCHT Praha, Zpráva z analýzy agregovaných statistik*, Sociologický ústav, AV ČR, v.v.i., 2014.
6. Projekt PEDICEV, EUPRO II LE14016, MŠMT ČR, <http://gro.vscht.cz/>

3L-03

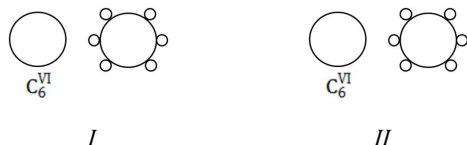
POKUSY O ZNÁZORNĚNÍ STRUKTURY BENZENU V 19. STOLETÍ

MIROSLAV NOVÁK

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Katedra učitelství a humanitních věd, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika

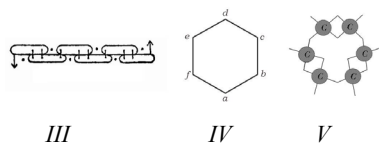
Miroslav.Novak@vscht.cz

Benzen od doby, kdy jej izoloval a popsal Faraday¹, představoval pro chemiky tehdejší doby velkou hádanku. Bylo zřejmé, že jde o silně nenasycenou sloučeninu (C₆H₆ např. oproti *n*-hexanu C₆H₁₄), přitom ale stálou a vstupující do substitučních reakcí, namísto očekávaných reakcí adičních. Částečné rozluštění této hádanky přišlo teprve v polovině devatenáctého století. První vzorce benzenového jádra, benzenu a řady aromatických sloučenin navrhl v roce 1861 Josef Loschmidt². Loschmidt benzenové jádro považoval za šestivaznou cyklickou částici C_6^{VI} (obr. 1: I – benzenové jádro, II – benzen) a problematické dvojné vazby úmyslně nelokalizoval.



Obr. 1.

Tradičně – a neprávem – je ale objev struktury benzenu a od něj odvozených aromatických sloučenin připisován Kekulému. Ten v rozmezí let 1865 – 1867 uveřejnil tři návrhy strukturního uspořádání molekuly benzenu, uvedené na obr. 2, v nichž rovněž předpokládal cyklický uhlíkový řetězec.

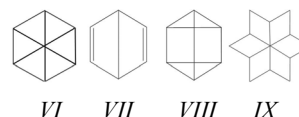


Obr. 2.

Z dnešního hlediska jsou tyto vzorce chybné. Vzorec III z „klobásových“ schémat atomů uhlíku nijak nenaznačuje uzavření cyklu, jsou v něm dvojné vazby, což neodpovídá chemickému chování, a není z něj jasně patrné jak – a zda – jsou mezi sebou spojeny sousední atomy³. Šestiúhelníkový vzorec IV vychází ze zřejmého nepochopení čáry ve významu chemické vazby: šestiúhelník je pouze jakousi obálkou z vodíkových atomů^{4,5}. Vzorec V bez zakreslených atomů vodíku, ale s jasně vyznačenými dvojnými vazbami⁶, tedy kostra cyklohexa-1,3,5-trienu, neodpovídá chemickému chování benzenu (dnes používaný „Kekulého“ vzorec benzenu představuje uzanci, kde zakreslené dvojné vazby nerepresentují nenasycený charakter, jde tedy *de facto* o jiný vzorec).

Kekulého vzorce nebyly tehdejšími chemiky jednoznačně přijaty, především vzorec V, neboť reaktivita benzenu neodpovídá přítomnosti dvojných vazeb a ve vzorci se střídavými dvojnými vazbami nejsou jednotlivé uhlíkové atomy rov-

nocenné (např. by musely existovat dva různé orthoderiváty). Proto se řada chemiků snažila navrhnout vhodnější vzorce. Na obr. 3 je uvedeno několik příkladů (VI – Clausův centrický vzorec⁷, VII – „Dewarův“ benzen⁸, VIII – „Ladenburgův“ benzen⁹, prisman (plošný průmět), IX – Körnerův hvězdicový vzorec¹⁰), vzorce ovšem nepředstavují benzen.



Obr. 3.

Kekulé nakonec tyto diskrepance vyřešil svým oscilačním vzorcem¹¹, který v té době byl ovšem pouhou nepodloženou spekulací.

LITERATURA

1. Faraday M.: Phil. Trans. Roy. Soc. London 115, 440 (1825).
2. Loschmidt J., v knize: *Chemische Studien. A. Constitutions-Formeln der organischen Chemie in graphischer Darstellung*. Wien, C. Gerold Sohn 1861.
3. Kekulé A.: Bull. Soc. chim. Paris, 3, 98 (1865).
4. Kekulé A.: Bull. Acad. roy. sci. Belg. 19, 551 (1865).
5. Kekulé A.: Ann. Chem. Pharm. 137, 129 (1866).
6. Kekulé A., v knize: *Chemie der Benzolderivate oder der aromatischen Substanzen*. Erlangen: F. Enke, 1867.
7. Claus A. K. L., v knize: *Theoretische Betrachtungen und deren Anwendungen zur Systematik der organischen Chemie*. Freiburg, Pappan 1866.
8. Dewar J.: Proc. Roy. Soc. Edinb. 6, 82 (1867).
9. Ladenburg A.: Ber. Dtsch. Chem. Ges. 2, 140 (1869).
10. Körner W.: Giorn. Sci. Nat. Econ. Palermo 5, 208 (1869).
11. Kekulé A.: Ann. Chem. Pharm. 162, 77 (1872).

3L-04

JAK A CO UČIT V CHEMII

PETR KOLOROS

Větrovy 78, 390 02 Tábor, Česká republika
P.Koloros@seznam.cz

Na otázku jak učít chemii se dá odpovědět, že s využitím badatelsky orientovaného vyučování (dále BOV), které má též mezinárodní označení IBSE (inquiry based science education). Tato metoda, která je založena na pedagogickém konstruktivismu, se objevuje již počátkem 60. let minulého století. Učitel zde nepředkládá učivo jen výkladem, ale vytváří znalosti cestou řešením problému a systémem kladených otázek¹. Způsob komunikace při sledování experimentu tedy jakýsi koučovací² postup vychází z otázek: Co jsi viděl? Co si o tom myslíš? Proč nastalo to, co pozoruješ, co ještě potřebujeme vědět? Mohli bychom pokus uspořádat jinak? Co navrhujete? Jak bychom mohli naše pozorování zdokumentovat? Je však na učiteli, aby měl promyšlený celý postup, aby věděl, co už žáci o věci vědí, co se ještě potřebují dozvědět, kdy jsou jejich znalosti a porozumění základním souvislostem dostateč-

né pro to, aby se pustili do badatelských činností. Velkou a okamžitou příležitostí jsou laboratorní práce žáků. Z původního zadání, kde byl v protokolu jen: Název, Úkol, Pomůcky a chemikálie, Postup, Zhodnocení a závěr, jak se to celou dobu dělalo je zde nové pojetí s využitím pracovních listů. Je to: Úvod do tématu (motivace), což může být demonstrační pokus nebo historická exkurze, Předlaboratorní příprava, Praktická (badatelská) činnost, Vyhodnocení výsledků, Prezentace výsledků a Laboratorní protokol. Posledně jmenovanému by měla být věnována vyučovací hodina, kde by se probraly nejčastější chyby. V rozvrhu by měla být sladěná teoretická výuka a laboratoře tak aby na sebe navazovaly a ne jak je obvyklé, že polovina třídy má praktika až za 14 dní, kdy už je na pořadu jiné téma.

Velkým problémem je zapojení žáků to je motivace k činnosti, protože žáci zpočátku nejsou na tento přístup vinou klasické výuky zvyklí. Abychom alespoň zpočátku tento hendikep překonali, měly by se problematikou na celoškolské úrovni zabývat pedagogické rady. Badatelsky orientovaná výuka je totiž modelem vzdělání, filosofií učení (se) a je tedy všeobecná (nejen přírodovědná ale i humanitní). Samozřejmě je třeba upravit tématické plány a školní vzdělávací program, nastavit kritéria pro klasifikaci a stanovit rozsah maturit. Jaksi mimochodem je zde odpověď na otázku co učit. Jsou to jen nosná témata jako např. Roztoky, acidobazický a redoxní děj a navazující praktické titrace, kovy, základní uhlovodíky apod. Odpadají zde diskuse o tom, jestli se má učit dříve chemie obecná nebo anorganická anebo jak dostat do středoškolské výuky chemii jako obor. Je zde také nebezpečí, že pokud BOV nebude realizována profesionálně, stane z ní jako v případě projektové výuky didaktický kých.

LITERATURA

1. Tomek K.: Soukromé sdělení, Třebíč 2015.
2. Beran M.: Badatelsky orientovaný přístup ve výuce chemie. Závěrečná práce. UP Olomouc, PedF 2016.

3L-05

SMĚŘUJEME UČITELE K AKTIVNÍ VÝUCE

JANA PRÁŠILOVÁ

*Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, Česká republika
jana.prasilova@osu.cz*

S měnícím se pojetím výuky se pozměňuje i role učitele. Učitel by měl být podle nové koncepce především průvodce studiem a měl by umět žáky vést k aktivitě během vzdělávacího procesu. Z uvedených důvodů je třeba seznámit budoucí učitele, nejen přírodovědných předmětů, s aktivizačními a moderními metodami výuky a jejich aplikací v praxi. Na zavádění nových trendů a rozšiřování požadavků na učitele se snažil svým obsahem zaměřit seminář Vybrané problémy z didaktiky chemie 1. Předmět je zařazen mezi povinně volitelné předměty v rámci oborově didaktické složky navazujícího studia učitelství chemie na PFF Ostravské univerzity v Ostravě. V letním semestru 2016 byl seminář zaměřen na následující témata:

- modulární výuka,

- projektová výuka,
- badatelsky orientované vyučování (BOV, ISBE),
- počítačem podporované experimenty,
- převrácená třída (Khanova škola)¹,
- unchooling².

Semináře byly vedeny aktivní formou, k tématům byly připraveny kromě teorie i praktické úkoly. Nedílnou součástí byly i domácí práce studentů (téma projektová výuka, převrácená třída, vyhodnocení naměřeným dat).

Zadanou domácí přípravu hodnotili studenti v rámci akčního výzkumu jako „spíše náročnou“, přičemž za nejtěžší úkol považovali vytvoření krátkého výukového videa. Z hlediska budoucí praxe se studentům seminář jevil jako „rozhodně přínosný“ a všichni by jej doporučili svým spolužákům. Z akčního výzkumu rovněž vyplynulo, že by se rádi dozvěděli více o vzdělávacích larpových hrách³.

Tato práce vznikla za podpory příspěvku z Fondu vzdělávací politiky MŠMT ČR na rok 2016.

LITERATURA

1. Khanova škola. Dostupné z: <https://khanovaskola.cz/> (cit. 10. 5. 2016).
2. ScioŠkola. Dostupné z: <https://www.scio.cz/scioskoly/> (cit. 10. 5. 2016).
3. Prášilová J., Kundrát J., Doleček J.: *Edulapy a jejich využití nejen v přírodovědném vzdělávání*, Inovácie a trendy v prírodovednom vzdelávaní, Bratislava 2016.

3L-06

ORGANICKÉ MOLEKULY JAKO AKTÉŘI POPULARIZAČNÍCH AKCÍ UNIVERZITY PARDUBICE

PATRIK PAŘÍK

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

Univerzita Pardubice (UPa) a její dceřinná společnost Institut rozvoje evropských regionů, o. p. s. (IRER) v posledních několika letech systematicky a pravidelně uskutečňují velké množství akcí a aktivit, jejichž náplní je prezentace a popularizace vědeckých disciplín pěstovaných na UPa. Akce se uskutečňují na půdě univerzity, v různých hostitelských institucích, zejména školách, nebo i na veřejných prostranstvích tzv. pod širým nebem¹. Veřejnost přijde na univerzitu anebo univerzita vezme vědu tzv. na výlet.

Fakulta chemicko-technologická (FChT) jako nedílná součást UPa se na akcích zaměřuje zejména na napravení negativního nahlížení na chemii, které dnes u žactva i laické veřejnosti bohužel převažuje. Proto se FChT kromě výsledků svého výzkumu prezentuje i jednoduchými a jak věříme zábavnými experimenty. Ty jsou uskutečňovány buďto pouze jako ukázkové anebo, v lepším případě, jako „zážitkové“ s osobním zapojením návštěvníků jednotlivých akcí, zejména dětí. Druhá forma je samozřejmě více oceňována a žáci si odnášejí hlubší dojmy a někdy i suvenýry.

Vzhledem k toxicitě, hořlavosti a jiným negativním vlastnostem mnoha organických látek nebývají tyto látky a jejich reakce k prezentačním pokusům často využívány. Při vhodném výběru je však možno i organické molekuly angažovat jako aktéry chemického divadla. V příspěvku budou prezentovány experimenty, které zahrnují organické nebo přírodní látky. Budou mezi nimi demonstrování některých vlastností látek, sensorické testy, různé důkazové reakce (cukry, aminokyseliny, vitamíny), jednoduché syntézy (estery, haloformy) aj.

LITERATURA

1. Pařík P.: *ChemZi 11*, 96 (2015).

4L-01
FOTONOVÁ AKTIVAČNÍ ANALÝZA:
PRINCIPY A APLIKACE METODY VE SROVNÁNÍ
S NEUTRONOVOU AKTIVAČNÍ ANALÝZOU

JIRÍ MIZERA

Ústav jaderné fyziky AV ČR, v.v.i., Hlavní 130, 250 68 Řež,
 Česká republika
 mizera@ujf.cas.cz

Príspevek podává přehled základních principů a aplikací významné radioanalytické metody pro multielementární chemickou analýzu – fotonové aktivační analýzy (PAA). Zabývá se stručně teorií fotojaderných a fotoexcitačních reakcí, výběrem vhodných zdrojů vysokoenergetického fotonového záření použitelných pro PAA a přehledem prakticky stanovitelných prvků v různých typech materiálů, především s využitím v geo- a kosmochemickém výzkumu. Analytické možnosti PAA jsou porovnávány s možnostmi její sesterské metody – neutronové aktivační analýzy (NAA) – se zaměřením na oblasti, kde PAA možnosti NAA doplňuje či rozšiřuje^{1,3}. Zvláštní pozornost je věnována využití krátkodobých produktů fotojaderných reakcí, především pro metodu expresní základní geochemické charakterizace (tzv. silikátovou analýzu) a pro nedestruktivní stanovení vybraných prvků, např. fluoru a dusíku^{4,5}. Příspěvek dále prezentuje technické možnosti mikrotronu MT-25, radiofrekvenčního cyklického urychlovače elektronů používaného na pracovišti autora jako zdroje vysokoenergetického fotonového záření pro PAA⁶. Na závěr příspěvek podává stručný přehled současných výzkumných aplikací PAA na mikrotronu MT-25, především její využití při geochemické charakterizaci tektitů (např. vltavínů) a impaktivních skal⁷⁻⁹.

Task práce vznikla za podpory grantu GAČR 13-22351S.

LITERATURA

1. Řanda Z., Frána J., Mizera J., Kučera J., Novák J. K., Ulrych J., Belov A. G., Maslov, O. D.: *Geostand. Geoanal. Res.* 31, 275 (2007).
2. Řanda Z., Kučera J., Mizera J., Frána J.: *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 271, 589 (2007).
3. Mizera J., Řanda Z.: *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 284, 157 (2010).
4. Krausová I.: *Disertační práce*, FJFI ČVUT v Praze (2015).
5. Krausová I., Mizera J., Řanda Z., Chvátíl D., Krist P.: *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* 342, 82 (2015).
6. Krist P., Horák Z., Mizera J., Chvátíl D., Vognar M., Řanda Z.: *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 304, 183 (2015).
7. Mizera J., Řanda Z., Tomandl I.: *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 293, 359 (2012).
8. Mizera J., Řanda Z., Kameník J.: *Earth-Sci. Rev.* 154, 123 (2016).
9. Žák K., Skála R., Řanda Z., Mizera J., Heissig K., Ackerman L., Ďurišová J., Jonášová S., Kameník J., Magna T.: *Geochim. Cosmochim. Acta* 179, 287 (2016).

4L-02
STANOVENÍ VELMI NÍZKÝCH OBJEMOVÝCH
AKTIVIT TRITIA S VYUŽITÍM
ELEKTROLYTICKÉHO NABOHACENÍ VZORKŮ

DIANA MAREŠOVÁ^a, BARBORA SEDLÁŘOVÁ^a, EVA JURANOVÁ^{a,b}

^a Výzkumný ústav vodohospodářský T. G. Masaryka, veřejná výzkumná instituce, Podbabská 2582/30, 160 00 Praha 6,
^b Ústav pro životní prostředí, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Benátská 2, 128 01 Praha 2, Česká republika
 diana_maresova@vuv.cz

VÚV TGM, v.v.i., Referenční laboratoř složek životního prostředí a odpadů, oddělení radioekologie se dlouhodobě zabývá sledováním tritia ve vodách. Hlavní pozornost je věnována sledování doznívajícího vlivu atmosférických testů jaderných zbraní v minulém století a vlivu provozu našich jaderných elektráren¹. Je důležitá znalost pozadí tohoto radionuklidu. Laboratoř je vybavena nízkopozadovými kapalinovými scintilačními spektrometry Quantulus 1220 a TriCarb 3170TR/SL. Při používané geometrii měření: low diffusion PE 20 ml měřicí kvety s dávkovaným množstvím vzorku 8 ml a scintilátoru (Ultima GoldTM LLT) 12 ml a době měření vzorku a pozadí 800 min je dosahováno nejmenší detekovatelné aktivity c_{ND} cca 1,0 Bq/l. To neumožňuje přesné stanovení hodnot uváděných pro současné pozadí tritia ve vodách, tj. hodnot v oblasti 1 Bq/l a níže². Pro vybrané vzorky byla zařazena předúprava pomocí elektrolytického nabohacení tritia, která je prezentována dále.

Metoda elektrolytického nabohacení je založená na principu selektivního izotopického obohacení. Po průchodu zvoleného elektrického proudu je původní objem vzorku redukován (na cca 5 %) a v důsledku izotopické frakcionace zůstává v nabohaceném vzorku cca 90 % tritia. Elektrolytický rozklad čisté vody je velmi pomalý proces, proto je přidáván vhodný elektrolyt, tj. elektrolyt, který neobsahuje vodík (Na_2O_2). Laboratoř disponuje sestavou pro elektrolytické nabohacení tritia od AGH University of Science and Technology Krakow. Jedná se o chladičí zařízení pro 20 elektrolytických článků, napájení elektrického proudu a přesný ampérmetr. Zařízení umožňuje souběžnou úpravu 20 vzorků o objemu 500 ml. Při zvoleném prošlém elektrickém proudu (1400 Ah) je konečný objem vzorku 20 až 25 ml. V závislosti na době měření vzorku a pozadí je dosahovaná c_{ND} 0,05–0,1 Bq/l, což významně rozšiřuje možnosti využití toho stanovení např. v oblasti hydrologie a hydrogeologie.

LITERATURA

1. Hanslík E., Marešová D.: Tritium: Production, Uses and Environmental Impact. In: Tosti S. and Ghirelli N.: *Tritium in Fusion: Production, Uses and Environmental Impact*. Nova Science Publishers, Inc., 2013.
2. Ivanovová D., Hanslík E.: Temporal and spatial changes in tritium concentration in the Vltava River basin affected by the operation of Temelin Nuclear Power Plant. *A. Un. Car. Envir. 1–2*, 2009 (2010).

4L-03**SEKVENČNÉ STANOVENIE ⁹³Zr, ⁹⁴Nb, ¹²⁶Sn a ⁹⁹Tc V RÁDIOAKTÍVNYCH ODPADOCH****SILVIA DULANSKÁ, JÁN BILOHUŠČIN, BORIS REMENEC, ĽUBOMÍR MÁTEL**

*PriF UK Katedra jadrovej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava
dulanskas@gmail.com*

Bola vyvinutá a optimalizovaná nová metóda sekvenčného stanovenia rádionuklidov ⁹³Zr, ⁹⁴Nb, ⁹⁹Tc a ¹²⁶Sn s použitím extračno chromatografického sorbentu TEVA® Resin a anión výmenného sorbentu Anion Exchange Resin, dodávané firmou Eichrom Industries. Metóda sekvenčného stanovenia ⁹³Zr, ⁹⁴Nb, ¹²⁶Sn a ⁹⁹Tc bola aplikovaná na analýzu vzoriek rádioaktívneho kalu pochádzajúcich z JE Mochovce a JE Jaslovské Bohunice A1. Vzorky kalu boli digerované zmesou 3 cm³ 22,1 mol dm⁻³ HF a 15 cm³ 14,35 mol dm⁻³ HNO₃ na varnej platni pri teplote 120 °C. Pre stanovenie výťažkov boli pridané stopovacie rádionuklidy ⁹⁵Nb pre ⁹⁴Nb, ¹¹³Sn pre ¹²⁶Sn, ^{99m}Tc pre ⁹⁹Tc a 1 mg stabilného nosiča Zr⁴⁺ pre ⁹³Zr. Zirkónium a niób majú vysokú hodnotu retencie na kolóne obsahujúcej sorbent TEVA® Resin a Anion Exchange Resin v prostredí HF s koncentráciou 0,25 mol dm⁻³ až 2 mol dm⁻³ HF s rádiochemickými výťažkami vyššími ako 90 % rovnako ako Tc v technecistanovej forme v roztokoch HNO₃, HCl aj HF s nízkymi koncentraciami. HF s koncentráciou 0,5 mol dm⁻³ bola zvolená ako vhodné komplexujúce činidlo pre sorpciu vybraných rádionuklidov na sorbente separáciu TEVA® Resin, alebo Anion Exchange Resin týchto prvkov. Pred separáciou na kolóne TEVA® Resin, alebo Anion Exchange Resin bol použitý iónovymenný sorbent Cation Exchange Resin, forma H⁺, 100–200 mesh na odstránenie interferentov ^{110m}Ag, izotopov Co, Cs, ⁵⁴Mn, Fe a Ni. Izotopy Sn, Nb, Tc a Zr vo forme záporné nabitých fluoro komplexov nie sú na tomto sorbente zachytávané¹⁻³. Zirkónium bolo z TEVA® Resin a Anion exchanger Resin eluované² s 40 cm³ 11,3 mol dm⁻³ HCl + 100 µL 22 mol dm⁻³ HF, niób¹ s 40 cm³ 6 mol dm⁻³ HCl + 100 µL 22 mol dm⁻³ HF, ¹¹³Sn bol eluovaný³ s 20 cm³ 2 mol dm⁻³ HNO₃ a ako posledné bolo eluované technécium s 20 cm³ 12 mol dm⁻³ HNO₃. Priemerné výťažky v stanovovaných vzorkách kalov boli 97 % pre zirkónium, 84 % pre niób, 87 % pre cín a 76 % pre technécium.

Meranie ⁹⁴Nb

Frakcie obsahujúce niób boli zmerané priamo po elúcii na HPGe detektore (ORTEC, 20% relatívna účinnosť) pri energiách 765,8 keV nuklidu ⁹⁵Nb za účelom určenia rádiochemického výťažku. Aktivita ⁹⁴Nb bola určená meraním gama aktivity pri energiách 871 a 703 keV.

Meranie ⁹³Zr

Zirkóniové frakcie boli po eluovaní odparené na objem 5–10 cm³, pH bolo upravené s koncentrovaným 25 % NH₄OH na hodnotu ~ 8–9. Zrazenina bola centrifugovaná pri 5000 ot. min⁻¹ a premytá deionizovanou vodou. Zrazenina bola rozpustená v 1 cm³ 11,3 mol dm⁻³ HCl a zriedená s 5 cm³ deionizovanej vody, 0,5 cm³ bolo odobraných pre meranie na

ICP-OEC za účelom určenia chemického výťažku. ⁹³Zr bolo merané po pridaní 15 cm³ scintilačného koktejlu ULTIMA GOLD AB na kvapalinovom scintilačnom spektrometri TRI-CARB 3100 TR. Optimalizované energetické okno 0–30 keV bolo vybrané na minimalizovanie vplyvu požadia a minimálnej detekovateľnej aktivity.

Meranie ¹²⁶Sn

Po elúcii izotopov cínu z kolóny boli vzorky priamo merané použitím HPGe detektora (ORTEC, 20% relatívna účinnosť), pri energii píku 391,6 keV pre stanovenie rádiochemického výťažku ¹¹³Sn. Aktivita ¹²⁶Sn bola vyhodnotená meraním gama žiarenia dcérskeho izotopu ^{126m}Sb po dosiahnutí rovnováhy pri energiách píkov 666,3 resp. 695 keV⁴.

Meranie ⁹⁹Tc

Tc frakcia bola meraná na HPGe detektore, Ak bola frakcia obsahujúca Tc po elúcii z kolóny TEVA® Resin alebo Anion Exchange Resin stále kontaminovaná, bol do separačného postupu zahrnutý čistiaci krok pomocou sorbentu Cation Exchange Resin. Finálne frakcie boli odparené skoro do sucha a rozpustené v 5 cm³ 0,05 mol dm⁻³ HNO₃. Následne bola vzorka nanosená na kolónu obsahujúcu 0,7 g Cation Exchanger Resinu, forma H⁺, 100–200 mesh (prekondicionovaná s 10 cm³ 0,05 mol dm⁻³ HNO₃), na odstránenie ⁶⁰Co a zvyšku ¹³⁷Cs. Pretečené frakcie boli zmerané na HPGe detektore pre určenie rádiochemických výťažkov ^{99m}Tc pri energii 140 keV. Vzorky boli mereané po týždni z dôvodu úplnej premeny ^{99m}Tc a následne bolo ⁹⁹Tc merané na TRI-CARB 3100 TR po pridaní 15 cm³ scintilačného koktejlu ULTIMA GOLD AB. Optimalizované energetické okno (10–90) keV bolo vybrané na minimalizovanie vplyvu požadia a minimálnej detekovateľnej aktivity (MDA), TRI CARB 3100 TR bol kalibrovaný použitím štandardu ⁹⁹Tc certifikovaným Českým Metrologickým Inštitútom. Typická účinnosť merania sa pohybovala okolo 75 % a vzorky boli merané dvakrát po dobu 120 minút. Vo všetkých analyzovaných vzorkách kalov bol stanovený ⁹⁴Nb vo s najvyššou aktivitou vo vzorke Kalu 3, pochádzajúceho z JE Mochovce⁵. Aktivita ¹²⁶Sn a taktiež ⁹³Zr sa nachádzali pod minimálnou detegovateľnou aktivitou (MDA), ⁹⁹Tc bolo identifikované v Kale 2 pochádzajúceho z JE Jaslovské Bohunice⁵ A1. Hodnoty MDA boli vyrátané na základe Currieho rovnice pre každý experiment.

LITERATÚRA

1. Remenec B., Dulanská S., Mátel Ľ., Bilohuščin J.: J. Radioanal. Nucl. Chem. 302, 117 (2014).
2. Dulanská S., Remenec B., Gardoňová V., Mátel Ľ.: J. Radioanal. Nucl. Chem. 293, 635 (2012).
3. Dulanská S., Bilohuščin J., Remenec B., Gardoňová V., Mátel Ľ.: J. Radioanal. Nucl. Chem. 293, 635 (2012).
4. Dulanská S., Bilohuščin J., Remenec B., Mátel Ľ., Darážová Ľ.: J. Radioanal. Nucl. Chem. 304, 1093 (2015).
5. Dulanská S., Bilohuščin J., Remenec B., Mátel Ľ., Šiliková V.: J. Radioanal. Nucl. Chem. v tlači.

4L-04**SORPCE VYBRANÝCH RADIONUKLIDŮ NA TiO₂**

**VOJTĚCH BRYNYCH^a, JANA POSPĚCHOVÁ^a,
KATEŘINA KOLOMÁ^a, MARKÉTA KOLÁŘOVÁ^a,
LÓRANT SZATMÁRY^a, JAN ŠUBRT^b**

^a ÚJV Řež, a. s. Divize chemie palivového cyklu a nakládání s odpady, Hlavní 130, 250 68 Husinec-Řež, ^b Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i., Hlavní 130, 250 68 Husinec-Řež, 250 68 Řež, Česká republika
vojtech.brynych@ujv.cz

Radionuklidy našly uplatnění v širokém spektru aplikací, od medicíny po energetický průmysl. Jejich riziko spočívá v možném úniku do životního prostředí v případě nehody či chybného zacházení. Isotopy stroncia a cesia patří mezi hlavní produkty štěpení a jsou považovány za velmi nebezpečné pro lidské zdraví a životní prostředí. Europium je typickým členem lanthanoidů a může být použito jako homolog pro předpověď sorpčního chování ostatních lanthanoidů. Kobalt se používá v širokém spektru průmyslových a medicínských aplikací.

Oxid titaničitý je komerčně snadno dostupný materiál, převážně používaný jako fotokatalyzátor, ale má velmi široké spektrum aplikací. TiO₂ byl studován jako sorpční materiál pro řadu těžkých kovů^{1,2}, plynný jód a methyljodid^{3,4}. Několik autorů studovalo sorpci Eu na TiO₂ za různých podmínek⁵⁻⁷.

V prezentované práci byl oxid titaničitý syntetizován za teploty blízké nule následujícím způsobem: Ochladená destilovaná voda s ledem se smíchala s amoniakem (pH 9) a TiOSO₄. Následně se teplota směsi začala zvyšovat až na laboratorní úroveň. Nakonec se vzniklá sraženina odfiltravala a promyla vodou. Konečný produkt byl charakterizován pomocí rentgenové difrakce, skenovací elektronové mikroskopie a Ramanovy spektroskopie, byla měřena velikost pórů a povrchu. Sorpční vlastnosti vybraných radionuklidů (Cs⁺, Co²⁺, Sr²⁺, Eu³⁺, UO₂²⁺) byly stanoveny pomocí vsádkové metody.

Kinetické experimenty ukázaly, že sorpce probíhá velmi rychle pro všechny použité nuklidy. Byla stanovena Langmuirova a Freundlichova izoterma. S výjimkou Cs⁺ odpovídala sorpční data jednotlivých nuklidů Langmuirově izotermě. Z Langmuirovy izotermy byly odečteny následující maximální sorpční kapacity: 0,69 mmol/g pro Cs⁺, 0,55 mmol/g pro Co²⁺, 0,46 mmol/g pro Sr²⁺, 0,48 mmol/g pro Eu³⁺ a 0,48 mmol/g pro UO₂²⁺.

LITERATURA

- Engates K. E., Shipley H. J.: Environ. Sci. Pollut. Res. Int. 18, 386 (2011).
- Liang P., Shi T., Li J.: Int. J. Environ. Anal. Chem. 84, 315 (2004).
- Sharygin L. M. et al.: At. Energy 73, 826 (1992).
- Sharygin L. M., Tret'yakov S. Y.: At. Energy, 423 (1997).
- Tan X., Fang M., Li J., Lu Y., Wang X.: J. Hazard. Mater. 168, 458 (2009).
- Bouby M., Lützenkirchen J.: J. Colloid Interface Sci. 350, 551 (2010).

- Dario M., Molera M., Allard B.: J. Radioanal. Nucl. Chem. 270, 495 (2006).

4L-05**HOMOGENITA PLOŠNÝCH ETALONŮ RADIOAKTIVITY (ČMI)**

KAROLÍNA FICENZOVÁ

Český metrologický institut, OI - Praha, Radiová 1a, 102 00 Praha 10, Česká republika
kficenzova@cmi.cz

Výroba plošných etalonů radioaktivity se řídí českou technickou normou ČSN ISO 8769. Norma z roku 1994¹ připouštěla maximální standardní odchylku emisí v každé měřené části celého zdroje 10%, přičemž plocha dané části byla maximálně 10 cm². Dle současné české technické normy z prosince 2014 (cit.²) by standardní odchylka emisí v každé měřené části celého zdroje neměla překročit 5%, a zároveň každá měřená část musí mít plochu maximálně 5 cm². Plošné etalony se dříve v ČMI dělaly metodou stříkání radioaktivního laku, dnes se nuklidy na podložku nanáší perkem ve formě roztoku. Na základě výše uvedených změn bylo provedeno nové měření homogenity a zároveň porovnání námi vyrobených plošných etalonů starou a novou metodou a etalonu zahničího výrobce. Měření homogenity probíhá posuvem sondy ve dvou směrech. Tento posun stejně jako celé měření je řízeno počítačovým programem. Výjimkou je výška umístění sondy a velikost měřené části zdroje, které jsou upravovány ručně. Pro naše měření jsme použili maximální povolený rozměr měřené části 5 cm². Toho bylo dosaženo kolimátorem s výřezem 25×20 mm, který je umístěn přímo na sondě. Kvůli prostoru mezi sondou a aktivní plochou dochází ke ztrátě části impulzů rozptylem částic do prostoru. Ve středu aktivní plochy je tato ztráta nahrazena příspěvkem z rozptylu částic z okolních ploch. Toto neplatí na okrajích, kde je jen příspěvek částečný a ztráta do volného prostoru není nahrazena. To znamená, že na krajích aktivní plochy je naměřeno výrazně méně emisí, než ve středových částech. Korekce těchto ztrát je provedena soustavou rovnic. Každá z nich je specifická pro dané místo kraje aktivní plochy (př. hrana nebo střed strany). Rovnice vycházejí z dat naměřených pomocí plošných etalonů o rozměru měřené části (25×20 mm), které se k sobě postupně přikládaly, a tím se zjistil vzájemný vliv jednotlivých částí celého plošného etalonu. Zároveň s těmito měřeními jsme ověřili plnění normy ČSN ISO 8769.

LITERATURA

- ČESKÁ NORMA – ČSN ISO 8769 (40 4412): Referenční zářiče pro kalibraci monitorů povrchové kontaminace – Zářiče beta (maximální energie částic větší než 0,15 MeV) a zářiče alfa (červen 1994).
- ČESKÁ TECHNICKÁ NORMA – ČSN ISO 8769 (40 4412): Referenční zdroje – Kalibrace monitorů povrchové kontaminace – Alfa-, beta- a fotonové zářiče (prosinec 2014).

4L-06**RADIAČNĚ CHEMICKÝ VÝZKUM V OBLASTI BIOLOGICKO-MEDICÍNSKÝCH APLIKACÍ****VILIAM MÚČKA**

ČVUT v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská,
Katedra jaderné chemie, Břehová 7, 115 19 Praha 1, Česká
republika
viliam.mucka@fffi.cvut.cz

Výzkum v oblasti interakce ionizujícího záření s živou hmotou je náplní oboru radiobiologie, přesněji řečeno radiační biologie. Intenzivní rozvoj této oblasti jako celku v posledních desetiletích znamenal také rozvoj a rozšíření její dílčích částí, což přirozeně vedlo a postupně vede k jisté samostatnosti některých těchto sub oblastí. Jednou z nich je problematika, která svým charakterem již, důsledně vzato, přesahuje rámec radiobiologie orientované převážně na ovlivnění biologických struktur a jejich funkcí ionizujícím zářením. Tato oblast, kterou lze nazvat bioradiační chemie klade důraz na chemické aspekty související s interakcí ionizujícího (dnes však i UV) záření buď přímo s biologickými systémy, nebo s materiálem, který je používán v biologicko – medicínských aplikacích. V prvním případě se jedná o ovlivnění radiačně chemických procesů probíhajících v biologických systémech chemických agens, ve druhém jde o radiačně chemickou přípravu nebo modifikaci biokompatibilních nebo biofunkčních materiálů, či jiných materiálů biomedicínské praxe.

Jednou z oblastí procesní bioradiační chemie je oblast studia vlivu chemických agens na radiační citlivost živých buněk. Jedním druhem takových agens jsou vychytávače radikálů (zejména OH radikálů), které patří mezi protektory, tj. látky, které snižují radiační citlivost buněk, na rozdíl od senzibilizátorů zvyšujících tuto citlivost. Výzkumu zejména protektorů je věnována značná pozornost¹.

V našich pracích^{2,3} byla a je pozornost věnována metodice kvantitativního vyhodnocování ochrany buněk před účinky ionizujícího nebo UV záření prostřednictvím vychytávačů OH radikálů. Detailními experimenty bylo prokázáno, že tento ochranný účinek lze objektivně a kvantitativně, se stejnou nejistotou, vyhodnotit pomocí dvou různých veličin α a σ , které jsou definovány vztahy $\alpha = (S_S - S_0) / S_0$ a $\sigma = \ln S_0 / \ln S_S$, kde S_0 a S_S jsou frakce buněk přežívajících po ozáření bez přítomnosti a v přítomnosti vychytávače. Výhodnost použití jedné nebo druhé veličiny je dána podmínkami experimentu (zejména ozařování). Na základě výsledků prováděného výzkumu lze konstatovat, že vychytávače OH radikálů, jako jsou methanol, ethanol, nebo mravenčan, výrazně snižují radiační citlivost jak prokaryotních tak eukaryotních mikroorganismů. Přitom je možné konstatovat, že každý vychytávač působí specificky. Větší ochranný účinek přitom vykazují alkoholické vychytávače a větší účinek byl pozorován u bakterií než u kvasinek. Ukazuje se, že ochranný účinek založený na vychytávání OH radikálů souvisí s přítomností kyslíku v ozařovaném systému a je nepřímo úměrný rychlostní konstantě reakce vychytávače s OH radikály.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 13-28721S.

LITERATURA

1. Ewing D., v knize: *Farhatazis, Rodgers MAJ (ed.), Radiation Chemistry, Principles and applications*, kap. 17, s. 501. WCH Publishers Inc. New York 1987.
2. Můčka V., Bláha P., Čuba V., Červenák J.: *Int. J. Radiat. Biol.* 89, 1045 (2013).
3. Můčka V., Červenák J., Čuba V., Bláha P.: *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 304, 237 (2015).

4L-07**^{61,64}Cu-(SCN)-FOSFINÁT-IMUNOGLOBULIN-G M75 A JEHO IN VITRO TESTOVÁNÍ**

**ADAM ČEPA^{a,b}, JAN RÁLIŠ^b, LENKA MAREŠOVÁ^c,
MARKÉTA KLEINOVÁ^c, DANIEL SEIFERT^b, IRENA
SIEGLOVÁ^d, VLASTIMIL KRÁL^d, ONDŘEJ LEBEDA^b,
MILAN LÁZNÍČEK^a**

^a Katedra farmakologie a toxikologie, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové Univerzita Karlova, Hradec Králové,
^b Oddělení radiofarmak, Ústav jaderné fyziky AV ČR, v. v. i., Řež,
^c ÚJV Řež a. s., Řež, ^d Oddělení strukturní biologie, Ústav molekulární genetiky AV ČR, v. v. i., Česká republika
cepa7aa@faf.cuni.cz

Studovali jsme nový přístup k radioaktivnímu značení protilátky IgG M75 proti epitopu lidské karboické anhydrázy IX radionuklidu mědi. Lidská karboanhydráza IX je membránový enzym, který je významně exprimován v některých typech hypoxických nádorových buněk a radionuklidu mědi nabízejí celou řadu diagnostických, terapeutických a teranostických možností. Protilátka IgG M75 byla úspěšně konjugována s nekomerčním ligandem fosfinátem, který byl vyvinut jako specifický chelátor mědi. Metoda konjugace byla optimalizována a poskytuje dobře reprodukovatelné výsledky. Konjugát pak byl označen dvěma radionuklidy: ⁶¹Cu (T_{1/2} = 3,339 h) a ⁶⁴Cu (T_{1/2} = 12,701 h). Označené konjugáty byly testovány in vitro na buněčných modelech kolorektálního karcinomu (HT-29). Získaná data svědčí pro to, že u takto značené protilátky nedochází k výraznému snížení imunoafinity ke karboické anhydráze IX. Jde tedy o látku s potenciálem v zobrazování některých hypoxických solidních nádorů metodou pozitronové emisní tomografie (PET).

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury Univerzity Karlovy, projekt č. 1752314. Příprava izotopů mědi proběhla na výzkumné infrastruktuře CANAM Ústavu jaderné fyziky AV ČR, v. v. i. podpořené projektem MŠMT č. LM2011019.

LITERATURA

1. Chrastina A., Závada J., Parkkila S., Kaluz Š., Kaluzová M., Rajčání J., Pastorek J., Pastoreková S.: *Int. J. Cancer* 105, 873 (2003).
2. Forque-Laffite M. E., Coudray A. M., Bréant B., Mester J.: *Oncogene. Cancer Res.* 49, 6566 (1989).

4L-08

MERANIE EXCITAČNÝCH FUNKCIÍ JADROVÝCH REAKCIÍ PROTÓNŮV NA ^{nat}Mo**JAROSLAV ČERVENÁK, ONDŘEJ LEBEDA**

Ústav jaderné fyziky AV ČR, v. v. i., Husinec-Řež 130, 250 68
Řež, Česká republika
yaro.cervenak@gmail.com

Excitačné funkcie reakcií protónov na ¹⁰⁰Mo vedúce na ^{99m}Tc a ⁹⁹Mo sú dôležité pre prípravu ^{99m}Tc na cyklotrone. Ide o jednu zo sľubných alternatív ku generátoru ⁹⁹Mo/^{99m}Tc založenom na ⁹⁹Mo, ktorý sa pripravuje v reaktore z vysoko obohateného ²³⁵U.

Excitačné funkcie reakcií protónov na prírodnom molybdéne vedúciach na ^{96m+g}Tc boli použité ako monitory v rozsiahlej databáze prác Levkovského. Ako sa ukázalo, boli hodnoty účinných priereзов týchto reakcií výrazne precenené. Pre korekciu tohto inak spoľahlivého zdroja dát je treba dobre poznať priebeh tejto excitačnej funkcie a navrhnúť odporúčané účinné prierezy tejto reakcie pre monitoring protónového zväzku. Účinné prierezy pre tvorbu ^{95m}Tc na prírodnom molybdéne sú dôležité pri príprave tohto rádionuklidu, ktorý sa používa ako stopovač ^{99g}Tc v životnom prostredí.

Databázy jadrových dát obsahujú mnoho experimentov týkajúcich sa reakcií protónov na ^{nat}Mo, tieto dáta sú však v mnohých prípadoch výrazne rozptýlené a nekonzistentné, niektoré dokonca úplne chýbajú.

V rámci IAEA Coordinated Research Project „Nuclear Data for Charged-Particle Monitor Reactions and Medical Isotope Production“ boli zamerané excitačné funkcie reakcií ^{nat}Mo(p,x)^{95m}Tc, ^{95g}Tc, ^{96m+g}Tc, ^{97m}Tc, ^{99m}Tc a ⁹⁹Mo v intervale energií 6,9–35,8 MeV. Dáta pre ^{99m}Tc a ⁹⁹Mo boli prepočítané z prvkových na izotopové účinné prierezy na ¹⁰⁰Mo s použitím aktualizovaných dát zastúpenia izotopov v prírodnom Mo.

Namerané dáta boli následne porovnané s teoretickou predpoveďou kódu TALYS prevzatej z knižnice TENDL-2015 a s publikovanými účinnými prierezymi pre tieto reakcie. Pre všetky identifikované rádionuklidy boli vypočítané aj výtazky v hrubom terči.

Na záver bola urobená selekcia publikovaných dát a boli navrhnuté odporúčané účinné prierezy reakcií ¹⁰⁰Mo(p,2n)^{99m}Tc, ¹⁰⁰Mo(p,x)⁹⁹Mo, ^{nat}Mo(p,x)^{96m+g}Tc a ^{nat}Mo(p,x)^{95m}Tc.

Táto práca vznikla aj vďaka podpore IAEA Coordinated Research Project „Nuclear Data for Charged-Particle Monitor Reactions and Medical Isotope Production“ č. 17461 a výskumnému zámeru Akademie věd ČR č. AV0Z10480505 na výskumnej infrastrukture CANAM Ústavu jaderné fyziky AV ČR, v. v. i. podporené projektom MŠMT č. LM2011019.

4L-09

PŘÍPRAVA, STABILIZACE A ZNAČENÍ OXIDU TITANIČITÉHO ^{99m}Tc A ²²³Ra PRO NUKLEÁRNÍ MEDICÍNU**PETRA MIČOLOVÁ, EKATERINA KUKLEVA, EVA MÁLKOVÁ, MARTIN VLK, PAVEL NYKL, MICHAL SAKMÁR, JÁN KOZEMPEL**

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení
technické v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha, Česká republika
petra.micolova@fffi.cvut.cz

Teranostické nosiče jsou perspektivní a široce studovanou oblastí nukleární medicíny. Volba vhodného nosiče je obzvláště důležitá pro radionuklidy přeměňující se alfa přeměnou, především kvůli vysokým odrazovým energiím uvolněným v jejich důsledku a stabilizaci dceřiných produktů¹.

Jedním ze studovaných materiálů je i oxid titaničitý. Jedná se o materiál, který je znám jako tzv. titanová běloba, a je používán v široké škále produktů – např. aktivní složka opalovacích krémů, pigment či plnivo ve farmacii a kosmetice.

Studovanou přípravou oxidu titaničitého byla hydrolyza tetra-N-butyl orthotitanátu v isopropanolu. S ohledem na velikost částic byla studována i příprava TiO₂ ze zředěných roztoků².

Z důvodu rychlé agregace byla provedena řada experimentů se stabilizátory velikosti částic. Bylo využito detergentů či polymerů – urotropin, citronan sodný, glycerol a polyerní stabilizátory. Velikost získaných nanočástic byla studována pomocí DLS. Radioaktivně značené nanočástice byly také filtrovány přes 0,22 μm filtry.

Ke značení nanočástic bylo použito ^{99m}Tc jako diagnostického radionuklidu a ²²³Ra dezintegrující kaskádou alfa přeměn vhodných k terapeutickým účelům. Značení proběhlo adsorpcí na povrch připravených nosičů a také zabudováním radionuklidu přímo do struktury nosiče, v tomto případě byla hydrolyza prováděna v roztoku obsahujícím zvolený radionuklid. Výtazky značení byly v obou případech vyšší než 80 %.

U označených nosičů byly prováděny studie jejich stability *in vitro* – ve fyziologickém roztoku, krevní plasmě a séru – byly zjišťovány uvolněné aktivity, které se v jednotlivých intervalech pohybovaly pod 10 %.

Tato práce vznikla za podpory grantu TAČR – TA03010027, AZV ČR – 16-30544A a SGS ČVUT – SGS16/251/OHK4/3T/14.

LITERATURA

1. Welch M. J., Redvanly C. S.: *Handbook of radiopharmaceuticals: radiochemistry and application*. s. 848. J. Wiley, New York 2003.
2. Zhang W. F., He Y. L., Zhang M. S., Yin Z., Chen Q.: J. Phys. D: Appl. Phys. 33, 912 (2000).

4L-10 FRUSTRATED LEWIS PAIRS-ASSISTED TRITIUM LABELING

ALEŠ MAREK, SABINA ŠIROKÁ, TOMÁŠ ELBERT

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

An alternative and robust method for the reduction of double bonds by frustrated Lewis pairs (FLPs) will be discussed. With its very mild reaction conditions, good to excellent yields, absolute regioselectivity and the non-metallic character of the reagent, it provides an excellent tool for ^1H , ^2H as well as ^3H chemistry¹. It is a new strategy for the one-pot synthesis of e.g. alcohols, amines and ethers selectively labeled with heavy isotopes of hydrogen.

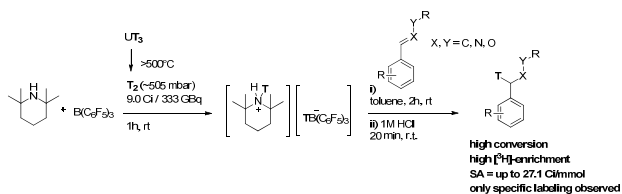


Fig. 1. The first-ever examples of FLP-assisted tritium labeling

The authors thank the Czech Academy of Sciences for financial support on this project (RVO: 61388963).

REFERENCE

1. Marek A., Pedersen M. H. F.: *Tetrahedron* 71, 917 (2015).

4L-11 ACCELERATOR MASS SPECTROMETRY IN THE CZECH REPUBLIC – ABILITIES AND APPLICATIONS

MOJMÍR NĚMEC^a, IRENA ŠPENDLÍKOVÁ^a, JAN KUČERA^b, JAN JOHN^a, IVO SVĚTLÍK^c, DAGMAR DRESLEROVÁ^d

^a CTU in Prague, Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, Břehová 7, 11519 Prague, ^b Nuclear Physics Institute CAS, Husinec - Řež, ^c Nuclear Physics Institute CAS, CRL Laboratory, Prague, ^d Institute of Archaeology AS CR, Prague, Czech Republic
mojmir.nemec@fffi.cvut.cz

The world demand for ultratrace analyses of radionuclides with long half-lives has been increasing in broad spectrum of fundamental and applied research areas. The most sensitive tool for such analyses is the dynamically advancing method of Accelerator Mass Spectrometry (AMS) which enables the determination of more than 50 rare long-lived radionuclides in isotopic ratios up to 10^{-16} , which are not

achievable by standard instrumentation¹. In addition, sample amount necessary for such analysis range usually from several to several hundreds of milligrams, which gives this method significant advantage in analyses of rare and valuable samples. The unique properties of AMS are used in various dating and trace analytical techniques in relation to measureable (radio)nuclides – in dating studies in archaeology and paleoecology, in climate, geological, hydrological and atmospheric research, nuclear industry and waste management, safeguards systems, cosmogenic nuclides production, and biochemical and pharmaceutical research.

AMS is a very powerful but technologically challenging analytical method, which needs close collaboration between chemists and physicists to produce quality results and making full use of the sensitivity of the AMS. In addition it requires precise, reproducible, and well defined methods for sample preparation and proper sampling applied. From the chemical point of view, reasonable integration of radiochemistry separation and preparation methods into AMS sample preparation results in quality samples/methods well suited for high precision AMS measurements at further decreased background and improved sensitivity.

The main AMS application is determination of ^{14}C for various environmental, industrial, pharmaceutical studies, and of course radiocarbon dating. In these fields of study AMS plays an irreplaceable and worldwide known role because of precision, background suppression at the common levels of isotopic ratios $^{14}\text{C}/^{12}\text{C} < 10^{-12}$ and lower. But there are other nuclides which determination in various matrices is as much exciting as dating or interpretation of past nature phenomena using radiocarbon. At present, the most determined nuclides for research and commercial applications are ^{14}C , ^{10}Be , ^{26}Al , ^{36}Cl , ^{41}Ca , ^{129}I and actinides.

The overview of current AMS dedicated and related research in relation to various nuclides of interest will be presented and discussed.

In the Czech Republic, Laboratory CRL of the NPI has been focused on determination of ^{14}C and radiocarbon dating. Except radiocarbon analyses including analyses of the past and present environment in the Czech Republic² and imissions of nuclear industry³, the research is also focused on treatment and dating of various samples related to e.g. archaeology and paleoecology in collaboration with Institute of Archaeology AS CR⁴. Chemical part of the research is focused on development of new graphitization method – procedure for preparation of target carbon samples for AMS⁵. Such procedure and its quality is crucial for reproducibility and detection limits of the final AMS results. Now, the prepared samples are measured in collaboration with known AMS laboratories abroad – mainly in AMS laboratory in Debrecen.

Current AMS dedicated research at the CTU in Prague – FNSPE is focused on measurement of ^{236}U ^{6,7}. This minor uranium isotope is produced in nature and natural $^{236}\text{U}/^{238}\text{U}$ isotopic ratios range from 10^{-10} to 10^{-14} . Due to human activities in nuclear fuel industry, the $^{236}\text{U}/^{238}\text{U}$ isotopic ratio ranges in nature from 10^{-6} up to 10^{-3} . ^{236}U is used as tracer isotope in the long term processes of mixing oceanic waters, global fallout modelling, SAFEGUARDS programme monitoring of nuclear materials, monitoring of neutron fluxes in the earth crust, mixing of underground and surface waters etc. The main tasks today deal with proper sampling and

sample treatment and finding well suitable compound and target matrix for ^{236}U AMS measurement.

Lack of AMS in the CR limits the research areas and AMS laboratories abroad are not able to fully saturate „hunger” of the Czech scientist for AMS analyses. Thus, our contribution is an appeal on a closer collaboration in various fields of expertise for support of Accelerator Mass Spectrometry, thus contributing to a better use of its potentials. An overview of plans to build a new AMS facility in the Czech Republic will be introduced.

REFERENCES

1. Kutschera W.: EPJ Web of Conferences 63, 03001 (2013).
2. Svetlík I., Povínek P. P., Brabcová K. P., Fejgl M., Tomásková L., Turek K.: Radiocarbon 55, 1546 (2013).
3. Svetlík I., Fejgl M., Tomásková L., Turek K., Michálek V.: J. Radioanal. Nucl. Chem. 291, 689 (2012).
4. Bešta T., Novák J., Dreslerová D., Jankovská V., Bernardová A., Lisá L., Valentová D.: Boreas 44, 563 (2015).
5. Černý R.: diplomová práce, ČVUT v Praze (2014).
6. Povínek P. P., Svetlík I., Ješkovský M., Šivo A., John J., Špendlíková I., Němec M., Kučera J., Richtáriková M., Breier R., Fejgl M., Černý R.: J. Radioanal. Nucl. Chem. 304, 67 (2015).
7. Špendlíková I., Raindl J., Němec M., Steier P., Mičolová P.: J. Radioanal. Nucl. Chem. 300, 1151 (2014).

4L-12

SUSTAINABLE FUTURE NUCLEAR FUEL CYCLES – SEPARATIONS, RADIATION STABILITY, AND INNOVATIVE PROCESSES FOR NUCLEAR FUELS PRODUCTION

JAN JOHN, FERDINAND ŠEBESTA, VÁCLAV ČUBA, PETR DISTLER, KAMIL V. MAREŠ, JANA KONĎE

Department of Nuclear Chemistry, Czech Technical University in Prague, Břehová 7, 11519 Prague 1, Czech Republic
jan.john@jfi.cvut.cz

The irradiated nuclear fuel is highly radiotoxic and has to be contained for more than 100,000 years. Its radiotoxicity is mainly dominated by transuranium elements, particularly plutonium isotopes and so called “minor actinoids” (Am, Cm, Np). For the recovery of uranium and plutonium from used nuclear fuel, the PUREX (Plutonium and Uranium Reduction EXtraction) process is industrially used. Liquid high active waste generated from nuclear fuel reprocessing contains the majority of these long-lived actinoids together with the bulk of the fission products. The long term radiological risks associated with this high active waste would be reduced very effectively if Partitioning and Transmutation (P&T) strategy is used. P&T combines chemical separation of long-lived minor actinoids from the rest of waste with their transmutation by means of the nuclear conversion into more short-lived or even stable nuclides. For the transmutation of minor actinoids novel nuclear fuels are under development based on ceramic

(CerCer) or metallic (CerMet) matrices. These fuels will have to undergo multiple recycling and will require novel powderless methods of fuels production and methods for the recycling of the fuel matrix materials.

The key process considered for the partitioning of minor actinoids from high level waste is liquid-liquid extraction. In recent years, many ligands have been developed that display excellent selectivities for minor actinoids over lanthanoids. In addition to sufficient selectivity toward the actinoids, any extractant considered for full-scale application in partitioning processes must fulfil several additional criteria such as good solubility in organic phase, and high hydrolytic and radiolytic stabilities. In the first part of the presentation, results of studies of a series of soft N donor ligands such as BTBP (6,6''-(5,6-dialkyl-1,2,4-triazin-3-yl)-2,2''-bipyridines) or BTPhen type molecules, derived from BTBPs by replacing the 2,2'-bipyridine moiety with a 1,10-phenanthroline moiety, will be presented.

The key process considered for the production of novel CerCer and CerMet fuels is an advanced sol-gel process. However, several alternative options are under development. In the second part of this presentation, results of studies of two procedures – radiation-induced preparation and PAN-process – proposed for the production of precursors of such fuels will be discussed. This part will be concluded by a brief summary of the performance of a process developed for the recycling of one of the potential matrices of the CerMet fuel – the enriched metallic molybdenum.

4L-13

SAFETY ASSESMENT APPROACH FOR DEEP GEOLOGICAL REPOSITORY IN CZECH REPUBLIC

VÁCLAVA HAVLOVÁ^a, ANTONÍN VOKÁL^b, DAGMAR TRPKOŠOVÁ^a, EVA HOFMANOVÁ^a, LUKÁŠ BRÁZDA^a

^a ÚJV Řež, a.s., Hlavní 130, Řež, 250 68 Husinec, ^b SURAO, Dlážděná 6, 110 00 Praha 1, Czech Republic
vaclava.havlova@ujv.cz

The Czech concept assumes that deep geological repository (DGR) for spent nuclear waste will be built in the rock massive at a depth of ~ 500 m below the earth's surface. The waste packages will be enclosed in steel-based canisters placed in vertical or horizontal boreholes. The empty space between the canisters and the host crystalline rock will be backfilled with compacted bentonite. Granite is the host rock considered.

Not only the model calculations themselves can prove the safety. The input data for each of the DGR components is compiled from archive sources, expert judgment and supporting research and development. Furthermore, supporting scientific research programme provides knowledge and arguments, concerning description and evaluation of all the features, events and processes, being present in the DGR system.

In order to prove the long-term safety of the future DGR over a period of 1 million years, the development of complex safety assessment (SA) model employing GoldSim software

has been under way since 2006.

The near-field model assumes the disposal of a total of 6000 carbon-steel canisters with a minimum container lifetime of 10,000 years. The scientific data about canister material degradation are provided by an experimental programme, studying potential materials (carbon steel, stainless steel, copper and titanium) corrosion in contact with bentonite under anaerobic conditions (in anaerobic box under Ar atmosphere)¹. Part of the research has been also held *in-situ* in the real rock massive as a part of international project MACOTE².

The radionuclides are transported by diffusion through the bentonite layer towards the rock compartment. The data input for radionuclide migration through bentonite layers are delivered from through-migration experiments, using radioactive tracers in order to gain diffusion coefficient D_e data and evaluate available pore space for radionuclide migration³ – see example for conservative tracer on Fig. 1.

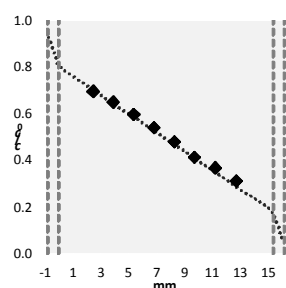


Fig. 1. HTO profile and breakthrough curve on compacted bentonite B75 to 1600 kg/m³ saturated in synthetic granitic water and corresponding best-fit model³

Radionuclides are transported by means of groundwater flow (advection) from the boundary with the near-field to a preferential path within the geosphere.

Radionuclide migration processes are studied both in lab (e.g.⁴ and *in-situ*). Laboratory results can provide results for well-defined conditions, however not being able to fully reflect the conditions of the rock massive. The example of scattered values of diffusion coefficients D_e for different granitic rocks is demonstrated on Fig. 2.

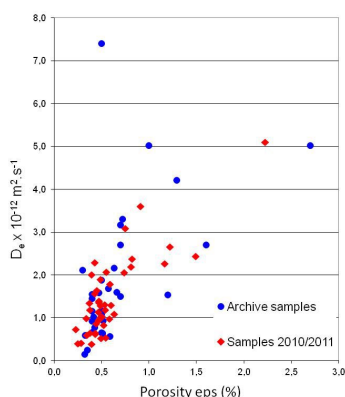


Fig 2. Dependence of D_e (m²/s) for HTO on rock porosity (%) for representative samples of Czech granites⁴

The supporting *in-situ* program is held either in the underground research laboratory Josef (e.g. PAMIRE project⁵) or in the Grimsel test site (project Long term diffusion, LTD⁶)

The biosphere is modelled using four compartments representing land (cultivable and forest), the pond and a river. The model represents a universal system that corresponds to the current lifestyle of the Czech Republic.

The activities have been funded by SURAO, TA04020986 and MPO TIP FR TII/367.

REFERENCES

1. Research and development of disposal canister for deep geological disposal of spent nuclear fuel. SÚRAO project.
2. Material Corrosion test (MACOTE, <http://www.grimsel.com/gts-phase-vi/macote-the-material-corrosion-test/macote-introduction>)
3. Research of material properties for safe disposal of radioactive wastes and development of procedures for their evaluation. MPO TIP FR TI-1/362.
4. Research on influence of inter-grain granite permeability for safe disposal into geological formation; methodology and measurement device development; MPO TIP FR TI-1/367 project.
5. PAMIRE – <http://www.ujv.cz/cz/pamire>. TA04020986.
6. Long term diffusion Phase VI. project – <http://www.grimsel.com/gts-phase-vi/ltd/ltd-introduction>.

4L-14

VLIV HORNINOVÉHO PROSTŘEDÍ A CEMENTOVÝCH MATERIÁLŮ NA DIFÚZI RADIOKONTAMINANTŮ V BENTONITU

TOMÁŠ ROSENDORF^{a,b}, EVA HOFMANOVÁ^a, RADEK ČERVINKA^a

^a ÚJV Řež, a.s., Hlavní 130 Řež, 250 68 Husinec-Řež, ^b FJFI ČVUT, Břehová 7, 115 19 Praha 1, Česká republika
tomas.rosendorf@gmail.com

Difúzní koeficienty radiokontaminantů v kompaktním bentonitu jsou zásadní při hodnocení bezpečnosti hlubinného úložiště (HÚ). Během dlouhodobého vývoje HÚ bude inženýrská bariéra kompaktního bentonitu ovlivněna mimo jiné složením podzemní vody, které povede ke změnám v bobtnavosti, hydraulické vodivosti, mineralogie, sorpčního potenciálu, které ovlivní rychlost migrace radionuklidů^{1,2}.

Tato práce se zabývá stanovením difúzních koeficientů HTO a ¹²⁵I v českém komerčním bentonitu nasyceném granitickou (SGW-UOS) a cementovou (ECW) vodou v průnikovém uspořádání experimentu. Výsledky jsou zobrazeny v Tabulce I.

Stanovené hodnoty efektivních difúzních koeficientů v bentonitu nasyceném cementovou vodou byly přibližně dvakrát vyšší ve srovnání s bentonitem nasyceným granitickou vodou. Tyto rozdíly v difúzním chování jsou přisuzovány rozdílnému zastoupení bivalentních kationtů v mezivrstvi montmorillonitu (stanoveném pomocí Cu(II)-

trieniu), rozdílné porozitě (stanovené gravimetricky) a rozdílné referenční difuzivité v granitické a cementové vodě (stanovené na poréznych fritách).

Tabulka I

Stanovené hodnoty efektivních porozit ϵ_{eff} a efektivních difúzních koeficientů D_e při daných objemových hmotnostech bentonitu ρ_d

Typ vody	Stopovač	ρ_d [kg m ⁻³]	ϵ_{eff} [-]	D_e [m ² s ⁻¹]
SGW-	HTO	1 530	0,46	$8,4 \times 10^{-11}$
UOS	¹²⁵ I ⁻	1 550	0,03	$2,4 \times 10^{-12}$
ECW	HTO	1 490	0,48	$1,8 \times 10^{-10}$
	¹²⁵ I ⁻	1 510	0,03	$4,9 \times 10^{-12}$

Tato práce je zčásti výsledkem řešení projektu *Správy úložišť radioaktivních odpadů „Výzkumná podpora pro bezpečnostní hodnocení hlubinného úložiště“ a zčásti řešením Studentské grantové soutěže ČVUT č. SGS16/250/OHK4/3T/14.*

LITERATURA

- Melkior T., Mourzagh D., Yahiaoui S., Thoby D., Alberto J. C., Brouard C., Michau N.: *App. Clay Sci.* 26, 99 (2004).
- Choi J.-W., Oscarson D. W.: *Jour. Of Cont. Hydrol.* 22, 189 (1996).

4L-15

KOMPOZITNÝ BIOSORBENT PRE SEPARÁCIU RÁDIONUKLIDOV

LUBOMÍR MÁTEL, SABÍNA PETERCOVÁ, SILVIA DULANSKÁ

*PriF UK Katedra jadrovej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovensko
matel@fns.uniba.sk*

Biosorbenty na báze myceli húb vykazujú špecifické vlastnosti, ktoré sa môžu odvodiť od chemických štruktúr „stavebných jednotiek myceli a od ich pevnosti¹. V tomto zmysle sa môžu vlastnosti výsledného sorbentu modifikovať. Celkový charakter sorpčných vlastností závisí od funkčných skupín biosorbentu po vhodnej modifikácii. Selektivita biosorbentu ako celku je daná zložkami ako sú proteíny a polysacharidy, ovplyvňujú mechanické i retenčné vlastnosti. Cieľom práce bola príprava biosorbentu z drevokazných nelupenatých a chorošovitých húb s nasledovnou vhodnou modifikáciou pre prípravu sorbenta vhodného na separáciu rádionuklidov. Príprava povrchovo modifikovaného sorbentu sa realizovala v otvorenom systéme². Drevokazná huba bola pomletá a postupne modifikovaná za pomoci chloridu železitého, síranu meďnatého a hexakvanoželeznanu draselného. Výsledný produkt bol sušený v sušiarňi pri 40 °C. Modifikovaný biosorbent bol následne použitý na charakterizáciu sorpčných vlastností pomocou vhodného rádionuklidu.

Ako prvé sa testovala možnosť sorpcie ¹³⁷Cs a ⁶⁰Co, ako aj časová závislosť adsorpcie od doby premiešavania so

sorbentom. Odobralo sa 0,05 g modifikovaného biosorbentu do centrifugačnej skúmavky, následne sa pridalo 10 ml destilovanej vody a 200 uL ¹³⁷Cs a ⁶⁰Co s aktivitou 20 Bq. Sledovala sa časová závislosť adsorpcie vybraných rádionuklidov od doby premiešavania so sorbentom. Následne sa odobralo na gama spektrometrické meranie 10 ml roztoku a stanovilo sa percento adsorpcie. K sorpcii dochádza pomerne rýchlo, už v prvých minútach kontaktu, ¹³⁷Cs je sorbované vo väčšej miere ako ⁶⁰Co. Až 90 % ¹³⁷Cs sa sorbovalo na pripravenom sorbente.

V ďalšej časti práce sa testovalo vhodné prostredie pre adsorpciu v poradí deionizovaná voda a následne prostredie HCl a HNO₃ s koncentráciou v rozsahu 0,01–9 mol dm⁻³. Gama spektrometrickým meraním sa zistilo, že je až 92 % ¹³⁷Cs a 85 % ⁶⁰Co je adsorbované na pripravenom sorbente v širokom rozsahu pri pH (1–9). Mierna desorpcia ⁶⁰Co nastala pri použití HCl s koncentráciou nižšou ako 1 mol dm⁻³. Kompozitný sorbent vykazoval vysokú schopnosť adsorpcie ¹³⁷Cs aj pri vyšších koncentráciách HCl. Z výsledkov vyplýva, že koncentrácia HNO₃ má väčší vplyv na desorpciu rádionuklidov vo ako HCl. V prostredí HNO₃ sa cézium vymýva vo väčšej miere ako kobalt najmä v rozsahu koncentrácie kyseliny 1–2 mol dm⁻³.

V ďalšom experimente sa študovala možnosť adsorpcie nielen Cs⁺ a Co²⁺, ale aj ďalších dvojmocných katiónov Ba²⁺ a Sr²⁺. Na sledovanie výťažku boli do roztoku pridané aj stopovacie rádionuklidy ¹³³Ba a ⁸⁵Sr. Zistilo sa, že pri pH (4–9) došlo k účinnej adsorpcii všetkých testovaných rádionuklidov. K desorpcii ⁸⁵Sr a ¹³³Ba došlo pri použití slabých kyslých roztokov s pH (1–2,5). V kyslých roztokoch sa sorbovalo len ¹³⁷Cs. Pri pH 9,8 sa desorbovalo 25 % ¹³³Ba a 50 % ¹³⁷Cs. Z výsledkov vyplýva, že pripravený impregnovaný sorbent z drevokaznej huby je vhodný na sorpciu ¹³³Ba, ⁸⁵Sr, ¹³⁷Cs a ⁶⁰Co v širokej oblasti pH 4–9. V kyslých roztokoch sa ⁸⁵Sr a ¹³³Ba nesorbujú, ale dochádza k čiastočnej sorpcii ⁶⁰Co a úplnej sorpcii ¹³⁷Cs.

Práca bola realizovaná vďaka grantu UK/119/2016.

LITERATÚRA

- Petercová S.: Využití derivátov chitosanu pre separáciu alfa rádionuklidov. *Diplomová práca* PriF UK (2015).
- Pratt D. Y., Wilson L. D., Kozinski J. A.: *J. Colloid Interface Sci.* 395, 205 (2013).

4L-16

SOLVENT EXTRACTION OF EUROPIUM (III) FROM COMPLEXING SOLUTIONS INTO IONIC LIQUIDS CONTAINING CMPO EXTRACTANT

BARBARA BASARABOVÁ, KATEŘINA ČUBOVÁ, MOJMÍR NĚMEC

*Czech Technical University in Prague, Břehová 7, 115 19 Prague 1, Czech Republic
basarbar@jfifi.cvut.cz, katerina.cubova@jfifi.cvut.cz,
mojmir.nemec@jfifi.cvut.cz*

Room temperature ionic liquids (RTILs) are organic salts with a melting point below 100 °C, made of bulky

organic cations and organic/inorganic anions. Currently, RTILs are considered as promising extraction media for various separations processes, therefore they are investigated as possible replacements of volatile organic compounds (VOCs) that are widely used today. Their properties such as negligible vapour pressure, ability to solvate organic, inorganic and polymeric materials, high ionic conductivity, high thermal and radiation stability, tuneable hydrophobicity etc. are valuable in the field of radioactive waste treatment and radionuclide separations. The potential for use of hydrophobic RTILs in decontamination of liquid radioactive waste (LRW) is emphasized with possibility of their recycling.

Although RTILs provide enormous variety of structures, extraction studies predominantly concern on the imidazolium family. Imidazolium ionic liquids are usually made of methylimidazolium cations with a grafted alkyl chain of various length „n“ – $[C_n\text{mim}]^+$. From great amount of methylimidazolium cations, ethyl- and buthyl-methylimidazolium has been chosen – $[C_2\text{mim}]^+$ and $[C_4\text{mim}]^+$. Along the bulky cation, one of the various anions, such as $[\text{Cl}]^-$, $[\text{PF}_6]^-$, $[\text{BF}_4]^-$, $[\text{TfO}]^-$, $[\text{NTf}_2]^-$..., may be used. As the anion $[\text{NTf}_2]^-$ makes the RTILs very hydrophobic and its combination with methylimidazolium cation makes the RTIL mainly highly thermally and radiation stable, $[C_2\text{mim}][\text{NTf}_2]$ and $[C_4\text{mim}][\text{NTf}_2]$ RTILs have been selected for the investigation of radionuclide separations from liquid radioactive wastes.

Table I
Physical properties of selected room temperature ionic liquids

RTILs	m_p [°C]	ν [cP] at 25 °C
$[C_2\text{mim}][\text{NTf}_2]$	-16	35.55
$[C_4\text{mim}][\text{NTf}_2]$	-4	61.14

m_p – melting point; ν – viscosity

Within the above scope, the main aim of this research is to develop a new method for separation and concentration of radionuclides suitable for decontamination a decommissioning procedures and based on ionic liquids. In this research, europium has been selected as a representative of lanthanides and radionuclides of interest.

The liquid-liquid extraction experiments have been carried out under the various concentrations of nitric acid ranging from 10^{-4} up to 4 mol dm^{-3} containing citric or oxalic acid in concentrations $10^{-2} \text{ mol dm}^{-3}$ in aqueous phase. As the organic phase, pure RTILs or solutions of CMPO extractant in RTILs ranging from 0.5 up to 5 mmol dm^{-3} were used.

The sets of extraction experiments is aimed to determine the preferable RTIL and compare used complexing agents for further study under the more specific conditions.

The results shows that CMPO solution in $[C_2\text{mim}][\text{NTf}_2]$ extracts Eu from HNO_3 solution better than CMPO solution in $[C_4\text{mim}][\text{NTf}_2]$. The higher distribution ratio was observed when higher CMPO concentration in ionic liquid was used.

This work was supported by grant project of the Technology Agency of the Czech Republic TH01020381.

REFERENCES

1. Vasudeva Rao P., Venkatesan K., Srinivasan, T.: *Progress in Nuclear Energy* 50, 449 (2008).
2. Pandey S.: *Anal. Chim. Acta* 556, 38 (2006).
3. Billard I., Ouadi A., Gaillard C.: *Anal. Bioanal. Chem.* 400, 1555 (2011).
4. Wasserscheid P., Welton T.: *Ionic liquids in synthesis*. Second edition (2007).
5. Wilkes J.: *Green Chem.* 4, 73 (2002).
6. Sun X., Luo H., Dai S.: *Chem. Rev.* 112, 2100 (2012).
7. Kirchner B.: *Ionic liquids*. Springer, Heidelberg (2009).

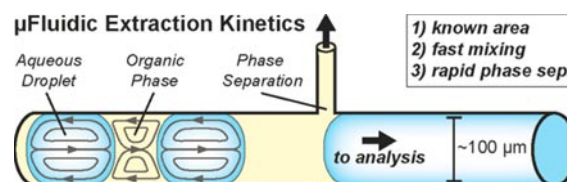
4L-17

STANOVENÍ KINETICKÝCH PARAMETRŮ KAPALINOVÉ EXTRAKCE RADIONUKLIDŮ POMOCÍ MIKROFLUIDNÍ SLUG-FLOW METODY

PAVEL BARTL, MOJMÍR NĚMEC, JAN JOHN

KJCH FJFI-ČVUT v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha 1,
Česká republika
pavelbartl80@gmail.com

V současné době se vyvíjí množství kapalinově extrakčních procesů spojených především s přepracováním ozařeného jaderného paliva. Před jejich průmyslovou implementací je nutné tyto procesy optimalizovat a případně i mít možnost vytvářet jejich funkční modely. Pro tyto účely je velmi výhodné znát kinetické parametry daného procesu, jako jsou konstanty převodu hmoty na mezifázi, poločas extrakce nebo kinetické konstanty extrakce.



Existuje spousta konvenčních technik pro studium převodu hmoty na mezifázi, avšak většina z nich není schopna buď zajistit dostatečnou rychlost míchání, anebo stanovit mezifázovou plochu. Právě v tomto tkví hlavní výhoda slug-flow mikrofluidiky. Při správném nastavení jsou v kapiláře tvořeny tzv. slugs a plugs (viz obr.), jejichž optickým měřením jsme schopni vypočítat mezifázovou plochu. Navíc, díky pohybu slugu dochází ke tření o stěnu kapiláry, a je tak zajištěno velmi rychlé a účinné míchání. Další výhodou této techniky je, že díky práci v mikroměřítku se generuje minimální množství radioaktivního odpadu.

V této práci se zaměříme na podstatu celé metody. Ukázána bude jak fyzikální výhoda mikrofluidiky, tak její snadná implementace na kinetické rovnice, z nichž plynou výše zmíněné cenné parametry. Ukázán bude rovněž mikrofluidní systém, který je pro tyto účely používán na Katedře jaderné chemie, FJFI-ČVUT v Praze.

4L-18 STUDIUM ALTERNATIVNÍCH ELUČNÍCH ČINIDEL PRO DIPHONIX RESIN

JIRÍ JANDA, LUKÁŠ KAŇKA

*Univerzita obrany, Ústav OPZHN, Vítá Nejedlého, 682 01
Vyškov, Česká republika
jiri.janda@unob.cz*

Práce byla zaměřena na experimentální stanovení separačně-extrakčních vlastností pevného extrahentu DIPHONIX (Eichrom Industries, USA) v závislosti na použitém elučním činidle. Extrakční vlastnosti byly testovány pro plutonium, americium, curium a uran. Jako mobilní fáze byly použity kyseliny chlorovodíková a dusičná o různých koncentracích. Cílem práce bylo nalezení nejvhodnější kombinace mobilní fáze a elučního činidla, která by vedla k nejvyšší výtěžnosti. Dostupné literární zdroje uvádějí jako nejčastěji používané eluční činidlo kyselinu 1-hydroxyethylidendifosfonovou (HEDP, Etidronic Acid). Na základě rešerše byly vybrány sloučeniny, které jsou známé svými komplexotvornými vlastnostmi, jako jsou soli kyselin šťavelové a citrónové o různých koncentracích. Aktivita vzorků získaných elucí byla měřena pomocí kapalinné scintilační spektrometrie.

4L-19 SORPCE UMĚLÝCH RADIONUKLIDŮ V HYDROSFÉŘE – DISTRUBUČNÍ KOEFICIENT

EVA JURANOVÁ^{a,b}, EDUARD HANSLÍK^a

*^a Výzkumný ústav vodohospodářský T. G. Masaryka, v.v.i.,
Podbabská 30, 160 00 Praha 6, ^b Univerzita Karlova v Praze,
Přírodovědecká fakulta, Ústav pro životní prostředí, Albertov
6, 128 43 Praha 2, Česká republika
eva_juranova@vuv.cz*

V případě radioaktivního znečištění povrchové vody jsou kontaminanty unášeny spolu s vodou a migrují podél toku řeky. Během této migrace mohou být radionuklidy fixovány na pevné součásti hydrosféry¹. Dlouholeté zkušební ukazují, že sorpce hraje při migraci významnou roli^{2,3}.

Cílem bylo popsat vliv sorpce na kontaminaci vodního prostředí v důsledku hypotetické těžké havárie jaderné elektrárny.

Jako parametr popisující sorpci radionuklidů na pevné části hydrosféry byl stanoven distribuční koeficient, který udává rovnovážné rozdělení radionuklidu mezi pevnou a vodnou fází. S využitím vsádkového uspořádání experimentů byla stanovena sorpce pro systém sediment-voda v profilech na Vltavě a Labi.

Distribuční koeficienty se pro sedimenty ve sledovaných profilech pohybovaly v rozmezí od desítek do tisíců l/kg. Obecně lze konstatovat, že hodnoty distribučních koeficientů v systému sediment-voda se pro sledované radionuklidy snižují v pořadí: $^{139}\text{Ce} > ^{134}\text{Cs} > ^{133}\text{Ba} > ^{241}\text{Am} > ^{60}\text{Co} > ^{85}\text{Sr} > ^{131}\text{I}$. ^{139}Ce je tedy na sedimenty sorbován nejvíce, ^{131}I

nejméně. Protože jsou ale v různých profilech zjišťovány velmi rozdílné hodnoty, může se toto pořadí v různých lokalitách lehce lišit.

Sorpce umělých radionuklidů na sedimenty je ovlivněna řadou faktorů, proto byly analyzovány vztahy sorpčních vlastností a složení sedimentů. Významný vliv na sorpci ^{85}Sr se podařilo zjistit v případě zrnitosti a obsahu organické hmoty v sedimentech. Mineralogické složení (obsah křemene a živců) významně ovlivňovalo sorpci v případě ^{133}Ba a ^{134}Cs a dále byla nalezena závislost sorpce ^{139}Ce na obsahu prachových částic. V ostatních případech byl vliv sledovaných charakteristik kvality sedimentů zanedbatelný nebo nízký. To může znamenat, že v daných systémech vodního prostředí existuje velké množství faktorů, které působí společně a lze je jen těžko odlišit.

Jednoduché zobecnění vztahů sorpce radionuklidů a kvality sedimentů není ve většině případů možné a je nutné posuzovat celý systém komplexně.

LITERATURA

1. Eyrolle F., Radakovitch O., Raimbault P., Charmasson S., Antonelli C., Ferrand E., Aubert D., Raccasi G., Jacquet S., Gurriaran R. J.: *Soils Sediments* 12, 9 (2012).
2. Hanslík E., Ivanovová D., Juranová E., Šimonek P., Jedináková-Křížová V. J.: *Environ. Radioact.* 100, 2 (2009).
3. Hanslík E., Marešová D., Juranová E.: *Int. J. Nucl. Energy Sci. Eng.* 3, 3 (2013).

4P-01**TREATMENT OF LARGE VOLUMES OF LIQUID WASTES, BEING PRODUCED BY SEVERE NPP ACCIDENT****VÁCLAVA HAVLOVÁ^a, VOJTĚCH BRYNYCH^a, LÓRANT SZATMÁRY^a, PAVEL FRANTA^a, MIROSLAV KOTOUČ^a, ERVÍN HOFMAN^b**^a ÚJV Řež, a.s., Hlavní 130, Řež, 250 68, Husinec; ^b ČEZ, a.s., Duhová 6, Praha 4, Česká republika
vaclava.havlova@ujv.cz

The post-accident measure demand has raised after Fukushima Daichi accident. One of the main challenges was related to treatment of large volumes of the highly radioactive waste waters, being generated during the severe accident mitigation. Therefore ÚJV Řež in the cooperation with ČEZ, a.s. has started an attempt to review the concept and design of a modular device, dedicated to treatment of radioactive contaminated water, being hypothetically produced during the VVER 440 and 1 000 NPPs severe accident.

In the first step the source term from both types of NPPs in Czech republic, i.e. VVER 440 was revised and recalculated^{1,2}.

The results of revised source term then were used as the input for development of modular device for liquid waste treatment. The most important contaminants in the coolant solution would be Cs and Sr radioisotopes, altogether with actinides.

The development of such a modular system had started in late 80ties³. The previous experience was revised and extended, including recent information, e.g. Three Mile Island and Fukushima Daichi accidents, accompanied also with short term experimental research. Based on that the treatment procedure in the modular device was proposed. The apparatus has been developed as an integral part of the implementation of Fukushima Daichi post- accident measures in VVER units.

The volume of treated water is expected to be 3 000 m³, presuming that the treatment of the contaminated water would start 6 months after the successful stabilization of the accident progression. However, the volume of treated water can be increased by scaling of the modular system. The chemical composition of the treated solution is further important input information for concept development.

The apparatus itself consists of several columns with various sorbent materials, dedicated to the type of radioisotope to be eliminated. The various types inorganic sorbent were tested in the past, in order to determine sorption properties. The zeolites sorbents demonstrated the best sorption properties for caesium. The capabilities of these zeolites can be improved by the modification with hexacyanoferrate. The effectiveness of the sorbent seems to be crucial for further planning of sorbent column transportation, storage and processing. It can be influenced by composition of processed solution (content of Na, K, alkalis), by irradiation from processed radionuclides, by temperature, being emitted by sorbed radionuclides e.g.

The columns can be utilized for both sorption and vitrification, in which case the sorbent can be mixed with

glass substrate. Thus, it can be vitrified afterwards without any further manipulation with the highly radioactive sorbent.

Finally, the sorptive capacity of columns has been assessed in order to determine the amount of radioactive waste produced and to evaluate further steps in planning of waste management. It is clear that in case of such a severe NPP accident the capacity of both existing and planned radioactive waste repositories will not be sufficient.

The activities have been funded by ČEZ, a.s.

REFERENCES

1. Vokáč P.: Výpočtová analýza havarijního scénáře typu LOCA o ekvivalentním průměru 200 mm s uvážením strategie IVR na elektrárně VVER-440/213, ÚJV Z-3839T, Revize 0, (2013).
2. Kotouč M.: Analýza těžké havárie typu velká LOCA na ETE: výpočet inventáře štěpných produktů při iniciační události a v dlouhodobém horizontu, vyhodnocení úniku základních tříd štěpných z paliva a ocenění množství v kontejmentu, ÚJV Z-4336-T, (2015).
3. Franta P., Vojtěch O., Kuča L., Kepák F., Nenička P., Stuchlík S., Schula M., Šotola A.: Příprava vývoje a výroby mobilních zařízení pro zneškodňování atypických radioaktivních odpadů. Ústav jaderného výzkumu Řež, (1991).

4P-02**SORPTION OF NICKEL FROM AQUEOUS SOLUTIONS WITH CITRIC ACID USING SELECTIVE SORBENTS****MONIKA CHLUPÁČOVÁ^{a,b}, PAVEL KŮS^a, HELENA PARSCHOVÁ^b**^a Research centre Řež, Husinec - Řež, 25068, ^b UCT Prague, Technická 5, 160 00 Prague, Czech Republic
monika.chlupacova@cvrez.cz, pavel.kus@cvrez.cz

In industry, there is need to control a limit concentration of heavy metals to maintain safety and good economy of the process. Nowadays, there are several techniques for removing metals; precipitation-filtration, ion exchange, reverse osmosis, oxidation-reduction, solvent extraction and membrane separation. The most common is ion exchange because the sorbents can be easily recovered and reused by regeneration operation¹.

Corrosion, which can be caused by heavy metals, is one of important factors in power plant safety. From time to time, it is essential to use the decontamination solutions in order to protect materials at power plants. One of the used decontamination process, in nuclear power industry, is called AP-CITROX. The AP-CITROX procedure is an eight-step process, including an oxidizing pre-treatment of the surface with alkaline potassium permanganate followed by washing with a concentrated mixture of citric and oxalic acids to remove the contaminated surface layer, and washing with demineralized water before, between and after each step^{2,3}. The decontamination solution contains complexes with following metals: zinc, cobalt, nickel, copper, iron and

manganese. Further processing and storage of the used decontamination solutions is then dependent on its radioactivity, therefore it is convenient to remove radioactive compounds from the solutions.

According to previous studies various types of sorbents (weakly acidic cation exchanger, chelating sorbents, weakly basic anion exchanger) can be used for removal of heavy metal ions from water and industrial wastewaters using ion exchange technique⁵⁻⁷. In this study chelating sorbents and weakly acidic cation exchangers were used.

Chelating sorbents are a special type of sorbents. These sorbents are selective to metal ions in appropriate pH value. These sorbents adsorb metal ions with combination of ionic and coordination interactions instead of electrostatic interactions⁸.

The aim of this study was to provide experiments with chosen sorbents and find suitable operating conditions for the separation of nickel from aqueous solutions of citric acid.

For the separation of metal from decontamination solutions of citric acid were chosen five different types of commercial sorbents: Amberlite IRC 748, Amberlite IRC 747, Amberlite IRC 86, Lewatit Mono plus TP207, Lewatit CNP80.

The authors gratefully acknowledge the financial support from the Research centre Řež, project SUSEN and financial support from specific university research (MSMT No 20/2015).

REFERENCES

1. Hubicki Z., Kolodyńska D.: *Intech*. 8, 193 (2012).
2. Varga K., Németh Z., Somlai J., Varga I., Szánthó R., Borszéki J., Halmos P., Schunk J., Tilky P.: *J. Radioanal. Nuclear Chem.* 254, 589 (2002).
3. Vargaa K., Németha Z., Szabóa A., Radóa K., Oravetz D., Homonnayc Z., Schunkd J., Tilkyd P., Kőrösie F.: *J. Nuclear Mater.* 348, 181 (2006).
4. Li-Chun L., Ruey-Shin J.: *Chem. Eng. J.* 132, 205 (2007).
5. Dabrowski A., Hubicki Z., Podkoscielny P., Robens E.: *Chemosphere* 56, 91 (2004).
6. Li-Chun L., Ruey-Shin J.: *Chem. Eng. J.* 112, 211 (2005).
7. Jelínek L., Parschová H., Paidar M., Mištová E., *Desalinační a separační metody v úpravě vody*. VŠCHT, Praha 2009.

4P-03

EXTRAKČNÁ CHROMATOGRAFIA AKO METÓDA SIMULTÁNEHO STANOVENIA Pu A Np V KONTAMINOVANÝCH PÓDACH

JANA STRIŠOVSKÁ, DUŠAN GALANDA, JOZEF KURUC

*Katedra jadrovej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Ilkovičova 6, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava 4, Slovenská republika
strisovska@fns.uniba.sk*

Prezentovaná práca bola zameraná na vypracovanie experimentálneho algoritmu na separáciu antropogénnych transuránových rádionuklidov ²³⁷Np a ²⁴¹Pu vo vzorkách pôdy a popola z rýb. Vypracovanie metodiky bolo primárne zamerané na aplikáciu metód vychádzajúcich z vlastností extrakčnej chromatografie, pričom dôraz bol kladený na separáciu vzoriek pomocou komerčne dodávaných extrakčných materiálov z portfólia firmy TrisKem International¹.

Samotné postupy rádiochemickej analýzy boli priebežne modifikované a optimalizované podľa typu vzorky, resp. požadovanej matrice vzorky s dôrazom na dosiahnutie čo najvyššej efektivity pri čo najmenšom počte krokov a použitých chemikálií. Finálna a prezentovaná rádiochemická procedúra je výsledkom kombinácie dvoch algoritmov, ktoré predstavujú separáciu rádionuklidov na extrakčných materiáloch TEVA[®] resin a TRU resin od firmy TrisKem International.

Stanovované izotopy neptúnia boli selektívne zachytávané na sorbente TEVA[®] resin v oxidačnom stupni 4+. TRU resin bol použitý pre purifikáciu izotopov plutónia od prípadných interferujúcich rádionuklidov Am a Th.

Na stanovenie výtťažkov rádiochemickej separácie rádionuklidov Np a Pu boli do vzoriek pridávané stopovacie rádionuklidy ²³⁹Np a ²⁴²Pu s verifikovanou aktivitou. Príprava stopovacieho rádionuklidu ²³⁹Np musela byť realizovaná pred každou rádiochemickou analýzou, pričom použitý izotop stopovacieho rádionuklidu bol pripravovaný separáciou z materského rádionuklidu ²⁴³Am, ktorý dosahuje rádioaktívnu rovnováhu s ²³⁹Np v priebehu dvadsiatich dní. Hodnota aktivity ²³⁹Np sa stanovovala spektrometriou emitované gama žiarenia.

Hodnoty priemerných výtťažkov chemickej separácie ²³⁹Np boli stanovené pre energiu žiarenia gama 277 keV, kde hodnota výtťažku dosahovala 69,3 % a pri 228 keV bol 65,9 % (cit.²).

Výsledky úvodných experimentov separácie Pu a Np realizované na modelových vzorkách boli aplikované na vzorky z porovnávacích meraní NPL AH-B08069 (2008)³ obsahujúce zmes alfa-rádionuklidov s deklarovanými hmotnostnými aktivitami s cieľom modifikovať a optimalizovať komplexnosť verifikovanej separačnej metódy.

Hodnoty rádiochemických výtťažkov pri aplikácii navrhovaného rádiochemického separačného postupu boli relatívne vysoké, pre ^{239,240}Pu 95,0 ± 3,5 % a pre ²³⁷Np 87,9 ± 3,0 %.

Validácia metódy bola prevedená aplikovaním nami

modifikovaných separačních postupů na referenčním materiálu IAEA–375⁴ a IAEA–414⁵ poskytovaných International Atomic Energy Agency (IAEA).

Porovnaním nami získaných experimentálních výsledků a následnou kalkulací stanovených hmotnostních aktivit byla potvrzená zhoda s hodnotami deklarovanými IAEA. Závěrem práce byla robustnost a aplikovatelnost finální verze separační procedury overovaná jej aplikací při radiochemické analýze vzorky kontaminované země, která je dočasně uložena v areálu Jadrové elektrárny A1 Jaslovské Bohunice, přičemž výsledkem těchto experimentů bylo stanovení hmotnostní aktivity sledovaných radionuklidů, kterých přítomnost byla aj předpokladaná a zároveň jsme potvrdili vhodnost naší navrhovaného postupu radiochemické analýzy aj na matrice reálných vzorků.

LITERATURA

1. TrisKem International, na internete: http://www.triskem-international.com/iso_album/technical_doc_general_v6_en_ht_web.pdf (2016).
2. Strišovská J., Drábová V., Kuruc J.: J. Radioanal. Nucl. Chem. 298, 1179 (2013).
3. Harms A., Gilligan CH.: Environmental radioactivity proficiency test exercise 2008. National Physical Laboratory, Teddington 2009.
4. International Atomic Energy Agency: Reference sheet. Reference material IAEA-375 Vienna : IAEA (2000).
5. Pham M. K., La Rosa J., Lee S.-H., Povinec P. P.: Report on the worldwide intercomparison. Monaco : IAEA–MEL (2004).

4P-04

SNÍŽENÍ RADIČNÍ CITLIVOSTI BUNĚK OZÁŘENÝCH UV ZÁŘENÍM POMOCÍ VYCHYTÁVAČŮ OH RADIKÁLŮ

BARBORA NEUŽILOVÁ, VILIAM MÚČKA

ČVUT v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Katedra jaderné chemie, Břehová 7, 115 19 Praha 1, Česká republika
b.neuzilova@gmail.com

Živé organismy tvoří zhruba z 80 % voda. Jejich ozařováním ionizujícím zářením dochází k radiolýze vody a vzniku OH radikálů, které jsou pro živé buňky toxické. Mezi vychytávače těchto radikálů patří například methanol a ethanol, které snižují radiační citlivost buněk¹.

Tato studie se zabývá mírou snížení radiační citlivosti kvasinek *Saccharomyces cerevisiae* DBM 272 ozářených UV zářením vychytáváním hydroxylových radikálů methanolem a ethanolom. Ozáření bylo charakterizováno nominálními dávkami, které se pohybovaly v intervalu 1–3,5 Gy a dávkovou rychlostí 45,6 Gy/h vztaženou na jodid/jodičnanový aktinometr. Jako zdroj UV záření sloužila nízkotlaká rtuťová výbojka Philips TUV 11W, UV Technik Meyer, GmbH. Míra ochrany buněk vychytáváním OH radikálů byla definována jako směrnice závislosti poměru přirozených logaritmů frakcí přeživších buněk bez

vychytávače a s vychytávačem na vychytávací účinnosti vychytávače.

Bylo prokázáno, že ochranný účinek způsobený vychytáváním OH radikálů roste lineárně s vychytávací účinností vychytávače a nezávisí na dávce UV záření. Dále lze konstatovat, že methanol se zdá být účinnějším protektorem než ethanol, podobně jak tomu bylo při ozařování živé kultury zářením gama².

Tato práce vznikla za podpory grantu SGS14/207/OHK4/3T/14.

LITERATURA

1. Můčka V., Bláha P., Čuba V., Červenák J.: Int. J. Radiat. Biol. 89, 1045 (2013).
2. Neuzilová B.: *Bakalářská práce*, Praha (2015).

4P-05

VLIV VYCHYTÁVAČŮ OH RADIKÁLŮ NA RADIČNÍ CITLIVOST BUNĚK ZA RŮZNÝCH OZÁŘOVACÍCH PODMÍNEK

LUKÁŠ ONDRÁK, VILIAM MÚČKA

ČVUT v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Katedra jaderné chemie, Břehová 7, 115 19 Praha 1, Česká republika
ondraklukas@gmail.com

Vliv ionizujícího záření na živé buňky lze ovlivnit mnoha parametry, mezi které patří i dávkový příkon ionizujícího záření¹.

Předložená práce byla zaměřena na studium závislosti míry snížení radiační citlivosti bakterie *Escherichia coli* DBM 3125 vychytáváním OH radikálů na dávkové rychlosti gama záření. Použitým vychytávačem OH radikálů byl ethanol. Jako zdroje gama záření byla použita dvě zařízení s radionuklidem ⁶⁰Co, a to Gamacell 220, který bylo možné použít do dávkové rychlosti 45,1 Gy/hod, a Chisostat pro aplikaci vyšších dávkových rychlostí. Aplikované dávkové rychlosti byly 1,8; 12,6; 17,2; 30,3; 33,2; 45,1; 60,0 a 75,0 Gy/hod. Naměřené hodnoty při těchto dávkových rychlostech byly konfrontovány s dřívějšími daty získanými při dávkových rychlostech 30,0; 54,0 a 70 Gy/hod. Taktéž byl orientačně prověřen možný vliv hypotermie na ochranný účinek vychytávače. Ochranný účinek vychytávače založený na vychytávání OH radikálů byl definován jako směrnice *k* závislosti poměru přirozených logaritmů frakcí přeživších buněk bez vychytávače a s vychytávačem, na vychytávací účinnosti vychytávače.

Bylo zjištěno, že veličina *k* lineárně roste s dávkovou rychlostí v celém měřeném intervalu dávkových rychlostí a nezávisí na dávce. Dále bylo zjištěno, že hypotermie (2 hodiny při 0 °C) neovlivní hodnotu ochranného účinku *k*. Naměřené výsledky vykazovaly dobrou opakovatelnost i reprodukovatelnost.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 13-28721S.

LITERATURA

1. Můčka V., Bláha P., Čuba V., Červenák J.: *Int. J. Radiat. Biol.* 89, 1045 (2013).

4P-06

VPLYV MATRICE NA STANOVENIE NÍZKYCH KONCENTRÁCIÍ URÁNU METÓDOU TRLFS

IVAN HUPKA, ALENA ZAVADILOVÁ, BARBORA DRTINOVÁ

*České vysoké učení technické v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Břehová 7, 115 19 Praha 1, Česká republika
hupkaiva@fffi.cvut.cz*

Časovo rozlíšená laserom indukovaná fluorescenčná spektroskopia (TRLFS) je rýchla a citlivá metóda vhodná i na stanovenie nízkych koncentrácií prvkov v roztoku, ktorých študované formy vykazujú po ožiarení luminiscenčné vlastnosti (v praxi sa jedná hlavne o lantanoidy a aktinoidy – Eu, U, Am apod.). V rámci stanovenia koncentrácie uránu bolo vo výskume pre dosiahnutie lepších luminiscenčných vlastností použité jednak komerčne dostupné komplexačné činidlo Uraplex®, ale i kyselina fosforečná. Ich úlohou je fixovať urán v jednom, fosforečnanovom komplexe, ktorý má dlhú dobu luminiscencie a znížiť tak celkový efekt matrice na stanovenie koncentrácie. Zásobné roztoky boli tvorené dusičnanom, chloridom alebo síranom uranylu o koncentracii 100 µg U/l a to v kyseline dusičnej alebo sírovej. pH roztokov sa pohybovalo v rozmedzí 1,35–1,43. Urán sa za týchto podmienok nachádza v oxidačnom stave +6 vo forme uranylu. Intenzita luminiscencie a doba dosvitu boli študované v rôznych zloženiach roztoku a to bez alebo v prítomnosti matrice (Na⁺, NO₃⁻, Cl⁻) s cieľom určiť mieru vplyvu stanovenej koncentrácie U použitím komplexačných činidiel v prítomnosti matrice. Vlnová dĺžka budiaceho žiarenia bola s ohľadom na absorpčné vlastnosti uranylu 418 nm.

V tabuľke I sa nachádzajú experimentálne získané doby dosvitu uranylového komplexu v kyseline dusičnej za použitia H₃PO₄ v prítomnosti vybranej matrice. Z tabuľky je zrejmé, že chloridová matrica (Cl⁻ ióny) spôsobuje zhášanie luminiscenčného signálu.

Tabuľka I

Dosvit UO₂²⁺ v UO₂(NO₃)₂ v HNO₃ za prídavku H₃PO₄ v rôznych matriciach

Matrica	$\tau \pm s$ [µs]
—	94,4 ± 1,9
NaNO ₃	92,1 ± 1,6
NaCl	0,50 ± 0,02
	2,37 ± 0,01

Kombináciou solí uranylu, použitých kyselín a komplexačných činidiel s matricami boli stanovené koncentrácie uránu v závislosti na intenzite luminiscenčného signálu ako i doby života vytvoreného komplexu.

4P-07

NÁROKY NA AKREDITOVANÉ LABORATÓRIUM MERANIA AKTIVITY

LADISLAV RÁBARA, PETER CHNAPKO, MIROSLAV PRAŽSKÝ

*WERT s.r.o., Jerichova 4, 917 01 Trnava, Slovensko
wert@wert.sk; www.wert.sk*

V súvislosti s postupujúcim trendom globalizácie a zaradením sa Slovenska do Európskej únie sa zvyšujú nároky na kvalitu práce a jej garanciu. Aj rádiochemické laboratóriá, ktoré chcú byť garantom kvalitne vykonaných rádiochemických analýz, musia pracovať na základe uznávaných medzinárodných štandardov a v optimálnom prípade so zavedeným systémom manažérstva kvality^{1,2}. Ich kompetentnosť má byť posúdená nezávislou inštitúciou, tzv. treťou stranou, ktorou je obvykle národný akreditačný orgán, ktorým je u nás Slovenská národná akreditačná služba (SNAS).

Tento príspevok si kladie za cieľ poskytnúť prehľad o nárokoch kladených na kontrolu kvality (QA) v akreditovanom rádiochemickom laboratóriu. Taktiež berie na zreteľ požiadavky zákazníkov (nielen zo Slovenska a Českej republiky ale aj iných krajín EÚ) týkajúce sa rozsahu rádiochemických analýz. Tieto požiadavky totiž určujú rádiochemickému laboratóriu prípadnú nutnosť zmeny v rozsahu akreditácie.

Z niekoľkoročnej štatistiky vyplýva, že na zabezpečenie kvality skúšok (rádiochemických analýz) AL vykoná cca 30 % zo zaznamenaných meraní v príslušnom roku. Táto skutočnosť a požiadavka na vysoko-kvalifikovaný personál, či kvalita používaných chemikálií (a mnoho ďalších požiadaviek vyplývajúcich z normy STN EN/IEC 17025:2005) v AL, tak približuje prípadnému zákazníkovi o výkon akreditovanej skúšky nákladnosť objednaných analýz.

V príspevku je ďalej štatisticky je spracovaných 5 rokov meraní vzoriek rôzneho pôvodu a matrice so zameraním sa na požiadavky zákazníka a ich premietnutie v rozsahu akreditácie AL.

LITERATÚRA

1. STN EN ISO 17025:2005
2. STN EN ISO 9001:2001
3. SM04 Zabezpečenie kvality skúšok
4. Príručka kvality IMS WERT, s.r.o.

4P-08**NANOHYBRID SYSTEMS BASED ON SCINTILLATING NANOPARTICLES FOR X-RAY INDUCED PHOTODYNAMIC THERAPY****KSENIYA POPOVICH^a, LENKA PROCHÁZKOVÁ^a, IVETA TEREZIE PELIKÁNOVÁ^a, VÁCLAV ČUBA^a, VÍTĚZSLAV JARÝ^b, MARTIN NIKL^b, MARTIN VLK^a**

^a Czech Technical University in Prague, Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, Břehová 7, 115 19 Prague, ^b Institute of Physics of the AS CR, Cukrovarnická 10, 162 53 Prague, Czech Republic
popovich.xenie@gmail.com

X-ray induced photodynamic therapy (PDTX) is a novel method for cancer treatment. It uses composite nanomaterials, based on the nanoparticles conjugated with a photosensitizer molecule, as a tumor-destroying agent. The PDTX agent accumulates preferentially in target cells; subsequently the external X-ray irradiation excites the scintillating nanoparticles which emit secondary radiation and activate photosensitizer (PS) molecules. Their deexcitation via the non-radiative energy transfer leads to the production of reactive oxygen species (ROS)¹.

This work presents a proof-of-concept of the development of luminescent nanocomposite materials based on CeF₃:Tb³⁺, ZnO:Ga, ZnCdO:Ga and LuAG:Pr³⁺. The nanoparticles were modified with SiO₂ amorphous layer using reaction of polycondensation between tetraethyl orthosilicate (TEOS) and (3-aminopropyl)triethoxysilane (APTES) and biofunctionalized with protoporphyrin IX (PpIX) photosensitive molecule. The results of successful surface modification and biofunctionalization were confirmed by X-ray diffraction (XRD) and Fourier Transform Infrared (FTIR) spectroscopy. Due to the changes observed in radioluminescence (RL) spectra, it can be assumed that in some cases² an energy transfer from nanoparticles core to the porphyrin outer layer occurs, which is a basic requirement for singlet oxygen generation.

This work has been supported by Czech Science Foundation, project GA13-09876S and by the Grant agency of the Czech Technical University in Prague, grant No. SGS14/207/OHK4/3T/14.

REFERENCES

1. Chen W., Zhang J.: *J. Nanosci. Nanotechnol.* 6, 1159 (2006).
2. Popovich K., Procházková L., Pelikánová I. T., Vlk M., Palkovský M., Jarý V., Nikl M., Múčka V., Mihóková E., Čuba V.: *Radiat. Meas.* 90, 325 (2016).

4P-09**CHARAKTERIZACE CEMENTOVÉHO KAMENE CEM II POMOCÍ VYBRANÝCH ANALYTICKÝCH METOD A SORPCE STRONCIA****JANA KITTNEROVÁ, BARBORA DR TINOVÁ, DUŠAN VOPÁLKA**

ČVUT v Praze, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, Katedra jaderné chemie, Břehová 7, 115 19 Praha 1, Česká republika
jana.kittnerova@fffi.cvut.cz

V souvislosti s českým projektem hlubinného úložiště radioaktivního odpadu pod vedením SÚRAO a evropským projektem CEBAMA (CEment BAsed MATerials) je studován cementový kámen CEM II/A-S 42,5 R pomocí různých analytických metod a také pomocí sorpce stroncia. Stroncium zde slouží jako analog radia¹, sorpční experimenty s radiem naváží na provedenou studii.

Materiál použitý k analýzám a sorpci je nadrcený cementový kámen (frakce ≤ 0,71 mm) připravený z cementu CEM II/A-S 42,5 R v poměru voda/cement = 0,667. Mezi provedené analýzy patří např. rentgenová difrakce, která v použitém materiálu odhalila čtyři sloučeniny: kalcit, portlandit, hydrotalcit a ettringit. Výskyt ettringitu pravděpodobně souvisí s nedokončenou hydratací, která byla v prostředí 100% vlhkosti vedena pouze 19 dní, místo obvyklých nejméně 28 dní. Z méně používaných metod byla provedena rovněž analýza IR. Na základě stanovení kationtů ve výluhu metodou AAS se ukázalo, že samotný cement obsahuje Sr (3,5·10⁻⁴ M).

Sorpční experiment byl proveden kontaktováním drceného cementu a výluhu ze stejného cementového materiálu v poměru fází m/V = 1:100 až 1:3 s různou počáteční koncentrací stroncia (3,5·10⁻⁴ až 2·10⁻³ M). Sledování sorpce bylo prováděno pomocí úbytku aktivity ⁸⁵Sr v roztoku pomocí studnového detektoru NAI(Tl).

Sorpční experimenty ukázaly dobu potřebnou k ustavení rovnováhy odpovídající přibližně 30 hodinám pro všechny poměry fází. Získané výsledky závislosti nasorbovaného množství stroncia na koncentraci stroncia v roztoku jsou nejlépe proložitelné K_d-modelem, ve srovnání s proložením Langmuirovou nebo Freundlichovou izotermou. Distribuční koeficient systému cement – stroncium byl stanoven jako K_d = 16,19 ± 4,03 l/kg.

LITERATURA

1. Tits J., Wieland E., Müller C. J., Landesman C., Brandbury M. H.: *J. Colloid Interface Sci.* 300, 78 (2006).

4P-10 VYUŽITÍ IONTOVÝCH KAPALIN PRO DEKONTAMINACI RADIOAKTIVNÍCH ODPADŮ

MARTIN STRAKA, LORANT SZATMÁRY

ÚJV Řež, a.s., Hlavní 130, Husinec-Řež, 250 68, Česká republika
Martin.Straka@ujv.cz

Iontové kapaliny jsou uvažovány jako alternativa pro v současnosti používané systémy v procesech přepracování vyhořelého jaderného paliva a dekontaminace/recyklace materiálů kontaminovaných radionuklidů. Díky svým vhodným fyzikálně-chemickým vlastnostem (nehořlavost, nízká tenze par, vysoká termální, elektrochemická i radiolytická stabilita, dostatečná elektrická vodivost, materiálová kompatibilita, ...) by mohly iontové kapaliny nahradit v současnosti používanou organická rozpouštědla a představují též alternativu k vysokoteplotním systémům roztavených solí studovaných v rámci vývoje procesů přepracování vyhořelého jaderného paliva^{1,2}. Motivace pro vývoj procesů recyklace založených na iontových kapalinách je environmentální (snížení pravděpodobnosti průniku radionuklidů do životního prostředí), společenská (pozitivnější vnímání průmyslových odvětví využívajících radioaktivní látky, především jaderné energetiky) a ekonomická (výrazné snížení nákladů na ukládání radioaktivních odpadů). Elektrochemické separace z prostředí iontových kapalin jsou v tomto kontextu jedním z nejvíce studovaných procesů. V předkládaném příspěvku je shrnut dosavadní průběh projektu vývoje recyklačního schématu pro recyklaci kontaminovaných materiálů (viz Schéma 1).

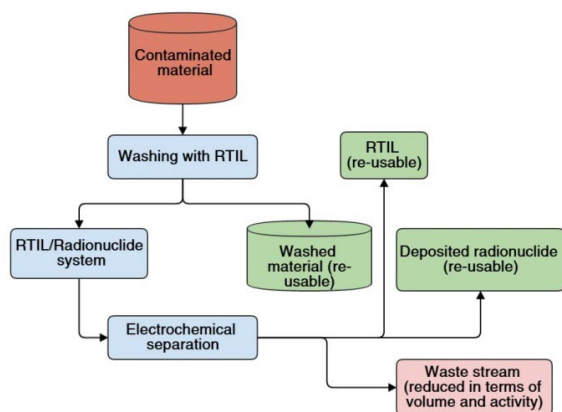


Schéma 1. Obecná podoba procesu pro recyklaci kontaminovaných materiálů³

Prezentovány jsou výsledky studia chování uranu, thoria a europia v iontových kapalinách zahrnující proces rozpouštění konkrétních sloučenin uvedených prvků a jejich elektrochemického chování včetně studia elektrochemické depozice na pevné elektrody (viz Schéma 2). V rámci projektu byly studovány iontové kapaliny s alkylimidazoliovými kationty, kationty typu butyl-methylammonium a anionty typu $[Cl]^-$, $[BF_4]^-$, $[PF_6]^-$, bis(trifluoromethylsulfonyl)imide

a trifluoromethylsulfonát. Z výsledků je patrné, že některé iontové kapaliny mají dostatečně široké potenciálové okno pro přímou elektrochemickou depozici a jsou schopny rozpustit sloučeniny radionuklidů.

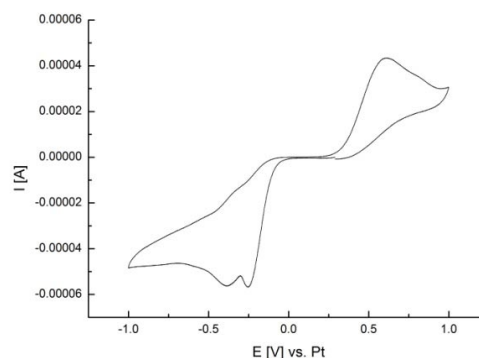


Schéma 2. Cyklický voltamogram systému 1-ethyl-3-methylimidazolium chlorid / UF4 při 80 °C na Pt pracovní elektrodě

Tato práce vznikla za podpory grantu TAČR TH01020381.

LITERATURA

1. Rogers R. D., v knize: *Green Industrial Applications of Ionic Liquids*, s. 209, NATO Science Series, Kluwer, Dordrecht 2002.
2. Plechkova N., Seddon J.: *Chem. Soc. Rev.* 37, 123 (2008).
3. Straka M., v knize: *Green Processes*, De Gruyter, Berlin 2017 (to be published).

4P-11 CHARAKTERIZACE FLUORITŮ A UMĚLECKÝCH PIGMENTŮ S FIALOVÝM FLUORITEM NEUTRONOVOU AKTIVAČNÍ ANALÝZOU

JIŘÍ MIZERA^a, RADKA ŠEFCŮ^b, DAVID KOLOUŠEK^c

^a Ústav jaderné fyziky AV ČR, v.v.i., Hlavní 130, 250 68 Řež,
^b Národní galerie v Praze, Chemicko-technologická laboratoř,
Staroměstské nám. 12, 110 15 Praha 1, ^c VŠCHT v Praze,
Ústav chemie pevných látek, Technická 5, 166 28 Praha 6,
Česká republika
mizera@ujf.cas.cz

Použití fialového fluoritu jako uměleckého pigmentu v malbě a polychromii sochařských děl v památkovém fondu České republiky je vázán k poměrně krátkému období pozdní gotiky a rané renesance na přelomu 15. a 16. století. Fialový fluorit se ve vrstvách malby vyskytuje od světlejších odstínů až po tmavý černofialový fluorit, známý též jako antozonit, či pod historickým německým názvem „Stinkspat“¹⁻⁴. Zdroje fluoritu použitého jako pigmentu v uměleckých dílech nebyly dosud jednoznačně určeny. V daném historickém období připadá v úvahu řada nalezišť ve střední Evropě včetně domácích (např. Jáchymov), nejpravděpodobnější jsou

však vzhledem k výskytu specifického antozonitu naleziště v Nabburgu-Wölsendorfu v jihovýchodním Německu⁵.

V prezentované studii byly použity metody instrumentální neutronové aktivační analýzy k charakterizaci souboru pigmentů s obsahem fialového fluoritu, odebraných z uměleckých děl ze sbírek Národní galerie v Praze. Stejnými metodami byl charakterizován i soubor fialových fluoritů ze sbírek VŠCHT, obsahujícího kromě fluoritů z Nabburgu a Wölsendorfu fluorit z Castleton, Derbyshire v Anglii a domácí fluority z Teplicka a Sokolovska. Jednoznačná interpretace výsledků byla komplikována převládajícím obsahem dalších pigmentů kromě fluoritu v odebraných vzorcích maleb, značnou variabilitou složení studovaných fluoritů i v rámci jednoho naleziště, i poměrně vysokou nejistotou stanovení řady prvků ve velmi malých vzorcích (0,1–2 mg) poskytnutých pro analýzu. Indikátorem původu fluoritů ve studovaných vzorcích maleb z nalezišť v Nabburgu-Wölsendorfu by mohl být vyšší obsah uranu při současném nižším obsahu thoria.

Tato práce vznikla v rámci infrastruktury CANAM, podpořené projektem MŠMT č. LM2011019, a v rámci grantového projektu NAKI MK ČR, DF13P010V01.

LITERATURA

1. Richter M., Fuchs R.: *Restauro* 5, 316 (1997).
2. Spring M.: *Nat. Gal. Tech. Bull.* 21, 20 (2000).
3. Richter M., Hahn O., Fuchs R.: *Stud. Conserv.* 46, 1 (2001).
4. Chlumská Š., Šefců R., Třeštíková A., Pechová D.: *Acta Artis Academica*, Praha, 165 (2010).
5. Dill H. G., Weber B.: *Ore Geol. Rev.* 37, 65 (2010).

4P-12

EFFECT OF SELECTED PARAMETERS ON RADIATION INDUCED PEROXIDATION OF MONOUNSATURATED PHOSPHOLIPID

KATEŘINA TOMANOVÁ^a, LUDĚK VYŠÍN^b, VÁCLAV ČUBA^a

^a*Czech Technical University in Prague, Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, Břehová 7, 115 19 Prague.* ^b*Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, Na Slovance 1999/2, 182 21 Prague, Czech Republic*
tomanka2@fffi.cvut.cz

According to the target theory, cell membranes have been recognized as one of the most vital targets for the action of ionizing radiation¹. The formation of lipid hydroperoxides is believed to proceed via radical chain reaction induced by OH· radicals from water radiolysis^{1–5}. The course of the reaction involves a conversion of the phospholipid radical from the initiation step to the peroxy radical by a presence of the molecular oxygen and a final transfer of its unpaired electron to the neighbouring phospholipid.

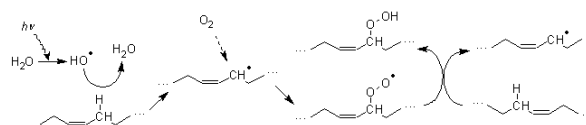


Fig. 1. Radiation induced phospholipid peroxidation

The aim of this work has been to study the peroxidation of the dioleoyl-phosphatidylcholine (DOPC) induced by ionizing radiation under various experimental conditions. Cell-like phospholipid vesicles were prepared to serve as a model structures for biological membranes. Protons and gamma radiation were chosen due to their different radiation qualities and their application in radiotherapy. The results are expressed as radiation chemical yields of the lipid peroxides.

The results show that for protons, radiation chemical yields of lipid hydroperoxides increase with decreasing dose rate, while for gamma radiation the yields of lipid hydroperoxides decreased with decreasing dose rate. It is shown that radiation chemical yield of the peroxidation product is directly proportional to the oxygen saturation in the irradiated solution. This can be an important result when concerning the radiation therapy, as the tumour cells are usually hypoxic⁶.

This work was supported by GAČR 302-3021310D.

REFERENCES

1. Petkau A.: *Acta Physiol. Scand. Suppl.* 492, 81 (1980).
2. Stark G.: *J. Lipid Res.* 26, 1015 (1991).
3. Raleigh J. A., Kremers W., Gaboury B.: *Int. J. Rad. Biol.* 31, 203 (1977).
4. Yau T. M., Mencl J.: *Int. J. Rad. Biol.* 40, 47 (1981).
5. Metwally M. M. K., Moore J. S.: *Int. J. Rad. Biol.* 52, 253 (1987).
6. Michieli P.: *Cell Cycle* 8, 3291 (2009).

5L-01 FLUORESCENT NANODIAMONDS AS NON- PHOTOBLEACHABLE RESPONSIVE PROBES

PETR CÍGLER

*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry AS CR,
v.v.i., Flemingovo nám. 2, 166 10 Prague 6, Czech Republic
petr.cigler@uochb.cas.cz*

Fluorescent nanodiamonds (FNDs) represent a key component in recent development of ultra-high precision optical resolution techniques. FNDs can accommodate nitrogen-vacancy (NV) centers – an extremely photostable crystal lattice defect emitting in near-infrared region. Electron transitions among NV quantum states can be influenced by very weak external electric or magnetic fields, which have been utilized for construction of various types of probes and nanosensors. Utilization of these particles in sensing will be demonstrated as well as chemical aspects influencing interactions at their surface^{1–8}.

This work was supported by GAČR grant Nr. 16-16336S.

REFERENCES

- Havlik J., Raabova H., Gulka M., Petrakova V., Krecmarova M., Masek V., Lousa P., Stursa J., Boyen H.-G., Nesladek M., Cigler P.: *Adv. Funct. Mater.*, DOI: 10.1002/adfm.201504857 (2016).
- Petrakova V., Benson V., Buncek M., Fiserova A., Ledvina M., Stursa J., Cigler P., Nesladek M.: *Nanoscale*, DOI: 10.1039/C6NR00610H (2016).
- Stursa J., Havlik J., Petrakova V., Gulka M., Ralis J., Zach V., Pulec Z., Stepan V., Zargaleh S. A., Ledvina M., Nesladek M., Treussart F., Cigler P.: *Carbon* 96, 812 (2016).
- Rehor I., Lee K. L., Chen K., Hajek M., Havlik J., Lokajova J., Masat M., Slegerova J., Shukla S., Heidari H., Bals S., Steinmetz N. F., Cigler P.: *Adv. Healthcare Mater.* 4(3), 460 (2015).
- Slegerova J., Hajek M., Rehor I., Sedlak F., Stursa J., Hruby M., Cigler P.: *Nanoscale* 7, 415 (2015).
- Rehor I., Slegerova J., Kucka J., Proks V., Petrakova V., Adam M.-P., Treussart F., Turner S., Bals S., Sacha P., Ledvina M., Wen A. M., Steinmetz N. F., and Cigler P.: *Small* 10(6), 1106 (2014).
- Rehor I., Mackova H., Filippov S. K., Kucka J., Proks V., Slegerova J., Turner S., Vandeloo G. V., Ledvina M., Hruby M., Cigler P.: *ChemPlusChem* 79(1), 21 (2014).
- Havlik J., Petrakova V., Rehor I., Petrak V., Gulka M., Stursa J., Kucka J., Ralis J., Rendler T., Lee S.-Y., Reuter R., Wrachtrup J., Ledvina M., Nesladek M., Cigler P.: *Nanoscale* 5, 3208 (2013).

5L-02 RAMAN ANALYSIS OF GRAPHENE

PAULINA FILIPCZAK^{a,b}, MARCIN KOZANECKI^a

^a *Department of Molecular Physics, Lodz University of Technology, Zeromskiego 116, 90-924 Lodz, Poland,*
^b *Student Section of Polish Chemical Society
paulina.filipczak@dokt.p.lodz.pl*

Graphene is a 2-dimensional building block for other carbon allotrope forms of every other dimensionality. Graphene sheets could be stacked forming 3-dimensional graphite structure or be rolled in single or multiwalled 1-dimensional carbon nanotubes, or raveled in 0-dimensional fullerene structure^{1,2}. Because of graphene extra-ordinary properties, like high electric conduction, high strength and others it may find application in electronics, sensors and energy storage³.

To make the most of graphene materials potential, there has to be complex analysis of its structure, interactions inside the structure and also with the other materials. A key requirement for carbon research and applications is the ability to identify and characterize all the members of the carbon family, both at the lab- and at mass-production scale. To be appealing, a characterization tool must be nondestructive, fast, with high resolution and give the maximum structural and electronic information. Raman spectroscopy is non-invasive analytical technique, which may provide a lot of information about structure and interactions, what makes it popular method of analysis in case of carbon materials¹.

The main features in the Raman spectra of carbons are the so-called *G* and *D* peaks, which lie at around 1560 and 1360 cm^{-1} respectively. Also important is overtone of *D* peak – 2*D* peak, which is at around 2700 cm^{-1} . This last band is always observed in graphite samples, thus is also present in graphene. Comparison of graphite and graphene Raman spectra in the range of 2*D* band is presented in Figure 1. Changes in peak position and band shape are prominent.

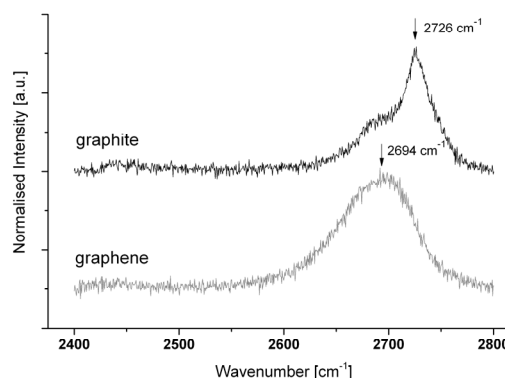


Fig. 1. Raman spectra of graphene and graphite in the range of 2*D* peak

2*D* band evolves in a function of the number of graphene layers in the sample. Thus Raman spectroscopy can clearly identify a single layer, from bi-layer from few (less

than five) layers. For more than five layers the Raman spectrum becomes hardly distinguishable from that of bulk graphite¹.

Results of Raman analysis of commercially available graphene, graphite and carbon foam samples will be presented.

The authors wish to thank Mr Zbigniew Sieradzki and Electrotechnological Company QWERTY Ltd. for graphene samples.

REFERENCES

1. Ferrari A. C.: Solid State Communications 143, 47 (2007).
2. Ferrari A. C. *et al.*: Physical Review Letters 97, 187401 (2006).
3. Ray S. C., in book: *Application of Graphene and Graphene-Oxide Based Nanomaterials*, p. 1–38. Elsevier, 2015.

5L-03

BIOSENZORY NA BÁZE MODIFIKOVANÉHO GRAFÉNU OXIDU

**NIKOLA BUGÁROVÁ^a, ZDENKO ŠPITÁLSKÝ^a,
PĚTER ŠIFFALOVIČ^b, MICHAL BODÍK^b,
MARTINA KONERACKÁ^c, MIRIAM ZAŤOVIČOVÁ^d,
MÁRIA OMASTOVÁ^a**

^a Ústav polymérov, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava,

^b Fyzikálny ústav, Dúbravská cesta 9, 845 11 Bratislava,

^c Ústav experimentálnej fyziky, Watsonova 47, 040 01 Košice,

^d Virologický ústav, Dúbravská cesta 9, 845 05 Bratislava, Slovensko

nikola.bugarova@savba.sk

V dnešnej dobe sú intenzívne študované biosenzory na báze grafénu (G) pre jeho pozoruhodné fyzikálne, chemické a mechanické vlastnosti. Spoľahlivosť, vysoká citlivosť a ultrarýchla odozva biosenzorov je zabezpečená hlavne hydrofilným charakterom grafénu oxidu (GO) tvoriaceho nanoplatformu senzoru. Hrúbka GO v subnanoškále a povrchová kompatibilita s rôznymi biologickými materiálmi ho robí vhodným stavebným blokom na vývoj nových senzorov. Veľkosť platničiek GO v rozpätí od mikrónov k 100 nm, zohráva dôležitú úlohu pri transporte cez biologické bariéry akými je aj nádorové tkanivo^{1,2}. Pripravovaný GO biosenzor je modifikovaný vhodnou protilátkou na vyhľadávanie nádorových hypoxických buniek a superparamagnetickými nanočasticami.

GO bol pripravený exfoliáciou grafitu s priemerom častíc 5 μm. Následne bol čiastočne redukovaný tak, aby sa zachovali funkčné skupiny. Základná charakterizácia prebiehala pomocou röntgenovej fotoelektrónovej spektroskopie (XPS). Veľkosť pripravených GO nanočastíc sa následne redukovala pomocou vysokorychlostného mixovania a následnej centrifugácie. Pripravené GO nanoplatformy s najvyššou početnosťou mali laterálnu veľkosť cca. 180 nm a použili sa na ďalšie modifikovanie. Sféricke superparamagnetické nanočastice (MNps)

s priemerom častíc 10 nm sa pripravili chemickou zrážacou reakciou železných a železitých solí v alkalickom médiu. Superparamagnetické nanočastice (MNps), ktorých stredný priemer je 10 nm, boli obalené aminokyselinami tak, aby boli schopné reagovať s GO.

GO s MNps sa modifikoval prídavkom samotného 1-etyl-3-(3-dimetylaminopropyl)karbodiimid (EDC) ale aj kombináciou EDC s *N*-hydroxysulfosukcinimidom (NHS), kedy sa pH upravovalo prídavkom kyseliny 4-morfolinopropánsulfónovej (MOPS) a dvoma komerčnými puframi: Sentron a Hanna. Optimálne modifikácie sa dosiahli reakciou samotného EDC ale aj reakciou systému EDC s NHS s komerčným puframi Sentron, pričom sa využili v nasledujúcich krokoch.

Detailný mechanizmus biosenzora je založený na molekulárnom rozpoznávaní a interakcii antigén-protilátka. Preto sa v ďalších krokoch skúma najvhodnejší spôsob naviazania monoklonálnej protilátky (MAb) na modifikovaný GO. MAb sú svojou podstatou proteíny, obsahujúce voľné NH₂ a COOH skupiny. Skupina COOH vytvorí väzbu s aminovými skupinami na povrchu MNps, ktoré budú napojené na GO alebo sa naviaže cez aminoskupiny linkeru naviazaného na redukovanom GO.

Ďalším krokom, bude štúdium účinkov modifikovanej GO-nanoplatformy na živých bunkách.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou pre výskum a vývojna na základe Zmluvy č. APVV-14-0120.

LITERATÚRA

1. Rao C. N. R., Sood A. K. (Eds.), v knihe: *Graphene synthesis, properties, and phenomena*, Wiley-VCH Verlag & Co., Germany 2013.
2. Zhang Y., Nayak T. R., Hong H., Cai W.: *Nanoscale* 4, 3833 (2012).

5L-04

KOMPOZITNÍ NANOVLÁKNA

JAN GRÉGR, STANISLAV NEVYHOŠTĚNÝ, KAREL HAVLÍČEK, EVA KUŽELOVÁ-KOŠŤÁKOVÁ

Technická Univerzita v Liberci, Studentská 1402/2, 461 17

Liberec 1, Česká republika

jan.gregr@tul.cz

Pod pojmem kompozitní nanovlákná chceme představit polymerní nanovlákná s částicemi anorganických sloučenin. Nanovlákná jsme připravovali z různých polymerů a rozpouštědel. Vkládání anorganických sloučenin můžeme rozdělit na systémy, kde je anorganická látka prakticky molekulárně rozptýlena v polymerní hmotě a na systémy, kde jsou inkorporovány nanočástice anorganických sloučenin. Možnost přípravy a stability vzniklých kompozitních nanovláken je ovlivněna řadou fyzikálně chemických vlastností všech složek – tedy polymeru, anorganické sloučeniny i rozpouštědla, ze kterého provádíme zvláknování. Základním parametrem pro vytvoření kvalitních nanovláken je schopnost vzájemné povrchové interakce zúčastněných materiálů. Pro přípravu nanovláken jsme používali především

elektrospinning, potom tedy hrály důležitou roli i elektrické vlastnosti a viskozita použitých směsí. Pro kvalitu a budoucí využití produktů jsou významné i velikosti a koncentrace částic, biokompatibilita složek.

Cílové uplatnění studovaných materiálů je především v biomedicíně, hledání materiálů pro zeslabení účinků ionizujícího záření, magnetické materiály a senzory v nanorozměrech.

Tato práce vznikla za podpory grantu SGS TUL 21115.

LITERATURA

1. Jirsák O. et. al. : US Patent 2005 Wo 2005024101.
2. Barakat N. A. M. et. al.: Chem. Eng. J. 156, 487 (2010).
3. Kostakova E., Meszaros L., Gregr J.: Mater. Lett. 63, 2419 (2009).
4. Havlíček K., Kuželová-Košťáková E., Kejzlar P.: Nanofibers with Magnetic Properties. NANOCON 2015 Conference Proceedings, pp. 302–308, Brno 19.–21.10.2015
5. Nevyhosteny S., Gregr J., Kostakova E.: The incorporation of insoluble inorganic particles into polymeric nanofibers. 6th NANOCON 2014, Conference proceedings pp. 411–416, Brno, 5.–7.11. 2014

5L-05

PLASMONIC BIOSENSORS AND THEIR APPLICATIONS

JIRÍ HOMOLA

*Institute of Photonics and Electronics of the CAS, Chaberská 57, 182 51 Prague, Czech Republic
homola@ufe.cz*

The need for rapid and sensitive detection of chemical and biological species exists in numerous important fields, including medical diagnostics, environmental monitoring, food safety and security. This continuously growing demand stimulates research and development of new analytical technologies. The last two decades have witnessed tremendous effort towards development of biosensors based on optical methods (optical biosensors). Optical biosensors based on surface plasmons (sometimes referred to as surface plasmon resonance biosensors) represent the most advanced and mature optical label-free biosensor technology.

This paper reviews the present state of the art in the development of plasmonic biosensors and reports on selected results of research into plasmonic biosensors of Optical Biosensors research group at the Institute of Photonics and Electronics. The research into optical biosensors encompasses efforts in multiple areas. In this paper, several specific developments illustrating research efforts on various fronts will be presented.

Advances in optical instrumentation for plasmonic biosensors, including high-throughput plasmonic sensors for parallelized investigation of molecular interactions and compact optical platforms for the rapid and sensitive detection of chemical and biological analytes in the field, will be presented. Transport of target molecules in microfluidic

systems of plasmonic biosensors and effects of transport on performance of plasmonic biosensors will be also discussed. In addition, attention will be given to functional coatings for plasmonic nanoparticles and (nano)structures, in particular to new functional coatings based on polymer brushes with ultrahigh resistance to fouling from complex biological media. Advanced methodologies for the detection of extremely low levels of molecular analytes in biological samples (e.g. new referencing and amplification strategies) will be also discussed. Finally, examples of applications of plasmonic biosensors for the detection of analytes related to medical diagnostics (microRNA and protein biomarkers) and food safety (foodborne pathogens and toxins) will be given.

This research was supported by Praemium Academiae of the Academy of Sciences of the Czech Republic and the Czech Science Foundation (contract # P205/12/G118).

5L-06

MAGNETICKY ASISTOVANÁ POVRCHEM ZESÍLENÁ RAMANOVA SPEKTROSKOPIE (MA-SERS) JAKO NÁSTROJ DETEKCE FYZIOLOGICKY AKTIVNÍCH SLOUČENIN

VÁCLAV RANC, ANNA BALZEROVÁ, ARIANA FARGAŠOVÁ, ZUZANA CHALOUPOKOVÁ, ZDENKA MEDŘÍKOVÁ, RADEK ZBOŘIL

*Regionální Centrum Pokročilých Technologí a Materiálů, Přírodovědecká Fakulta Univerzity Palackého, Olomouc, Česká republika
vaclav.ranc@upol.cz*

Současné trendy v oblastech lékařské diagnostiky, fyziologie a molekulární biologie vedou ke snaze vyvinout analytické procedury se schopností analyzovat stále nižší koncentrace sledovaných látek často ve velmi komplexních vzorcích. Jednu ze zajímavých alternativ k běžně využívaným přístupům patří i magneticky asistovaná povrchem zesílená Ramanova spektroskopie (MA-SERS)^{1,2}.

Metody založené na MA-SERS využívají nanokompozity magnetických nanočástic oxidů železa a nanočástic ušlechtilých kovů; povrch nanokompozitu je dále funkcionizován pomocí vhodných selektorů. Analyt je v rámci analýzy ze složité matrice nejprve izolován pomocí externího magnetického pole a následně detekován povrchem zesílenou Ramanovou spektroskopií.

V rámci této práce byl přístup úspěšně aplikován například v analýze dopaminu³, imunoglobulinu G⁴, nukleových kyselin a PSMA. Limity detekce vyvinutých metod se pohybují řádově na úrovni jednotek až desítek ng l⁻¹.

Tato práce vznikla za podpory grantu LO1305 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

LITERATURA

1. Shi Z., Wang T., Lin H., Wang X., Ding J., Shao M.: Nanoscale 5, 10029 (2013).
2. Song J., Duan B., Wang C., Zhou J., Pu L., Fang Z., Wang P., Lim T. T., Duan H.: J. Am. Chem. Soc. 136,

- 6838 (2014).
- Ranc V., Markova Z., Hajduch M., Pucek R., Kvitek L., Kaslik J., Safarova K., Zboril R.: *Anal. Chem.* 86, 2939 (2014).
 - Balzerova A., Fargasova A., Markova Z., Ranc V., Zboril R.: *Anal. Chem.* 86, 11107 (2014).

5L-07**PLAZMONOVÉ NANOŠTRUKTUROVANÉ POVRCHY
PRIPRAVENÉ KOLOIDNOU LITOGRAFIU**

ONDREJ PETRUŠ^a, ANDREJ ORIŇÁK^a, RENÁTA ORIŇÁKOVÁ^a, ZUZANA ORSÁGOVÁ KRÁLOVÁ^a, KAROL KOVAL^b, ERIKA MÚDRA^b, LENKA KVETKOVÁ^b, FRANTIŠEK LOFAJ^b

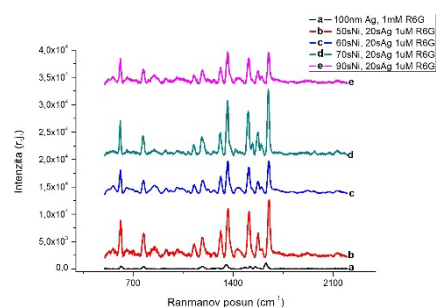
^a Katedra fyzikálnej chémie, PF UPJŠ v Košiciach, Moyzesová 11, 040 01 Košice, ^b Ústav materiálového výskumu, SAV, Watsonova 47, 040 01 Košice, Slovensko
ondrej.petrus@student.upjs.sk

Povrchom zosilnená Ramanova spektroskopía sa dnes v širokej miere využíva na charakterizáciu funkcionality plazmónových nanoštrukturovaných povrchov. Hlavnou charakteristikou je zosilnenie analytického signálu, čo v ideálnom prípade môže viesť k detekcii už jedinej molekuly¹. Nanokavitové substráty pripravené kombináciou koloidnej litografie a elektrochemickej depozície prinášajú výhody ako v jednoduchosti prípravy, homogenity povrchu, tak aj v reprodukovateľnosti výsledkov meraní. V našej práci sme sa zamerali na charakterizáciu nanokavit pripravených z koloidnej masky polystyrénových guľičiek s priemerom 500 nm a rozličnou hrúbkou depozitovaného Ni filmu. Takto pripravený nanoštrukturovaný povrch bol za účelom zosilnenia LSPR, elektrochemický modifikovaný vrstvou striebra, ktoré vykazuje lepšiu schopnosť vytvoriť LSPR. Ako modelový analyt bol použitý Rodamín 6G s koncentráciou 1.10^{-6} mol dm⁻³ pre nanoštrukturovaný povrch a 1.10^{-3} mol dm⁻³ pre referenciu, ktorá pozostávala zo 100 nm naprášaného striebra na kremíkovej podložke. Najvýznamnejšie zosilnenie analytického signálu bolo pozorované pre pás s vlnčtom 1125 cm^{-1} a dosahovalo hodnotu $4,58 \cdot 10^4$ pre nanokavitový povrch b). Porovnateľná hodnota zosilnenia signálu bola dosiahnutá pre povrch d), kde hodnota zosilnenia signálu bola $3,69 \cdot 10^4$. Povrchy c) a e) vykazujú skoro identické hodnoty a to $2,91 \cdot 10^4$ a $2,98 \cdot 10^4$. Rovnaký trend bol sledovaný aj pre pás s posunom 1309 cm^{-1} . Priemerné zosilnenie pre charakteristické píky Rodamínu 6G bolo pre povrch b) $1,94 \cdot 10^4$ c) $1,20 \cdot 10^4$ d) $1,75 \cdot 10^4$ e) $1,22 \cdot 10^4$. Pripravené nanoštrukturované povrchy budú ďalej testované na senzorké vlastnosti, ktoré môžu byť aplikované v biodiagnostike.

Táto práca vznikla za podpory VEGA1/0211/12, APVV-0280-11.

LITERATÚRA

- Liu H., Zhang L., Lang X., Yamaguchi Y., Iwasaki H., Inouye Y., Xue Q., Chen M.: *Sci. Rep.* 1, 1 (2011).



Obr. 1. SERS spektrá Rodamínu 6G na nanoštrukturovaných substrátoch pripravených koloidnou litografiou s rozličnou dobou vylučovania nílu a) referencia 100 nm Ag, b) Ni(50s)/Ag(20s), c) Ni(60s)/Ag(20s), d) Ni(70s)/Ag(20s), e) Ni(90s)/Ag(20s)

5L-08**BIOLOGICKÁ AKTIVITA NANOČÁSTIC STRĚBŘA:
HISTORIE, SOUČASNOST A PERSPEKTIVA**

ALEŠ PANÁČEK^a, MONIKA SMĚKALOVÁ^a, ŠÁRKA HRADILOVÁ^a, RENATA VEČEŘOVÁ^b, MILAN KOLÁŘ^b, ROBERT PRUCEK^a, LIBOR KVÍTEK^a, RADEK ZBORIL^a

^a Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 77146 Olomouc,
^b Ústav mikrobiologie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotinská 5, 77515, Olomouc, Česká republika
ales.panacek@upol.cz

Nanočástice stříbra, díky svým antimikrobiálním vlastnostem, patří mezi nejčastěji studovaný materiál ve vědeckém výzkumu¹ a zároveň mezi nejčastěji používaný nanomateriál v běžné praxi. Baktericidních účinků stříbra využívá lidstvo po staletí a např. sulfadiazin stříbrný je předepisován k eliminaci lokálních bakteriálních infekcí i v současné medicíně. Počátkem 20. století byly nanočástice stříbra ve formě koloidní disperze aplikovány v léčbě bakteriálních infekcí, nicméně s objevem penicilinu přestaly být dále využívány. V posledních 10 letech dochází k obnově zájmu o antibakteriální vlastnosti nanočástic stříbra díky narůstající rezistenci bakterií vůči antibiotikům. Téměř osmdesátiletá éra klasických antibiotik se díky odolnosti bakterií pravděpodobně blíží ke svému konci. Otázkou zůstává, jaká by mohla být role nanočástic stříbra právě v době bakteriální rezistence a v době hledání nové účinné látky. Varianta náhrady antibiotik nanočásticemi stříbra není příliš reálná vzhledem k jejich možným nežádoucím účinkům². Nicméně poslední vědecké výzkumy ukazují, že společný účinek velmi nízkých koncentrací nanočástic stříbra a klasických antibiotik by problém bakteriální rezistence mohl překonat a minimálně tak prodloužit éru užívání antibiotik³. Avšak vzhledem ke genetické výbavě bakterií společně s jejich schopností přizpůsobovat se negativním vlivům nesmíme podceňovat možnost tvorby bakteriální rezistence i vůči tak efektivnímu antibakteriálnímu činidlu, jakými jsou nanočástice stříbra. Do budoucna lze s největší pravděpodobností očekávat, že si

bakterie dokáží vytvořit obranný mechanismus i vůči antibakteriálním účinkům nanočástic stříbra.

Tato práce vznikla za finanční podpory projektu LO1305 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky, projektu 15-22248S Grantové agentury České republiky, projektu 15-27726A Ministerstva zdravotnictví České republiky a projektu PrF_2015_022 Univerzity Palackého v Olomouci.

LITERATURA

1. Panacek A., Kvittek L., Pucek R. et al.: J. Phys. Chem. B 110, 33 (2006).
2. Panacek A., Kolar M., Vecerova R. et al.: Biomaterials 30, 31 (2009).
3. Panacek A., Smekalova M., Vecerova R., et al.: Colloids Surf., B 142 (2016).

5L-09

MODIFIKACE POVRCHU ORTOPEDICKÝCH IMPLANTÁTŮ POMOCÍ NANOČÁSTIC STŘÍBRA

ŠÁRKA HRADILOVÁ, ALEŠ PANÁČEK

*Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Univerzita Palackého Olomouc, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, Česká republika
Sarka.hradilova@upol.cz*

Infekce kloubních implantátů představují obávanou komplikaci při operacích totálních endoprotéz. Rozsáhlé infekty ovlivňují negativně proces hojení a mohou končit i smrtí pacienta. Vhodná volba biomateriálů implantovaných protéz a jejich povrchových úprav může významně ovlivnit případnou bakteriální infekci a tvorbu biofilmu na implantátu. V současné době se do popředí zájmu dostávají stříbrné nanočástice (AgNPs) pro své antimikrobiální vlastnosti. Velkou výhodou povrchových úprav pomocí AgNPs je možnost regulovat uvolňování účinných látek do okolní tkáně a dlouhá doba účinnosti; ideálně po celou dobu životnosti implantátu. Navíc antibakteriální účinek AgNPs může být posílen kombinací s běžnými antibiotiky¹ a dalšími antimikrobiálními látkami.

V naší studii jsme se zaměřili na modifikaci povrchů titanových implantátů nanočásticemi stříbra. Porovnávali jsme několik metod (UV redukce, chemická redukce, sonochemická redukce) a sledovali jsme celkové množství AgNPs na disku, kompaktnost a mechanickou odolnost vrstvy, antibakteriální účinnost a cytotoxicitu.

Ukázalo se, že již výběr vhodné metody zásadně ovlivňuje jak množství AgNPs na implantátech, tak především antibakteriální vlastnosti. Kompaktnější vrstva s vyšší mechanickou odolností umožňuje snižování koncentrace AgNPs na implantátu tak, aby byla zachována antibakteriální účinnost a zároveň byly minimalizovány nežádoucí účinky.

Na základě již dosažených výsledků předpokládáme, že jsme schopni vyvinout spolehlivé, odolné, netoxické a bezpečné nano materiály, které brání ulpívání bakterií a tvorbě biofilmu na povrchu implantátu. AgNPs kombinují silný antibakteriální účinek s relativní inertností a nízkou toxicitou pro pacienta, jak již bylo prokázáno *in vitro* i *in vivo*.

Na druhé straně je zde mnoho otázek týkajících se mechanických odolnosti a možných dlouhodobých vedlejších účinků, které vyžadují další zkoumání.

Tato práce vznikla za finanční podpory Ministerstva zdravotnictví ČR (AZV VES 15-27726A) a studentského projektu IGA PŘF 2016021 Univerzity Palackého.

LITERATURA

1. Panacek A., Smekalova M., Vecerova R., Bogdanova K., Roderova M., Kolar M., Kilianova M., Hradilova S., Froning J. P., Havrdova M., Pucek R., Zboril R., Kvittek L.: Colloids and surfaces B, Biointerfaces 142, 392 (2016).

5L-10

BIODEGRADOVATELNÉ MATERIÁLY PRE ORTOPEDICKÉ APLIKÁCIE

LUCIA MARKUŠOVÁ-BUČKOVÁ^a, RENÁTA ORIŇÁKOVÁ^a, ANDREJ ORIŇÁK^a, MÁRIA GIRETOVÁ^b, LUBOMÍR MEDVEČKÝ^b, MIRIAM KUPKOVÁ^b, MONIKA HRUBOVČÁKOVÁ^b, KAROL KOVAL^b

*^a Katedra fyzikálnej chemie, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesova 11, 04154 Košice, ^b Ústav materiálových vied, Slovenská akadémia vied, Watsonova 47, 04353 Košice, Slovenská republika
markusovabuckova@gmail.com*

Biomateriály sú látky, ktoré nahrádzajú poškodené tkanivá alebo podporujú ich funkciu¹. Degradovateľné biomateriály predstavujú novú triedu materiálov, ktoré majú pomôcť pri liečbe poškodeného tkaniva mechanickou oporou a podporou bunkovej proliferácie, súčasne majú so zvyšujúcou sa obnovou tkaniva postupne degradovať². Biologicky degradovateľné materiály prinášajú riešenia niektorých problémov, ktoré vyvolávajú trvalé implantáty, napríklad nespôsobujú chronický zápal, napätové tienenie, znižujú počet operačných zásahov a podobne³. Táto práca sa venuje príprave a testovaniu biodegradovateľných materiálov, ktoré by mohli slúžiť ako kostné implantáty. Na prípravu vzoriek bol ako základný materiál použitý karbonylový železný prášok. Z neho boli vyrobené celulárne štruktúry Fe, Fe-CNT a Fe-Mg. Korózna odolnosť týchto materiálov bola hodnotená metódou anodickej polarizácie v roztoku NaCl a v Hankovom roztoku. V oboch roztokoch došlo k zvýšeniu korózneho potenciálu u vzoriek s obsahom Mg, tieto materiály mali tiež najvyššiu degradačnú rýchlosť. Statická korózia bola testovaná v Hankovom roztoku, pričom po 7 týždňoch boli všetky vzorky kompletne pokryté hrdzou. Pri skúmaní cytotoxicity sa sledovala životaschopnosť buniek na povrchu pripravených látok. Pričom hustota buniek na povrchu experimentálnych vzoriek klesla po troch dňoch v porovnaní s kontrolou. Testy hemokompatibility celulárnych štruktúr mali za úlohu stanoviť ich hemolytický účinok, tvorbu krvných zrazenín a adhéziu krvných doštičiek. Z výsledkov testov vyplýva, že experimentálne vzorky majú dobrú hemokompatibilitu. V ďalšom výskume je potrebné vyriešiť cytotoxicitu skúmaných látok, ktorá je pomerne vysoká.

Táto práca vznikla za podpory grantov APVV-0677-11 Agentúry na podporu výskumu a vývoja a VEGA 1/0211/12 Vedeckej grantovej agentúry MŠVVaŠ SR a SAV.

LITERATÚRA

1. Qizhi C., Thouas G. A.: *Mat. Sci. Eng. R.* 87, 2 (2015).
2. Zheng Y. F., Gu X. N., Witte F.: *Mater. Sci. Eng. R.* 77, 3 (2014).
3. Tan L., Yu X., Wan P., Yang K.: *J. Mater. Process Tech.* 29, 504 (2013).

5L-11

MODULÁCIA HYDROFOBICITY MIKRO-A NANOTEXTÚRNYCH POVRCHOV PRE ADHÉZIU ŽIVÝCH BUNKOVÝCH LÍNÍÍ

JÁN MACKO^{a,b}, RENÁTA ORIŇAKOVÁ^b, ANDREJ ORIŇAK^b

^a Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, PrifUK, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, ^b Katedra fyzikálnej chémie, PF UPJŠ, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovensko
jmacko10@gmail.com

Práca sa zaoberá prípravou mikro- a nanotextúrnych substrátov pripravených kombináciou elektrodepozície a spincoatingu a vzájomným porovnaním ich hydrofobicity.

Nanotextúrne substráty mali elektrochemicky deponovanú niklovú vrstvu, na ktorej boli v prípade polovice pripravených vzoriek nanosené spincoatingom tenké polymérne vrstvy monitorujúce východziu textúru povrchu¹. Hydrofobicita pripravených povrchov bola kvantifikovaná veľkosťou kontaktného uhla sediacej vodnej kvapky pred aj po nanosení polymérnej vrstvy. Na niklový povrch boli nanášané polydimetylsiloxan (PDMS), fenylmetylsiloxán (PhMS) a cyanopropylmetylfenylmetylsiloxán (CNPhMS). Bolo zistené že tenká vrstva nanorozmerného niklu s polykrystalickou štruktúrou výrazne zvyšuje hydrofobicitu nad ňou nanoseného polyméru. U hydrofóbnejších polymérov bol pozorovaný výraznejší nárast hydrofobicity. Príspevky nanotextúrnej niklovej vrstvy k celkovému zvýšeniu hydrofobicity boli v rozmedzí od 2 do 26° (cit.²).

Povrchy s mikročasticami boli pripravené pulznou elektrodepozíciou s počtami pulzov od 10 do 30 a trvaním pulzu od 0,1 až 1 sekundu. V závislosti na počte použitých pulzov mali mikročastice tvary v rôznej miere vyvinutých dendritov dĺžkami až 8 mikrometrov. V prípade pokrytia povrchu s mikročasticami polymérnou vrstvou zvýšenie hydrofobicity nepresiahne 7°. Potvrdilo sa že, útvary na povrchu s veľkosťou v mikrometrovej škále už výrazne neovplyvujú na nárast hydrofobicity skúmaného povrchu. Fenomén výraznejšieho príspevku k celkovej hydrofobicite je zrejme obmedzený iba na povrchy s nanotextúrou.

Obidva typy pripravených povrchov majú vďaka svojej hydrofobicite potencionálne použitie pri potlačaní adhézie a proliferácie buniek a ako antimikrobiálne povrchy.

Táto práca vznikla za podpory VEGA 1/0211/12, APVV-0280-11, APVV-0677-11, VEGA 1/0592/13,

LITERATÚRA

1. Hall D. B., Underhill P., Torkelson J. M.: *Polym. Eng. Sci.* 38, 2039 (1998).
2. Macko J., Oriňak A., Oriňaková R., Muhmann C., Petruš O., Harvanova D., Vargová J., Jendželovský R., Radoňák J., Fedoročko P., Arlinghaus H. F.: *Appl. Surf. Sci.* 355, 553 (2015).

5L-12

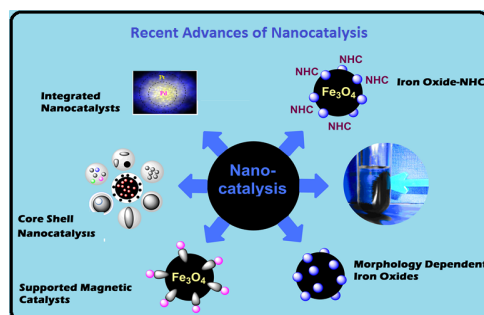
RECENT ADVANCES IN NANOCATALYSIS

MANOJ B. GAWANDE

Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Palacký University, Olomouc, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, Czech Republic
manoj.gawande@upol.cz

Nanomaterials and magnetic nanomaterials have expanded substantial attractiveness among the chemists as they can be used in a variety of catalytic processes and benign organic synthesis¹⁻⁵. The nanocatalysts described would include magnetic-supported nanocatalysts, core-shell (Pd@Pt, and Au@Pd) catalysts and morphology-dependent iron oxides^{4,5}.

Newly synthesized nanoparticles over the years have allowed important and unique series of developments in the progress of the sustainable heterogeneous nanocatalysts. Notably, nanomaterials/magnetic nanomaterials for catalysis can now be designed and prepared with need for specific catalytic applications. Core-shell nanocatalysts, morphology-dependent iron oxide and metal supported nanoparticles can be prepared *via* more benign pathways with unique structure, morphology and composition. Our recent research activity on nanomaterials and its catalytic applications will be emphasized¹⁻⁴.



Author gratefully acknowledges the support by the project LO1305 of the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic.

REFERENCES

1. Sharma R. K., Sharma S., Zboril R., Gawande M. B.: *Green Chem.* 18, 3184 (2016).
2. Gawande M. B., Goswami A., Felpin F.-X., Asefa T., Huang X., Silva R., Zou X., Zboril R., Varma R. S.: *Chem. Rev.* 116, 3722 (2016).

- Datta K. J., Datta K. K. R., Gawande M. B., Ranc V., Čépe K., Malgras V., Yamauchi Y., Varma R. S., Zboril R.: *Chem. Eur. J.* 22, 1577 (2016).
- Rathi A.K., Gawande M. B., Pechousek J., Aparicio C., Petr M., Cepe K., Krikavova R., Travnicek Z., Zboril R.: *Green Chem.* 18, 2363 (2016).
- Gawande M. B., Goswami A., Asefa T., Guo H., Peng D.-L., Biradar A., Zboril R., Varma R. S.: *Chem. Soc. Rev.* 21, 7540 (2015).

5L-13**SUPERPARAMAGNETIC IRON OXIDES NANOPARTICLES AS CONTRAST AGENTS FOR MRI APPLICATION**

KATEŘINA POLÁKOVÁ^a, ZDENKA MARKOVÁ^a, TOMÁŠ MALINA^a, ARIS BAKANDRITSOS^a, ANETA MALÁ^b, JOSEF SKOPALÍK^c, RADEK ZBOŘIL^a

^a Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Departments of Experimental Physics and Physical Chemistry, Faculty of Science, Palacky University, Slechtitelu 27, 783 71 Olomouc, ^b Institute of Scientific Instruments, The Czech Academy of Sciences, Královopolská 147, 612 64 Brno, ^c Department of Human Pharmacology and Toxicology, Faculty of Pharmacy, University of Veterinary and Pharmaceutical Sciences, Brno, Czech Republic
katerina.polakova@upol.cz

Magnetic nanoparticles (NPs), especially SPIO nanoparticles, have long been used as MRI (Magnetic Resonance Imaging) contrast agents and as an advantageous nanopatform for drug delivery, taking advantage of their unique magnetic properties and ability to function at the molecular and cellular levels¹.

In RCPTM (Regional Centre of Advanced Technologies and Materials) at Palacky University in Olomouc smart design and development of SPIO nanoparticles in mild conditions with desired physico-chemical properties (size, composition, surface modification, magnetization, relaxivity etc.) has been recently performed. In this lecture the most promising results will be presented and consequently discussed advanced *in vitro* and *in vivo* MRI application of prepared SPIO nanomaterials or nanocomposites. The particular attention will be devoted to labeling and MRI detection of stem cells, *in vitro* and *in vivo* MRI characterization of various biocompatible surface modified densely packed SPIO nanoparticles prepared in mild conditions and potential clinical application of maghemite/bentonite nanocomposite as per-oral contrast agent.

The authors acknowledge the support by the Ministry of Education of the Czech Republic (LO1305) and the Student Project IGA_PrF_2016_021.

REFERENCE

- Colombo M., Carregal-Romero S., Casula M. F., Gutiérrez L., Morales M. P., Böhm I. B., Heverhagen J. T., Prosser D., Parak W. J.: *Chem. Soc. Rev.* 41, 4306 (2012).

5L-14**ENKAPSULÁCIA LANGERHANSOVYCH OSTROVČEKOV A ELEKTROCHEMICKÉ STANOVENIE GLUKÓZY A INZULÍNU**

IVANA SMORADOVÁ^a, RENATA ORIŇAKOVÁ^a, ANDREJ ORIŇAK^a, JANA HOVANCOVÁ^a, JOZEF RADOŇÁK^b, KATARÍNA BUDZOVÁ^b

^aKatedra fyzikálnej chémie, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesova 11, 040 01 Košice, ^bI. Chirurgická klinika, Lekárska fakulta UPJŠ, Trieda SNP 1, 040 11 Košice, Slovensko
ivana.smoradova@gmail.com

Diabetes mellitus je heterogénne metabolické ochorenie, charakteristické dlhodobým zvýšením glukózy v krvi (hyperglykémiou), čo je zapríčinené poruchou vylučovania inzulínu, pôsobenie inzulínu alebo oboch porúch súčasne¹. Inzulín je peptidový hormón tvorený z 51 aminokyselín produkovaný β -bunkami Langerhansových ostrovčekov, nachádzajúcich sa v pankrease². Rozonávame niekoľko typov diabetu ako napríklad diabetes mellitus I. typu a diabetes mellitus II. typu. Diabetes mellitus prvého typu sa primárne vyskytuje u detí a mladých ľudí. Pri tomto type diabetu dochádza k poškodeniu β -buniek pankreasu autoimunitným systémom. V dôsledku tohoto poškodenia dochádza k obmedzenej produkcii inzulínu, ktorý sa do tela musí dodávať injekčne. Diabetes mellitus II. typu je civilizáčnym ochorením a vyskytuje sa predovšetkým u starších ľudí po 40tom roku života. Pri tomto type diabetu postupne zaniká funkcia a počet β -buniek pankreasu³.

Cieľom práce je príprava a charakteristika vhodného polyméru, ktorý by bol následne použitý na enkapsuláciu Langerhansových ostrovčekov. Úlohou tohto polyméru je zabrániť autoimunitnej deštrukcii Langerhansových ostrovčekov. Takto enkapsulované bunky by však stále boli schopné produkovať inzulín v dostatočnom množstve a tak regulovať hladinu glukózy v krvi. Množstvo glukózy a inzulínu sa stanoví elektrochemicky metódou cyklickej voltampérometrie za použitia zlatej mikroelektrody. Za účelom nájdenia optimálnych podmienok bol študovaný vplyv pH a rýchlosti polarizácie na detekciu vzoriek. Na základe analýzy cyklických voltampérogramov nameraných pre glukózu a inzulín sme odhadli priebeh mechanizmu oxidácie inzulínu a glukózy na zlatých mikroelektrodách.

Táto práca vznikla za podpory grantov APVV-0677-11, VEGA 1/0211/12, VVGS-2014-187.

LITERATÚRA

- America Diabetes Association: *Diabetes Care.* 37, 581 (2014).
- Alavi P., Yousefi R., Amirghofran S., Karbalaeei-Heidari H. R., Moosavi-Movahedi A. A.: *Appl. Biochem. Biotech.* 3, 623 (2013).
- National Diabetes Data Group: *Diabetes.* 28, 1039 (1979).

5P-01

DIFFERENTIATION OF THE PHOTOCATALYTIC DEGRADATION MECHANISMS OF ORGANIC COMPOUNDS BASED ON SULFONAMIDES

EWA ADAMEK, WOJCIECH BARAN, MATEUSZ CHOLEWIŃSKI, ROMAN ADAMCZYK, BARBARA PELCZAR

*School of Pharmacy with the Division of Laboratory Medicine in Sosnowiec, Medical University of Silesia, Department of General and Analytical Chemistry, Jagiellońska 4, 41-200 Sosnowiec, Poland
eadamek@sum.edu.pl*

It is assumed that the photocatalytic reaction mechanisms involving substances having a similar chemical structure are also similar. Differences in the reactions rate are explained by differences in sorption efficiency of substrate on the heterogeneous catalyst¹

The aim of our study was to verify this thesis. A six sulfanilamide derivatives that differ only in the amide substituent nature were used in the experiments. The photocatalytic reaction was initiated by UVA irradiation in the presence of TiO₂-P25. NaI, isopropanol and benzoquinone were used as scavengers electron holes, hydroxyl radicals and superoxide radicals, respectively. The results are shown in Figure 1.

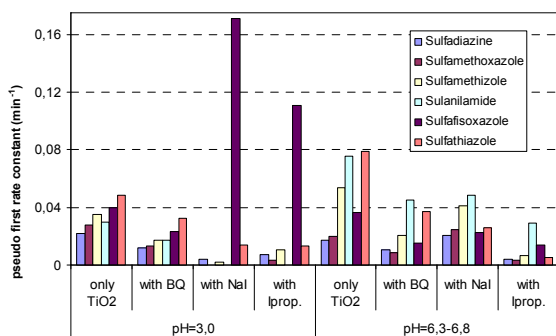


Fig. 1. Comparison of the photocatalytic degradation rate constants of the selected sulfonamides

It was found that degradation mechanisms of sulfonamides having the similar structure may be different and undergo significant changes depending on the pH. For example, in an acidic medium all free radicals cause likely sulfafisoxazole degradation. This fact may have an important practical significance.

This research was supported by the National Science Centre Grant (UMO-2011/03/D/NZ7/01684).

REFERENCE

1. Mills A., O'Rourke C., Moore K.: J. Photochem. Photobiol. A: Chem. 310, 66 (2015).

5P-02

CLASSIFICATION OF THE TREATMENT METHODS OF WASTEWATER THAT CONTAIN HIGH CONCENTRATION OF ANTIBIOTICS

WOJCIECH BARAN, EWA ADAMEK, ROMAN ADAMCZYK, MATEUSZ CHOLEWIŃSKI, JOANNA WILK, ALICJA SZYMKIEWICZ

*School of Pharmacy with the Division of Laboratory Medicine in Sosnowiec, Medical University of Silesia, Department of General and Analytical Chemistry, Jagiellońska 4, 41-200 Sosnowiec, Poland
bw-xxl@wp.pl*

High amounts of antibiotics introduced into the environment with waste from animal husbandry increase the risk of the spread of antibiotic-resistant microorganisms and they can cause a serious threat to human health. Therefore, antibiotics present in wastes should be decomposed to less antimicrobial active compounds^{1,2}. The aim of our study was to assess the efficiency of the selected degradation processes used for the treatment of wastewater that contain antibiotics based on the degradation and mineralization efficiency and degradation products ecotoxicity (Table I). The ecotoxicity

Table I
Results

	Heterogenic photo-catalysis	Homogenic photo-catalysis	Fenton process	Electro-coagulation	Biodegradation
Ampicillin (penicillins)					
Degradation	++	++	++	0	++
Mineralization	+	+/-	++	0	+
Products toxicity	++	++	+/-	0	++
Doxycycline (tetracyclines)					
Degradation	++	+	++	+	++
Mineralization	+	+/-	++	0	+/-
Products toxicity	++	++	+/-	++	++
Sulfathiazole (sulfonamides)					
Degradation	++	++	++	0	+
Mineralization	+	+/-	++	0	n.d.
Products toxicity	++	++	+/-	0	+/-
Tylosin (macrolides)					
Degradation	++	++	++	0	+/-
Mineralization	+	+/-	++	0	+/-
Products toxicity	++	++	+/-	0	++

-: negative effect, 0: no effect, +: acceptable effect, ++: very good effect, +/- effect depends on process parameters and/or substrates concentrations, n.d.: no data

was determined in relation to the selected environmental microorganisms (MARA® test) and unselected microorganisms (from rivers and wastewater treatment plant).

This research was supported by the National Science Centre Grant (UMO-2011/03/D/NZ7/01684).

REFERENCES

1. DANMAP 2014 Reports.: <http://www.danmap.org>
2. Miege C., Choubert J. M., Ribeiro L., Eusebe M., Coquery M.: *Environ. Poll.* 157, 1721 (2009).

5P-03

ROUBOVÁNÍ POVRCHŮ POLYMERNÍCH SUBSTRÁTŮ PRO BIOAPLIKACE

**ZDEŇKA KOLSKÁ^a, SIMONA LUPÍNKOVÁ^a,
MONIKA BENKOCKÁ^a, ALENA ŘEZNÍČKOVÁ^b,
VÁCLAV ŠVORČÍK^b**

^a *Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem, Přírodovědecká fakulta, Ústecké materiálové centrum, katedra fyziky, České Mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem,* ^b *Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Fakulta chemické technologie, Ústav inženýrství pevných látek, Technická 5, 166 28 Praha, Česká republika*
zdenka.kolska@ujep.cz

Polymery hrají díky svým vlastnostem významnou roli v různých oblastech života, průmyslu, medicíny, atd. Jejich povrchové vlastnosti jsou však často nevhodné zejména pro případné bioaplikace. Proto se povrchy polymerů záměrně modifikují. Nejprve je nutná tzv. aktivace povrchu, která se provádí různými fyzikálními či chemickými postupy¹⁻³. Na takto aktivovaný povrch pak mohou být navázány chemické látky zlepšující např. cytocompatibilitu povrchu³⁻⁵.

V této práci byly studovány povrchové vlastnosti polymerních folií před a po aktivaci (i) plazmatem nebo (ii) Piranha roztoky. Na aktivované povrchy byly následně roubovány vybrané vicinální sloučeniny (cysteamin, ethylendiamin, 2-aminoethanol) nebo chitosan. Následně mohly být ještě přiroubovány např. boranové sloučeniny³⁻⁵. Byly sledovány změny povrchových vlastností všech studovaných substrátů před a po jednotlivých krocích modifikace. K analýze byly použity rentgenová fotoelektronová spektroskopie, elektrokinetická analýza, goniometrie, mikroskopie atomárních sil, aj. Na vybraných površích byly provedeny vybrané mikrobiální testy: (i) antibakteriální testy, (ii) testy na inhibici růstu řas nebo (iii) testy na růst, proliferaci a životaschopnost hladkých svalových buněk.

Tato práce vznikla za podpory projektu GAČR č. 13-06609S, Grantové agentury Ministerstva zdravotnictví ČR č. 15-33018A a interní grantové agentury Univerzity J. E. Purkyně v Ústí nad Labem v ČR (SGA projekt č. 53518 15 0008 01).

LITERATURA

1. Merret K., Cornelius R. M., McClung W. G., Unsworth L. D.: *J. Biomater. Sci.-Polym. Ed.* 13, 593 (2002).

2. Slepíčka P., Siegel J., Lyutakov O., Švorčík V.: *Chem. Listy* 106, 875 (2012).
3. Benkocká M., Knapová T., Braborec J., Matoušek J., Černá H., Londesborough M. G. S., Švorčík V., Kolská Z.: *Chem. Listy* 109, 960 (2015).
4. Lupínková S., Výborný K., Benkocká M., Kolská Z., Slepíčková Kasálková N., Švorčík V.: *Chem. Listy* 108, 237 (2014).
5. Kolská Z., Řezničková A., Nagyová M., Slepíčková Kasálková N., Sajdl P., Slepíčka P., Švorčík V.: *Polym. Degrad. and Stabil.* 101, 1 (2014).

5P-04

ANTIBAKTERIÁLNÍ NANOČÁSTICE PŘIPRAVENÉ Z NANOVLÁKENNÝCH MATERIÁLŮ

PETR HENKE^a, JIŘÍ MOSINGER^{a,b}

^a *Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze, Hlavova 2030, 128 43 Praha 2,* ^b *Ústav anorganické chemie Akademie věd České republiky, v.v.i., Řež 1001, 250 68 Řež, Česká republika*
henke@natur.cuni.cz

Elektrostaticky zvlákněné a sulfonované polystyrenové nanovlákněné vrstvy s enkapsulovaným 5,10,15,20-tetrafenylporfyrinem efektivně generují singletový kyslík při ozařování viditelným světlem¹. Z těchto vrstev lze pomocí jednoduché nanoprecipitace připravit stabilní fotoaktivní nanočástice. Takto připravené nanočástice s poloměrem okolo 30 nm mají antibakteriální vlastnosti a mohou být použity pro fotooxidaci externího substrátu pomocí singletového kyslíku.

Tyto nanočástice byly charakterizovány pomocí elektronové mikroskopie, „steady state“ a časově rozlišené absorpční a fluorescenční spektroskopie. Schopnost oxidace externího substrátu byla ověřena pomocí jodidového činidla a antibakteriální vlastnosti byly porovnány vůči modelovému organismu *Escherichia Coli*.

Díky krátké difuzní dráze singletového kyslíku je fotooxidace lokalizovaná na povrchu materiálů s vázaným nebo enkapsulovaným fotosensitizerem. Proto v porovnání s výchozím nanovlákněným materiálem, může singletový kyslík z nanočástic, které mají také větší měrný povrch, difundovat do výrazně většího objemu suspenze. Tyto nanočástice jsou ve vodné suspenzi dlouhodobě stabilní a nesedimentují.

Pro aplikace v medicíně nebo průmyslu může být využito toho, že nanovlákněné materiály lze použít nejen jako zdroj nanočástic, ale také jako efektivní filtr pro jejich odstranění ze suspenze.

Tato práce byla podporována Grantovou agenturou České Republiky (Grant 63-15020S).

LITERATURA

1. Henke P., Kozak H., Artemenko A., Kubát P., Forstová J., Mosinger J., *ACS Appl. Mater. Interfaces* 6, 15 (2014).

5P-05

**HODNOCENÍ CYTOTOXICITY MATERIÁLŮ
POUŽÍVANÝCH K VÝROBĚ KLOUBNÍCH NÁHRAD****VERONIKA PIVODOVÁ^{a,b}, ADÉLA
GALANDÁKOVÁ^{a,d}, ALEŠ PANÁČEK^c, ROBERT
PRUCEK^c, JIŘÍ GALLO^d, JITKA ULRICHOVÁ^{a,b}**

^a Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3,775 15 Olomouc, ^b Ústav molekulární a translační medicíny, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3,775 15 Olomouc, ^c Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, tř. 17. listopadu 1192, 771 46 Olomouc, ^d Ortopedická klinika, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, I. P. Pavlova 6, 779 00 Olomouc, Česká republika
veronikapivodova@seznam.cz

Totální kloubní náhrada je široce využívanou operací, která každý rok výrazně zlepšuje kvalitu života miliónům lidí¹. Při operaci je nahrazen buď celý kloub, nebo jeho část kloubní náhradou vyrobenou z moderních biomateriálů. Zcela zásadní vlastností protetikých biomateriálů, které jsou v kontaktu s živou tkání, je biokompatibilita. Neměly by vyvolávat toxické, alergické nebo zánětlivé reakce. Nejpoužívanějším materiálem nejen v ortopedii je titan a jeho slitiny. Důvodem je jeho dobrá odolnost vůči korozi a výborné mechanické vlastnosti. Přes veškerý pokrok podlehnou část kloubních náhrad infekci a v dlouhodobé perspektivě je problémem aseptické uvolnění. Řešením prvně uvedeného problému je úprava povrchu implantátů anti-infekčními vrstvami².

Naše studie byla zaměřena na testování cytotoxicity vzorků titanové slitiny Ti6Al4V, které byly pokryty vrstvou nanočástic stříbra (AgNPs). K pokrytí povrchu vzorků AgNPs byly použity různé metody viz tabulka I.

Tabulka I

Označení vzorku	Typ vzorku
A0	Ti6Al4V
A1	Ti6Al4V + AgNPs připravené pomocí sonochemické redukce glukózy
A2	Ti6Al4V + AgNPs připravené pomocí sonochemické redukce maltózy
A3	Ti6Al4V + AgNPs připravené s pomocí chemické redukce glukózy
A4	Nanostruktura
A5	Nanostruktura + AgNPs připravené pomocí sonochemické redukce glukózy

Cytotoxicita byla hodnocena na buněčné linii NIH 3T3 metodou přímého kontaktu a na buněčné linii Balb/c 3T3 testem extraktu.

Získané výsledky cytotoxicity vzorků titanu pokrytých vrstvou AgNPs budou diskutovány.

Tato práce vznikla za podpory grantů IGA MZ ČR 15-27726A a LO1304.

LITERATURA

- Galandáková A., Ulrichová J., Langová K., Hanáková A., Vrbka M., Hartl M., Gallo J.: J. Biomed. Mater. Res. B Appl. Biomater., DOI: 10.1002/jbm.b.33663 (2016).
- Gallo J., Panacek A., Prucek R., Kriegova E., Hradilova A., Hobza M., Holinka M.: Materials 9(5), 337 (2016).

5P-06

**STUDIUM BIOKOMPATIBILNÍCH VRSTEV
POLYMERŮ KYSELINY MLÉČNÉ (PLA)****ANNA VITÁSKOVÁ**

Univerzita Palackého, 17. listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc, Česká republika
vitaskova716@gmail.com

V této práci byl pomocí Langmuirova rovnovážného měření studován vliv podmínek na morfologii povrchu a stabilitu vrstev poly(L-lactidu) terminovaného aminem (PLLA-NH₂) na rozhraní voda-vzduch. Vrstvy PLLA-NH₂ byly nanášeny na skleněný substrát pomocí depoziční techniky Langmuir-Blodgettové. K charakterizaci vrstev bylo použito měření kontaktního úhlu a snímky ze skenovacího elektronového mikroskopu. Získané výsledky ukazují, že složení subfáze má významný vliv na uspořádanost a stabilitu připravovaných vrstev. V případě, kdy byla jako subfáze použita disperze nanočástic stříbra, docházelo k zachycení nanočástic stříbra na povrchu připravovaných filmů.

Poděkování za podporu patří projektu LO1305 MŠMT ČR.

5P-07

**ŽIHÁNÍ TENKÝCH VRSTEV AU NAPRÁŠENÝCH NA
POLYIMIDU A POLYETHERETHERKETONU****ONDŘEJ KVÍTEK^a, DOMINIK FAJSTAVR^a, ALENA
ŘEZNÍČKOVÁ^a, PETR SLEPIČKA^a, ZDEŇKA
KOLSKÁ^b, VÁCLAV ŠVORČÍK^a**

^a Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice, ^b Přírodovědecká fakulta Univerzity J. E. Purkyně, České mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem, Česká republika
kviteko@vscht.cz

Žihání tenkých vrstev Au připravených metodou katodového naprašování na polymerních substrátech polyimidu (PI) a polyetheretherketonu (PEEK) bylo provedeno s cílem studovat vliv substrátu na transformaci jejich morfologie a případné slévání Au do nanostrůvkovité struktury, tzv. "dewetting", který byl dříve pozorován na skleněných substrátech¹⁻³. Tepelná stabilita substrátů byla studována pomocí diferenční skenovací kalorimetrie. Bylo zjištěno, že substrát PI je stabilní až do 400 °C, PEEK prochází krystalizací při teplotě kolem 170 °C a taje při teplotě zhruba 320 °C. Byly proto zvoleny žihací teploty 200 °C a 300 °C pro PEEK a PI, resp. Morfologie povrchu vzorků byla studována pomocí mikroskopie atomárních sil. Žihání

PEEK substrátu vede k významným změnám jeho povrchové struktury, dochází k dramatickému zvyšování povrchové drsnosti. Dostatečně tenká vrstva Au je pak rozdělena do ostrovů, tlustší vrstvy však překrývají strukturu substrátu. Žihání Au vrstev na PI substrátu vede ke vzniku hrubších Au nanoostrovů s užší distribucí velikosti. UV-Vis absorpční spektra vykazují vzestup pásu povrchové plazmonové rezonance po žihání, což dokládá tvorbu jednotné nanostruktury. Pás je nejvíce patrný u nejtenčích vrstev Au. Strukturální transformace nanovrstev byla rovněž potvrzena elektrokinetickou analýzou.

Transformace povrchové struktury tenkých vrstev Au je řízena kinetickým dějem povrchové difuze. Protože depozice probíhá za poměrně nízkých teplot, je difuze atomů po povrchu během depozice omezená a vznikající struktura je nerovnovážná. Během post-depozičního žihání pak dochází k urychlení povrchové difuze Au atomů a transformaci struktury blíže k termodynamické rovnováze, jež lze popsat Youngovou rovnicí^{4,5}.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky pod projekty č. 13-06609S a 14-18149P.

LITERATURA

- Švorčík V., Kvítek O., Lyutakov O., Siegel J., Kolská Z.: *Appl. Phys. A* 102, 747 (2011).
- Tesler A. B., Chuntonov L., Karakouz T., Bendikov T. A., Haran G., Vaskevich A., Rubinstein I.: *J. Phys. Chem. C* 115, 24642 (2011).
- Thompson C. V.: *Annu. Rev. Mat. Res.* 42, 399 (2012).
- Butt H.-J., Golovko D. S., Bonaccorso E.: *J. Phys. Chem. B* 111, 5277 (2007).
- Owens D. K., Wendt R. C.: *J. Appl. Polym. Sci.* 13, 1741 (1969).

5P-08

MAGNETIC PROPERTIES OF POLYETHYLENE COATED WITH SULFONATED COPPER PHTHALOCYANINE

ALENA ŘEZNÍČKOVÁ^a, ONDŘEJ KVÍTEK^a, ZDEŇKA KOLSKÁ^b, MARTIN ORENDÁČ^c, VÁCLAV ŠVORČÍK^a

^aDepartment of Solid State Engineering, University of Chemistry and Technology, 166 28 Prague 6, ^bFaculty of Science, J.E. Purkyne University, 400 96 Usti nad Labem, Czech Republic, ^cFaculty of Science, P.J. Safarik University, Park Angelinum 9, 040 13 Kosice, Slovakia
reznicka@vscht.cz

Since the discovery of the phthalocyanines (Pc), the main focus of the chemists has been on tailoring of their properties to produce molecular materials for previously targeted medical or technological applications^{1,2}. The intense blue-green color of phthalocyanines is due to the electronic delocalization of their 18 π electrons. This made them to be initially utilized industrially as dyes and pigments in various fields³. In addition, metal MPcs show special physical and chemical properties as a class of macrocyclic planar aromatic compounds, and there have been numerous experimental

studies of their optical, magnetic, and electric properties^{4,5}.

Our study focuses on high density polyethylene (HDPE) activated by Ar plasma treatment, subsequently grafted with sulfonated copper phthalocyanine (CuPc) especially pointing out to the surface and magnetic properties of those composites. Properties of pristine and plasma treated HDPE were studied by various experimental techniques: X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), UV-Vis spectroscopy, zeta potential measurements and electron spin resonance (ESR). XPS analysis confirmed the successful grafting of phthalocyanine. The highest absorption was found for the sample grafted with ⁶³CuPc for 1 h. Electrokinetic analysis also confirmed the significant influence of plasma treatment and subsequent CuPc grafting on the surface chemistry and charge. These results correspond well with XPS examination. ESR studies confirmed the presence of CuPc grafted on HDPE. It was found, that the grafting is mediated by magnetically inactive functional groups, rather than radicals. Magnetic properties of CuPc do not seem to change significantly after grafting of CuPc on the polyethylene surface.

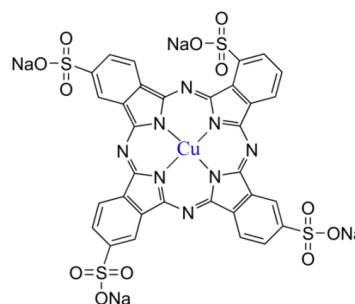


Fig. 1. Formula of copper phthalocyanine-3,4',4'',4'''-tetra-sulfonic acid tetrasodium salt ($C_{32}H_{12}CuN_8O_{12}S_4 \cdot 4 Na$)

This work was supported by the Czech Science Foundation (GA CR) under the projects 14-18149P and 13-06609S.

REFERENCES

- Tracz A., Makowski T., Masirek S., Pisula W., Geerts Y. H.: *Nanotechnology* 18, 485303 (2007).
- Bedioui F., Griveau S., Nyokong T., Appleby A. J., Caro C. A., Gulppi M., Ochoa G., Zagal J. H.: *Phys. Chem. Chem. Phys.* 9, 3383 (2007).
- Gregory P.: *J. Porphyr. Phthalocya.* 4, 432 (2000).
- Liao M. S., Scheiner S.: *J. Chem. Phys.* 114, 9780 (2001).
- Dumoulin F., Durmus M., Ahsen V., Nyokong T.: *Coord. Chem. Rev.* 254, 2792 (2010).

5P-09

DECOMPOSITION OF SILVER CHLORIDE
BY WATER STABILIZED PLASMA RADIATIONVLASTIMIL BROŽEK, RADEK MUŠÁLEK, MONIKA
VILÉMOVÁ, TOMÁŠ FRANTIŠEK KUBATÍK,
MAREK JANATA, LIBOR MASTNÝ, VLADIMÍR
SÝKORA*Institute of Plasma Physics of the CAS, v.v.i., Za Slovankou 3,
18200 Prague, University of Chemistry and Technology
Prague, Technická 5 166 28 Prague, Czech Republic
brozek@ipp.cas.cz, libor.mastny@vscht.cz*

Commercial use of decomposition of silver halogenides by UV-VIS light radiation is documented by 150 year history of black and white photography. One of the most recent uses of the silver halogenides decomposition is for preparation of new forms of silver nanoparticles. The nanoparticles are highly valued especially for their biochemical and biomedical applications. Photographic negatives with silver bromide in the gelatin emulsion were analyzed by SEM and EDS for comparison with produced silver nanoparticles. The ultrafine-grained materials produced by Fotochema, Fomapan, Kodak and Ilford Company were exposed to UV-VIS and X-ray radiation. The size of the produced particles was in the range 50–100 nm, lower sizes were not observed. In this study silver nanoparticles were prepared by AgCl photodecomposition using the radiation of water stabilized plasma and three different approaches. First approach was based on irradiation of AgCl powder deposited by Suspension plasma spraying method on silica glass plates serving as dosimeter, second approach was irradiation of AgCl water suspension only and third dry AgCl and Fe powders in silica glass tube (followed by magnetic separation). Water stabilized plasma torch WSP® developed in Institute of Plasma Physics CAS was used as a source of radiation. The spectrum of WSP® with radiation output up to 30 kW is described in Fig.1. The mechanisms of the reactions and influence of the radiation dose were described. AgCl was used for its negligible decomposition by daylight. Samples were stored in darkness before further analysis. Described approaches led to formation of silver nanoparticles in the size range of 30–100 nm.

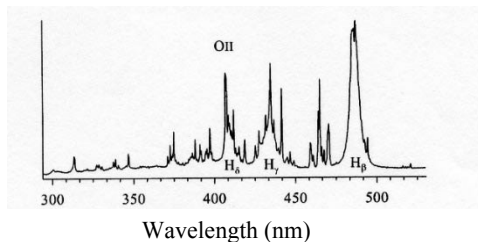


Fig. 1. Radiation spectrum of WSP®

The study confirmed that WSP® radiation can be used for production of silver nanoparticles in form of powder or colloidal solution without presence of additional anions. However low Zeta-potential (max. 10 mV) causes agglomeration of the nanoparticles.

This work has been supported by project GA 15-12145S.

5P-10

POROVNÁNÍ ZPŮSOBU TERMICKÉ INICIACE PŘI
REDUKČNÍ PŘÍPRAVĚ NANOČÁSTIC STŘÍBRALIBOR KVÍTEK, KLÁRA KOSTELANSKÁ, RADKA
POCKLANOVÁ, ALEŠ PANÁČEK, ROBERT PRUCEK*Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů a
Katedra fyzikální chemie, Univerzita Palackého v Olomouci,
17. Listopadu 12, Olomouc 771 46, Česká republika
libor.kvitek@upol.cz*

Nanočástice stříbra patří mezi nejstudovanější kovové nanomateriály. To je způsobeno nejen jejich vysokou biologickou aktivitou, ale i katalytickou aktivitou a zajímavými optickými vlastnostmi. V oblasti antimikrobiálních aplikací či povrchem zesíleného Ramanova rozptylu vynikají tyto nanočástice nad ostatní typy kovových i nekovových nanomateriálů, a i proto je velká pozornost věnována metodám jejich řízené přípravy. V této oblasti výzkumu se v poslední době objevuje stále větší množství studií, věnovaných tzv. „green“ metodám syntézy nanočástic stříbra, založených na využití přírodních látek pro redukci a stabilizaci vznikajících nanočástic¹. Přírodní látky mají většinou jen slabé redukční účinky a proto je třeba iniciovat redukci vhodným způsobem – obvykle termicky, ale využívány jsou i fotochemické metody či ultrazvuk. Při termické iniciaci redukce je možno využít jak klasické metody ohřevu tak i stále oblíbenější mikrovlnný ohřev. Metoda mikrovlnného ohřevu poskytuje mnohé výhody, zejména pak rychlost a rovnoměrnost ohřevu v celém objemu reakčního systému.

V rámci provedené studie využitelnosti slabých redukčních látek buď přírodního původu či látek syntetických byly porovnány výsledky redukce iniciované klasickým ohřevem a ohřevem mikrovlnami. Jako redukční látky byly použity cukry manóza a od ní odvozený mannitol a syntetické polymery typu polyethylenglykolu (PEG) s různou molekulovou hmotností (PEG 300 a PEG 35.000). Získané výsledky ukazují, že využití mikrovlnného ohřevu pro iniciaci redukce stříbrných iontů je výhodné zejména u nejslabších redukčních látek (hydroxyl jako redukční skupina), u silnějších redukčních látek (typu redukujících cukrů s karbonylovou redukční skupinou) naopak jako výhodnější metoda termické iniciace vychází klasický ohřev.

Tato práce vznikla za podpory grantu LO1305 MŠMT ČR.

LITERATURA

1. Sharma V. K., Yngard R. A., Li Y.: Adv. Colloid Interface Sci. 145, 83 (2009).

5P-11**PŘÍPRAVA ANTIMIKROBIÁLNĚ AKTIVNÍHO
KOMPOZITNÍHO MATERIÁLU POMOCÍ *IN-SITU*
DEPOZITOVANÝCH STŘÍBRNÝCH NANOČÁSTIC
NA MICELÁCH Z BLOKOVÝCH KOPOLYMERŮ****RENATA VYHNÁLKOVÁ, JANA SOUKUPOVÁ,
RADEK ZBOŘIL***Regionální Centrum Pokročilých Technologí a Materiálů,
Univerzita Palackého, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, Česká
republika
renata.vyhnalkova@upol.cz*

Micely blokových kopolymerů jsou často používány jako nosiče různých malých molekul a mají potenciál být využívány v oblastech medicíny, katalyzátorů a v dalších jiných odvětvích. Kromě plnění („loading“) malými molekulami, micely mohou být naplněny také nanočásticemi kovů. Kompozit dvou struktur (např. micel a nanočástic stříbra – AgNPs) může přinést výhody, které jednotlivé struktury nezaručí. AgNPs mohou být sice použity v řadě aplikací díky svým antibakteriálním vlastnostem, ale zároveň mohou způsobit intoxikaci okolních oblastí, pokud jsou aplikovány v práškové formě, nebo ve formě disperze. Systém, založený na micelách z blokových kopolymerů obsahující imobilizované AgNPs může využít, jak antimikrobiální vlastnosti AgNPs, tak možnost pomalého uvolňování účinné složky (Ag⁺) z micel bez nebezpečí intoxikace okolí stříbrem. Uvolňování Ag⁺ může být regulováno množstvím částic v koroně micel. AgNPs jsou ukotveny v micelární koruně pomocí elektrostatických interakcí mezi negativně nabitými funkčními skupinami v koruně micely a pozitivně nabitými nanočásticemi stříbra. Z tohoto důvodu bylo nutné studovat stupeň možného loadingu micel uvedenými nanočásticemi. Loading byl proveden třemi různými technikami: depozice pomocí *ex-situ* a *in-situ* technik a přímým plněním. Nejúčinnější byla prokázána *in-situ* technika, kterou bylo dosaženo naplnění 16 hm.%. Ostatní techniky prokázaly mnohem nižší plnicí kapacitu: *ex-situ* technika – 9 hm.%, metoda přímého plnění – 4 hm.%. Stabilita micel naplněných AgNPs byla rovněž studována; bylo zjištěno, že micely byly stabilní po dobu delší než rok. Biologické testování na gram negativní *E. Coli* a gram pozitivní *S. Aureus* prokázalo účinnost kompozitu na testovaných bakteriích.

*Tato práce vznikla za podpory grantu LO1305 MŠMT ČR.***5P-12****FLUOROGRAFEN PRO POKROČILÉ
ELEKTROCHEMICKÉ SENZORY****VERONIKA URBANOVÁ, MICHAL OTYEPKA,
RADEK ZBOŘIL***Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů,
Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity
Palackého v Olomouci, tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc,
Česká republika
veronika.urbanova@upol.cz*

Grafen je uměle připravený uhlíkový alotrop rozprostírající se ve dvou dimenzích (2D), kde jsou jednotlivé uhlíkové atomy uspořádány do hexagonální mřížky. Sporadické pokusy o jeho zkoumání se datují už od roku 1859, avšak aktivní a cílený výzkum grafenu a jeho derivátů začal teprve před několika lety v souvislosti s nalezením jednoduchého a účinného způsobu přípravy izolovaných grafenových vzorků^{1,2}. Grafen je zajímavým materiálem především díky svým unikátním vlastnostem, které předurčují jeho velký potenciál pro nejrůznější aplikace a technologické využití^{3,4}. Nicméně některé vlastnosti, jako je například velká hydrofobicita, omezuje jeho uplatnění v senzoričích aplikacích. Těchto nedostatků se lze zbavit vhodnou kovalentní funkcionalizací a tak získat nové grafenové deriváty s řízenými fyzikálně-chemickými vlastnostmi⁵.

Fluorografen byl poprvé připraven v roce 2010⁶. Jedná se o 2D strukturu hexagonálních uhlíkových kruhů, kde je na každý uhlík kovalentně navázán atom fluoru. Tím se změnila výsledná hybridizace grafenového uhlíku z sp² na sp³, což vede ke změně základních charakteristik tohoto materiálu⁷. Fluorografen je neobyčejně reaktivní materiál reagující za běžných podmínek s celou řadou chemických látek (NaSH, NaOH, CCl₂). Tohoto faktu lze elegantně využít v celé řadě substitučních reakcí pro přípravu nových elektrochemicky zajímavých materiálů. Tímto způsobem byl například připraven zcela nový derivát thiofluorografen, který byl použit jako impedimetrický senzor pro detekci hybridizace DNA⁸.

V této práci se zabýváme vlivem stupně fluorace na elektrochemické vlastnosti vzniklých derivátů a na jejich použití v elektrochemických senzorech pro detekci biologicky relevantních molekul jako je například dopamin⁹.

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

1. Brodie B. C.: Philos. T. Roy. Soc. 149, 249 (1859).
2. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S. V., Grigorieva I. V., Firsov A. A.: Science 306, 666 (2004).
3. Geim A. K., Novoselov K. S.: Nat. Mater. 6, 183 (2007).
4. Allen M. J., Tung V. C., Kaner R. B.: Chem. Rev. 110, 132 (2010).
5. Georgakilas V., Otyepka M., Bourlinos A. B., Chandra V., Kim N., Kemp K. Ch., Hobza P., Zboril R., Kim K. S.: Chem. Rev. 112, 6156 (2012).
6. Nair R. R., Ren W., Jalil R., Riaz I., Kravets V. G., Britnell L., Blake P., Schedin F., Mayorov A. S., Yuan S., Katsnelson M. I., Cheng H. M., Strupinski W., Bulusheva L. G., Okotrub A. V., Grigorieva I. V., Grigorenko A. N., Novoselov K. S., Geim A. K.: Small 6, 2877 (2010).
7. Pykal M., Zbořil R., Otyepka M.: Chem. Listy 110, 335 (2016).
8. Urbanová V., Holá K., Bourlinos A. B., Čépe K., Ambrosi A., Loo A. H., Pumera M., Otyepka M., Zbořil R.: Adv. Mater. 27, 2305 (2015).
9. Urbanová V., Karlický F., Adam M., Šembera F., Janoušek Z., Perman J. A., Ranc V., Čépe K., Michl J., Otyepka M., Zbořil R.: Nanoscale 8, 12134 (2016).

5P-13**VYUŽITÍ REDOXNÍCH VLASTNOSTÍ NANOMATERIÁLŮ NA BÁZI ŽELEZA V TECHNOLOGIÍCH ČIŠTĚNÍ VOD: LABORATORNÍ VERSUS TERÉNNÍ ZKUŠENOSTI****JAN FILIP, PETRA SKÁCELOVÁ, JANA OBORNÁ, ELENI PETALA, RADEK ZBOŘIL***Regionální Centrum Pokročilých Technologí a Materiálů, Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, Česká republika
jan.filip@upol.cz*

Odstranění perzistentních a nově se objevujících organických a anorganických polutantů představuje důležitou výzvu v oboru pokročilého čištění vod. Pro zajištění ekonomické a časové udržitelnosti sanací různých typů vod (zejména podzemní vody kontaminované v souvislosti se starými ekologickými zátěžemi: těžba U, bývalé vojenské prostory apod.; odpadní vody z galvanoven, těžkého průmyslu a farmacie; povrchové a pitné vody obsahující sinice a řasy, fosfor, arsen, léčiva, hormony, pesticidy, apod.) a pro dosažení požadovaných limitů se přímo nabízí využití moderních nanomateriálů, které mají obecně vysokou reaktivitu (zejména nanočástice kovů)¹ a/nebo unikátní sorpční účinky (především nanočástice oxidů kovů)². Využití sloučenin železa v různých valenčních stavech se jeví jako velmi perspektivní, a to jak s ohledem na velmi dobrou dostupnost železo obsahujících materiálů, tak i z pohledu široké škály vlastností železa v různých valenčních stavech (reduktivní vlastnosti železa ve valenčním stavu 0 a II^3 , oxidační vlastnosti železa ve valenčních stavech IV , V a VI^4). V neposlední řadě je výhodou i obecně nízká toxicita oxidů železa, které bývají typickými reakčními produkty po použití (nano)materiálů v technologiích čištění vod^{5,6}, a tyto oxidy železa mají obdobné vlastnosti jako přírodně se vyskytující analogy⁷.

V příspěvku budou prezentovány výsledky studia reaktivity (nano)materiálů nově vyvíjených na půdě RCPTM – jak nanočástic kovového železa (tzn. materiálů pro reduktivní technologie čištění především podzemních vod) a kompozitních materiálů na bázi nanočástic kovového železa na uhlíkové matici (materiály pro kombinované reduktivně-sorpční technologie), tak i oxidů železa (sorbenty pro rozpuštěné látky v povrchových a odpadních vodách) a superoxidů železa (železičitany, železačnany a železany alkalických kovů pro oxidační technologie čištění širokého spektra vod a polutantů). Využití jednotlivých materiálů bude demonstrováno na modelových vodách s organickými (PCE, TCE, DCE) i anorganickými látkami (Cr, As, Cu, P, kyanidy), a zároveň budou prezentovány výsledky z pilotního nasazení identických materiálů (připravovaných v průmyslovém měřítku firmou NANO IRON) pro sanace reálných kontaminovaných lokalit. Reakční mechanismy a kinetiky reakcí jsou rozdílné pro laboratorní a pilotní experimenty, kdy hlavním rozdílem v charakteru vod je nepoměrně komplikovanější složení reálných kontaminovaných vod. Dalším zásadním rozdílem v případě sanace podzemních vod je přítomnost sedimentu (horninového prostředí), které může také ovlivňovat chování použitých nanočástic kovového

železa při reduktivní degradaci chlorovaných uhlovodíků.

Tato práce vznikla za finanční podpory Technologické agentury České republiky (projekt TE01020218) a projektu 7FP - NANOREM.

LITERATURA

1. Soukupova J., Zboril R., Medrik I., Filip J., Safarova K., Ledl R., Mashlan M., Nosek J., Cernik M.: Chem. Eng. J. 262, 813 (2015).
2. Kiliánová M., Pucek R., Filip J., Kolařík J., Kvítek L., Panáček A., Tuček J., Zbořil R.: Chemosphere 93, 2690 (2013).
3. Němeček J., Pokorný P., Lhotský O., Knytl V., Najmanová P., Steinová J., Černík M., Filipová A., Filip J., Cajthaml T.: Sci. Total. Environ. 563, 822 (2016).
4. Filip J., Yngard R. A., Siskova K., Marusak Z., Ettl V., Zboril R., Sharma, V. K.: Chem. Eur. J. 17, 10097 (2011).
5. Filip J., Karlický F., Marušák Z., Černík M., Otyepka M., Zbořil R.: J. Phys. Chem. C 118, 13817 (2014).
6. Pucek R., Tuček J., Kolařík J., Filip J., Marušák Z., Sharma V. K., Zbořil R.: Environ. Sci. Technol. 47, 3283 (2013).
7. Sharma V. K., Filip J., Zboril R., Varma R. S.: Chem. Soc. Rev. 44, 8410 (2015).

6L-01

N-HETEROTRIANGULENES AS VERSATILE PLATFORMS FOR THE CONSTRUCTION OF NITROGEN-DOPED POLYAROMATICS

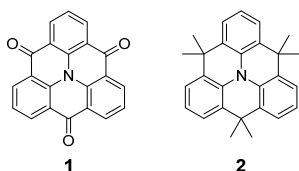
MILAN KIVALA*, NATALIE HAMMER, UTE MEINHARDT, BETTINA D. GLIEMANN

Department of Chemistry and Pharmacy, University of Erlangen-Nürnberg, Henkestrasse 42, D-91054 Erlangen, Germany
milan.kivala@fau.de

The incorporation of heteroatoms directly into the sp^2 -carbon skeleton of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) provides a powerful tool – next to variation of their size and periphery and/or lateral decoration with various substituents – to manipulate their optoelectronic properties and supramolecular behavior¹. Nitrogen is particularly appealing as it can readily adopt a planar sp^2 -hybridized conformation due to its favorable van der Waals radius to enable for efficient electronic communication with the surrounding p-system.

In this context, we have identified carbonyl- (**1**) and dimethylmethylene-bridged (**2**) triphenylamines, so-called *N*-heterotriangulenes^{2,3}, as versatile platforms for the construction of unprecedented nitrogen-doped covalent and supramolecular architectures with unusual electronic and materials characteristics.

In this contribution, we provide an overview of our synthetic efforts involving the *N*-heterotriangulene scaffolds **1** and **2** and discuss the optoelectronic, redox, and self-assembly properties of the resulting scaffolds^{4,5}.



This work was supported by the Deutsche Forschungsgemeinschaft as part of SFB 953 “Synthetic Carbon Allotropes”.

REFERENCES

1. Dral P. O., Kivala M., Clark T.: *J. Org. Chem.* 78, 1894 (2013).
2. Hellwinkel D., Melan M.: *Chem. Ber.* 104, 1001 (1971).
3. Hammer N., Schaub T. A., Meinhardt U., Kivala M.: *Chem. Rec.* 15, 1119 (2015).
4. Hammer N., Shubina T. E., Gisselbrecht J.-P., Hampel F., Kivala M.: *J. Org. Chem.* 80, 2418 (2015).
5. Steiner C., Gliemann B. D., Meinhardt U., Gurrath M., Meyer B., Kivala M., Maier S.: *J. Phys. Chem. C* 119, 25945 (2015).

6L-02

KŘEMÍK JAKO VĚTVICÍ ATOM: LIGANDY, KOMPLEXY A IONTOVÉ KAPALINY

JAN ČERMÁK^a, TOMÁŠ STRAŠÁK^b, LUCIE ČERVENKOVÁ ŠŤASTNÁ^b, VERONIKA BÍLKOVÁ^b

^a Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta UJEP v Ústí nad Labem, České mládeže 8, 400 01, Ústí n. L., ^b Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Rozvojová 135, 165 02 Praha 6, Česká republika
cermak@icpf.cas.cz

Byla připravena série nových vysoce fluorofilních sloučenin s tris(3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8,8,8-tridekafluoroktyl)silylovým substituentem. Podle potenciálního využití připravených sloučenin může být série rozdělena do tří skupin: a) cyklopentadienylové komplexy přechodných kovů a dusíkaté ligandy, např. *I*, b) synthony pro [3 + 2] cykloadici alkyln – azid, např. *II*, c) iontové kapaliny imidazoliového typu, např. *III*, (Schéma 1)^{1,2}.

Byly dále změřeny rozdělovací koeficienty mezi fluorovou a organickou fází ve standardním systému perfluor (methylcyklohexan)/toluen několika různými metodami pro tyto a několik dalších podobných sloučenin. U všech sloučenin byla použita gravimetrie a ¹⁹F NMR spektroskopie zatímco plynová chromatografie a AAS/AES spektroskopie byly využity jen pro vhodné látky. Nejvyšších hodnot rozdělovacího koeficientu dosahovaly iontové kapaliny.

Oxidativní adice perfluoralkyl jodidů na karbonylový komplex *I* poskytla komplexy kobaltu(III), ve kterých byl perfluoralkyl vázán přímo na centrální atom.

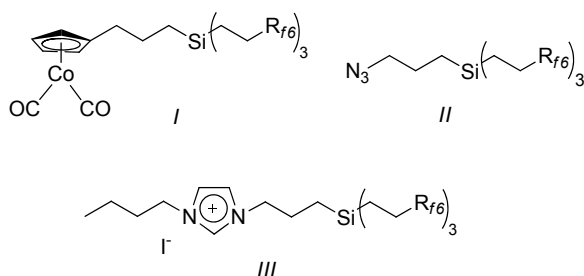


Schéma 1. Příklady připravených sloučenin

LITERATURA

1. Strašák T., Čermák J., Červenková Šťastná L., Sýkora J., Fajgar R.: *J. Fluorine Chem.* 159, 15 (2014).
2. Strašák T., Červenková Šťastná L., Bílková V., Skoupá V., Karban J., Cuřínová P., Čermák J.: *J. Fluorine Chem.* 178, 23 (2015).

6L-03

OD UMĚLÝCH DNA MODIFIKACÍ K NOVÉ PŘIROZENÉ MODIFIKACI RNA

HANA MACÍČKOVÁ CAHOVÁ

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.,
Flemingovo náměstí 542/2, Praha 6, 166 10, Česká republika
cahova@uochb.cas.cz

Nukleové kyseliny (DNA, RNA) jsou biopolymery přítomné ve všech známých formách života. Díky sekvenci nukleotidů v DNA či RNA dokáží kódovat a přenášet genetickou informaci. Pochopení detailní chemické struktury a interakce nukleových kyselin s ostatními partnery v buňce je klíčem k diagnostice a léčbě mnoha chorob. Chemické modifikace DNA jako je methylace cytidinu nebo N-6 methylace adeninu stejně tak jako více než 150 známých chemických modifikací RNA nám poukazují i na další možnost, jak příroda ovlivňuje tok informací z nukleových kyselin.

Vkládání tzv. umělých chemických modifikací do DNA, obsahujících elektrochemicky aktivní skupiny jako je nitro, amino¹ nebo sulfany² bylo součástí našeho vývoje elektrochemického značení DNA pro diagnostické účely. Modifikované oligonukleotidy byly připraveny enzymovou inkorporací modifikovaných deoxynukleosid trifosfátů pomocí DNA polymeras. DNA nesoucí jak nitrofenylovou, aminofenylovou tak fenylsulfanylovou skupinu byla elektrochemicky aktivní a byla využita pro takzvané DNA minisekvencování.

Jakákoliv molekulárně biologická manipulace s DNA vyžaduje využití restrikčních endonukleas (RE), které rozeznávají palindromické nebo symetrické sekvence DNA a štěpí je. Naším cílem bylo prověřit možnosti manipulace modifikované DNA právě těmito enzymy. Překvapivě jsme pozorovali velkou toleranci těchto enzymů k modifikovanému adeninu³ nebo deoxyuridinu v rozpoznávací sekvenci. Oproti tomu modifikace polohy 5 cytidinu⁴ v rozpoznávací sekvenci vedla téměř vždy k zablokování procesu štěpení RE. Těchto poznatků jsme využili při vývoji tzv. přechodného chránění DNA před štěpením RE⁵.

Modifikace lze vkládat do DNA několika způsoby. Buď je možno využít modifikované stavební bloky jako jsou deoxynukleosid trifosfáty a přímět DNA polymerasu z takovýchto bloků stavět modifikovanou DNA, nebo můžeme DNA upravovat tzv. postsynteticky. Takovou metodu jsme zvolili při vývoji nového typu fotopřepínatelné DNA. Fotopřepínače jsme vkládali vodnou Suzukiho reakcí přímo do jódovaných oligonukleotidů. DNA obsahující diarylethenové fotopřepínače jsme využili při manipulaci in vitro transkripce pomocí světla⁶.

Všechny výše zmíněné modifikace jsou umělé a mají nám umožnit rozšířit repertoár vlastností DNA nebo RNA. Příroda sama se však také neomezuje jen na základní 4 nukleotidy a využívá také chemické modifikace. Jednou z nedávno objevených modifikací RNA je Nikotinadenindinukleotid (NAD). Přítomnost NAD-RNA byla prokázána v prokaryotických buňkách ale nebylo známo nic o její struktuře, sekvenci ani funkci. Nám se podařilo vyvinout tzv. NADseq metodu⁷. Pomocí chemo-enzymové reakce

s ADP ribosylcyklasou a pentynolem vkládáme do RNA trojnou vazbu. Takovou RNA pak můžeme selektivně ve směsi izolované totální RNA biotinylovat cykloadicí azidu za katalýzy mědi. Po zachycení biotinylované RNA na streptavidinových kuličkách byla RNA selektivně amplifikována kombinací molekulárně biologických technik a následně jsme připravili knihovny pro „Next generation sequencing“. Bioinformatická analýza odhalila přítomnost NAD na 5' koncích krátkých nekódujících RNA – sRNA a dříve neznámých krátkých fragmentů kódující mRNA. Většina nalezených sRNA hraje nějakou regulační roli při odpovědi buňky na stres. Nicméně přesný mechanismus účinku není znám.

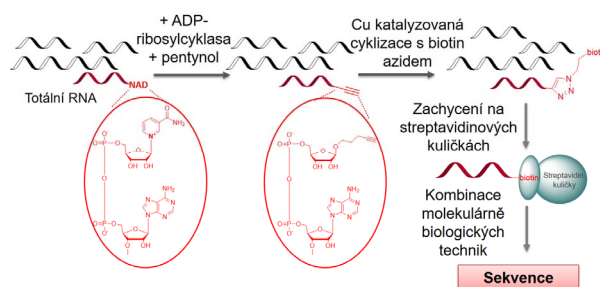


Schéma 1. NADseq metoda pro odhalení RNA s kovalentně vázaným NAD

Je otázkou jaké další RNA modifikace ještě čekají na objevení. Především vyhledávání chemických RNA modifikací v eukaryotickém transkriptomu stále naráží na limity dnes dostupných metod. Eukaryotické viry se vyvíjely společně s eukaryotickými buňkami. Využívají velmi podobné biomolekuly a tak mohou, jako již několikrát v minulosti (například tzv. RNA čepička byla nejdříve objevena ve virech), pomoci při objevu nových chemických RNA modifikací. Cílem našeho nynějšího výzkumu je detailní analýza genomové, kódující i regulační RNA savčích virů pomocí hmotnostní spektrometrie a kombinace chemicko biologických technik.

LITERATURA

1. Cahová H., Havran L., Brázdilová P., Pivoňková H., Pohl R., Fojta M., Hocek M.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 47, 2059 (2008).
2. Macíčková-Cahová H., Pohl R., Horáková P., Havran L., Špaček J., Fojta M., Hocek M.: *Chemistry* 17, 5833 (2011).
3. Macíčková-Cahová H., Hocek M.: *Nucleic Acids Res.* 37, 7612 (2009).
4. Macíčková-Cahová H., Pohl R., Hocek M.: *Chembiochem* 12, 431 (2011).
5. Kielkowski P., Macíčková-Cahová H., Pohl R., Hocek M.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 50, 8727 (2011).
6. Cahová H., Jäschke A.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 52, 3186 (2013).
7. Cahová H., Winz M.-L., Höfer K., Nübel G., Jäschke A.: *Nature* 519, 374 (2015).

6L-04**POČTY A VÝPOČTY V ORGANICKÉ CHEMII****OLDŘICH PYTELA**

*Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav organické chemie, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika
olpytela@gmail.com*

Matematický aparát je obecným nástrojem popisu, analýzy, interpretace a predikce vlastností nebo reaktivit organických sloučenin. Matematické metody se v organické chemii uplatňují zejména v počítačové chemii a při matematicko-statistickém zpracování experimentálních dat v chemometrii. Řada těchto postupů je rovněž využitelná při výuce organické chemie.

Do počítačové chemie spadají zejména metody založené na molekulové mechanice (MM), teorii funkcionálu hustoty (DFT) a kvantové mechanice (QM), přiřadit můžeme i počítačové simulace některých vlastností molekul, zobrazovací postupy a další příbuzné metody. Těmito metodami lze u izolovaných molekul vypočítat a popřípadě i vizualizovat řadu užitečných vlastností, zejména geometrii molekuly, energii molekulárních orbitalů nebo určitých, např. reakčních stavů molekuly, předpovědět spektrální vlastnosti apod. Perspektivní jsou výpočty interakcí malé molekuly, např. léčiva, s velkou molekulou, např. s enzymem.

Chemometrické postupy zahrnují numerické metody, jako jsou např. derivace, interpolace, vyhlazování, a základní metody matematické statistiky, jako je průzkumová analýza, analýza rozptylu, korelační analýza, regresní analýza, metody s latentními proměnnými, klasifikační metody a jiné. V organické chemii se tyto metody využívají např. při stanovení rovnovážných a rychlostních konstant, konstant stability komplexů, velmi rozsáhle pak při vyhodnocování vztahů mezi strukturou a chemickými nebo biologickými vlastnostmi molekul. Zvláštní skupinu tvoří speciální algoritmy navržené pro řešení netypických úloh, jako jsou například autorem navržené symetrizace přibližně symetrických molekul, konstrukce aciditních funkcí ze spektrálních měření, fragmentová analýza v korelaci s hmotovými spektry nebo 3D vizualizace základních reakčních mechanismů.

Vybrané postupy budou demonstrovány na výsledcích získaných programy OPstat¹ a OPchem².

Tato práce byla podpořena Technologickou agenturou České republiky (TE01020022, Flexprint).

LITERATURA

1. Pytela O.: Program OPstat. Ver. 6.8 pro Windows, 2015. Dostupné z <http://bures.upce.cz/OPgm/>, freeware.
2. Pytela O.: Program OPchem. Ver. 7.16 pro Windows, 2016. Dostupné z <http://bures.upce.cz/OPgm/>, freeware.

6L-05**VLIV STRUKTURÁLNÍHO USPOŘÁDÁNÍ PUSH-PULL CHROMOFORŮ NA JEJICH OPTOELEKTRONICKÉ VLASTNOSTI****MILAN KLIKAR, FILIP BUREŠ**

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

Vzrůstající zájem o organické push-pull chromofory se datuje od 60. let minulého století a souvisí s objevem laseru. Právě u push-pull chromoforů lze po interakci s laserovým paprskem pozorovat nelineárně optické děje (NLO), které umožnily následný rozvoj optoelektroniky a souvisejících oborů. V dnešní době náleží organickým push-pull chromoforům tradiční a pevná pozice v materiálové chemii, která je poskytuje v mnoha strukturních variacích a fyzikálních parametrech pro účely využití především v optoelektronických, polovodičových a telekomunikačních zařízeních jako jsou OPVC, OLED, 2PA, DSSC, BHJSC, OFET a jiné. Využitelnost v takovýchto zařízeních je dána především barevností, dipolárním charakterem a polarizovatelností push-pull chromoforů, jejich výbornými a snadno laditelnými lineárními a nelineárními optickými, jakož i elektronickými (HOMO/LUMO) vlastnostmi. Především právě ze získaných optických a elektronických vlastností cílových push-pull chromoforů lze snadno definovat pozorované vztahy „struktura-vlastnosti“.

V nedávné době byla v naší pracovní skupině provedena rozsáhlá studie popisující vliv multipoladity (strukturálního větvení) na celkové optoelektronické vlastnosti postupně větvených molekul, které navíc systematicky mění délku p-systému a typ akceptorní jednotky. V příspěvku bude diskutována jak příprava těchto molekul, tak i vyvozeny vztahy „struktura-vlastnosti“, plynoucí z elektrochemických a lineárně a nelineárně optických dat, jakož i z výpočetních metod¹. V roce 2013 byla naší skupinou ověřena vysoká akceptorní schopnost *N,N'*-dibutylbarbiturové kyseliny². Jelikož je kyselina barbiturová derivátem malonové kyseliny, vznikla tak myšlenka porovnání elektronakceptorní síly jednotlivých derivátů malonové kyseliny a jejich 1,3-diketo analogů. Byla připravena rozsáhlá série push-pull chromoforů, které nesou stejnou donorní jednotku a liší se rozsahem p-systému a počtem a typem akceptorních jednotek na bázi 6 derivátů malonové kyseliny a jejich dvou 1,3-diketo analogů³.

Tato práce byla podpořena Technologickou agenturou České republiky (TE01020022, Flexprint).

LITERATURA

1. Klikar M., Kityk I. V., Kulwas D., Mikysek T., Pytela O., Bureš F.: Chem. Asian J., zasláno.
2. Klikar M., Bureš F., Pytela O., Mikysek T., Padělková Z., Barsella A., Dorkenoo K., Achelle S.: New J. Chem. 37, 4230 (2013).
3. Klikar M., Růžičková Z., Mikysek T., Pytela O., Bureš F.: Eur. J. Org. Chem., rozpracováno.

6L-06**ZPRACOVÁNÍ KONCENTRÁTU MASTNÝCH KYSELIN Z RAFINACE ROSTLINNÝCH OLEJŮ NA FAME KYSELE KATALYZOVANOU ESTERIFIKACÍ A TRANSESTERIFIKACÍ****LENKA SOUKUPOVÁ, JIŘÍ KOLENA**

Unipetrol výzkumně vzdělávací centrum, a.s., Revoluční 84,
č.p. 1521, 400 01 Ústí nad Labem, Česká republika
Lenka.soukupova@unicre.cz

Zvyšující se poptávka po složkách paliv z obnovitelných zdrojů, motivovaná direktivou Evropské unie¹, vede k hledání alternativních surovin pro jejich výrobu. V případě metylesterů vyšších mastných kyselin (FAME) se jeví jako perspektivní surovina použité potravinářské tuky a oleje, ty však obsahují kromě triglyceridů (TG) i vysoký obsah volných mastných kyselin (VMK)^{2,3}. VMK je možné a výhodné před dalším zpracováním odstranit alkalickou rafinací a neutralizací s následující separací mýdlového roztoku (tzv. soapstocku) od oleje. Koncentrát mastných kyselin (FFA) je pak možno uvolnit kyselým štěpením tohoto mýdlového roztoku. Vzhledem k původu se jedná o kyselé oleje tvořené směsí VMK s různým podílem TG, vody, minerálních látek a dalších nečistot³. Uvedeným způsobem je možné a z hlediska dalšího zpracování i výhodné, zbavovat VMK i čerstvé rostlinné oleje.

Většina stávajících výrobních jednotek FAME využívá alkalicky katalyzovanou transesterifikaci rostlinných olejů (TG) metanolem, kterou ale nelze zpracovávat oleje s vyšším obsahem VMK (např. FFA), neboť alkalický katalyzátor s VMK tvoří mýdla. Uvedený problém by mohl být eliminován použitím dostatečně aktivního kyselého katalyzátoru. Ověření účinnosti vybraného kyselého katalyzátoru jak pro esterifikaci VMK (25 %), tak pro transesterifikaci TG v FFA bylo cílem této práce. Jako katalyzátor byla zvolena kys. methansulfonová, odzkoušená a využívaná v některých procesech esterifikace.

Všechny pokusy byly provedeny ve 3 reakčních stupních. V prvním stupni probíhalo především odstranění VMK, tedy esterifikace. Následující dva stupně byly zaměřeny na transesterifikaci, odstranění mono-, di- a triglyceridů. Nejlepších výsledků bylo dosaženo za podmínek uvedených v tab. I.

Nejkvalitnější methylester získaný třístupňovou esterifikací a transesterifikací frakce FFA byly podroben

analýze, při které byl zjištěn 99% obsah FAME, obsah VMK 1 %, obsah glycerolu 0,4 % a obsah TG 0,5 %.

Projekt byl řešen s finanční podporou Ministerstva průmyslu a obchodu České republiky, které poskytlo prostředky v rámci Institucionální podpory na dlouhodobý koncepční rozvoj výzkumné organizace. Projekt byl začleněn do Národního programu udržitelnosti I Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky prostřednictvím projektu Rozvoj centra UniCRE, identifikační kód LO1606.

LITERATURA

1. Směrnice Evropského parlamentu a Rady (EU) 2015/1513 ze dne 9. září 2015, kterou se mění směrnice 98/70/ES o jakosti benzínu a motorové nafty a směrnice 2009/28/ES o podpoře využívání energie z obnovitelných zdrojů (Text s významem pro EHP)
2. Turan S., Yalcuk A.: Journal of the American Oil Chemists' Society, 90 (11), 1761 (2013).
3. Piloto-Rodríguez R., Melo E. A., Goyos-Pérez L., Verhelst S.: Brazilian journal of chemical engineering, 31 (2), 287 (2014).

6L-07**PUSH-PULL DERIVÁTY PYRAZIN-2,3-DIKARBONITRILU JAKO EFEKTIVNÍ FOTOREDOX KATALYZÁTORY****FILIP BUREŠ**

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

Vzhledem k její relativní jednoduchosti, široké škále možností a dostupnosti, představuje v dnešní době fotoredox katalýza viditelným světlem významný syntetický nástroj organického chemika. Fotoredox reakcemi lze tvořit nejenom C-C, ale i C-P či C-N vazby. V současnosti směřuje pozornost k aplikacím organických push-pull chromoforů jako fotoredox katalyzátorů, kterými lze nahradit nejen komplexy přechodných kovů, ale i běžná barviva typu rhodamin, eosin apod. Obecně je hledána taková substance, která vykazuje absorpci ve viditelné oblasti spektra a má fotoredox vlastnosti „vyladěné“ pro daný fotokatalytický proces.

V naší skupině byly v nedávné době připraveny 4,5-disubstituované deriváty pyrazin-2,3-dikarbonitrilu (dikyanpyrazinu, DPZ), které představují push-pull chromofory ve tvaru písmene X. Tyto sloučeniny našly uplatnění například v nelineární optice¹. V posledních několika letech se však DPZ deriváty podařilo využít i jako efektivní fotoredox katalyzátory s laditelnými vlastnostmi. Postupným strukturálními obměnami základního push-pull DPZ byl vyvinut katalyzátor nesoucí methoxythienyl donor, který je schopný katalyzovat cross-dehydrogenativní coupling tetrahydroisochinolinů (THIQ) využívající jednáč běžných nukleofilů (RCH₂NO₂, aceton, TMSCN apod.)², tak i itakonimidu³, který vykazoval výraznou chemodivergenci za vzniku třech zcela nových derivátů THIQ (Schéma 1).

Tabulka I

Reakční podmínky esterif. a transester. VMK (3 st)

Parametr	1. st	2. st	3. st
m _{sur.} [g]	500	500	500
m _{CH₃OH} [g]	110	70	70
V _{KMS} [ml] (kat.)	5	10	10
t [°C]	65	65	65
Doba reakce [min]	120	360	360

Výrazná katalytická aktivita DPZ katalyzátoru byla dále demonstrována v enantioselektivní oxidativní C(sp³)-H olefinaci aminů⁴. V příspěvku bude diskutován jednak vývoj a příprava katalyzátoru, jakžto jeho úspěšné aplikace ve vybraných fotoredox reakcích.

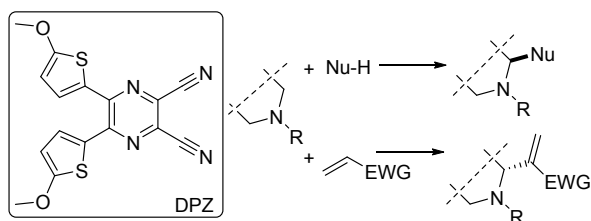


Schéma 1. Obecná struktura a vybrané aplikace push-pull DPZ derivátů ve fotoredox katalýze

Tato práce byla podpořena Technologickou agenturou České republiky (TE01020022, Flexprint).

LITERATURA

1. Bureš F., Čermáková H., Kulhánek J., Ludwig M., Kuznik W., Kityk I. V., Mikysek T., Růžička A.: *Eur. J. Org. Chem.* 2012, 529 (2012).
2. Zhao Y., Zhang C., Chin K. F., Pytela O., Wei G., Liu H., Bureš F., Jiang Z.: *RSC Adv.* 4, 30062 (2014).
3. Liu X., Ye X., Bureš F., Liu H., Jiang Z.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 54, 11443 (2015).
4. Wei G., Zhang C., Bureš F., Ye X., Liu H., Jiang Z.: *ACS Catal.* zasláno (2016).

6P-01

N-ARYL- AND N-HETEROARYL- β -D-GLUCURONAMIDES AS POTENTIAL ANTICANCER AGENTS: SYNTHESIS AND SPECTROSCOPIC ANALYSIS**ZUZANA HRICOVÍNIOVÁ^{a,*}, MICHAL HRICOVÍNÍ^b, VLASTA BREZOVÁ^b, PETER MAGDOLEN^c**

^a Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, SK-845 38 Bratislava, ^b Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, SK-812 37 Bratislava, ^c Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences Comenius University, SK-842 15 Bratislava, Slovakia
Zuzana.Hricoviniova@savba.sk

The heterocyclic structural motif is often present in many biologically active glycoconjugates where the saccharide part plays important role in their biological activity. The incorporation of a sugar moiety noticeably affects the compound's physicochemical and pharmacokinetic properties such as absorption, distribution, biotransformation, and excretion. Our attention has been directed towards synthesis of D-glucuronic acid conjugates by incorporating the aromatic and GlcA moieties into a single molecular framework. A series of structurally diverse D-glucuronic acid derivatives, comprising various aromatic scaffolds, was synthesized and characterized with the aim of developing new prodrug candidates. The presented ultrasound-assisted protocol provides a convenient way for the synthesis of *N*-aryl- and *N*-heteroaryl-substituted D-glucuronamides with improved bioavailability. New conjugates containing benzene, naphthalene, indole, quinoxaline, and benzothiazole moieties were prepared in high yields (41–85 %). Their structures were elucidated by various spectroscopic methods, including NMR, and their potential in the photoactivation of molecular oxygen was monitored by EPR spectroscopy¹. The structural and photoactive properties of these conjugates make them promising candidates for biological/photobiological activity tests. The application of the presented approach for the synthesis of biologically active compounds makes the method attractive because of their potential use in biomedical and pharmaceutical chemistry.

This work was supported by the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic (Projects VEGA 2/0100/14 and VEGA 1/0041/15).

REFERENCE

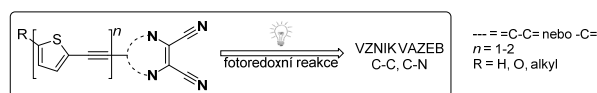
1. Hricovíniová Z., Hricovíni M., Brezová V., Magdolen P.: Tetrahedron Asymm. in press.

6P-02

PUSH-PULL CHROMOFORY VE SLUŽBÁCH FOTOREDOX KATALÝZY**ZUZANA HLOUŠKOVÁ, FILIP BUREŠ**

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

Fotoredox katalýza využívající čistě organické fotoredox katalyzátory poutá v posledních letech významnou pozornost jako vhodný nástroj aktivace malých molekul. Fotoredox katalýzu viditelným světlem lze pak považovat za metodu dostupnou, levnou a šetrnou k životnímu prostředí. V naší pracovní skupině byly v nedávné době zkoumány nové push-pull sloučeniny na bázi 5,6-disubstituovaného pyrazin-2,3-dikarbonitrilu. Jeden z těchto derivátů se ukázal jako velice účinný fotoredox katalyzátor v cross-dehydrogenativním couplingu (CDC) využívající *N*-aryl-tetrahydroisochinolinů a nitroalkanů^{1,2}. V současné době jsou prováděny strukturální modifikace nedávno vyvinutého katalyzátoru s cílem efektivně využít celé viditelné spektrum světla a optimalizovat energetický rozdíl HOMO a LUMO fotoredox katalyzátoru. U cílových chromoforů dochází k obměnám akceptorní části, kterou je pyrazin-2,3-dikarbonitril nebo 1-methyl-1*H*-imidazol-4,5-dikarbonitril a také délky a složení π -konjugovaného systému (2,5-thienyl v kombinaci s násobnými vazbami). Jako donorní jednotka byla využita methoxyskupina. Obrázek 1 zobrazuje obecnou strukturu nově vyvíjených fotoredox katalyzátorů ve tvaru písmene X nebo Y. V příspěvku budou diskutovány syntetické cesty vedoucí k těmto sloučeninám a jejich možné uplatnění ve fotoredox reakcích.



Obr. 1. Obecná struktura fotokatalyzátoru a jeho využití ve fotoredox reakci

Tato práce byla podpořena Technologickou agenturou České republiky (TE01020022, Flexprint).

LITERATURA

1. Zhao Y., Zhang C., Chin K. F., Pytela O., Wie G., Liu H., Bureš F., Jiang Z.: RSC Adv. 4, 30062 (2014).
2. Liu X., Ye X., Bureš F., Liu H., Jiang Z.: Angew. Chem. Int. Ed. 54, 11443 (2015).

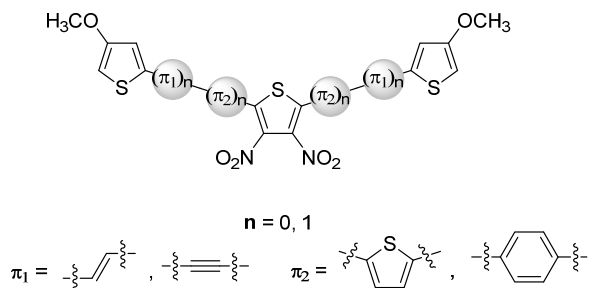
6P-03

3,4-DINITROTHIOFEN JAKO CENTRÁLNÍ JEDNOTKA V KVADRUPOLÁRNÍCH SYSTÉMECH**JIRÍ TYDLITÁT, FILIP BUREŠ, JIRÍ KULHÁNEK***

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

Organické molekuly obsahující jeden či více donorů (D) a jeden či více akceptorů (A) a konjugovaný systém násobných vazeb (π -můstky) tvoří široce zkoumanou skupinu látek. U takovýchto látek, často označovaných jako chromofory, dochází k vnitřnímu přenosu náboje, z něhož vychází řada zajímavých vlastností. Díky polarizaci v molekule a většinou i barevnosti jsou chromofory široce zkoumány pro jejich optoelektronické vlastnosti a nacházejí své uplatnění jako polovodiče, látky zvyšující účinnost solárních článků (DSSC), organické diody (OLEDs), organické transistory (OFETs) a další.

Oproti anorganickým materiálům s podobnou aplikací skýtají organické chromofory výhodu především v relativně snadné možnosti úpravy cílových vlastností volbou použitých donorů, akceptorů a délkou a typem použitých π -můstek. Na našem pracovišti se zabýváme syntézou chromoforů od nejjednodušších, s obecnou strukturou typu D- π -A, až po látky nesoucí několik donorů a/nebo akceptorů. V jejich tvaru můžeme častokrát nalézt podobu například s písmeny T, Y nebo X¹.

Schéma 1. 3,4-Dinitrothiofenové D- π -A- π -D chromofory

Tato práce navazuje na strukturně podobné D- π -A- π -D chromofory nesoucí 2,3,5,6-tetrafluorbenzen jako centrální akceptorní jednotku². Dalším cílem byl zájem o posouzení vlastností 3,4-dinitrothiofenové centrální jednotky (Schéma 1). Přesto že se jedná o známou strukturní jednotku, není využívána jako finální akceptor, ale nejčastěji se převádí sledem reakcí na centrální thienopyrazinovou jednotku³. V této práci byla připravena série devíti chromoforů, jejichž vlastnosti byly posuzovány.

LITERATURA

1. Klikar M., Solanke P., Tydlitát J., Bureš F.: Chem. Rec., v tisku.
2. Kulhánek J., Bureš F., Pytela O., Pippig F., Danko M., Mikysek T., Padělková Z., Ludwig M.: J. Fluorine Chem. 161, 15 (2014).

3. McNamara L. E., Liyanage N., Peddapuram A., Murphy J. S., Delcamp J. H., Hammer N. I.: J. Org. Chem. 81, 32 (2016).

6P-04

THE ANTIVIRAL EFFECT OF *FAGUS SYLVATICA* 4OME-GLUCURONOXYLAN SULFATES**CARLOS ALBERTO PUJOL^a, ELSA BEATRIZ DAMONTE^a, JOZEF TURJAN^b, PETER CAPEK^b**

^aLaboratorio de Virología, Departamento de Química Biológica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria, Pabellón 2, Piso 4, Buenos Aires, Argentina, ^bDepartment of Glycomaterials, Institute of Chemistry, Center for Glycomics, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, Bratislava, Slovakia
 chemtur@savba.sk

4OMe-glucuronoxylans are the second most widespread natural polymers of hardwoods, however, they did not find an adequate industrial application till now. Acidic pentosans consist of β -(1,4) linked xylopyranose backbone carrying the monomeric 4OMeglucuronic acid at O-2 as a side-chain, randomly distributed along the backbone¹. These renewable biopolymers represent a promising group of glycomaterials for various industrial applications. For a longer time the attention has been focused on the xylan and xylan-related biopolymers to enhance their application possibilities. Trends have led to the identification of new biological activities of native or functionally modified xylan-related polymers such as antioxidant, antitumor, antimicrobial, anti-inflammatory, antitussive, anticoagulant and antithrombotic activities²⁻⁴. Among the functional derivatives, the sulfated xylan, known as pentosan polysulfate (PPS), Elmiron, etc., prepared from beech 4OMe-glucuronoxylan, reached the widest application in pharmacy and medicine as an anticoagulant, antithrombotic, anti-inflammatory agents as well as the remedy to treat an interstitial cystitis and osteoarthritis^{5,6}.

The aim of our study was to verify the possible impact of 4OMe-glucuronoxylan sulfates, differing in molecular weight and degree of sulfation, against certain viruses. The antiviral activity was tested against human Herpes simplex virus (HSV) types 1 and 2 – agents of oral, genital and neurological infections⁴, Dengue virus (DENV) – a flavivirus agent of dengue fever and dengue hemorrhagic fever in humans⁵, and Polio virus (PV) – a neurotropic enterovirus causing poliomyelitis⁶.

This study was supported by the Slovak Research and Development Agency (APVV), Grant No. 0305/12, the Slovak Scientific Grant Agency VEGA, Grant No. 2/0018/15, Agencia Nacional para la Promoción Científica y Tecnológica (ANPCyT, Argentina), Grant Nos. 0506, and 0404.

REFERENCES

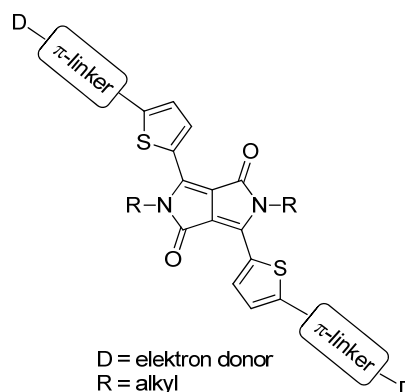
1. Ebringerová A., Hromadková Z., Heinze T.: Adv. Polym. Sci. 186, 1 (2005).
2. Scully M. F., Kakkar V.: Biochem. J. 218, 657 (1984).

- Ghosh P., Smith M.: *Biogerontology* 3, 85 (2002).
- Whitley R. J., Roizman B., v knize: *Clinical Virology* (third ed.), Richmann D. D., Whitley R. J., Hayden F. G. (Eds.), s. 409, ASM Press, Ltd., Washington 2009.
- Guzmán M. G., Harris E.: *Dengue Lancet* 385, 453 (2015).
- Pujol C. A., Damonte E. B., Turjan J., Capek P.: *Int. J. Macromol. Biol.* 87, 195 (2016).

6P-05**3,6-DISUBSTITUOVANÉ DERIVÁTY
2,5-DIHYDROPYRROLO[3,4-C]PYRROL-1,4-DIONU****JAN PODLESNÝ, FILIP BUREŠ***

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

Jednou z prvních aplikací DiketoPyrroloPyrrolů (DPP) bylo jejich využití jako barviv a pigmentů v různých odvětvích průmyslu jako jsou automobilový průmysl, kosmetika, textilní průmysl nebo barevné filtry pro LCD displeje¹. Nyní DPP nachází využití v (opto)elektronických zařízeních typu OLED, OFET, DSSC nebo OPV. Tyto aplikace jsou založeny na skutečnosti, že DPP sestává z bicyklického laktamového skeletu, který se chová jako π -konjugovaná elektron-akceptorní část. Nejfrekventovanější způsob syntézy 3,6-disubstituovaných DPP derivátů je reakce mezi (hetero)aromatickým nitrilem a sukcinátem v přítomnosti *t*-amylalkoholátu². Tato cesta umožňuje přípravu kvadrupolárních push-pull-push nebo D- π -A- π -D systému se dvěma periferními donory a centrálním DPP akceptorem. V takových molekulách dochází k intramolekulárnímu přenosu náboje (ICT) z donorních substituentů směrem k akceptorní části³. Výrazného zvýšení rozpustnosti lze dosáhnout *N*-alkylací centrálního laktamového jádra pomocí delších uhlovodíkových řetězců⁴. Strukturální modifikací periferních donorů v polohách 3 a 6 lze ladit požadované vlastnosti jako jsou energie HOMO a LUMO, pozici nejdélnějšího absorpčního maxima a další. Tyto strukturální modifikace mohou být realizovány prodloužením π -konjugovaného systému tzn. navázáním (hetero)aromatických cyklů, mezi nimiž se mohou nacházet násobné vazby. Jako vhodná reakční cesta pro takovou strukturální úpravu se ukazuje halogenace⁵ periferních substituentů základního DPP skeletu a následná cross-couplingová reakce. Tímto způsobem bylo připraveno deset nových DPP chromoforů nesoucích periferní donorní skupiny jako je 4-*N,N*-dimethylaminofenyl, 4-methoxyfenyl, thiofen, 2-methoxythiofen nebo ferrocén (obr. 1). Základní vztahy mezi strukturou a vlastnostmi těchto derivátů byly studovány pomocí UV-VIS spektroskopie, fluorescenční emisní spektroskopie, diferenční skenovací kalorimetrie a cyklické voltametrie.



Obr. 1. Obecná struktura studovaných DPP derivátů

Tato práce byla podpořena Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

LITERATURA

- Eliáš Z. Disertační práce, Univerzita Pardubice, 2013.
- Stas S., Sergeev S., Geerts Y.: *Tetrahedron* 66, 1837 (2010).
- Bureš F.: *RSC Adv.* 4, 58826 (2014).
- Zhou E., Wei Q., Yamakawa S., Zhang Y., Tajima K., Yang Ch., Hashimoto K.: *Macromolecules* 43, 821 (2010).
- Matthews J. R., Niu W., Tandia A., Wallace A. L., Hu J., Lee W. Y., Giri G., Mannsfeld C. B., Xie Y., Cai S., Fong H. H., Bao Z., He M.: *Chem. Mater.* 25, 782 (2013).

6P-06**SENSITIVE STRONGLY BASIC ANION SENSING BY
PENTAFLUOROPHENYLHYDRAZONES OF ISATIN****PAVOL TISOVSKÝ, MIROSLAV HORVÁTH, MAREK
CIGÁŇ, KLAUDIA JAKUSOVÁ, JURAJ FILO,
MARTIN GÁPLOVSKÝ, ANTON GÁPLOVSKÝ**

Faculty of Natural Sciences, Institute of Chemistry, Comenius University, Ilkovičova 6, 84215 Bratislava, Slovakia
tisoovsky@fns.uniba.sk

Ion and neutral molecule recognition and signalling is currently one of the most intense emerging areas of supramolecular chemistry. Due to the facile synthesis and easily tunable NH acidity, amides, ureas and thioureas are the most widely employed hydrogen bond donor groups in anion sensor systems, and this has not changed during last three years¹. Detection of anions in aqueous environments is currently the most interesting target in the chemosensor field². This is, however, unachievable for most designs relying in hydrogen bonding, since even minute amounts of water disrupt these interactions.

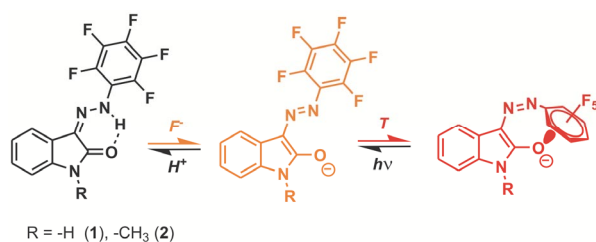
Herein, we focused on research of isatin pentafluorophenylhydrazones. In the last three years, hydrazones found important application in various areas of supramolecular chemistry as molecular switches, photo- and thermo-sensitive supramolecular arrangement and

colorimetric or fluorescent chemosensors³. Our recent two studies investigated the photochromic properties of basic isatin phenylhydrazones and isatin diphenylhydrazones as a new type of molecular switches^{4,5}. Isatin presence in the structure shifts their absorption to the Vis-region of the electromagnetic spectrum, and the isomerization around the C=N double bond bestows them a simple On-Off photochromic character. However, the hydrazine NH group deprotonation sensitivity in basic isatin phenylhydrazones was insufficient to produce effective F⁻ or CH₃COO⁻ colorimetric sensors.

Due to the more significant difference between absorption maxima of corresponding protonated and deprotonated forms and more acidic character of hydrazone (aniline) NH hydrogen, studied isatin pentafluorophenylhydrazones **1** and **2** (Scheme 1) are significantly more sensitive to strongly basic anions compared to isatin phenylhydrazones⁶.

The F⁻ or CH₃COO⁻ anion addition to **1** or **2** DMF solution results in hydrazone NH group deprotonation (acid-base keto/enolate reaction), with significant equilibrium shift to the more conjugated *E*-azo enolate side (Scheme 1). The acid-base keto (hydrazo)/enolate (azo) equilibrium is accompanied by the decrease of the initial long-wavelength absorption band intensity and simultaneous appearance of the new bathochromically shifted absorption band at 450 nm (Fig. 1). Initial solution thus turns orange.

Unexpected additional *E/Z* isomerization leads to modest hypsochromic (blue) shift of the rapidly formed *E*-azo enolate absorption band at 450 nm, however without solution colour change. Stabilization of the *Z*-azo enolate form results from σ -type anion- π interaction between positively charged pentafluorophenyl aromatic ring (significant electron density withdraw due to the presence of fluorines results in positive quadrupolar moment generation) and negatively charged isatin oxygen.



Scheme 1. Deprotonation of *Z*-isomers by strongly basic anion (acid-base keto/enolate equilibrium) followed by *E/Z* isomerization of *E*-azo enolate form

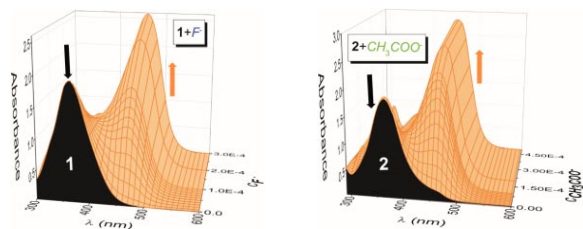


Fig. 1. UV-Vis spectrum of isatin pentafluorophenylhydrazones **1** and **2** after F⁻ and CH₃COO⁻ addition in DMF (*c*_{SENSOR} = 1·10⁻⁴ M)

The determined 3 σ /S for F⁻ and CH₃COO⁻ anions by sensors **1** and **2** are amongst the lowest published detection limits for these anions in organic solvent and are very similar to previously published isatin phenylsemicarbazones. However, the advantage of isatin pentafluorophenylhydrazones is the insensitivity of their selectivity to solution dilution. As already mentioned, detection of anions in aqueous environments is currently the most interesting target in the chemosensor field². Interestingly, isatin pentafluorophenylhydrazone chemosensors can also be used for F⁻ or CH₃COO⁻ sensing in semi-aqueous media.

This contribution is the result of the project implementation (ITMS 26240220086), supported by ERDF funded OPRaD.

REFERENCES

- Gale P. A., Busschaert N., Haynes C. J. E., Karagiannidis L. E., Kirby I. L.: *Chem. Soc. Rev.* **43**, 205 (2014).
- Beer P. D., Gale P. A.: *Angew. Chem. Int. Ed.* **40**, 486, (2001).
- Vantomme G., Lehn J. M.: *Angew. Chem. Int. Ed.* **52**, 3940, (2013).
- Cigáň M., Jakusová K., Donovalová J., Szöcs, V., Gáplovský A.: *RSC Adv.*, **5**, 62449, (2015).
- Cigáň M., Jakusová K., Gáplovský, M., Filo, J., Donovalová J., Gáplovský A.: *Photochem. Photobiol. Sci.* **14**, 2064, (2015).
- Horváth M., Cigáň M., Jakusová K., Gáplovský, M., Filo, J., Gáplovský A.: prepared manuscript (2016).

6P-07

SYNTHESIS OF MODIFIED PHENANTHROLINES – ISATIN STRUCTURAL PATTERN

RÓBERT ŠANDRIK, PAVOL TISOVSKÝ, MAREK CIGÁŇ, JANA DONOVALOVÁ, ANTON GÁPLOVSKÝ

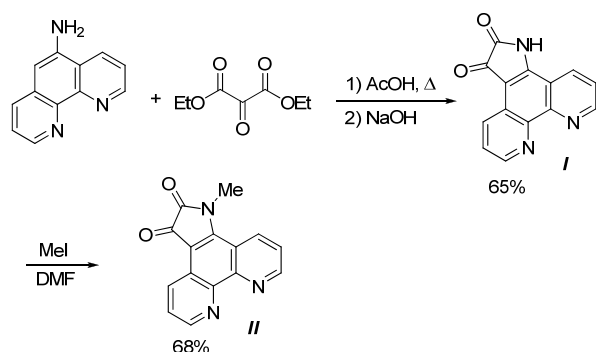
*Faculty of Natural Sciences, Institute of Chemistry, Comenius University, Ilkovičova 6, 84215 Bratislava, Slovakia
sandrik@fns.uniba.sk*

Organic functional materials are finding increasing applications in cutting-edge technologies such as energy production, storage and conversion, medicine and biotechnology. 1,10-Phenanthroline has been extensively used for decades as a chemically versatile module exhibiting a fortunate combination of structural and chemical properties¹. Its rigidity makes it an entropically better chelating molecule than the more common 2,2'-bipyridine and has been exploited to make a variety of simple geometrically diverse mononuclear complexes. In more recent times, taking advantage of the so-called template effect, 1,10-phenanthroline derivatives enabled the development of sophisticated synthetic strategies that have yielded fascinating molecular architectures such as catenanes, rotaxanes and knots². Some of these systems can be designed to work as molecular-level machines³. Another important property of 1,10-phenanthroline is connected to its planar structure, that prompts intercalation or Groove binding with DNA or RNA⁴.

Phenanthroline derivatives have further been tailored to provide chemical products utilized for rather different purposes such as herbicides, analytical probes or pharmaceuticals¹. In some cases they are also used in optoelectronic devices, a classical example being bathocuproine (2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline) which is employed as a hole blocking material to optimize the transport of electric charge in organic light emitting diodes (OLEDs)⁵.

Amongst various types of ligands, phenanthroline and its derivatives entails number of appealing structural and chemical properties. The free nitrogens of phen in imidazole derivatives have further been used for the synthesis of various metal complexes such as Ru(II), Re(I), Eu(III) and Ir(III). These luminescent metal complexes of phenanthroline are unique in terms of chemical stability, are good visible light absorbers, exhibit relatively intense and long lived luminescence and have reversible redox behaviour both in the ground and excited states⁵.

We designed and synthesized novel phenanthroline derivatives to use as chemosensors or functional materials for organic electronics. New phenanthroline derivatives **I** and **II** were synthesized from 5-amino-1,10-phenanthroline (Scheme 1). The first step was reaction with diethyl ketomalonate followed by basic hydrolysis⁷. Product **I** was isolated in 65 % yield. Other methods using oxalyl chloride or chloral hydrate did not afford the desired product. Derivative **II** was prepared via methylation of **I** and was isolated in 68 % yield.



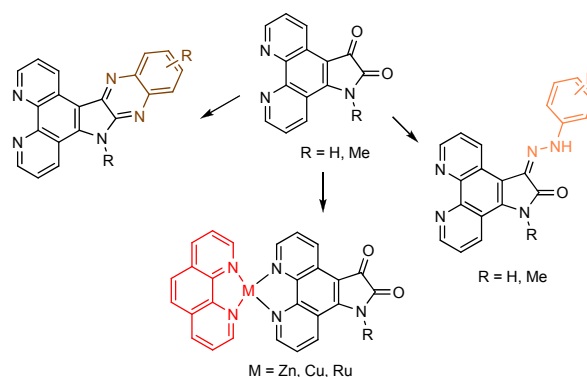
Scheme 1.

These two building blocks will serve as starting material for novel anion and cation chemosensors⁸, novel Vis-Vis photoswitches⁹ and novel luminescent complexes with transition metals for organic electronics (Scheme 2).

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-14-0740.

REFERENCES

1. Sammes P. G., Yahioğlu G., Chem. Soc. Rev. 23, 327 (1994).
2. Sauvage J. P., Dietrich-Buchecker C. O., in book: *Molecular Catenanes, Rotaxanes and Knots. A Journey through the World of Molecular Topology*, Wiley-VCH, Weinheim, Germany 1999.
3. Bonnet S., Collin J. P., Koizumi M., Mobian P., Sauvage J. P.: Adv. Mater. 18, 1239 (2006).



Scheme 2.

4. Hayashi K., Akutsu H., Ozaki H., Sawai H.: Chem. Commun. 1386 (2004).
5. Alreja P., Kaur N.: RSC Adv. 6, 23169 (2016).
6. Accorsi G., Listorti A., Yoosaf A., Armaroli N.: Chem. Soc. Rev. 38, 1690 (2009).
7. Bruice T. C.: J. Am. Chem. Soc. 79, 702 (1957).
8. Cigáň M., Jakusová K., Donovalová J., Szöcs V., Gáplovský A.: RSC Adv. 4, 54072 (2014).
9. Cigáň M., Gáplovský M., Jakusová K., Donovalová J., Horváth M., Filo J., Gáplovský A.: RSC Adv. 5, 62449 (2015).

6P-08 NEOČAKÁVANÁ REAKCIA 1-FOSFANORBORNADIÉN-2-KARBALDEHYDU S ALKOHOLMI V ZÁSADITOM PROSTREDÍ

**MILOŠ LUKÁČ, FERDINAND DEVÍNSKY,
BRANISLAV HORVÁTH, IVETA PECHOVÁ**

*Farmaceutická fakulta, Univerzita Komenského, Odbojárov
10, 832 32 Bratislava, Slovensko
lukac@fpharm.uniba.sk*

Fosfanorborniadiénové deriváty sú študované hlavne v súvislosti s ich použitím ako chirálnych ligandov pre organokovové katalyzátory. Ich prípravu možno uskutočniť z enantioméne čistých 1-fosfanorborniadién-2-karbalddehydov¹.

V rámci štúdia chemickej reaktivity 3,6-difenyl-4,5-dimetyl-1-fosfabicyklo[2.2.1]hepta-2,5-dién-2-karbalddehydu sme uskutočnili niekoľko reakcií typických pre aldehydy. Jednou z nich bola aj Claisenova-Schmidtova kondenzácia s fenyletanómom v prostredí NaOH v metanole. Na naše počudovanie sme nezískali očakávaný chalkón, ale 4,7-difenyl-2-hydroxy-4-metoxi-5,6-dimetyl-1-fosfabicyklo[3.2.1]okt-6-én-1-oxid (Schéma 1).

Reakciu sme uskutočnili s rôznymi alkoholmi. Štruktúru bicyklického fosfinoxidu sme objasnili prostredníctvom 2D NMR – COSY, HSQC, HMBC, NOESY a na základe fragmentácie molekuleového iónu $[M+H]^+$ s použitím HRMS. Mechanizmus vzniku zlúčeniny sme študovali reakciou s deuterometanolom.

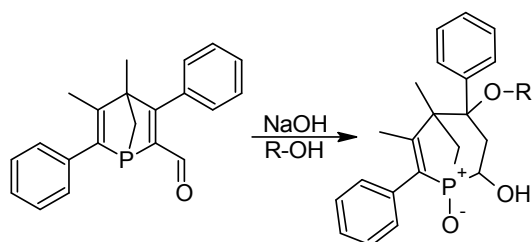


Schéma 1. Reakcia 3,6-difenyl-4,5-dimetyl-1-fosfabicyklo[2.2.1]hepta-2,5-dién-2-karbaldehydu s alkoholmi v zásaditom prostredí

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. APVV-0516-12 a grantu VEGA 1/0298/16.

LITERATÚRA

1. Siutkowski M., Mercier F., Ricard L., Mathey F.: *Organometallics* 25, 2585 (2006).

6P-09

ANTIRADIKÁLOVÁ AKTIVITA NOVÝCH DERIVÁTOV KURKUMÍNU

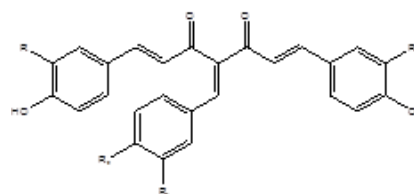
LUCIA RIŠIAŇOVÁ, NATALIA MIKLÁŠOVÁ, JINDRA VALENTOVÁ, FERDINAND DEVÍNSKY

Farmaceutická fakulta Univerzity Komenského, Katedra chemickej teórie liečiv, Kalinčiakova 8, 832 32 Bratislava, Slovensko

lucia.risianova@gmail.com

Kurkumín (1,7-bis(4-hydroxy-3-metoxifynyl)-hepta-1,6-dién-3,5-dión) je žlté korenie používané pre mnohé farmakologické účinky¹. Jeho slabú biologickú dostupnosť a biologické účinky je možné zlepšiť aj štruktúrnou obmenou², napríklad paládnaté komplexy kurkumínu vykazujú cytostatickú a antioxidantnú aktivitu na ľudské rakovinové bunky prostaty³.

V rámci nášho výskumu bolo pripravených 14 Knoevenagelových kondenzátov z dvoch typov kurkuminoidov (kurkumínu a etoxyderivátu kurkumínu). Pripravené zlúčeniny sa charakterizovali príslušnými analytickými metódami. Antiradikálová aktivita bola hodnotená ABTS a DPPH metódou. Zlúčeniny pripravené použitím aromatických aldehydov obsahujúce na benzénovom kruhu dve hydroxy alebo metoxy a hydroxy skupiny dosiahli najlepšiu antiradikálovú aktivitu. Nasyntetizované zlúčeniny boli testované metódou MTT *in vitro* na ľudské črevné rakovinové bunky, ktorá potvrdila ich významnú cytotoxickú aktivitu. Bol študovaný aj vplyv derivátov kurkumínu na superoxididismutázy (intracelulárnu SOD1, mitochondriálnu SOD2 a extracelulárnu SOD3) v ľudských črevných rakovinových bunkách. Výsledky demonštrujú, že Knoevenagelove kondenzáty vychytávajú voľné radikály a majú antioxidantnú aktivitu.



Kurkumín: R = OCH₃, Kurkuminoid: R = OCH₂CH₃

Použité substituenty:

R₁ = OCH₃, OCH₂CH₃, OH, H

R₂ = OCH₃, OCH₂CH₃, OH, H

Schéma 1. Pripravené deriváty kurkuminoidov

Tato práce vznikla za podpory grantov APVV-0516-12, VEGA-1/0346/16, UK/211/2016.

LITERATÚRA

1. Zambre A. P., Jamadar A., Padhye S., Kulkarni V. M.: *Metal-Org. nano-Met.* 37, 19 (2007).
2. Anand P., Kunnumakkara A. B., Newman R. A., Aggarwal B. B.: *Mol. Pharm.* 4, 807 (2007).
3. Miklášová N., Fischer-Fodor E., Mikláš R., Kucková L., Kožíšek J., Liptaj T., Devínsky F.: *Inorg. Chem. Commun.* 46, 229 (2014).

6P-10

NOVÉ MOLEKULÁRNÍ MATERIÁLY PRO NELINEÁRNÍ OPTIKU – PRODUKTY REAKCÍ 3-AMINO-1,2,4-TRIAZINU S KYSELINOU MALONOVOU

MATOUŠ KLODA, IVANA CÍSAŘOVÁ, IVAN NĚMEC

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká Fakulta, Katedra Anorganické Chemie, Hlavova 2030, 128 42 Praha 2, Česká republika
matous.kloda@gmail.com

Amino deriváty dusíkatých heterocyklů již v minulosti prokázaly svůj potenciál jako výchozí sloučeniny pro přípravu nových materiálů pro nelineární optiku¹. V případě systémů s více atomy dusíku, jako jsou triaziny, navíc dochází k řadě zajímavých adičních reakcí². Vlivem snížené elektronové hustoty v aromatickém systému dochází k adici řady nukleofilů, především vody a alkoholů. Výsledné produkty jsou chirální, což zvyšuje pravděpodobnost vzniku necentrosymetrických struktur nutných pro generování druhé harmonické frekvence, a jejich NLO vlastností jsou srovnatelné s výchozí molekulou. Bylo zjištěno, že v případě 3-amino-1,2,4-triazinu může v roli nukleofilu vystupovat i malonátový aniont, pravděpodobně ve své enolické formě. Ve studovaném systému byly pozorovány tři možné výsledky, závislé na výchozích reakčních podmínkách: tvorba soli za současné adice vody na kationt 3-amino-1,2,4-triazinia (1), adice malonátového aniontu na kationt 3-amino-1,2,4-triazinia prostředním atomem uhlíku (2) a dvojitá adice spojená

s dekarboxylací (3).

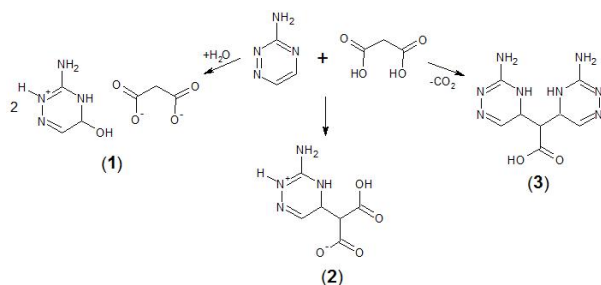


Schéma 1. Možnosti reakcí 3-amino-1,2,4-triazinu s kyselinou malonovou

Adiční reakce byly sledovány pomocí Ramanovy spektroskopie v roztoku a připravené materiály byly charakterizovány pomocí metod vibrační spektroskopie a rentgenové difrakce.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 14-05506S.

LITERATURA

1. Matulková I., Cihelka J., Pojarová M., Fejfarová K., Dušek M., Vaněk P., Kroupa J., Krupková R., Fábry J., Němec I.: *CrystEngComm* 14, 4625 (2012).
2. Albert A.: *Advances in Heterocyclic Chemistry* 20, 117 (1976).

6P-11

SELEKTIVNÍ HYDROGENACE BUTYLSORBÁTU

MARIA KOTOVA, ELIŠKA VYSKOČILOVÁ, LIBOR ČERVENÝ

Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika
CZ Maria.Kotova@vscht.cz

Listové alkoholy, konkrétně *cis*-hex-3-en-1-ol a *trans*-hex-2-en-1-ol, jsou velmi žádanými surovinami v parfumářském průmyslu. Velká pozornost je věnována *cis*-hex-3-en-1-olu, který má méně stabilní *cis* konfiguraci. Syntézy této sloučeniny jsou obvykle poměrně náročné mnohastupňové procesy s malými výtěžky. Nejsnadnější postup přípravy vychází z levného a snadno dostupného hexa-2,4-dien-1-olu (sorbolu) nebo derivátů kyseliny sorbové¹ (hexa-2,4-dienová kyselina) s využitím komplexu² se strukturou $[\text{Cp}^*\text{Ru}(\eta^4\text{-MeCH}=\text{CHCH}=\text{CHCO}_2\text{H})]^+\text{CF}_3\text{SO}_3^-$, který byl úspěšně imobilizován na smektitové minerály³. Tato práce byla zaměřena na přípravu Ru polosendvičového katalyzátoru $[\text{Cp}^*\text{Ru}(\text{butylsorbát})]\text{Tf}$ a jeho použití v selektivní hydrogenaci butylsorbátu v homogenním i heterogenním uspořádání. Hlavním produktem byl butyl-*cis*-hex-3-enoát se selektivitou až 99 %. Použití heterogenního uspořádání bylo vhodnější jak z důvodu lepší separace katalyzátoru ze směsi, tak i kvůli jeho větší stabilitě po heterogenizaci. Při opakovaném použití

katalyzátoru došlo ke snížení reakční rychlosti, ale selektivita zůstala zachována.

Byl zkoumán vliv rozpouštědel (MTBE, DEE, DBE, MeOH, směs MTBE a DBE) na selektivitu reakce a stabilitu katalyzátoru. Selektivita reakce byla při použití všech rozpouštědel velmi vysoká (98 – 99 %), ale rychlost reakce se lišila. Jako nejlepší rozpouštědlo se ukázal MTBE.

V MTBE byl zkoumán vliv teploty (30–70 °C) a tlaku (0,5–5 MPa) na reakční rychlost a selektivitu. Podle předpokladu reakční rychlost s teplotou a tlakem rostla. Selektivita byla na zvolených parametrech nezávislá.

Ze všech použitých reakčních podmínek se jako nejlepší ukázaly tyto: teplota 50 °C, tlak 5 MPa, MTBE jako rozpouštědlo. Při nich bylo dosaženo 80% konverze se selektivitou 99 %.

Tato práce byla realizována v rámci Operačního programu Praha – Konkurenceschopnost (CZ.2.16 / 3.1.00 / 24501) a Národního programu udržitelnosti (NPU I LO1613) MSMT-43760/2015). Dále financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 20-SVV/2016). Za pomoc při realizaci této práce děkujeme Anetě Semrádové.

LITERATURA

1. Leitmannová E., Červený L.: *Chem. Listy* 100, 418 (2006).
2. Kirchhoff J., Fries G., Driessen-Hoelscher B., Kalz W., Nobis M.: EP 1394170 (2004).
3. Leitmannová E., Červený L.: *J. Mol. Catal. A* 261, 242 (2007).

6P-12

SUBSTITUENT EFFECT IN THEORETICAL ROA SPECTRA

PIOTR F. J. LIPÍŃSKI

Mossakowski Medical Research Centre, Polish Academy of Sciences, Pawińskiego 5, 01-206 Warszawa, Poland
plipin@icm.edu.pl

The market of chiral chemicals is estimated at upwards of hundreds of billions of US dollars annually. This drives the development of chiral technologies that enable efficient and reliable characterisation of chiral chemicals. Chiroptical methods exploiting the phenomenon of Vibrational Optical Activity (VOA) are gaining more and more importance for the assignment of absolute configuration, determination of enantiomeric purity or monitoring of chiral reactions. VOA methods include Vibrational Circular Dichroism (VCD) and Raman Optical Activity (ROA). Despite a long and successful development history that started in the sixties, both VOA techniques still require careful studies on basic spectroscopic issues. In 2014 for the first time, we showed the presence of the substituent effect in the theoretical VCD spectra of indenenes¹. Recently, we complemented those findings by demonstrating for the first time substituent effects in theoretical Raman Optical Activity (ROA) spectra².

Theoretical spectra of 5-substituted 1-cyano-1*H*-indenenes (*IND*) and 1-cyanoisoidolinones (*IIN*) were simulated at the

B3LYP/aug-cc-pvDZ level. We were able to find significant correlations of the ROA intensities of $\nu(\text{C}^*\text{H})$ stretching vibrations with $pEDA(I)$ descriptor as well as of the ROA intensities of $\nu(\text{CN})$ stretching vibrations in IND with σ_p constants. Some ROA intensities are hence predicted to be sensitive to the overall electronic substituent effect or its resonance component represented here by $pEDA(I)$. For the systems studied here, the correlations were found only for those vibrations for which the $\alpha G'$ and $\beta(G')^2$ ROA invariants are mutually proportional. This may suggest that the substituent effect would be visible only when the electric and magnetic polarizabilities of a given mode are affected in some specific way.

The study was supported by National Science Centre in Poland (NCN, Grant DEC-2013/09/B/ST5/03664). Generous allotment of computer time within the Grant from Swierk Computing Centre of the National Centre for Nuclear Research is gratefully acknowledged.

REFERENCES

1. Lipiński P. F. J., Dobrowolski J. Cz.: RSC Adv. 27062, 4 (2014).
2. Lipiński P. F. J., Dobrowolski J. Cz.: RSC Adv. 40760, 6 (2016).

6P-13

ON CHIRAL GRAPH TOPOLOGICAL INDICES OF α -AMINO ACIDS

JAN CZ. DOBROWOLSKI^a, MICHAŁ H. JAMRÓZ^a, PIOTR F. J. LIPIŃSKI^{b*}

^aInstitute of Nuclear Chemistry and Technology, 03-195 Warsaw, ^bMossakowski Medical Research Centre, Polish Academy of Sciences, Pawińskiego 5, 01-206 Warszawa, Poland
plipin@icm.edu.pl

According to IUPAC the molecule is chiral, if and only if, it belongs to the point symmetry groups containing only orientation preserving self-isometries. However, IUPAC gives also a kind of operational definitions of structural elements of the molecule, which can make it chiral regardless whether it is rigid or not. These are an asymmetric center, or an axial chirality, or a chirality plane. The molecule with any of these chirality elements becomes chiral if the elements are not placed to make it diastereoisomeric.

Recently, we introduced the Chiral Graph Theory (ChGT)¹ in which the chiral graphs contain information on chirality vertices, axes, planes, and additionally on topological chirality of the entire molecule. Chiral matrices and chiral topological indices are assigned to chiral graphs based on chiral incidence matrix, in which entries corresponding to chirality elements are represented by 5-tuple hypercomplex numbers. Standard operations on chiral incidence matrix allow to obtain chiral adjacency, valency, distance, Laplacian, Zagreb, and Randić matrices, containing information on chiral elements present in the chiral graph.

Here we present the first application of the ChGT². The

calculations were using our own CHIGRA program³. In the presented approach, the entry of the chiral vertex in the chiral incidence matrix is equal to $a+bi$ and b is positive for S while negative for R configuration of the vertex. The chiral Wiener, Zagreb 1, Zagreb 2, Laplacian, and Randić indices were calculated for 18 fundamental α -amino acids. It was found that the real parts of the chiral indices are symmetric with the change of the chiral configuration, but the Randić index is constant. On the other hand, the imaginary parts of these indices are antisymmetric, but the Randić index is null. The interrelations between real and imaginary parts of the indices are discussed. For threonine with two chiral centres, either quadratic or higher order surfaces describe changes of the real and imaginary parts of the chiral indices.

The study was supported by National Science Centre in Poland (NCN, Grant DEC-2013/09/B/ST5/03664).

REFERENCES

1. Dobrowolski J. Cz.: MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 347, 73 (2015).
2. Dobrowolski J. Cz., Jamróz M. H., Lipiński P. F. J.: MATCH Commun. Math. Comput. Chem. 401, 76 (2016).
3. Jamróz M. H.: CHIGRA program based on Chiral Graph Theory, INCT, Warsaw, 2014, <http://www.smmg.pl/>.

7L-01

PŘÍPRAVA A VLASTNOSTI KONJUGOVANÝCH METALO-SUPRAMOLEKULÁRNÍCH POLYMERŮ ROZPUSTNÝCH V ALKOHOLECH

PAVLA ŠTENCLOVÁ^{a,b}, JAN SVOBODA^b, JIŘÍ VOHLÍDAL^b

^a Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Cukrovarnická 10/112, 16200 Praha 6, ^b Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze, Hlavova 8/2030, 128 43 Praha 2, Česká republika
stenclova@fzu.cz; stenclova.pavla@gmail.com

V souladu se vzrůstajícími požadavky na zpracovatelnost konjugovaných materiálů vhodných pro využití jako organických polovodičů např. na poli světlo-emitujících diod nebo tranzistorů řízených elektrickým polem byla připravena série bisterpyridinových unimerů (*bistpy*) s oligothiopenovým centrálním blokem nesoucím iontové skupiny^{1,2}. Použité trimethylammoniové (NMe_3^+) nebo triethylfosfoniové (PEt_3^+) substituenty získané modifikací původních bromhexylových substituentů (neiontové *bistpy*) dodávají připraveným látkám rozpustnost v alkoholech, čímž umožňují jejich zpracování v ekologicky přijatelných rozpouštědlech.

Iontové i neiontové *bistpy* byly použity k přípravě metalo-supramolekulárních polymerů (MSP) samoskupováním s Zn^{2+} a Fe^{2+} ionty (Schéma 1).

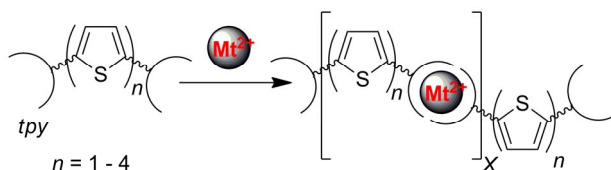


Schéma 1. Schematické znázornění samoskupování *bistpy* unimerů a kovových iontů do metalo-supramolekulárních polymerů

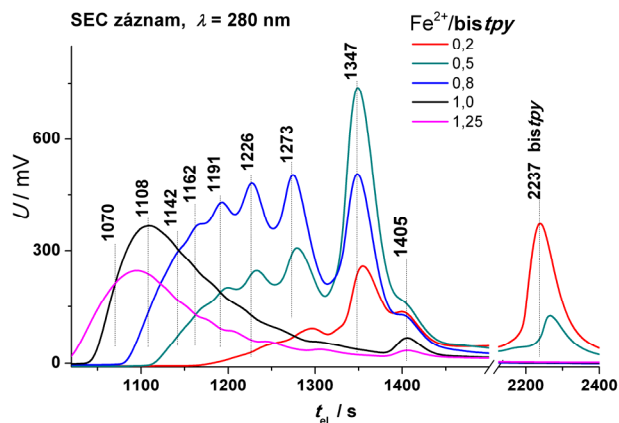
Spektroskopické studie připravených látek prokázaly, že sterické efekty převažují nad elektron-donorovými efekty substituentů centrálního bloku. Zkřížení rovin thiofenových cyklů dramaticky snižuje delokalizaci elektronů ve volných molekulách *bistpy* (roztoky), na rozdíl od pevné fáze, kde *bistpy* zaujímají planárnější konformace. Rozdílné substituenty naopak ovlivňují uspořádání molekul ve filmech, zatímco v roztocích je tento efekt potlačen.

Spektroskopická měření prokázala zvýšení rozsahu delokalizace elektronů po uspořádání *bistpy* do řetězců MSP. Na druhé straně, hypsochromní posun emisního maxima v tenkých filmech většiny MSP ve srovnání s příslušnými *bistpy* ukazuje, že objemné komplexy kovu a terpyridinových ligandů v oktaedrickém uspořádání potlačují efektivní planarizaci vázaných *bistpy* v pevných filmech MSP. Absorpční spektra Fe-MSP obsahují MLCT (metal-to-ligand charge transfer) pás zodpovědný za jejich modrou barvu. Zn-MSP vykazují fotoluminiscenci, zatímco Fe-MSP nikoliv.

Průběh samoskupování *bistpy* do řetězců MSP byl sledován pro sadu roztoků obsahující konstatní množství *bistpy* a různá množství iontů Zn^{2+} či Fe^{2+} . Pomocí absorpční a emisní spektroskopie byly identifikovány tři fáze procesu:

(i) vznik dimerních struktur až do polovičního množství kovů vůči *bistpy* ($\text{Mt}^{2+}/\text{bistpy} \leq 0,5$); (ii) tvorba delších MSP řetězců ($\text{Mt}^{2+}/\text{bistpy} \leq 1,0$); nejdelší řetězce vznikají při ekvimolárním složení roztoku ($\text{Mt}^{2+}/\text{bistpy} @ 1,0$); (iii) rovnovážná disociace MSP řetězců a vysycování jejich koncových *tpy* ligandů nadbytečnými kovovými ionty ($\text{Mt}^{2+}/\text{bistpy} > 1,0$). Selektivní tvorbu dimerů v první fázi seskupování prokazuje přítomnost isobestických bodů v absorpčních spektrech, které značí přechod mezi dvěma dobře definovanými formami látky. Průběh druhé a třetí fáze byl potvrzen viskozimetrickými měřeními a analýzou GPC.

Analýzy pomocí gelové permeační chromatografie (GPC) na zařízení s DAD UV/vis detektorem poskytly informace o chování MSP připravených z neiontových *bistpy*. GPC-DAD analýzy MSP s Zn^{2+} spojkami vykázaly pouze pík volného *bistpy*, což svědčí o rychlé disociaci MSP řetězců způsobené velkým zředěním jejich roztoků v GPC kolonách (nástřík 20 ml; eluční objem cca 20 ml). Zn-MSP tedy vykazují rychlou konstituční dynamiku. Oproti tomu MSP s Fe^{2+} spojkami poskytly GPC chromatogramy odpovídající polymerům (Obr. 1). DAD spektrum píku s elučním časem $t_{el} = 1347$ s se shoduje se spektrem dimerů. Další piky lze přiřadit, trimerům, tetramerům atd. a sestavit tak kalibrační závislost, která je lineární a umožňuje výpočet středů polymerizačních stupňů $\langle X \rangle_n$ a disperzity. Pro roztok Fe-MSP o nástříkové konc. $5 \cdot 10^{-4}$ M byl stanoven $\langle X \rangle_n \approx 7$ a disperzita 1,2. Tato GPC analýza byla proveditelná právě díky pomalé konstituční dynamice Fe-MSP. Pro 10^{-4} M roztoky Zn-MSP byla analýzou spekter transientní absorpce³ zjištěna hodnota $\langle X \rangle_n \approx 10$. MSP připravené z iontových *bistpy* poskytly pouze rozmyté záznamy svědčící o silné adsorpci jejich molekul na stacionární fázi GPC kolon.



Obr. 1. Chromatogramy pro roztoky s různými poměry $\text{Fe}^{2+}/\text{bistpy}$ ukazující vývoj délky/distribuce polymerních řetězců s měnícím se poměrem komponent v roztoku

Tato práce vznikla za podpory agentur GAČR (projekt P108/12/1143) a GAUK (projekt 64213).

LITERATURA

- Štenclová P., Šichová K., Šloufová I., Zedník J., Svoboda J., Vohlídal J.: Dalton Trans. 45, 1208 (2016).
- Štenclová-Bláhová P., Svoboda J., Šloufová I., Vohlídal J.: Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 13743 (2015).

3. Rais D., Menšík M., Štenclová-Bláhová P., Svoboda J., Vohlídal J., Pflieger J.: *J. Phys. Chem. A* 119, 6203 (2015).

7L-02**MEMBRÁNY NA BÁZI POLYIMIDŮ PRO SEPARACI PLYNŮ****PETR SYSEL, ANNA PATROVA, JAN VYŠOHLÍD**

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

Aromatické polyimidy jsou stále častěji využívány jako polymerní membrány pro separaci plyných směsí. Jakožto polymery, které jsou za běžných podmínek ve sklovitém stavu, vykazují obvykle dobrou dělicí schopnost (selektivitu), ale poměrně nízkou propustnost transportovaných plynů¹. Vzhledem k tomu, že propustnost plynu je odvislá především od jeho schopnosti difuze membránou, byly v práci sledovány cesty potenciálně vedoucí k jejímu růstu a tudíž i celkovému zlepšení transportních vlastností. Využitím plochých, neporézních membrán na bázi vysoce větveného polyimidu bylo dosaženo násobného růstu koeficientů propustnosti vodíku, oxidu uhličitého, kyslíku, dusíku a methanu ve srovnání s koeficienty propustnosti zjištěnými v membráně z lineárního polyimidu obdobného chemického složení při zachování selektivity. Další zefektivnění separačního procesu bylo realizováno cílenou inkorporací vhodného částicového, porézního aditiva do matrice z vysoce větveného polyimidu. S cílem dalšího příznivého ovlivnění transportních vlastností studovaných membrán, jsou do vysoce větvené struktury začleňovány siloxanové segmenty lišící se svou molární hmotností. Propustnost plynů takovými membránami roste se zastoupením kaučukovitěho siloxanu, přičemž při nižších obsazích dochází zároveň pouze k přijatelnému snížení selektivity.

V příspěvku bude příslušná pozornost věnována i syntéze a charakterizaci k přípravě membrán využívaných vysoce větvených polyimidů na bázi 4,4'-oxydifthalanhydridu nebo 4,4'-(hexafluorisopropylidene)difthalanhydridu a 4,4',4''-triaminotriphenylmethanu a dále pak i poly(imid-siloxanových) kopolymerů od nich odvozených.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 15-06479S.

LITERATURA

1. Liaw D.-J., Wang K.-L., Huang Y.-C., Lee K.-R., Lai J.-Y., Ha C.-H.: *Prog. Polym. Sci.* 37, 907 (2012).

7L-03**COMPARISON OF CHEMICAL AND ELECTROCHEMICAL PREPARATION OF POLYPYRROLE/MULTIWALL CARBON NANOTUBE NANOCOMPOSITES FOR SOLAR CELLS APPLICATION****JAROSLAV KULICEK^a, PAVOL GEMEINER^b, MATEJ MIČUŠÍK^a, EUBOMÍR ŠVORC^c, MÁRIA OMASTOVÁ^a**

^aPolymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, ^bDepartment of Graphic Arts Technology and Applied Photochemistry, ^cInstitute of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology SUT in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia
jaroslav.kulicek@savba.sk

One of the promising hybrid solar cell technologies are the dye-sensitized solar cells (DSSC). DSSCs with Pt as the standard catalytic layer of the counter electrode (CE) deposited onto fluorine-doped tin oxide (FTO) glass have the highest photovoltaic performance. The main drawback of Pt CE are the high-cost preparation of CEs with sufficient catalytic properties requiring high temperatures and the corrosion of Pt in the presence of a liquid electrolyte. As alternatives to standard Pt CE carbon-based materials together with conducting polymers and their composites have been studied intensively. Polypyrrole (PPy), due to its simple and inexpensive preparation, good catalytic activity for I₃⁻ reduction, high conductivity and stability in the presence of liquid electrolytes, is very interesting for DSSC CE applications¹.

Two methods were used for CE composites preparation. The first method is *in-situ* chemical oxidative polymerization of pyrrole in the presence of MWCNT and the second method consists in electrochemical polymerization of pyrrole on fluorine doped tin oxide coated (FTO) glass. The samples were prepared in different ratio of PPy and MWCNT. Two surfactants were used in the composite preparation, namely, cationic cetyltrimethylammonium bromide (CTAB), and anionic dodecylbenzene sulfonic acid (DBSA).

Morphologies of modified carbon nanostructures by PPy were investigated by scanning electron spectroscopy. Two main parameters were systematically studied with respect to PPy amount. X-ray photoelectron spectroscopy analysis of PPy/MWCNT nanocomposites provided information about the degree of PPy coating on the MWCNT, and cyclic voltammetry (CV) reflected results of electrode force and electrical conductivity. Catalytic activity of PPy/MWCNT layers on the FTO glass were evaluated by CV and photovoltaic properties of DSSCs with PPy/MWCNT counter electrodes were characterized by I-V measurements. The PPy/MWCNT with a ratio of 70:30 and surfactant CTAB reached the lowest charge transfer resistance measured by electrochemical impedance spectroscopy, even lower than standard the Pt CE, and had good electrochemical stability and reasonable catalytic activity in the presence of the iodide electrolyte. Overall, the photovoltaic performances of DSSCs were significantly higher for the PPy/MWCNT composite CEs than for the PPy CE, and the PPy/MWCNT 70:30

reached an approximately 30 % lower conversion efficiency ($\eta = 4.9$ %) compared to the standard Pt CE ($\eta = 7.1$ %). CEs prepared with PPy/MWCNT with surfactant DBSA show lower efficiency ($\eta = 2.3$ %) than CEs prepared with surfactant CTAB. CEs prepared with nanocomposites prepared by electrochemical polymerization of PPy/MWCNT onto FTO glass need to optimize for possible direct comparison with chemically synthesized PPy/MWCNT in DSSC application.

The use of PPy/MWCNT composite CEs with enhanced electrochemical and photovoltaic properties in DSSCs compared to pure PPy CEs and MWCNT CEs indicates that the former can be an efficient low-cost alternative to standard Pt CEs.

The work was supported by project SAS – TŮBĪTAK JRP 2014/2 and project VEGA 02/0149/14.

REFERENCE

1. Gemeiner P., Kuliček J., Mikula M., Hatala M., Švorc L., Hlavatá L., Mičušík M., Omastová M.: *Synthetic Metals* 210, 323 (2015).

7L-04

NANOINDENTATION TESTING OF TITANIUM OXIDE HYDRATE/POLYVINYL ALCOHOL THIN FILMS AFTER POST DEPOSITION ANNEALING

MICHAL PROCHAZKA^a, IRENE VOTTA^b, MARIAN VALENTIN^a, MARIA OMASTOVÁ^a, PAUL N. STAVRINO^b, NATALIE STINGELIN^b

^a *Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dubravska cesta 9, 845 41 Bratislava 45, Slovakia,* ^b *Centre for Plastic Electronics, Imperial College London, London SW7 2AZ, UK*
 michal.prochazka@savba.sk

Nano-mechanical properties of hybrid material of titanium oxide hydrate / polyvinyl alcohol were investigated. The main objective was to evaluate the changes produced by post deposition annealing in hybrid thin films. The investigated material was prepared from titanium tetrachloride (TiCl_4) and polyvinyl alcohol (PVAI) following a conventional procedure¹. We investigated a 2.4 μm thick films comprising hybrid with formulation 11.5 mmol titanium per g of PVAI, which were deposited via spin coating on glass substrates and aged in vacuum for seven days. Samples were analyzed by Triboindenter (TI750: Hysitron, Minneapolis, USA) using a Berkovich diamond indenter with a tip radius of ~ 150 nm. Samples before annealing and then annealed 10 minutes at 50 °C, 80 °C, and 200 °C were analyzed.

It was found that roughness slightly increased after annealing. Hardness also increased from 0.26 ± 0.01 GPa for sample before annealing to 1.50 ± 0.04 GPa for sample after annealing 10 minutes at 200 °C. Elastic modulus increased from 3.38 ± 0.09 GPa for sample before annealing to 18.79 ± 0.30 GPa for sample after annealing 10 minutes at 200 °C. Changes in elastic modulus is justified when considering the presence of titanium oxide hydrate units of large dimension that act as point of defect interfering with the polymer-

polymer interaction and altering the natural elasticity of the polymer matrix. The annealing promotes the removal of water and the increase in the crosslinking density of the hybrid material, hence it justifies the observed change of both the elastic modulus and hardness.

The work was supported by project VEGA 2/0149/14.

REFERENCE

1. Russo M., Campoy-Quiles M., Lacharminoise P., Ferenczi T. A. M., Garriga M., Caseri W. R., Stingelin N.: *J. Polym. Sci. Part B Polym. Phys.* 50, 65 (2012).

7L-05

CHEMICKÁ ODOLNOST MĚKČENÝCH SMĚSÍ PVC

RADKA KALOUSKOVÁ^a, HANA MINAŘÍKOVÁ, ZUZANA JOUKLOVÁ

^a *Ústav polymerů,* ^b *Ústav chemie pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika*
 radka.kalouskova@vscht.cz

Polyvinylchlorid, vzhledem k dobrým fyzikálním a mechanickým vlastnostem, snadné mísitelnosti s různými aditivy, a nepochybně i vzhledem k přijatelné ceně stále patří k polymerům s širokým aplikačním potenciálem. Přítomnost změkčovadla výrazně ovlivňuje zpracovatelské i uživatelské vlastnosti PVC směsí, ale také jejich stabilitu a odolnost působení vnějšího prostředí. Již řadu let je velkým problémem využití di(2-ethylhexyl)ftalátu (DEHP) v zdravotnických obalech určených ke skladování krve, toto změkčovadlo zajistí PVC materiálům požadované mechanické vlastnosti, transparentnost a chemickou odolnost. Nicméně se z PVC směsí v malé míře uvolňuje a tím se dostává do přímého kontaktu s pacientem. Jsou tedy hledány a testovány alternativní materiály, které by měkčený PVC nebo alespoň DEHP ve směsích PVC nahradily.

Stálost a zdravotní přijatelnost změkčovadel v PVC obalech využívaných v potravinářském průmyslu, popř. v zdravotnictví, je tedy zásadním předpokladem pro další využití PVC v této oblasti.

Příspěvek shrnuje výsledky studia migrace změkčovadel, které se liší chemickým složením a molární hmotností, ze směsí PVC do rozpouštědel, fyziologického roztoku, simulantů potravin, atd. Rozsah migrace změkčovadla z polymerní směsi závisí, vedle chemické struktury změkčovadla na složení polymerní směsi, na typu a množství stabilizátoru, historii výrobku, podmínkách migrace, teplotě, typu média.

Tato práce vznikla za podpory VŠCHT Praha.

LITERATURA

1. Eliason P., Greiner T., Rigano R., Strategiens P.: DEHP, 2009. TURI - Toxics Use Reduction Institute. http://www.turi.org/library/turi_publications/five_chemicals_study/final_report/chapter_7_dehp (accessed Nov 17, 2010).

2. Ministerstvo zdravotnictví České republiky *Český lékopis 2009*, 1st ed.; GRADA Publishing a.s., Praha 2009.
3. Marcilla A., Garcia S., Garcia-Quesada J. C.: *Polym. Test.* 27, 221 (2008).
4. Minaříková H.: *Bakalářská práce*, VŠCHT Praha 2011.
5. Jouklová Z.: *Diplomová práce*, VŠCHT Praha 2012.

7L-06**KOMPLIKACE U MODELŮ TOKEM INDUKOVANÉ KOALESCENCE VE VISKOELASTICKÉ MATRICI****JOSEF JŮZA, IVAN FORTELNÝ**

*Ústav makromolekulární chemie AV ČR, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika
juza@imc.cas.cz*

Koalescence (splývání) kapek je jedním z procesů probíhajících při míchání polymerních směsí a ovlivňujících fázovou strukturu. Ta má významný vliv na vlastnosti polymerních směsí. Jejím zvláštním případem, je-li hnací silou rozdíl v rychlosti toku matrice na různých místech, je tokem indukovaná koalescence. Vliv odporu matrice v etapě, kdy je přibližování částic zpomalováno odporem vrstvy matrice vytlačované z prostoru mezi kapkami, je kvantifikován pravděpodobností koalescence čili též kolizní účinností P_c , která je poměrem počtu srážek kapek při odporu matrice k jejich počtu za nepřítomnosti jakéhokoli vzájemného působení až do okamžiku srážky.

Základním krokem výpočtu kolizní účinnosti je výpočet dráhy dvojice kapek a určení, zda dojde k jejich splnutí^{1,2}. Používali jsme zjednodušený postup s integrací vzdálenosti a polárního úhlu podle azimutu a použitím limitních rovnic pro těsné přiblížení³, pro systémy s viskoelastickou matricí jsme ale narazili na meze tohoto postupu⁴.

Z tohoto důvodu jsme přikročili k souběžné integraci všech souřadnic dle času a zkoušení různých přechodů z rovnic popisujících volné unášení kapek tokem matrice, popisujících přiblížování vzdálených částic^{1,5} a rovnic pro pohyb v těsném přiblížení. Pro nejjednodušší případy se podařilo dosáhnout rozumné shody s exaktními výpočty pro kulové kapky v newtonských systémech⁵, zatímco pro viskoelastické systémy zatím stále hledáme vhodný způsob promítnutí elastických sil mimo těsné přiblížení.

Tato práce vznikla za podpory grantu Grantové agentury ČR GA14-17921S

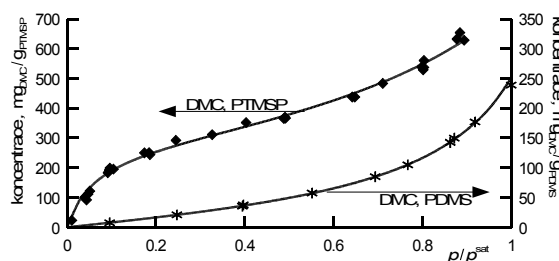
LITERATURA

1. Rother M. A., Davis R. H.: *Phys. Fluids* 13, 1178 (2001).
2. Fortelný I., Živný A.: *Rheol. Acta* 42, 454 (2003).
3. Fortelný I., Jůza J.: *J. Rheol.* 56, 1393 (2012)
4. Fortelný I., Jůza J.: *Colloid. Polym. Sci.* 293, 1713 (2015).
5. Wang H., Zinchenko A. Z., Davis R. H.: *J. Fluid Mech.* 265, 161 (1994).

7L-07**SORPCE PLYNŮ, PAR A JEJICH SMĚSÍ VE SKLOVITÝCH A KAUČUKOVITÝCH POLYMERECH: UNIVERZÁLNÍ POPIS GAB MODELEM VÍCEVRSTVÉ ADSORPCE?****ONDŘEJ VOPIČKA, DANIEL RADOTÍNSKÝ, KRYŠTOF PILNÁČEK, MAREK LANČ, PETR ČÍHAL, ALENA RANDOVÁ, KAREL FRIESS**

*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav fyzikální chemie, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika
vopicka@vscht.cz*

Obecně známou vlastností polymerů je jejich schopnost sorbovat nízkomolekulární látky. Polymery ve sklovitém stavu často vykazují esovitě zahnuté sorpční izotermy, které přechodem polymeru do kaučukovitého stavu (nad T_g) ztrácejí svůj počáteční ohyb. Jedním z nemnoha modelů schopných popsat sorpční izotermy plynů a par jak ve sklovitých, tak i v kaučukovitých polymerech je GAB model¹ vícevrstvé adsorpce. Tento model dobře vystihuje např. sorpční izotermy par dimethyl karbonátu (DMC) a jeho analogů, acetonu a methyl acetátu, v kaučukovitém poly(dimethylsiloxanu) a ve sklovitém poly[(trimethylsilyl)propynu]^{2,3} (obr. 1), stejně jako plynného oxidu uhličitého ve sklovitém polymeru s vnitřní mikroporozitou (PIM-1) a v triacetátu celulózy⁴. Dále byla ukázána možnost rozšíření modelu na popis sorpce směsí⁵, naznačující dosti univerzální použitelnost tohoto, v oboru studia sorpce v polymerech poněkud opomíjeného, modelu.



Obr. 1. Sorpce par dimethyl karbonátu v PDMS² a PTMSP³ při 40 °C, křivka znázorňuje model GAB

Tato práce vznikla za podpory grantů GA ČR č. 13-32829P a P106/10/1194, a podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.20/2015).

LITERATURA

1. Guggenheim E. A.: *Application of Statistical Mechanics*. Clarendon Press, Oxford 1966.
2. Vopička O., Randová A., Friess K.: *Eur. Polym. J.* 60, 49 (2014).
3. Vopička O., Pilnáček K., Číhal P., Friess K.: *J. Polym. Sci., Part B: Polym. Phys.* 54, 561 (2016).
4. Vopička O., Friess K.: *J. Polym. Sci., Part B: Polym. Phys.* 52, 1490 (2014).
5. Vopička O., Radotínský D., Friess K.: *Eur. Polym. J.* 73, 480 (2016).

7L-08**ANTIBACTERIAL TREATMENT OF POLY(LACTIC ACID) BY EFFECT OF RADIO-FREQUENCY PLASMA****IGOR NOVÁK^a, MARIAN VALENTIN^a, MATEJ MÍČUŠÍK^a, MARIAN LEHOČKÝ^b, JOZEF PRACHÁR^a**^a *Ústav polymérov SAV, 845 41 Bratislava, Slovakia,*^b *Medical Materials Research Centre, University Institute,**Tomas Bata University in Zlín, Zlín, Czech Republic**igor.novak@savba.sk*

Poly(lactic acid) (PLA) is the subject of intense scientific research and application. PLA is usually represented by thermoplastic aliphatic polyester derived from renewable resources (corn starch, tapioca roots, and chips). This polymer is considered as one of the most promising materials that could be an alternative to polymers derived from petroleum¹. There are two main major groups of PLA application. The first covers the special materials used in medicine (surgical threads, implants and drug carriers)², and the second relates to the products of everyday use in a variety of packaging materials and disposable items. Chitosan immobilized on the PLA surface after activation by radio-frequency (RF) discharge plasma, and grafting with allylamine has been investigated. PLA films were examined in terms of surface properties and bacteriostatic performance against two most representative bacterial strains, that is, *Escherichia coli* and *Staphylococcus aureus*. Surface analyses via various techniques established that chitosan was immobilized onto the PLA surface. As chitosan immobilized PLA packaging foils had strong activity against both *Escherichia coli* and *Staphylococcus aureus*, they may be exploited in various food packaging applications including antimicrobially active vacuum packages and oxygen barrier films.

This work was supported by Slovak grant agency VEGA (grant No. 2/0199/14) and Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-14-0518.

REFERENCES

1. Yang H. S., Kim H. J., Lee B. J., Hwang T. S.: *Compos. Struct.* 72, 429 (2004).
2. Lasprilla A. J. R., Martinez G. A. R., Lunelli B. H., Jardini A. L., Filho R. M.: *Biotechn. Adv.* 30, 321 (2012).

7L-09**NOVÝ POHLED NA ATRP POLYMERIZACI POSS MONOMERŮ DO VYSOKÝCH POLYMERIZAČNÍCH STUPŇŮ****MIROSLAV JANATA, VLADIMÍR RAUS, EVA ČADOVÁ***Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika**janata@imc.cas.cz*

Polyhedrální oligomerní silseskvioxany (POSS) obecného vzorce $(RSiO_{1.5})_8$ patří mezi nejstudovanější členy silseskvioxanové skupiny. Vyznačují se strukturou připomínající krychli, v níž jsou atomy křemíku umístěné v rohových pozicích a jsou vzájemně spojené stabilní vazbou Si–O–Si. Na každém atomu křemíku je navázán organický substituent a to zaručuje POSS sloučeninám kompatibilitu a mísitelnost s mnoha polymery. Některý z těchto organických substituentů může být polymerizovatelná skupina, což umožňuje přípravu organicko-anorganických hybridních materiálů polymerizačními technikami. Pomocí řízených polymerizačních metod tak lze syntetizovat dobře definované POSS (ko)polymery s POSS skupinou kovalentně vázanou v polymerním řetězci.

V naší studii¹ jsme zkoumali uplatnění metody atom transfer radikálové polymerizace (ATRP) při homopolymerizaci komerčně dostupného POSS monomeru, isobutyl-POSS-methakrylátu (iBuPOSSMA). Dřívější práce naznačovaly², že ATRP polymerizace tohoto monomeru probíhá pouze do nízkých polymerizačních stupňů, typicky $DP_n < 20$. Důvodem nemožnosti připravit vysokomolekulární PiBuPOSSMA polymer měla být obtížná sterická přístupnost polymerizačního růstového centra pro katalytický komplex po dosažení vyšších polymerizačních stupňů. My jsme však zjistili, že optimalizací reakčních podmínek lze připravit PiBuPOSSMA s M_n v řádu až 10^5 a nízkou disperzitou ($Đ < 1,20$). Klíčovým zjištěním bylo, že studovaný monomer má nízkou stropní teplotu, což má za následek pouze omezenou konverzi monomeru za neoptimalizovaných podmínek. Zvýšením výchozí koncentrace monomeru a/nebo snížením reakční teploty bylo toto omezení překonáno a byly připraveny vysokomolekulární homopolymery a kopolymery iBuPOSSMA.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR P106/12/0844.

LITERATURA

1. Raus V., Čadová E., Starovoytova L., Janata M.: *Macromolecules* 47, 7311 (2014).
2. Pyun J., Matyjaszewski K., Wu J., Kim G.-M., Chun S. B., Mather P. T.: *Polymer* 44, 2739 (2003).

7L-10**MECHANISMUS POLYMERACE ε-KAPROLAKTAMU A EXFOLIACE VRSTEVNATÝCH PLNIV****JIŘÍ BROŽEK^a, DANA LENNEROVÁ^a, FRANTIŠEK KOVANDA^b, DANIEL JAKSCH^a, LENKA MALINOVÁ^a**^a *Ústav polymerů, ^bÚstav chemie pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28**Praha 6, Česká republika**jiri.brozek@vscht.cz*

Polyamid 6 se převážně používá jako vláknářský a konstrukční materiál. Vlastnosti polyamidu 6 je možno dále modifikovat přísadou nanoplňiv. Pro syntézu polyamidových nanokompozitů se využívají vrstevnaté silikáty (montmorillonit), podvojně hydroxidy (hydrotalcit) a uhlíková nanoplňiva. Jednou z metod přípravy nanokompozitů

polyamidu 6 je polymerace interkalovaného monomeru ze suspenze vrstevnatého plniva v ϵ -kaprolaktamu (*in situ* interkalace). Nutnou podmínkou exfoliace vrstev a zajištění termodynamické stability výsledného nanokompozitu je vhodná organofilizace plniva, umožňující pronikání monomeru do mezivrstev a oddalování vrstev při jeho polymeraci¹.

Příspěvek je zaměřen na vliv typu plniva, strategie jeho organofilizace a použitého mechanismu polymerace ϵ -kaprolaktamu na vytváření interkalované a exfoliované struktury. Použitá plniva se zásadně liší v typu fixace organofilizující substance na jeho povrch. Hydrolytickým mechanismem lze připravit nanokompozity, nevýhodnou je nízká rychlost polymerace². Naše pozornost je zacílena na postupy využívající vysoké rychlosti aniontové polymerace. Při aniontových polymeracích ϵ -kaprolaktamu obsahující dispergovaný montmorillonit se nepodařilo připravit nanokompozit s exfoliovanou strukturou. Příčina nezdaru spočívala v rychlé výměně alkylammoniových kationtů v mezivrstevní za kationty iniciátoru polymerace (Na^+ , Mg^{2+}) vedoucí k zpětné agregaci až ke krystalizaci vrstev plniva³. Při použití hydrotalcitu interkalovaného 2-aminoethansulfonovou kyselinou se podařilo aniontovou polymerací ϵ -kaprolaktamu připravit nanokompozit s exfoliovanou strukturou⁴ při aplikaci různých aktivátorů polymerace lišících se v rychlosti polymerace. Zajímavý směr představuje montmorillonit interkalovaný laktimethery s různou velikostí cyklu⁵. Byly navrženy a diskutovány mechanismy vzniku polymerních molekul v mezivrstevní vrstevnatých plniv.

Tato práce vznikla za podpory VŠCHT Praha.

LITERATURA

1. Puffr R., Brožek J.: Chem. Listy 104, 138 (2010).
2. Puffr R., Lišková Špátová J., Brožek J.: Appl. Clay Sci. 63-64, 294 (2013).
3. Kadlecová Z., Puffr R., Baldrian J., Schmidt P., Roda J., Brožek J.: Eur. Polym. J. 44, 2798 (2008).
4. Lennerová D., Kovanda F., Brožek J.: Appl. Clay Sci. 114, 265 (2015).
5. Malinová L., Jaksch D., Brožek J.: Appl. Clay Sci. 129, 20 (2016).

7P-01**STUDY OF POLYAMIDE SURFACE TREATMENT BY PLASMA AND ADHESION TO RUBBER BY COLLAGEN ADDITION****PETER JURKOVIČ^a, IGOR NOVÁK^b, JOZEF PRACHÁR^b, ONDREJ ŽIGO^b, JÁN MATYŠOVSKÝ^a**^a *VIPO, a.s., Partizánske, ^b Ústav polymérov SAV, 845 41 Bratislava, Slovakia*
pjurkovic@vipo.sk

The low surface free energy of polyamide 12 causes that its surface and adhesives properties are insufficient for bonding, laminating and printing. To obtain a higher strength of adhesive joints of polyamide 12 to more polar polymers, it is necessary to increase its surface free energy by specific modification methods. The most advanced method of polyamide 12 surface treatment is based on surface barrier discharge plasma activation¹⁻³. The higher strength of adhesive joint polyamide 12 modified by barrier plasma to rubber using polyurethane adhesive can be reached by addition of collagen to adhesive. The surface of polyamide 12 was pre-treated at various times by surface barrier discharge plasma in O₂ or N₂ at atmospheric pressure. The chemical changes of polyamide 12 modified by plasma were analyzed using Fourier Transform Infra Red-Attenuated Total Reflection (FTIR-ATR) spectroscopy, X-Ray Photoelectron Spectroscopy (XPS) and static measurements of testing liquids contact angles. The surface free energy and strength of adhesive joints of polyamide 12 modified by barrier plasma to rubber using PUR adhesive increased. The strength of adhesive joint polyamide treated by barrier plasma to rubber increased significantly after modification PUR adhesive by collagen.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-15-124.

REFERENCES

1. Novák I., Pollák V., Chodák I.: *Plasma Proces. Polym.* 3, 355 (2006).
2. Novák I., Števiar M., Chodák I.: *Monatshefte für Chemie/Chemical Monthly* 137, 943 (2006).
3. Upadhyay D. J., Cui N. Y., Anderson C. A., Brown N. M. D.: *Coll. Surf. A: Physicochem. Engn. Apects* 248, 47 (2004).

7P-02**THERMAL AND MECHANICAL PROPERTIES OF GRAPHITE-BASED POLYOLFIN MICRO COMPOSITES****IGOR NOVÁK^a, IGOR KRUPA^b, ONDREJ ŽIGO^a, JOZEF PRACHÁR^a, JÁN MATYŠOVSKÝ^c, PETER JURKOVIČ^c**^a *Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, 845 41 Bratislava, Slovakia,* ^b *Center of Advanced Materials, Qatar University, P.O. Box 2713, Doha, Qatar,* ^c *VIPO, a.s., Partizánske, Slovakia*
igor.novak@savba.sk

Electrically conductive polymeric composites are often used as heating elements, temperature-dependent resistors and sensors, self-limiting electrical heaters and switching devices, antistatic materials for electromagnetic interference shielding of electronic devices¹. The importance of thermal conductivity² in polymer composites is associated with the need for appreciable levels of thermal conductance in circuit boards, heat exchangers, appliances, and machinery. The information on thermal conductivity of materials is also necessary for modeling of optimum conditions during materials processing, as well as for an analysis of transport of heat in materials during practical applications. Electrical conductivity, thermal conductivity and ultimate mechanical properties, namely elongation at break and stress at break of low- and high-density polyethylene/graphite composites were studied in this contribution. The thermal conductivity of filled high-density polyethylene is higher than thermal conductivity of filled low-density polyethylene due to higher degree of crystallinity. After initial decrease in stress at break, a reinforcing effect was observed. The reinforcing effect was more pronounced for high-density polyethylene matrix.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-14-0518 and No. APVV-14-0506.

REFERENCES

1. Senugupta K., Bhattacharya M., Bandyopadhyay S., Bhomwik A. K.: *Progres Polym. Sci.* 36, 638 (2011).
2. Wu H., Lu C., Zhang W., Zhang X.: *Materials & Design* 52, 621 (2013).

7P-03**INVESTIGATION OF DATLE WOOD-BASED COMPOSITES BEHAVIOR****IGOR NOVÁK^a, IGOR KRUPA^b, ZUZANA NÓGELLOVÁ^a, ONDREJ ŽIGO^a, JOZEF PRACHÁR^a, JÁN MATYŠOVSKÝ^c, PETER JURKOVIČ^c**^a *Ústav polymérov SAV, 845 41 Bratislava, Slovakia,* ^b *Center of Advanced Materials, Qatar University, P.O. Box 2713, Doha, Qatar,* ^c *VIPO, a.s., Partizánske, Slovakia*
igor.novak@savba.sk

Natural fibers can be used to reinforce rather than fill plastics, which increase strength as well as stiffness. Wood and other lignocellulosic fibers typically have higher aspect ratio than that of wood flour. Furthermore, the aspect ratio of the fiber can be increased. At a critical fiber length, stress is transferred from the matrix to the fiber, resulting in a stronger composite¹. Although most wood-based composites are considerably less stiff than solid wood, adding wood flour to unfilled plastics can greatly stiffen the plastic, but often makes more brittle, compared with pure plastics². The convenience of these composites lies in the fact that one of their ingredients (i.e. wood/lignocellulosic material) can be easily obtained from natural resource and they can be made relatively easily. The aim of this study was to evaluate mechanical properties of the date palm wood-based low-density polyethylene (LDPE) composites. The date palm wood filler concentration ranged from 10 to 70 wt.%. The stiffness and hardness of the micro composites, which were characterised by the Young's modulus, significantly increased with an increase in the filler content in the entire concentration range. The maximum value of 1933 MPa for the micro composite filled with 70 wt.% of the filler is approximately 13 times greater than that for the pristine LDPE. This result indicates that the filler has a strong reinforcing effect and that there is a good distribution of the filler. Furthermore, the stress at the break of the micro composites and its dependence on the filler fraction varies nonlinearly. The material becomes brittle if filled with more than 10 wt.% of the filler.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-14-0518 and No. APVV-14-0506.

REFERENCES

- Hattotuwa G., Premalal B., Ismail H., Bahrain A.: *Polym. Test.* 21, 833 (2002).
- Yang H. S., Kim H. J., Lee B. J., Hwang T. S.: *Compos. Struct.* 72, 429 (2004).

7P-04

REOLOGICKÁ CHARAKTERIZÁCIA PLNÍV NA BÁZE VRSTEVNATÝCH ÍLOV V KOMPOZITOCH S POLYMÉRNOU MATRICOU

ZUZANA NÓGELLOVÁ^a, DANIELA JOCHEC MOŠKOVÁ^a, MICHAELA SEDNIČKOVÁ^a, ĽUBOŠ JANKOVIČ^b, PETER KOMADEL^b, IVAN CHODÁK^a

^a Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, ^b Ústav anorganickej chémie, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovensko
zuzana.nogellova@savba.sk

V tejto práci sme použili reologické merania na sledovanie štruktúrnych zmien v nanokompozitoch, kde ako plnivá boli použité vrstevnaté silikáty.

Je známe, že už malé množstvo ílových minerálov v polymérnej matici môže výrazne ovplyvniť výsledné vlastnosti kompozitov, napríklad mechanické vlastnosti. Tento

efekt je však podmienený dôkladným rozdispergovaním plniva v polyméri. Avšak, keďže polyméry sú väčšinou hydrofóbne a prírodné íly hydrofilné, pre zvýšenie ich vzájomnej miešateľnosti je dôležitá vhodná povrchová modifikácia plniva. Keďže nie všetky polyméry majú rovnaký stupeň hydrofobicity, optimálna povrchová modifikácia daného plniva je rozdielna pre rôzne polyméry. Stupeň hydrofobicity môže byť vyjadrený napríklad parametrom rozpustnosti, ktorý je odlišný pre jednotlivé polyméry.

V našej práci sme najprv študovali reologické chovanie plnív v disperziách kvapalín. Vybrali sa kvapaliny, ktoré mali hodnoty parametra rozpustnosti podobné ako polyméry, z ktorých sme zamýšľali pripraviť kompozity. Z vybraných plnív sa pripravili kompozity v troch maticiacich (nízkohustotný polyetylén, polyamid 12 a polykaprolaktón). Porovnávali sa tri modifikované a dva nedomodifikované plnivá ílového typu. Sledovali sa reologické vlastnosti v tavenine na porovnanie s reologickými vlastnosťami zodpovedajúcich disperzií. Taktiež sa hodnotil vplyv plnív v jednotlivých polymérnych maticiacich na výsledné mechanické vlastnosti kompozitov.

Táto práca vznikla za podpory projektov APVV 0694-12 a VEGA2/0108/14.

7P-05

VÝSKUM MOŽNOSTÍ VYUŽITIA PRÍRODNÝCH POLYMÉROV Z KOŽIARSKYCH ODPADOV

JÁN MATYÁŠOVSKÝ^a, PETER JURKOVIČ^a, PETER DUCHOVIČ^a, IGOR NOVÁK^b

^aVIPO, a.s., Partizánske, Slovensko

^bÚstav polymérov SAV, 845 41 Bratislava, Slovensko
jmatyasovsky@vipo.sk

Spracovaním jednej tony surovej kože vznikne 200 kg chrómom sieťovaných kolagenových odpadov, 250 kg biologicky nestabilných odpadov s obsahom proteínov a živočíšnych tukov a do rôzneho stupňa hydrolyzovaný keratinový odpad¹. Cieľom našej práce bol výskum technológie dechromácie tuhých kolagenových odpadov bez oxidácie Cr³⁺ na Cr⁶⁺ so zachovaním fibrilárnej štruktúry kolagénu. Dosiahnutá bola vysoká cca 99% účinnosť odchromovania a nízke menej ako 3 % straty kolagénu². Táto práca prezentuje aj možnosť využitia biopolyméru kolagén na prípravu ekologických, termoplastických lepidiel. Priemyselné skúšky potvrdili možnosť spracovať lepidlo na všetkých typoch strojov pri štandardnej kvalite lepenia³. Práca rieši ďalej spracovanie biologicky nestabilnej strojnej glejovky na biopalivo a glycerín. Vysoké číslo kyslosti číslo kyslosti 38–46 mg KOH/1g tuku a množstvo vody 0,5–3 % v tuku bolo riešené prídavkom kvapalných sušidiel, kombináciou kyslej esterifikácie, alkalickéj transesterifikácie a destiláciou⁴. Cieľom tejto práce bola aj štúdia vplyvu hydrolyzátu keratínu s maximálnym obsahom voľných tiolových skupín na antioxidačné vlastnosti. Vzorky keratinových hydrolyzátoV boli testované diferenčnou kompenzačnou kalorimetriou (DSC) a experimentálne práce potvrdili, že antioxidačné vlastnosti keratínov významne

ovplyvňuje technológia prípravy, pričom niektoré modifikácie sú porovnateľné s prírodným polymérom lignín⁵.

Táto práca bola podporená Slovenskou Agentúrou pre Vedu a Výskum, evidenčné čísla projektov č. APVV-14-0506 a APVV-15-0124.

LITERATÚRA

1. Buljan J., Reich G., Ludvik J.: Congress of the IULCS, London, 138–156 (1997).
2. Matyašovský J., Jurkovič P., Duchovič P., Novák I.: Symp. XXI 128–138 (2013).
3. Matyašovský, J., at all. JALCA 106 (1), 8 (2011).
4. Kolomaznik K, at all.: JALCA 105 (10), 327 (2010).
5. Šimon P., Kolman E.: Journal of Therm. Analysis and Cal. 64 (2), 813 (2001).

7P-06

POLYMER HYDROGELS AS FUTURE MATERIALS – POTENTIAL APPLICATION

KRZYSZTOF PIECHOCKI, MARCIN KOZANECKI

*Lodz University of Technology, Faculty of Chemistry,
Department of Molecular Physics, 116 Zeromskiego Street,
90-924 Łódź, Poland
krzysztof.piechocki@dokt.p.lodz.pl*

Polymer hydrogels are defined as two- or multicomponent systems consisting of a three-dimensional network of polymer chains and water that fills the space between cross-linked macromolecules. They are able to absorb huge amount of water or water solutions which very often exceeds amount of the polymer significantly. The swelling degree depends mainly on chemical structure of polymer network, density of cross-linking, temperature, pressure and presence of additives. Most of polymer hydrogels are responsive to chemical, physical or biological stimuli. These materials are named smart materials, because they are able to answer for some external signals. The most interesting are biocompatible and non-toxicity materials. They can be applied in medical and pharmaceutical industry. Scientist study about producing of artificial tissue based on polymer hydrogels. Another applying field of polymer hydrogels are smart drug delivery systems. Stimuli-responsive hydrogel is drug carries, which release substances as response for some signals. The bigger advantage in such system is drug release in defined time and place. Nowadays hydrogel dressing for burns are commercially available. In addition that scientist makes research about conducting hydrogels, which can be used as stimulating electrodes in human body. Many other applications are also known for example: microactuators, microvalves, lenses with variable focal length, and sensors. Fast development of hydrogel materials will be observed in next few years.

REFERENCES

1. Hoffman A. S.: Adv. Drug Delivery Rev. 64, 18 (2012).
2. Nguyen K. T., West J. L.: Biomaterials 23.22, 4307 (2002).
3. Green R. A., Baek S., Poole-Warren L. A., Martens P. J.: Sci. Technol. Adv. Mater. 11, 1 (2010).

8L-01 POTENCIÁL UHLÍ PRO VÝROBU KLÍČOVÝCH CHEMIKáliÍ

JAROMÍR LEDERER

*Unipetrol výzkumně vzdělávací centrum, a.s., (UniCRE),
Areál Chempark, Záluží 1, 436 70 Litvínov, Česká republika
Jaromir.Lederer@unicre.cz*

Relativně vysoké zásoby uhlí (hnědého i černého)¹ nás v České republice nutí zamýšlet se, zda by bylo vhodné tyto vlastní zdroje uhlíkové suroviny využívat do budoucna jako suroviny pro výrobu chemikálií.

Uhlí je sice obdobně jako ropa koncentrovaný zdroj uhlíku, má však některé podstatné nevýhody. Jde o pevnou látku, která strukturně odpovídá zesíťované makromolekule, obsahuje významné množství nežádoucích prvků a jako pevný substrát vykazuje pomalé reakce při jeho chemických přeměnách.

V oblasti chemického využití uhlí existují tři základní technologické varianty: pyrolýza, přímé a nepřímé zkapalňování².

Karbonizace hnědého uhlí byla realizována v Československu až do 60. let minulého století. Spočívala v zahřátí hnědého uhlí na teploty 550 až 750 °C, přičemž se kromě plynů a tuhých zbytků uvolňovala po ochlazení kapalina – dehet s výtěžkem okolo 10 %. Přímé zkapalňování uhlí v podstatě znamená jeho destruktivní hydrogenaci, kdy působením vodíku, katalyzátorů a za vysokých teplot (500 °C) a tlaků (30 MPa), štěpíme již zmíněnou zesíťovanou strukturu uhelné molekuly na menší fragmenty. Z hlediska dnešního poznání je ovšem nejperspektivnějším postupem nepřímé zkapalňování uhlí. Prvým krokem je jeho zplyňování, kdy je uhelná hmota parciálně spalována za současného působení vodní páry. Teplo ze spalování do systému vnáší potřebnou energii a umožňuje tak průběh endotermních reakcí s vodou za vzniku převážně vodíku a oxidu uhelnatého, tedy na tzv. syntézní plyn. Pro jeho využití jsou k dispozici v principu dvě základní – obě využívané a pokládané za stejně perspektivní – syntetické cesty. Prvou je tzv. Fischerova a Tropschova syntéza, druhou syntézní cestou je výroba metanolu.

Pro země, které mají dostatečné zásoby, představuje uhlí spolehlivý zdroj pro výrobu chemikálií, a to zejména jako „partner“ pro klasické technologie nebo obnovitelné zdroje.

LITERATURA

1. Šafářová M.: Uhlí – energetické i neenergetické produkty, Konference HSPO, Most (2016).
2. Renzenbrink, W. et al.: Das Hochtemperatur-Winkler (HTW) Kohlevergasungsverfahren. Gasification Technologies Conference, San Francisco (1998). 04./07.10.1998; www.gasification.org – Events – Resource Library.

8L-02 OMEZOVÁNÍ NEGATIVNÍCH ENVIRONMENTÁLNÍCH DOPADŮ PŘI VÝROBĚ PALIV A PETROCHEMIKáliÍ

JAROMÍR LEDERER

*Unipetrol výzkumně vzdělávací centrum, a.s., (UniCRE),
Areál Chempark, Záluží 1, 436 70 Litvínov, Česká republika
Jaromir.Lederer@unicre.cz*

Růst světové populace a její nároky na hladinu blahobytu¹ spojené s rostoucími nároky na spotřebu paliv a chemikálií nutí průmysl – zejména energetický a chemický – významně omezovat environmentální dopady. To zejména při zpracování a užití fosilních uhlíkových surovin, při nichž je zákonitě produkován oxid uhličitý. Základní spotřební koš obyvatel Země se však bude měnit pomaleji a bude nadále založen na uhlíkových produktech (paliva, petrochemikálie, plasty). Přitom náhrada ropy, uhlí nebo zemního plynu biomasou bude vždy jen částečná. Je tedy nutné i při výrobě a spotřebě paliv a chemikálií snižovat emise oxidu uhličitého. Kromě prostého omezení výroby lze emise CO₂ limitovat jeho využitím v chemických výroбах nebo zabráněním uvolňování již vniklého plynu do atmosféry.

Poslední jmenovaná možnost zahrnuje dnes celosvětově studované postupy CCS² (carbon capture and storage). Tato technologie, založená na spalování pouze kyslíkem, zahrnuje separaci vzduchu (odstranění dusíku), takže v produktech spalování je převážně voda a oxid uhličitý. Ten lze pak relativně snadno separovat a po kompresi dopravit na vhodné místo k uložení. Příkladem využití oxidu uhličitého v organických syntézách je výroba karbonátových derivátů. Cykloadice CO₂ na epoxidy vede k tvorbě polykarbonátů³. Získané polymery (zejména polypropylenkarbonát) jsou tepelně stabilní, vysoce transparentní a biodegradabilní⁴.

V případě dostatku „zelené“ energie (solární, větrné) je řešením elektrolytická výroba vodíku a jeho použití na transformaci CO₂ na methan⁵, který představuje významnou surovinu pro návazné chemické syntézy. Samozřejmě, v oblasti motorových paliv, je masivně omežována novotvorba oxidu uhličitého použitím biopaliv zejména druhé generace⁶.

LITERATURA

1. Jess A.: Energy Policy 38, 4663 (2010).
2. Crombie M., Imbus S., Miracca I.: Energy Procedia 1(1), 55 (2009).
3. Sibouh A., Ryan P., Leskela M., Rieger B., Repo T.: Appl. Catal. 365, 194 (2009).
4. Sugimoto H., Inoue S.: J. Polym. Sci., Part A: Polym. Chem. 42, 5561 (2004).
5. Schoder M., Armbuster U., Martin A.: Hydrogenation of Carbon Dioxide towards SNG, Proceedings of the DGMK Conference, s. 39, Berlin, Germany (2012).
6. Pospíšil M., Šimáček, Souček I., Kittel H.: Národní akční plán pro obnovitelné zdroje energie, Konference ICCT, Mikulov (2016).

8L-03**PYROLÝZA ODPADOVÝCH PLASTOV ZO STARÝCH VOZIDIEL V PRÍTOMNOSTI PRÍRODNÝCH ZEOLITOV****ELENA HÁJEKOVÁ, PETRA BENŽOVÁ, PAVOL HUDEC, MICHAL HORŇÁČEK***FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie, Slovensko
elena.hajekova@stuba.sk*

V práci sa sledoval vplyv prírodných zeolitov mordenitu a klinoptilolitu zo slovenských nálezísk, z lokalít Bardošova Lehôtka a Nižný Hrabovec, na pyrolýzu odpadových plastov zo starých vozidiel. Surovinu predstavovali podrvené plastové časti autovrakov vyrobené z aditívovaného polypropylénu, ako sú palubné dosky, vnútorné obloženia, masky chladičov. Použili sa prírodné, nemoifikované formy katalyzátorov rôzneho znenia, ako aj katalyzátory opracované rôznymi spôsobmi na zväčšenie kyslosti a objemu pórov. V práci sa vyhodnotil vplyv jednotlivých katalyzátorov na rozklad plastu pri pyrolýze a zároveň sa výsledky porovnali s čisto termickým rozkladom. Porovnanie sa uskutočnilo na základe materiálovej bilancie a detailnej chromatografickej analýzy plyných a kvapalných produktov odobratých v piatich časoch v závislosti od doby experimentu a teploty v reaktore, ktorá dosiahla maximálne hodnotu 500 °C. Experimenty sa uskutočnili vo vsádzkovom laboratórnom reaktore v prítomnosti dusíka, ktorý premiešaval taveninu a pomáhal vynášať produkty rozkladu z reaktora.

Porovnaním termického a katalytického rozkladu sa zistilo, že pri termickom rozklade sa tvorilo najmenšie množstvo plynov (4 %) a veľké množstvo kvapalných produktov (71 %), najviac v oblasti naftovej frakcie. Množstvo tuhého zvyšku v reaktore bolo v prípade katalytického rozkladu menšie, čo svedčí o pozitívnom vplyve katalyzátorov na rozštiepenie makromolekúl odpadového plastu. Okrem nerozloženého plastu sa vo zvyšku nachádzali aj anorganické plnivé v množstve do 15 % hm. Na priebehu tvorby kvapalných produktov sa pozoroval vo všetkých prípadoch rovnaký trend, kedy sa na začiatku rozkladu plastu tvorili prevažne ľahšie uhľovodíky približne v oblasti benzínovej frakcie (C₅–C₁₁) a s dobou experimentu, teda aj s opotrebovaním katalyzátora prevažovala tvorba ťažších uhľovodíkov v oblasti naftovej frakcie (C₁₂–C₂₀).

Porovnaním výťažkov frakcií z experimentov s rôznymi katalyzátormi sa zistilo, že mordenity prírodné aj modifikované poskytovali väčšie výťažky plyných uhľovodíkov (do 23 % hm.) na úkor výťažkov benzínovej frakcie, ktorej väčšie množstvo vznikalo pri experimentoch s klinoptilolitmi ako prírodnými, tak aj modifikovanými.

8L-04**UTILIZATION OF FLUE GAS DESULPHURIZATION GYPSUM INTO AMMONIUM SULPHATE FERTILIZER****VLADIMÍR DANIELIK^a, JANA JURISOVÁ^a, PAVEL FELLNER^a, MILAN KRÁLIK^b***^a Faculty of Chemical and Food Technology STU in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ^b e search Institute of Chemical Technology, VUCHT a.s., Nobelova 34, 836 03 Bratislava, Slovakia
vladimir.danielik@stuba.sk*

Gypsum (CaSO₄·2H₂O) occurs in nature as a soft sulphate mineral. Nowadays huge amounts (millions tons all over the world) of this substance are formed as a side product from desulphurization processes. When it originates from a coal power plant, we call it flue gas desulfurization gypsum (FGDG). One of the possibilities of utilization of FGDG is the production of ammonium sulphate by the so called conversion reaction between gypsum and the mixture of carbon dioxide and ammonia (or by using ammonium carbonate). Besides obtaining of desirable products it will reduce the amount of gypsum that would be necessary to deposit after its arising from the desulphurisation of coal. The reaction consumes the equivalent amount of carbon dioxide, as well, which is also a positive effect.

In this paper, 10 FGDG samples of different origin (Slovnaft, ENO, Prunéřov, Tušimice, Deponie) together with 2 chemicals of pro analysis purity (Merck, Mikrochem) were tested. Quantitative parameters of conversion rate of gypsum were compared with the BET specific surface and average particle size. For quantitative evaluation of the rate of the conversion reaction, the following parameters were chosen: (i) initial rate of the reaction. This parameter can be determined by the extrapolation of the conversion curve to zero time; (ii) half-time of the reaction; (iii) conversion reached after certain time; (iv) maximum conversion achieved.

Initial rate is not a reliable parameter, because it is influenced very much by the disintegration of agglomerates formed by gypsum particles. Half-time of the reaction is determined also from the conversion curve. It is a better parameter for estimation of the reaction rate than the initial rate of the reaction. Conversion reached after a chosen time seems to be the most reliable. This parameter has a good reliability. The conversion reached after 25 min from the beginning of the experiment is in correlation with specific surface of the samples determined by the BET method.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-14-0217 (EGYVACHEP) and co-funding by VUCHT a.s.

8L-05**LOW TEMPERATURE SODIUM CRYOLITE
ELECTROLYTES WITH HIGHER ADDITION OF AlF_3** **EMÍLIA KUBIŇÁKOVÁ, JÁN HÍVEŠ**

*Faculty of Chemical and Food Technology STU in Bratislava,
Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia
emilia.kubinakova@stuba.sk*

Electrochemical preparation of aluminium from characteristic fluoride melts take place in temperature range 950–970 °C. The electrical conductivity is an important physical-chemical parameter of the electrolyte in this process. When electrical conductivity data are combined with transport numbers, the mobility of ions can be determined. This information is important for obtaining a better understanding of the mechanism of transport processes. The measurement of electrical conductivity in melts, especially in the case of fluorides and their mixtures is rather complicated.

In this paper, systems based on sodium cryolite with higher addition of AlF_3 were measured. This low-temperature electrolytes with molar ratio between NaF/AlF_3 , $\text{CR} < 2$, have different properties than “classic baths” ($\text{CR} = 2,8\text{--}2,2$). Higher addition of AlF_3 decreases temperature of primary crystalization but also reduces electrical conductivity. Measured temperature range was down to the 705 °C in these experiments.

The pyrolytic boron nitride electrode for tube-type graphite cell with an exactly defined distance between electrodes was used. Electrochemical impedance spectroscopy (EIS) was used for the measurements of the cell impedance. Measured impedance data were evaluated by the nonlinear regression analysis by the method of equivalent circuit. The electrical conductivities were calculated from the values of electrical resistance.

This work was supported by the Ministry of Education, Science, Research and Sport of the Slovak Republic within the projects VEGA 1/0543/15 and VEGA 1/0101/14.

8P-01**CALCIUM CARBONATE PREPARED FROM THE FLUE GAS DESULPHURIZATION GYPSUM****JANA JURISOVÁ^a, VLADIMÍR DANIELIK^a, PAVEL FELLNER^a, MILAN KRÁLÍK^b**

^a Faculty of Chemical and Food Technology STU in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ^b Research Institute of Chemical Technology, VUCHT a.s., Nobelova 34, 836 03 Bratislava, Slovakia
 jana.jurisovala@stuba.sk

Flue Gas Desulphurization Gypsum (FGDG) originates from a desulphurization process in coal power plants. In this paper, investigations of the conversion of FDGD with ammonium carbonate are reported. This conversion reaction results in calcium carbonate and ammonium sulphate that can be used as a fertilizer or a component of the fertilizers. The chemical reaction between gypsum and ammonium carbonate is known as the Merseburg process. Added value of this process can be a formation of different crystalline modifications of calcium carbonate. FDGD originating from a Slovak coal power plant was tested. The influence of initial concentration of raw materials, their initial ratio as well as influence of temperature was studied. Because of using of ammonium carbonate, the experiments were carried out in a sealed reactor (ammonium carbonate decomposes at temperatures higher than 30 °C). Under the studied reaction conditions calcium carbonate crystallizes in the form of calcite except of equimolar mixture when mixture of calcite and vaterite was formed. The conversion after 90 min of reaction reaches the values 89 % at equimolar initial mixture; 95 % at the mixture with 30 % excess of ammonium carbonate at 25 °C. The presence ammonium sulphate in the reaction solution (due to using recycling) results in formation of calcite and vaterite too.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-14-0217 (EGYVACHEP) and co-funding by VUCHT a.s.

8P-02**POROVNÁNÍ RŮZNÝCH ANEXŮ PŘI OPAKOVANÉ SORPCI URANU Z VODY****HANA PORSCHOVÁ, HELENA PARSCHOVÁ**

VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika
 hana.porschova@vscht.cz; helena.parschova@vscht.cz

Uran je radioaktivní toxický těžký kov, který se kumuluje v lidském těle v ledvinách a kostech. Poškozuje epitel tubulů a nahrazuje vápník v kostní mřížce, navíc může docházet k ozáření tkání v okolí místa deponování. Do těla se dostává nejčastěji z vody. Proto je třeba jej z vody odstraňovat^{1,2}. K odstranění uranu z vody lze použít např. srážení, sorpci na různých materiálech nebo iontovou výměnu³. O vhodném typu materiálu rozhodují především vstupní parametry vody – její pH, redox potenciál a celkové

složení. Ve vodách s pH ≥ 7 se uran vyskytuje převážně ve formě rozpustných aniontových komplexů, a proto lze využít silně nebo slabě bazické anexy^{4,5}, které můžeme po regeneraci znovu použít.

Tato práce byla zaměřena na sledování vlastností několika silně bazických anexy při opakované sorpci uranu z vodných roztoků. Anexy byly používány v síranové formě a jako regenerační roztok byla použita kyselina sírová. Bylo zkoumáno, zda se mění celková a užitná kapacita anexy a tlakové ztráty na koloně.

Z výsledků měření vyplývá, že se sledované vlastnosti anexy při opakované sorpci mění, např. užitková kapacita se snižuje a tlakové ztráty zvyšují, což může u některých ionexů způsobovat problémy v provozu. Tomu lze ale předejít častějším prováděním nápravné regenerace. Jinak lze ale zkoumané anexy opakovaně používat, protože regeneraci lze provést téměř se 100% účinností.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 20-SVV/2016).

LITERATURA

1. Jelíková H.: Uran v pitné vodě – aktuální toxikologické informace. Prezentace SZÚ, ze dne 24. 11. 2009 dostupná na adrese: http://www.szu.cz/uploads/documents/chzp/ovzdusi/konz_dny_a_seminare/konz_den_hzp_2009/07_kozisek_uran_zdr_rizika.pdf (staženo 12. 11. 2015)
2. SZÚ: Stanovisko Státního zdravotního ústavu – Národního referenčního centra pro pitnou vodu k limitní hodnotě uranu v pitné vodě ze dne 12. 3. 2013.
3. Pitter P.: *Hydrochemie* (4. vydání). VŠCHT Praha 2009.
4. Rychkov V. N., Smirnov A. L., Gortsunova K. R.: *Radiochemistry* 56(1), 38 (2014).
5. Riegel M., Tokmachev M., Hoell W. H.: *Reactive & Functional Polymers* 68, 1072 (2008).

8P-03**ODSTRAŇOVÁNÍ CHROMANŮ Z VODNÝCH ROZTOKŮ POMOCÍ CHELATAČNÍCH SORBENTŮ****MICHAL NĚMEČEK, HELENA PARSCHOVÁ**

VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika
 nemecek@vscht.cz

Chromany a polychromany jsou šestimocné sloučeniny chromu. Jedná se o karcinogenní a mutagenní látky dobře rozpustné ve vodě. Jejich využití v průmyslu je značné. Ať už se používají v textilním průmyslu k barvení textilií nebo v pyrotechnice, vždy vznikají odpadní vody, které obsahují tyto nebezpečné sloučeniny chromu. Vyhláška stanovující hygienické požadavky na pitnou a teplou vodu a četnost a rozsah kontroly pitné vody, stanovuje jako nejvyšší mezní hodnotu koncentrace Cr v pitné vodě 50 $\mu\text{g l}^{-1}$.

Pro sorpci chromanů byly použity následující sorbenty: Purolite S 110 (N-methylglukaminová funkční skupina), Wofatit MC 50 (aminoctová a aminodioctová funkční

skupina) a Dowex M 4195 (bis-pikolyaminová funkční skupina).

Provedené experimenty se sorbentem Purolite S 110 ukázaly, že po sorpci chromanů dochází k redoxním reakcím s funkční skupinou sorbentu, které jsou značně urychlovány slunečním světlem. Po proběhnutí redoxních reakcí došlo k poklesu celkové kapacity sorbentu o přibližně 1,3 %. K regeneraci sorbentu byla použita směs HCl a $(\text{COOH})_2$.

Při sorpci chromanů pomocí sorbentu Wofatit MC 50 dochází pravděpodobně k tvorbě velice stabilních komplexů s aminooctovými a aminodioctovými funkčními skupinami. Regenerace tohoto sorbentu se nezdařila.

U sorbentu Dowex M 4195 dochází při sorpci chromanů pravděpodobně k tvorbě komplexu s bis-pikolaminovou funkční skupinou, který snižuje celkovou kapacitu (počet funkčních skupin) o přibližně 8 %.

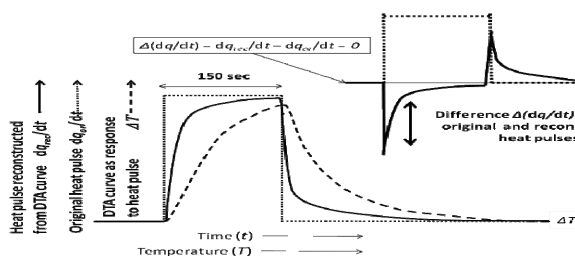
LITERATURA

1. Pitter P.: *Hydrochemie* (2. vydání). VŠCHT, Praha 2009.
2. Gerych P.: *Výskyt chromu v životním prostředí*, bakalářská práce, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, 2005.
3. 252/2004 Sb., Vyhláška ministerstva zdravotnictví ze dne 22. 4. 2004.
4. Jelínek L.: *Desalinační a separační metody v úpravě vody* (1. vydání). VŠCHT Praha 2008.
5. Schilde U., Uhlemann E.: *Reactive Polymers* 20, 181 (1993).
6. Horáková M., Lischke P., Pekárková K., Grünwald A.: *Metody chemické analýzy vod* (3. vydání). VŠCHT Praha 1986.

9L-01**TEMPERATURE AND ITS MEANING UNDER VARYING CONDITIONS: FROM NEWTON COOLING LAW TO THEORETICAL THERMAL ANALYSIS AND EVEN FURTHER****JAROSLAV ŠESTÁK, PAVEL HOLBA**

New Technology – Research Centre in the Westbohemian Region, West Bohemian University, Universitní 8, CZ-30114 Pilsen
sestak@fzu.cz

The early and even current DTA peak analysis seems to habitually follow the straightforward patterns of spectral analysis (such as XRD) so that some specific aspects of heat measurements are discussed showing the impact of the term of heat transfer sluggishness affecting the DTA peak background, the creation of temperature gradients (particularly critical when using the extreme heating/cooling rates), impact of the size of sample and the extent of its surface, etc. Even if the consequences of heat transfer hindrance (time lag) is inexcusably known since the time of legendary Newton cooling law (1701) and fundamental Tian calorimetric equation (1933) it has not been incorporated into theoretical treatises properly enough. The complexity of a DTA peak is thus analyzed in a more detailed manner including the necessary corrections created by the effect of the sample thermal inertia (following the graphical portrayal below) and numerical calculation of temperature gradients in both the steady and modulated modes. Expansion of the meaning of "temperature" into "hotness" is discussed and analyzed, with the goal of encompassing its two aspects: the *physical quantity* (thermodynamic, under equilibrium) and the *operational quantity* (experimentally observed under off-equilibrium circumstances by the sensor's thermoscopic reading)^{1–3}.



For standard TA methods of controlled heating and/or cooling, the standard thermodynamics applies well, but when the temperature changes very rapidly (methods of sample quenching), the customary thermodynamics is inadequate. Notwithstanding the special microchip techniques developed specifically to study rapidly-changing-temperature systems, which are capable of handling cooling rates as fast as million Kelvin's per second, the accuracy of the produced temperature data remains questionable. For such off-equilibrium, poorly defined temperature-measuring systems, a new term „temperecity“ is proposed.

REFERENCES

- Holba P., Šesták J., Sedmidubský D.: *Heat transfer and phase transition at DTA experiments*, in book: *Thermal analysis of Micro-, nano- and non-crystalline materials: Thermal physics, kinetics and thermodynamics* (Šesták J., Šimon P., eds.), p. 99-134 Springer, Berlin 2013.
- Holba P., Šesták J.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 121, 303 (2015).
- Šesták J.: *J. Therm. Anal. Calorim.*, DOI10.1007/s10973-016-5455-1.

9L-02**ABOUT THE USE OF A SOFTWARE-BASED LIBRARY FOR CHARACTERIZATION OF THERMOANALYTICAL DATA****EKKEHARD FUEGLEIN**

Netzsch-Geraetebau, Wittelsbacherstrasse 42, 95100 Selb, Germany
ekkehard.fueglein@netzsch.com

This work introduces the capability of a software-based database and library in the field of thermal analysis. It could be demonstrated that amorphous and semi-crystalline single phase polymers as well as mixtures of polymers can be successfully identified and classified by means of *Identify*.

The comparison of measured data and measurement results with values being already published in literature is a common approach to prove data quality, to develop new materials or to characterize materials behavior in general. Since thermoanalytical measurement results are usually strongly influenced by measurement conditions such as the heating rate, crucible type and material, atmosphere, gas flow rate and sample mass, to mention only a few, it was always difficult to create libraries or databases for comparison of results in the field of thermal analysis. Already in 1976, G. Liptay published the “Atlas of Thermoanalytical Curves” containing more than 350 organic and inorganic compounds within 5 printed Volumes¹. The authors present two results per sample, a smaller sample mass investigated with a low heating rate and a higher sample mass measured at a higher heating rate. This kind of data collection has been very helpful for numerous researchers, and it still is, in order to find appropriate measurement conditions or to receive suggestions for an adequate interpretation of the data observed. However, they all suffer from being printed documents and for this reason being not available for a software library comparison to currently measured data.

Recently, a newly developed software-based library for thermal analysis was introduced, named *Identify*². It allows for the first time to use a software-based comparison of currently measured thermoanalytical data with data stored in a library. As it is known for other analytical techniques such as FT-IR or MS, *Identify* delivers a relative value as a measure for similarity of measured data compared with library data. The library can be edited and customized to the application field of the user and can therefore be trained to recognize customer-specific reference materials, pure samples or mixtures. The results presented in this work made use of

Identify in order to characterize materials by means of thermoanalytical data.

Identify is a newly developed part of the NETZSCH Proteus[®] measurement and evaluation software. It allows for a software-based comparison of measured thermoanalytical data with data stored in a thermoanalytical library. Various polymers and polymer mixtures were investigated using thermoanalytical methods such as DSC and TG. The data received were analyzed regarding identification and classification of the mixtures using the database functionality of *Identify*.

Due to the introduction of *Identify*, the first software-based library for thermal analysis, it was possible to demonstrate the capability in terms of identification and classification of polymer mixtures. The database allows to correctly identify totally amorphous polymers such as polycarbonate (PC) by means of the evaluated glass transition. Furthermore, the database correctly identifies semi-crystalline thermoplastics such as polyethylene (PE), polypropylene (PP) or polybutylene terephthalate (PBT) by means of the evaluated melting effects³. Additionally, the ratio of different mixtures (PC-PBT) or (PE-PP) could be detected and classified correctly by using the database comparison. As an example for quality control, the successful classification of recycled polyamides compared to the virgin polyamide reference samples⁴ as well as the differentiation of various types of polyethylene is presented.

This work introduced the capability of a software-based database and library in the field of thermal analysis. It could be demonstrated that amorphous and semi-crystalline single phase polymers as well as mixtures of polymers can be successfully identified and classified by means of *Identify*.

REFERENCES

1. "Atlas of Thermoanalytical Curves" (TG-, DTG-, DTA-Curves measured simultaneously), Edited by G. Liptay, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1976.
2. Schindler A., Strasser C., Schmölzer S., Bodek M., Seniuta R., Wang X.: J. Therm. Anal. Calorim., DOI 10.1007/s10973-015-5026-x.
3. Fueglein E., Kaisersberger E.: J. Therm. Anal. Calorim. 23, 120 (2015).
4. Fueglein E.: J. Therm. Anal. Calorim. 121, 1353 (2015).

9L-03

TERMOANALYTICKÉ STUDIUM POVRCHOVÉ OXIDACE UHLÍKATÝCH MATERIÁLŮ

GABRIELA HOTOVÁ, VÁCLAV SLOVÁK

Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava
G.Hotova@seznam.cz, Vaclav.Slovak@osu.cz

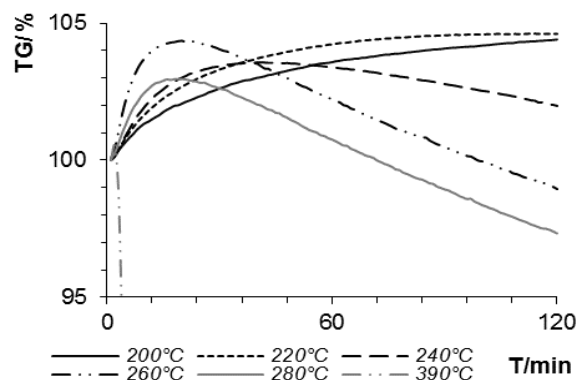
Termoanalytické studium (TG-MS) povrchové oxidace uhlíkatých materiálů bylo provedeno za účelem zjištění optimální teploty, doby oxidace a koncentrace kyslíku pro přípravu maximálně povrchově oxidovaného materiálu.

Neizotermické termogravimetrické experimenty byly

provedeny zahříváním vzorku uhlíkatého materiálu v oxidační atmosféře (20, 50 a 80 % směs O₂:N₂) rychlostí 10 K min⁻¹ do teploty 1000 °C. Na základě provedených neizotermických experimentů byly zjištěny teploty vhodné pro izotermické studium povrchové oxidace uhlíkatých materiálů. Samotné izotermické experimenty byly provedeny zahříváním ~ 5 mg vzorku na zvolenou teplotu po dobu 2 hodin. Během neizotermických a izotermických experimentů byly zaznamenávány MS signály s $m/z = 2, 18, 28, 32, 44$.

Na základě provedených izotermických experimentů (Obr. 1) bylo zjištěno, že průběh oxidace uhlíkatých kryogelů lze popsat třemi reakcemi. První z nich je samotná parciální oxidace uhlíkatých materiálů, která je spojena s hmotnostním nárůstem odpovídající chemisorpci kyslíku a tvorbě kyslíkatých funkčních skupin na povrchu materiálu. Tato reakce je pozorovatelná při nižších teplotách (asi od 150 °C). Druhou reakcí je samotná oxidace uhlíkatých materiálů, která vede až ke shošení vzorku (nad 350 °C). Třetím typem reakce pozorovatelné při oxidaci uhlíkatých materiálů je rozklad kyslíkatých funkčních skupin vytvořených na povrchu materiálu v důsledku chemisorpce kyslíku (asi 150–350 °C).

Uvedený model tří reakcí byl použit k získání kinetické rovnice celého procesu, která umožňuje simulovat oxidaci za různých podmínek a zjistit optimální parametry pro maximální míru povrchové oxidace.



Obr. 1. Izotermické TG křivky průběhu oxidace uhlíkatých kryogelů (atmosféra 50 % O₂)

9L-04

TÁNÍ JAKO MÍRA POLYKONDENZACE RESORCINOLU A FORMALDEHYDU VE VODNÉM ROZTOKU

EVA KINNERTO VÁ, PETRA VESELÁ, VÁCLAV SLOVÁK

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

Cílem tohoto příspěvku bylo prozkoumat, zda je možné experimentálně sledovat polykondenzaci resorcinolu a formaldehydu ve vodném roztoku měřením průběhu tání

pomocí DSC. Technikou DSC byly zkoumány dvě polykondenzační směsi pro přípravu resorcinol-formaldehydových xerogelů. Směs K1W40 obsahovala nižší koncentraci katalyzátoru a vyšší hmotnostní obsah výchozích látek (40 %). Druhá směs K2W20 byla připravena s vyšší koncentrací katalyzátoru a nižším hmotnostním obsahem výchozích látek (20 %). Analýza 10 μl polykondenzační směsi umístěné v hermeticky uzavřených hliníkových kelímcích probíhala následujícím teplotním programem: ochlazení na teplotu $-90\text{ }^\circ\text{C}$ (rychlost 5 K min^{-1}), udržování na této teplotě po dobu 5 min a následný ohřev na $25\text{ }^\circ\text{C}$ (rychlost 5 K min^{-1}). Směsi byly tímto způsobem měřeny v různých fázích polykondenzační reakce (1–8 dnů od počátku reakce).

Z provedených experimentů bylo zjištěno, že s prodlužující se dobou polykondenzace dochází u obou směsí k posunu piků tání k vyšším teplotám (narůstá teplota počátku tání a teplota piků). Tento posun byl pravděpodobně způsoben klesající koncentrací formaldehydu ve směsi. S postupující polykondenzací docházelo také k nárůstu plochy piků, což bylo zřejmě následkem uvolňování vody během reakce.

Vyšší koncentrace katalyzátoru u K2W20 způsobila, že polykondenzace probíhala pouze 3 dny ve srovnání s 8 dny pozorovanými u K1W40. Nižší hmotnostní obsah výchozích látek (K2W20) vedl k posunu piků tání k vyšším teplotám. Teplota počátku tání (na začátku reakce) odpovídala $-22\text{ }^\circ\text{C}$ pro K1W40 a $-13\text{ }^\circ\text{C}$ pro K2W20. Nižší hmotnostní obsah měl rovněž vliv na velikost plochy piků, která se u K1W40 pohybovala v rozmezí $127\text{--}166\text{ J g}^{-1}$ a u K2W20 mezi $213\text{--}240\text{ J g}^{-1}$.

Dle provedených experimentů se měření průběhu tání pomocí DSC jeví jako vhodná technika ke studiu polykondenzace resorcinolu a formaldehydu. Získaná data z průběhu tání mohou být dále využita k výpočtu stupně přeměny reakce, popřípadě k výpočtu molární hmotnosti látky vznikající v procesu polykondenzace.

9L-05 TERMICKÁ STUDIE PYROLÝZY ORGANICKÝCH XEROGELŮ NA BÁZI FURFURALU

PETRA VESELÁ, PETR BUCHTA

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

Hlavním cílem předkládaného příspěvku bylo prostudovat pyrolýzu organických xerogelů na bázi furfuralu pomocí termoanalytických technik. Byly připraveny 2 typy organických vzorků pomocí polykondenzace a subkritického sušení, přičemž první typ byl syntetizován z resorcinolu, furfuralu a HMTA a lišil se použitým katalyzátorem (CH_3COOH , NaOH nebo bez katalyzátoru). Druhý typ vzorku byl připraven z fenolu, *m*-kresolu, furfuralu a HMTA kyselou katalýzou (HCl).

U takto syntetizovaných vzorků byla zkoumána pyrolýza pomocí termoanalytických technik (TGA-MS, TMA). Pomocí TGA a TMA byly rozlišeny jednotlivé kroky pyrolýzy z hlediska hmotnostních a prostorových změn, výsledky

z těchto technik byly navzájem porovnány. Pomocí MS analýzy bylo možno identifikovat vyvíjené plyny během pyrolýzy a také prozkoumat míru proreagování jednotlivých výchozích prekurzorů. Tyto výsledky byly dále doplněny dalšími charakterizacemi, a to zjištěním hustoty a smrštění, snímkováním pomocí SEM a výsledky ze sorpcí Pb^{2+} iontů, metylenové modři, jodu a fenolu z vodných roztoků.

Bylo zjištěno, že pyrolýzu všech organických xerogelů lze podle TGA a TMA rozdělit do 3 kroků, přičemž 2. a 3. krok více či méně splývají. Prvnímu kroku lze přiřadit teplotní rozmezí $\sim 100\text{--}250\text{ }^\circ\text{C}$, druhý krok probíhá mezi $\sim 250\text{--}600\text{ }^\circ\text{C}$ a třetí pak mezi $\sim 600\text{--}900\text{ }^\circ\text{C}$. Průběhy křivek pro vzorky 1. typu jsou podobné, výrazně se ale od nich odlišuje vzorek 2. typu, a to kvůli jiným použitým výchozím prekurzorům. Celkové úbytky po pyrolýze dosahovaly hodnot mírně přes 50 %, celkové smrštění pak mezi $\sim 20\text{--}30\%$.

Na základě MS analýzy bylo zjištěno, že dochází k vypařování vody ze všech vzorků v průběhu celého procesu pyrolýzy. Všechny vzorky také vykazovaly vývin uhlovodíků a CO_2 během 2. a 3. kroku pyrolýzy (což je v souladu se zjištěním, že 2. a 3. krok pyrolýzy splývají). Během 3. kroku dochází k typickému uvolňování vodíku. Dále bylo zjištěno, že u vzorků 1. typu dochází k uvolňování furfuralu při teplotách $\sim 150\text{--}250\text{ }^\circ\text{C}$, což svědčí o jeho nedostatečném proreagování. Naopak u vzorku 2. typu byl detekován fenol v rozmezí $\sim 200\text{--}300\text{ }^\circ\text{C}$, který, na rozdíl od *m*-kresolu, nedostatečně proreagoval s furfurem.

Uvedené výsledky z termoanalytických měření byly porovnány s ostatními technikami a měřeními, přičemž bylo zjištěno, že hodnoty hustot a smrštění (měření pomocí posuvného měřítka a vah) rámcově odpovídají výsledkům z termické analýzy. Získané uhlíkaté vzorky byly dále testovány pro sorpční účely. Byla zkoumána sorpce různých látek z vodných roztoků, přičemž získané sorpční kapacity byly korelovány se zjištěními z termoanalytických technik.

9L-06 KRYSTALIZAČNÍ MECHANISMUS A JEHO PROJEVY V KINETICKÉ ANALÝZE

JANA SHÁNĚLOVÁ

*Katedra fyzikální chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
jana.shanelova@upce.cz*

Diferenciální termická analýza a diferenciální skenovací kalorimetrie jsou metody nejčastěji využívané při studiu krystalizačního chování v podchlazených taveninách. Tyto metody jsou rychlé, relativně jednoduché a dostatečně citlivé. Avšak poskytují pouze celkový tepelný obraz děje, ke kterému v tavenině dochází. Odhalení skutečného mechanismu krystalizace z těchto dat může být v řadě případů komplikované.

Jedním z nejčastěji používaných kinetických modelů pro krystalizaci je Johnson-Mehl-Avrami model (JMA)^{1,2}. Tento model byl odvozen na základě nukleačně růstového chování a díky tomu je možné na základě jeho jediného parametru usuzovat na pravděpodobný mechanismus krystalizace. Aplikovatelnost modelu JMA je však do jisté míry omezena,

a to zejména v případě neizotermních měření, která jsou v praxi velmi častá³.

Také řada dalších experimentálních faktorů jako např. aplikovaná rychlost ohřevu, objem vzorku, kvalita rozhraní vzorek-senzor, zrnitost vzorku, zvolená nulová linie či dokonce současná krystalizace více fází, může způsobit, že sledovaná kinetika neodpovídá modelu JMA. Je možné sledovat také závislost kinetických parametrů na těchto podmínkách⁴. Z uvedeného vyplývá, že stanovení vztahu mezi obrazem krystalizace sledovaným metodami termické analýzy a parametry nukleace a růstu krystalů, je stěžejní pro studium krystalizace těmito metodami⁵.

Tato práce se zabývá vlivem některých parametrů krystalizačního chování na výsledný tvar sledovaných termogramů. Pozornost je věnována zejména rozdílu mezi krystalizací na povrchu vzorku a homogenní krystalizací v objemu vzorku, časovému zpoždění nukleace a vlivu teplotní závislosti rychlosti růstu krystalů. Na simulovaných i experimentálních křivkách jsou tyto vlivy ukázány a dále diskutovány s ohledem na běžně používané kinetické modely.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury ČR, projekt č. 16-10562S.

LITERATURA

1. Johnson W. A., Mehl R. F.: *Trans. Am. Inst. Miner. (Metall.) Eng.* 135, 416 (1939).
2. Avrami M.: *J. Phys. Chem.* 9, 177 (1941).
3. Málek J.: *Thermochim. Acta* 267, 61 (1995).
4. Svoboda R., Málek J.: *Thermochim. Acta* 526, 237 (2011).
5. Honcová P., Šhánělová J., Barták J., Málek J., Košťál P., Stehlík S.: *Cryst. Growth Des.* 16, 2904 (2016).

9L-07

ISOCONVERSIONAL METHODS – HOW TO APPLY THEM CORRECTLY?

PETER ŠIMON, TIBOR DUBAJ, ZUZANA CIBULKOVÁ

*Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia
peter.simon@stuba.sk*

Thermoanalytical methods are widely used to study the condensed state processes. Mechanisms of these processes are often unknown or too complex to be characterized by a simple kinetic model. Methods based on the general rate equation are very popular to describe their kinetics^{1,2} where the rate of the process is expressed as

$$\frac{d\alpha}{dt} = k(T)f(\alpha) \quad (1)$$

where α is the conversion, t is time, T is temperature, $k(T)$ is a temperature function depending on T and $f(\alpha)$ is a conversion function depending on the conversion of the process. There is a number of conversion functions applied in

the kinetic analysis of thermoanalytical data³. On the other hand, the Arrhenius equation is almost exclusively employed as the temperature function.

In our paper⁴ it has been shown that, within the temperature range of measurement, two other temperature functions provide the description of experimental data so well or even better as the Arrhenius equation. Those functions are the Berthelot-Hood function

$$k(T) = A_{BH} \exp(DT) \quad (2)$$

where A_{BH} and D stand for parameters, and the Harcourt-Esson equation.

The most employed class of methods used for determination of the kinetic parameters are model-free isoconversional methods. They can be divided into integral, incremental and differential methods⁵. The integral methods are based on an assumption that the conversion function holds in the whole range of conversions. In ref.⁶ it was proved that in the case of variable activation energy the application of integral isoconversional methods leads to incorrect values of the kinetic parameters. In most thermoanalytical kinetic studies, conversion-dependent activation energy is reported, hence the integral methods should be avoided. Differential methods should provide the correct values of kinetic parameters; however, their drawbacks are that they are very sensitive to noise and tend to be numerically unstable when applied to experimental data^{3,7}. Consequently, the best choice for the treatment of kinetic data is to employ the incremental methods where the values of kinetic parameters are assumed to be constant within sufficiently small conversion intervals.

In ref.⁸ it has been found that the best extrapolations of the accelerated stability studies to the application conditions give the isoconversional methods based on Eq.(2). In ref.⁷ we proposed an incremental isoconversional method where the regression model is directly fitted without any approximations or transformations of the experimental data. Further advantage is that a statistically well-grounded and physically justified objective function based on the maximum likelihood approach is optimized; thus, the parameter uncertainties can be determined. The method provides the kinetic parameters free of bias which is introduced by the transformation of experimental data and by the use of incorrect objective functions.

Financial support from the Slovak Scientific Grant Agency, grant No. VEGA 1/0592/15, and Slovak Agency for Research and Development, project No. APVV-15-0124, are greatly acknowledged.

REFERENCES

1. Šimon P.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 82, 651 (2005).
2. Šimon P.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 88, 709 (2007).
3. Vyazovkin S., Burnham A. K., Criado J. M., Pérez-Maqueda L. A., Popescu C., Sbirrazzuoli N.: *Thermochim. Acta* 520, 1 (2011).
4. Šimon P., Dubaj T., Cibulková Z.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 120, 231 (2015).
5. Šimon P.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 76, 123 (2004).
6. Šimon P., Thomas P., Dubaj T., Cibulková Z., Peller A., Veverka M.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 115, 853 (2014).

- Dubaj T., Cibulková Z., Šimon P.: *J. Comput. Chem.* 36, 392 (2015).
- Šimon P., Hynek D., Malíková M., Cibulková Z.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 93, 817 (2008).

9L-08 KINETIKA PYROLÝZY NANOVLÁKNITÝCH CELULOSOVÝCH MATERIÁLŮ

VÁCLAV SLOVÁK, JANA ŠTEFELOVÁ

*Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, katedra chemie, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava
vaclav.slovak@osu.cz*

Environmentálně přijatelnou cestou přípravy uhlíkatých materiálů pro různé aplikace je pomalá pyrolýza biomasy nebo jejich složek. Struktura a vlastnosti připravených uhlíkatých materiálů jsou ovlivňovány vlastnostmi použité organické hmoty i podmínkami pyrolýzy. Pochopení a detailní popis pyrolýzního procesu právě ve vztahu k vlastnostem původního materiálu jsou nezbytné pro plánování příprav tohoto typu. Cílem tohoto příspěvku bylo popsat kinetiku pyrolýzy nanovláknitých celulosových materiálů různého původu (dřevo, bakterie, řasy) na základě série neizotermických termogravimetrických experimentů.

Pyrolýza celulosy je dvoustupňový proces. První krok (200–400 °C) je velmi rychlý, doprovázený výrazným hmotnostním úbytkem a intenzivním uvolňováním plynů. Nad teplotou 400 °C už dochází k pomalému dokončování karbonizace (hmotnostní úbytek a teplota ukončení reakce závisí na výchozím materiálu a rychlosti ohřevu).

Pro popis pyrolýzního procesu byla použita kinetická rovnice odpovídající dvěma paralelním reakcím. Pro závislost rychlostní konstanty na teplotě byl využit Arrheniův vztah, reakční model byl hledán ve tvaru $f(a) = a^m \cdot (1 - a)^n$. Výpočet kinetických parametrů pyrolýzy jednotlivých celulosových materiálů byl proveden nelineární optimalizací.

Výsledky výpočtů ukázaly, že v obou pyrolýzních krocích je parametr m v reakčním modelu nevýznamný a kinetiku procesu lze popsat jednoduchým modelem reakce n -tého řádu.

První část procesu pyrolýzy se řídí přibližně modelem reakce prvního řádu bez ohledu na typ celulosy. Výraznou podobnost prvního kroku pyrolýzy u všech materiálů dokazuje také dobrá lineární závislost mezi zjištěnými hodnotami aktivační energie a logaritmu frekvenčního faktoru (isokinetický kompenzační efekt).

Kinetiku druhého kroku pyrolýzy se nepodařilo vhodně popsat. Zjištěné řády reakce (hodnoty 5–9) nejsou reálné. Důvodem je pravděpodobně malý hmotnostní úbytek v druhém kroku a jeho výrazné teplotní překrytí s intenzivnějším prvním krokem.

Hmotnostní úbytky zjištěné v prvním a druhém kroku pyrolýzy jsou v relaci s krystalinitou použité celulosy. Velmi krystalický zdroj (celulosa z bakterií nebo řas) má výraznější hmotnostní úbytek v prvním pyrolýzním kroku, zatímco u méně krystalického materiálu (celulosa ze dřeva) narůstá význam druhé fáze pyrolýzy.

Zjištěné skutečnosti budou dále využity při hledání optimálního pyrolýzního postupu vedoucího k materiálům s vlastnostmi vhodnými pro adsorpční aplikace.

9L-09 STUDIUM SYNTÉZY VYBRANÝCH SPINELOVÝCH SLOUČENIN POMOCÍ METOD TERMICKÉ ANALÝZY

PETR BĚLINA, PETRA ŠULCOVÁ

*Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice
petr.belina@upce.cz*

Spinely I. typu obecného vzorce $A^{2+}B^{3+}_2O^{2-}_4$ nacházejí velmi široké uplatnění díky možnostem chemické i strukturní modifikace. Pracoviště katedry anorganické technologie se dlouhodobě zabývá těmito sloučeninami z pohledu jejich využití jako anorganických pigmentů, ale věnuje pozornost také metodám jejich přípravy. V minulosti byla na katedře anorganické technologie vyvinuta metoda suspenzního mísení surovin pro přípravu nejen spinelových oxidických materiálů.

V současnosti je pozornost věnována syntéze spinelových sloučenin $CoMn_2O_4$ a $MnCo_2O_4$ s využitím poměrně nových syntézních postupů. Výchozími látkami jsou v tomto případě sírany či dusičnany příslušných kovů, které jsou reakcí ve vysoce koncentrované suspenzi převedeny na směsné šťavelany, případně uhličitany. Tyto meziproducty pak při poměrně nízké teplotě rozkladu poskytují požadované produkty.

Metoda simultánní termické analýzy DTA/TG slouží v našem případě k posouzení chování reakční směsi. Tato metoda potvrdila, že rozklad meziproductů probíhá v několika krocích, nejprve dochází k oddělení krystalové vody a poté k vlastnímu rozkladu. Metodou DTA/TG a také následnou fázovou analýzou bylo potvrzeno, že teplota potřebná pro vznik spinelové sloučeniny je v případě šťavelanových meziproductů blízká hodnotě 420 °C, v případě uhličitánových meziproductů je pak tato teplota ještě o přibližně 40 °C nižší. Teploty přípravy těchto sloučenin jsou tedy o 200 až 300 °C v porovnání s přípravou reakcí v tuhé fázi. Bez zajímavosti není fakt, že vznikající práškový materiál vykazuje střední velikost částic v desítkách nanometrů. Hodnoceny byly i další fyzikálně-chemické vlastnosti připravených prášků – barevnost, termická stabilita, specifický povrch.

LITERATURA

- Bělina P., Šulcová P.: *J. Therm. Anal. Cal.* 88, 107 (2007).
- Zhou K., Wu W., Li Y., et al.: *J. Therm. Anal. Cal.* 114, 205 (2013).

9L-10**LIQUIDUS, SOLIDUS AND OTHER PHASE TRANSITION TEMPERATURES AND HEAT CAPACITY OF LOW CARBON STEEL****BEDŘICH SMETANA, SIMONA ZLÁ, MONIKA KAWULOKOVÁ, ALEŠ KALUP, JANA DOBROVSKÁ, ONDŘEJ MARTINÍK, PETR DOSTÁL***VŠB-TU Ostrava, Faculty of metallurgy and materials engineering, Regional materials science and technology centre, 17. listopadu 15/2172, 708 33 Ostrava
bedrich.smetana@vsb.cz*

The paper deals with the study of thermo-physical properties of selected real steel grade (wt.%: 0.16C, 0.7Mn, 0.2Si) in wide temperature region 20–1600 °C, in solid and also liquid phase (melt). The work is focused mainly on phase transition temperatures and heat capacities (apparent heat capacity), particularly liquidus (T_L) and solidus (T_S) temperatures, eutectoid transition (T_E), alfa-gamma ($T_{\alpha-\gamma}$) and magnetic transition (T_C).

Various thermal analysis methods were used for obtaining of experimental data:

“direct” Thermal analysis (TA),
Differential Thermal Analysis (DTA) and
Differential Scanning Calorimetry (3D DSC).

Experimental systems NETZSCH STA 449 F3 Jupiter, Setaram SETSYS 18_{TM} and Setaram MHTC (Multi High temperature Calorimeter) were used for experimental study.

Theoretical study of analysed steel grade was performed using IDS SW (Solidification Analysis Package) and thermodynamic SWs COMPUTHERM and THERMO-CALC with database TCFE8. Experimental and theoretical data were compared and discussed.

Selected experimental values of phase transition temperatures are presented below; temperature of liquidus and solidus:

T_L (DTA, heating) = 1515 °C, T_L (TA, heating) = 1516 °C and T_L (TA, cooling) = 1511 °C; T_L (IDS) = 1518 °C, T_L (Computherm) = 1518 °C and T_L (TCW) = 1519 °C. Differences up to 8 °C.

T_S (DTA, heating) = 1489 °C, T_S (TA, heating) = 1481 °C, T_S (TA, cooling) = 1468 °C; T_S (IDS) = 1477 °C, T_S (Computherm) = 1486 °C and T_S (TCW) = 1484 °C. Differences up to 21 °C.

This paper was created on the Faculty of Metallurgy and Materials Engineering in the Project No. LO1203 „RMSTC-Feasibility Program“ funded by Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic, TAČR project No. TA03011277 and student projects SP2016/90 and SP2016/103.

REFERENCES

1. Smetana B. et al.: J. Therm. Anal. Calorim. 112, 473 (2013).
2. Zlá S. et al.: J. Therm. Anal. Calorim. 110, 211 (2012).
3. Žaludová M. et al.: J. Therm. Anal. Calorim. 112, 465 (2013).

9L-11**AKTIVITY ODBORNÉ SKUPINY TERMICKÉ ANALÝZY****PETRA ŠULCOVÁ***Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
petra.sulcova@upce.cz*

Odborná skupina termické analýzy (OSTA) je aktivní od roku 1972. Národní skupina je od svého vzniku 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.

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 Praze je sekce termické analýzy zařazena již počtvrté. 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) a 66. sjezdu v Ostravě (2014).

Na webových stránkách OSTA (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 16th International Conference on Thermal Analysis and Calorimetry (Orlando, Florida, USA), kde má Česká republika také své zástupce.

V příštím roce oslaví OSTA při České společnosti chemické 45. výročí svého vzniku a při této příležitosti bude organizován druhý ročník Termoanalytického semináře, který se uskuteční v roce 2017 v Ostravě.

9P-01**CENTEM: THERMOANALYTICAL CENTER AT THE CZECH WESTBOHEMIAN UNIVERSITY AND ITS INTERNATIONAL COOPERATIVE PROGRAM****PAVEL HOLBA, JAROSLAV ŠESTÁK, TOMÁŠ KOVÁŘÍK, PETR MARTINEC, JAROSLAV KADLEC**

*NTC - New Technology; Research Centre in the Westbohemian Region, West Bohemian University, Universitní str. 8, CZ-30114 Pilsen, Czech Republic
holbap@gmail.com*

Specified research in the spheres of polymeric membranes, hydrogels, polysialates and geopolymer composites (and their profiles drawn by new pultrusion technology), photovoltaic cells and panels, fuel cells, batteries and solid electrolytes, biomaterials and biomedical application, car exhaust catalyses, nanomaterials and noncrystallites, foams heat isolators, etc., is concerned.

Instrumentation comprise MTGA – Thermogravimetric analyzer Q500, MDSC – Differential scanning calorimeter Q200, DMA – Dynamical mechanical analyzer Q800, MTMA – thermo mechanical analyzer – Q400, Rotary rheometer – ARES G2, Electrochemical impedance spectrometer – AIS, Dynamic thermogravimetry of vapor sorption – DVS, Inverse gas chromatography – IGS-SEA, Fuel cell testing with polymer membrane – PEMFC-TS, Laser deposition of thin layers, Dispersive fluorescence RTG spectrometer – AXS Bruker S4, Capillary electrophoresis with UV detection, Low angle RTG diffraction – SAXS Anton Paar, 3-D light microscopy, electron microscopy, etc.

The Centre is prepared to serve as an international reference laboratory ready to cooperate on the explication of variety methodical, scientific and industrial problems, providing material analysis and allied data evaluation, eventual explanation of whole problematic including the selection and association of individual types of measurements, analysis and material's option.

Beside international assignments, domestic projects and cooperation with industry, the Centre provides education service in both the material science and a wider range of interdisciplinary learning; recently is subordinating the international program "Excellence of human resources as basis for the competition ability" granting postdoctoral studies. Research includes powerful state of theoretical basis on thermophysical measurements, thermal analysis and calorimetry, material thermodynamics and technology, mechanical dynamics, reaction kinetics, data evaluation, computer data processing and analysis.

It encompasses links to various international boards as well as wider publication activities, including special book (now exhibited): Šesták J. "Science of heat and thermophysical studies: a generalized approach to thermal analysis". Elsevier, Amsterdam 2005; Hlaváček B., Mareš J.J. (Šesták J. ed): "Thermal physics of structure of crystalline and non-crystalline materials". Pardubice University 2008 (in Czech); Šesták J., Holeček M., Málek J. (eds): "Some thermodynamic, structural and behaviors aspects of materials accentuating non-crystalline states". OPS, West Bohemian University, Pilsen 2009; second edition

2011; Křemenáková D., Mishra R., Militký J., Šesták J. "Selected topics of textile and material science" West Bohemian University, Pilsen/Liberec 2011; Šesták J., Mareš J.J., Hubík P. (eds): "Glassy, amorphous and nano-crystalline materials: thermal physics, analysis, structure and properties". Springer, Berlin 2011; Šesták J., Šimon P. (eds) "Thermal analysis of micro-, nano- and non-crystalline materials: transformation, crystallization, kinetics and thermodynamics". Springer, Berlin 2012.

10L-01

NOVÁ METÓDA PRE STANOVENIE ^{90}Sr
V KOSTIACHSILVIA DULANSKÁ^a, ĽUBOMÍR MÁTEL^a,
MARIJANA NODILO^b^a PriF UK Katedra jadrovej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovensko, ^b Ruđer Bošković Institute, Laboratory for Radioecology, Bijenička cesta 54, 10 000 Zagreb, Croatia
dulanskas@gmail.com

Do životného prostredia sa ^{90}Sr dostalo počas skúšok jadrových zbraní uskutočnených hlavne v rokoch 1950–1970, ale aj počas havárií na jadrovej energetických zariadení. Doba polpremeny ^{90}Sr je 28,8 rokov, predstavuje beta žiarič ($E_{\beta} = 0,54 \text{ MeV}$) a rádiotoxický prvok. Inkorporácia ^{90}Sr do ľudského organizmu sa realizuje prostredníctvom koreňového systému rastlín, ktoré sú konzumované dobytkom. ^{90}Sr sa kumuluje v mäse a mlieku a keďže stroncium predstavuje nutričný analóg vápniku v organizme sa inkorporuje v rovnakých miestach ako vápnik, predovšetkým však v kostiach.

Stroncium je v organizme distribuované prostredníctvom: gastrointestinálnej absorpcie, obličkovej exkrécie, placentálneho transferu, ale vo všeobecnosti je stroncium v malej miere absorbované aj v tráviacom trakte. Zistilo sa, že vitamín D podporuje absorpciu stroncia v tráviacom trakte, kým naopak prítomnosť vápnika ho inhibuje. Väčšina stroncia obsiahnutá v strave je absorbovaná v tenkom čreve, a to až 62 % tekutej dávky a 88 % tuhej dávky, tieto experimenty sa uskutočňovali len na zvieratách¹.

^{90}Sr je akumulovaný v kostiach so vzrastajúcim časovým obdobím, preto sa u starších jedincov očakáva jeho vyšší obsah ako u mladších. Tieto tvrdenia podporujú aj experimentálne výsledky uskutočnené Landstetterom a Wallnerom², kde sa uvádza, že šesťročný srnec mal stanovený dvakrát vyšší obsah ^{90}Sr .

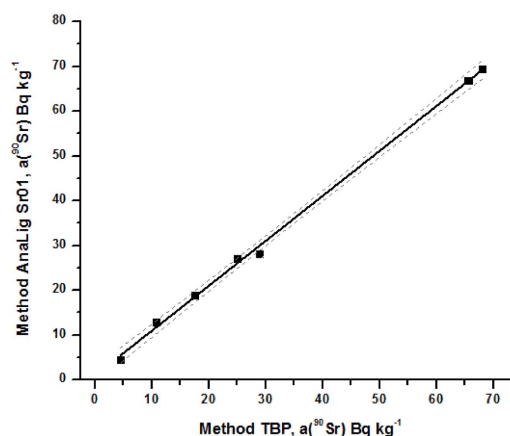
Cieľom práce bolo stanoviť hmotnostnú aktivitu ^{90}Sr v kostiach divožijúcich zvierat pomocou dvoch rozdielnych separačných postupov a následne ich porovnať vhodnou štatistickou metódou. Testovaná bola nová metóda stanovenia ^{90}Sr v kostiach pomocou sorbentu molekulárneho rozpoznávania² AnaLig[®] Sr01 s metódou kvapalinovej extrakcie s tri-butylfosfátom (TBP)³. Analyzovali sa vzorky kostí zo svine divej a srny z územia Slovenskej republiky. Divo žijúce zveri (diviaky, srny) boli vybrané, z dôvodu ich konzumácie širokého spektra potravy a tým môžu akumulovať vo svojom organizme rádioaktívne prvky kontaminácie biosféry (^{90}Sr , ^{137}Cs a podobne). Rádiochemický výťažok sa stanovil gamaspektrometrickým meraním pomocou stopovacieho rádionuklidu ^{85}Sr v prípade metódy stanovenia pomocou sorbentu AnaLig[®] Sr01 a gravimetricky vážením šťaveľanu ytritého v prípade metódy stanovenia ^{90}Sr pomocou TBP. Stroncium bolo merané na kvapalinovom scintilačnom spektrometri TriCarb a proporcionálnym detektorom (^{90}Y).

Technika molekulárneho rozpoznávania poskytuje rýchlu a účinnú metódu stanovenia ^{90}Sr z kostného tkaniva, ktoré predstavuje maticu s takmer 50 % obsahom

konkurenčného prvku, a to katiónu vápnika. Sorbent AnaLig[®] Sr01 bol vyvinutý firmou IBC Advanced Technologies pre separáciu ^{90}Sr , ktorý napriek svojej vyššej cene vykazuje dobrú regeneračnú schopnosť, časovú nenáročnosť separácie ^{90}Sr (od úpravy popola z kostí až po eluovanie frakcie so ^{90}Sr) približne 4 hodiny a zároveň poskytol vysoké rádiochemické výťažky.

Aktivita ^{90}Sr v kostiach zvierat odobratých z územia SR boli stanovené rozdielnymi metódami, najvyššie hodnoty aktivity stroncia mali vzorky z lokality Púchov ($69,4 \pm 4,0 \text{ Bq kg}^{-1}$) a najnižšie z lokality Borský Mikuláš a Tatry. Chemické výťažky sa pohybovali v rozsahu 85–96 % v prípade separácie stroncia pomocou sorbentu AnaLig Sr01. Minimálna detegovateľná aktivita bola $2,6 \text{ Bq kg}^{-1}$.

Nová metóda stanovenia ^{90}Sr v kostiach (metóda AnaLig Sr01) bola porovnaná so staršou metódou kvapalinovej extrakcie, pričom pre testovanie jej vhodnosti pre stanovenie ^{90}Sr bola použitá regresná analýza (testovanie regresného tripletu).



Obr. 1. Graf regresnej priamky pre vybrané metódy

Vysoká hodnota korelačného koeficientu (0,99) potvrdila, že model je štatisticky významný, čo dokazuje aj vysoká hodnota koeficientu determinácie. Nová metóda pre stanovenie ^{90}Sr poskytuje rovnaké výsledky ako staršia metóda. Stredná kvadratická chyba predikcie a Akaikeho informačné kritérium sa používajú na klasifikáciu kvality jednotlivých navrhnutých modelov, pričom pokles hodnoty MEP a AIC predikuje vyššiu kvalitu modelu⁵.

LITERATÚRA

1. Wasserman E. M., Kallfelz F. A., Comar C. L.: Science 133, 883 (1961).
2. Landstetter C., Wallner G.: Journal of environmental Radioactivity 87, 315 (2006).
3. Dulanská S., Remenec B., Mátel L., Darážová E. J.: Radioanal. Nucl. Chem. v tlači.
4. Mikulaj V., Švec V.: J. Radioanal. Nucl. Chem, 175, 317 (1993).
5. Meloun M., Militký J.: Kompendium statistického zpracování dat. Academia, Praha 2006.

10L-02

STATISTICKÁ ANALÝZA CHEMICKÝCH VLASTNOSTÍ (PARAMETRŮ) U ZEMĚDĚLSKÝCH A LESNÍCH PŮD METODOU HLAVNÍCH KOMPONENT A EXPLORATORNÍ ANALÝZOU VÍCEROZMĚRNÝCH DAT

LADISLAV MENŠÍK^{a,b}, EVA KUNZOVÁ^c, KLÁRA KOMPRDOVÁ^d, JIŘÍ KULHAVÝ^b, MILAN MELOUN^e

^aO hohospodařování a využívání trvalých travních porostů, VS Jevíčko, Výzkumný ústav rostlinné výroby, v.v.i., K. H. Borovského 461, 569 43 Jevíčko, ^bÚstav ekologie lesa, Lesnická a dřevařská fakulta, Mendelova Univerzita v Brně, Zemědělská 3, 613 00 Brno, ^cHospodaření se živinami v agroekosystémech, Výzkumný ústav rostlinné výroby, v.v.i., Drnovská 507, 161 06 Praha 6 - Ruzyně, ^dRECETOX (Centrum pro výzkum toxických látek v prostředí), Masarykova Univerzita Brno, Kamenice 753/5, 625 00 Brno, ^eKatedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika
ladislav.mensik@vurv.cz

Základními úlohami studia v biologických oborech (např. zemědělství, lesnictví) je simultánní monitorování úrovně různých chemických vlastností (parametrů resp. proměnných / koncentrací apod.) v půdě. Cílem je často zjištění, zda dané vlastnosti půdy (celkem p) nepřekračují zadané úrovně. Problémem je, že se jednotlivé vlastnosti (parametry) půdy navzájem ovlivňují a v řadě případů spolu silně souvisí (korelují), takže se často špatně samostatně interpretují. Navíc se informace o chemických vlastnostech půdy získávají z různých zdrojů (míst), které nejsou nezávislé. To vše vede k požadavku zkoumání struktur v datech a hledání vazeb mezi vlastnostmi (parametry) resp. zdroji¹.

Nejpoužívanější metodou průzkumové vícerozměrné statistické analýzy dat je analýza hlavních komponent (PCA) založená na principu transformace dat z původních proměnných x_j , $j=1, \dots, m$, do menšího počtu latentních proměnných y_j /hlavních komponent² (vhodnější vlastnosti, je jich výrazně méně, vystihují téměř celou proměnlivost původních proměnných a jsou vzájemně nekorelované). První hlavní komponenta y_1 popisuje největší část proměnlivosti čili rozptylu původních dat, druhá hlavní komponenta y_2 zase největší část rozptylu neobsaženého v y_1 atd.

Cílem studie bude popsat způsoby předběžné analýzy dat, vlastní realizaci metodou PCA, možnosti vizualizace výstupů a různých způsobů interpretace výsledků chemických vlastností půdy v různých ekosystémech (agroekosystém a lesní ekosystém). Jednotlivé postupy a metody budou demonstrovány na datech z oboru zemědělské a lesnické pedagogie.

Výsledky statistických analýz jednoznačně prokazují, že analýza hlavních komponent (PCA) je velice vhodnou metodou pro zobrazení, hodnocení a interpretaci dat o chemických vlastnostech půdy v různých typech ekosystémů^{3,4}.

Tato práce vznikla za podpory grantu MZe ČR – RO0416, NAZV QJ1210211 a MŠMT COST LD14018.

LITERATURA

1. Militký J., Meloun M.: Metoda hlavních komponent a exploratorní analýza vícerozměrných dat, *Konference Zajištění kvality analytických výsledků*, 18.–20.3. 2003, Komorní Lhotka.
2. Meloun M., Militký J., Hil M.: *Statistická analýza vícerozměrných dat v příkladech*. 2. vyd., Academia, Praha 2011.
3. Menšík L., Kunzová E., Sářka, M., Haberle J., Čermák P., Hlisnikovský, L., Hangen E., Schilling B.: *Contaminants in the Environment of the River Eger-Ohře*. Výzkumný ústav rostlinné výroby, Praha 2015.
4. Komprdová K., Komprda J., Menšík L., Vaňková L., Nizzetto, L.: *Sci. Total Environ.* 553, 532 (2016).

10L-03

THE USE OF FRACTIONAL FACTORIAL DESIGN FOR OPTIMIZATION OF DIRECT DETERMINATION OF BE IN SOIL AND SEDIMENT SAMPLES BY HR-CS-ET-AAS WITH SLURRY SAMPLING

LENKA HUSÁKOVÁ, MICHAELA ŠAFRÁNKOVÁ, IVA URBANOVÁ, TEREZA ŠÍDOVÁ

*Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Pardubice, Studentska 573 HB/D, CZ-532 10, Czech Republic
Lenka.Husakova@upce.cz*

In this work an efficient design methodology is presented for developing a simple, fast, and environmentally-friendly method for the determination of Be in soil and sediment samples using high-resolution continuum source electrothermal atomic absorption spectrometry (HR-CS-ET-AAS) with slurry sampling. A fractional factorial design^{1,2} was employed to assess the influence of seven analytical variables (particle size, concentration of stabilizing agent and extractant, effect of ultrasonic agitation, concentration of chemical modifier, pyrolysis and atomization temperature) onto the analyte signal and for the development of the slurry preparation and optimization of measuring conditions. Under the optimum conditions, the proposed method has been successfully applied to the determination of Be in two certified reference materials (NIST SRM 2702 Inorganics in Marine Sediment and IGI BIL-1 Baikal Bottom Silt). The method accuracy was in addition assessed by comparing the results obtained for ten real samples by slurry sampling with those obtained following microwave-assisted extraction by inductively coupled plasma time of flight mass spectrometry (TOF-ICP-MS); no statistical differences, based on a *t*-test at a confidence level of 95 %, were detected. The reported method has a precision better than 7 %. Characteristic mass and limit of detection for the original sample was 17 pg and 0.016 mg kg⁻¹, respectively.

Financial support from the University of Pardubice (project no. SGSFChT_2015001) is gratefully acknowledged.

REFERENCES

1. Montgomery D. C.: *Design and Analysis of Experiments*.

J. Wiley, New York 1991.

- Box G. E. P., Hunter W. G., Hunter S. J.: *Statistics for experimenters: An introduction to design, data analysis, and model building*. J. Wiley, New York 1978.

10L-04

VYUŽITÍ ANALÝZY HLAVNÍCH KOMPONENT PŘI SCREENINGU POLYMORFNÍCH FOREM A SOLÍ RAMONOVOU SPEKTROSKOPIÍ VE FARMACEUTICKÉM VÝVOJI

TOMÁŠ PEKÁREK

Zentiva, k. s., U Kabelovny 130, 102 37 Praha 10, Česká republika

Tomas.Pekarek@zentiva.cz

Vývoj generických léčiv je úzce spjat s hledáním patentově nekolizních solí a polymorfů. Polymorfie je schopnost krystalických látek existovat v různých krystalových strukturách, aniž by došlo ke změně chemického složení¹. V praxi se k jejich nalezení využívá screening, tj. velkého počtu experimentů s malým množstvím složek (do 100 mg). Screening lze provést automatizovaně nebo ručně. K charakterizaci produktů lze využít různých technik např. rentgenové práškové difrakce, nukleární magnetické rezonance nebo technik vibrační spektroskopie. Protože vzorků je v rámci jednoho screeningu obvykle získáno aspoň 96, je často pro analýzu spekter využíváno metod exploratorní analýzy dat a klasifikačních technik nezávisle na tom, zda spektra byla získána automatickým systémem nebo měřením jednotlivých vzorků *off-line*.

Mezi nejčastěji používané techniky analýzy screeningových dat patří shluková analýza a analýza hlavních komponent.

V prezentované práci bylo využito techniky analýzy hlavních komponent (PCA) pro rozlišení FT-Ramanových spekter screeningu polymorfních forem molekuly léčiva ze skupiny antihypertenziv. Vzorky byly připraveny mícháním suspenze vstupní účinné farmaceutické látky (API) v různých rozpouštědlech. Z části suspenzí vzorků byla rozpouštědla odpařena, některé vzorky byly měřeny přímo v suspenzích. Jednotlivé polymorfní formy studované API mají, s výjimkou amorfů, velmi blízká spektra lišící se pouze v několika oblastech relativní intenzitou pásů a malou změnou jejich polohy. Některé oblasti bylo nutno vyloučit vzhledem k interferenci pásů rozpouštědel.

Spektra bylo možno metodou PCA rozdělit do čtyř skupin: polymorfní formy I až III a amorfů. Výsledky byly ověřeny metodou práškové rentgenové difrakce.

LITERATURA

- Smith J. R., Xu W., Raftery D.: *J. Phys. Chem. B* 110, 81 (2006).

10L-05

DEVELOPMENT OF A SIMPLE AND FAST MICROWAVE-ASSISTED EXTRACTION METHOD FOR TRACE ELEMENT DETERMINATION IN FLY ASH SAMPLES USING INDUCTIVELY COUPLED PLASMA TIME-OF-FLIGHT MASS SPECTROMETRY

TEREZA ŠÍDOVÁ, LENKA HUSÁKOVÁ, IVA URBANOVÁ

University of Pardubice, Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical Technology, Studentská 573 HB-D, 532 10 Pardubice, Czech Republic
tereza.sidova@student.upce.cz

The study proposes a novel, interference free and environmentally friendly microwave-assisted extraction-based procedure for determination of trace elements in fly ash samples by inductively coupled plasma-time-of-flight mass spectrometry (TOF-ICP-MS). The extraction conditions were optimized using a fractional factorial design. The optimum results were obtained when 10 mg of the sample were used followed by microwave-assisted extraction with 5 mL of 140 g L⁻¹ NH₄F at 200 °C for 10 min. The calibration using aqueous standards was carried out with rhodium as an internal standard. The method was successfully applied for the quantitative extraction of Li, Be, Ni, As, Se, Rb, Sb, Cs, W, Tl and U. Detection limits ranging from 0.09 to 480 µg kg⁻¹ and relative standard deviations lower than 9 % were obtained. The method accuracy was assessed by using two certified reference materials namely Fine Fly Ash CTA-FFA-1 and Constituent Elements in Coal Fly Ash Standard Reference Material 1633b. The proposed method proved to be simple and fast¹ and can be applied to fly ash samples with the elimination of the sample digestion step prior to analysis. This method avoids the use of corrosive and/or toxic analytical reagents like HF, HCl, HClO₄ being commonly used^{2,3} during sample preparation of fly ash samples and eliminates the formation of different polyatomic species interfering during the TOF-ICP-MS analysis.

Financial support from the University of Pardubice (project no. SCFChT_2015001) is gratefully acknowledged.

REFERENCES

- Husáková L., Urbanová I., Šídová T., Cahová T., Faltys T., Šrámková J.: *Int. J. Environ. Anal. Chem.* 95, 922 (2015).
- Bettinelli M., Spezia S., Baroni U., Bizzarri G.: *At. Spectrosc.* 19, 73 (1998).
- Marrero J., Polla G., Rebagliati R. J., Gómez D., Smichowski P.: *Spectrochim. Acta, Part B* 62, 101 (2007).

10L-06**POROVNÁNÍ ROZLIŠOVACÍ SCHOPNOSTI
REGRESNÍ ANALÝZY SPEKTER A SPOLEHLIVOSTI
VÝPOČTU DISOCIAČNÍCH KONSTANT PROGRAMY
SQUAD(84) A SPECFIT/32****MILAN MELOUN^a, ZUZANA FERENČÍKOVÁ^a,
MILAN JAVŮREK^b**^a*Katedra analytické chemie, Katedra řízení procesů,
Univerzita Pardubice, CZ 532 10 Pardubice, Česká republika
milan.meloun@upce.cz*

Porovnáním rozlišovací schopnosti regresní analýzy spekter a spolehlivosti výpočtu konstant stability, disociačních konstant a molární absorpčních koeficientů pěti různě protonovaných iontů salicylátu fysostigminu programy SQUAD(84) a SPECFIT/32 na syntetických a experimentálních datech bylo zjištěno, že SQUAD(84) prokazuje lepší věrohodnost odhadů parametrů, díky originální, náročné statistické analýze reziduí. Pozornost byla věnována především souboru UV/VIS-spekter se silně se překrývajícími spektrálními pásy. Spolehlivost odhadů disociačních konstant organických kyselin je prokazována testem těsnosti proložení vypočtené absorbanční responzní plochy krabice experimentálních spekter. Z hladiny experimentálního přístrojového šumu měřené absorbance $s_{inst}(A)$ u syntetických tak u experimentálních dat lze osoudit na správnost a přesnost odhadů disociačních konstant. Pro závislost přesnosti odhadů $s(pK)$ na velikosti šumu měřené absorbance $s_{inst}(A)$ byl odvozen lineární regresní model $s(pK) = \beta_0 + \beta_1 s_{inst}(A)$. Ukázalo se, že parametr β_0 je ve všech případech statisticky nevýznamný čili nulový a přímka prochází počátkem. Je-li přístrojový šum $s_{inst}(A)$ malý, a to menší než 0,5 mAU, jsou odhady parametrů $pK_{a,vyp}$ stejné jako předvolené hodnoty parametrů $pK_{a,dany}$, pro které byla syntetická data simulována a vychýlení čili systematická chyba odhadů parametrů pK značená $\Delta pK = pK_{a,vyp} - pK_{a,dany}$ je proto zanedbatelná. U všech čtyřech disociačních konstant salicylátu fysostigminu je vychýlení odhadu ΔpK docela malé, i když pro pK_{a4} je oproti ostatním třem vyšší, tj. $\Delta pK = 0,05$ pro $s_{inst}(A)$ rovné 1,0 mAU. V intervalu hodnot $s_{inst}(A)$ od 0,1 do 1,0 mAU jsou odhady všech čtyř disociačních konstant pK_i dostatečně přesné. Ukázalo se, že z různých regresních diagnostik lze považovat v regresní analýze spekter statistická kritéria těsnosti proložení za nejučinnější k posouzení věrohodnosti vyčíslovaných odhadů parametrů. Velikost instrumentální chyby $s_{inst}(A)$ je jenom nepatrně ovlivněna tvarem Cattelova indexového grafu vlastních čísel $s_k(A) = f(k)$, který především určuje z hodnotnosti druhého momentu absorbační matice počet světlo-absorbujících částic v rovnovážné směsi rozličně protonovaných částic salicylátu fysostigminu.

LITERATURA

- Meloun M., Militký J.: *Interaktivní statistická analýza dat*, Karolinum, Praha 2012.

10L-07**ANALÝZA VLIVU RIZIKOVÝCH FAKTORŮ NA
PROFILU MASTNÝCH KYSELIN MEMBRÁN
ERYTROCYTŮ PŘI ZÁNĚTLIVÉ REAKCI
PO IMPLANTACI KORONÁRNÍHO STENTU
U NEMOCNÝCH S ISCHEMICKOU CHOROUBOU
SRDEČNÍ****JIŘÍ HANDL^a, VLADIMÍRA MUŽÁKOVÁ^a, MILAN
MELOUN^{b,*}**^a*Katedra biologických a biochemických věd, ^bKatedra
analytické chemie, Univerzita Pardubice, CZ 532 10
Pardubice, Česká republika
st34711@student.upce.cz*

Statistickým vyhodnocením dat analýzy krve byly nalezeny závislosti mezi 37 stanovenými mastnými kyselinami membrán erytrocytů a fosfolipidů plazmy pro 47 pacientů s ischemickou chorobou srdeční (ICHs) po implantaci koronárního stentu a následně zánětlivé reakci. Kanonickou korelační analýzou byl nalezen vztah vybraných mastných kyselin v membránách erytrocytů k pěti zvoleným markerům, a to k navýšení C-reaktivního proteinu a malondialdehydu po 24 hodinách, koncentrace triacylglycerolů, LDL cholesterolu a HDL cholesterolu v plazmě. Významný vliv či závislost na pěctici markerů vykazovaly kyseliny 12-methyltridekanová, pentadekanová, sapienová, α -linolenová, behenová a dokosatetraenová. Silná negativní korelace se projevila i u skupiny N-3 polynenasycených mastných kyselin, kdy největší inverzní závislost vykazovaly kyseliny α -linolenová a eikosapentaenová. Největší pozitivní korelaci s pěctici markerů vykazovaly mastné kyseliny arachidonová, lignocerová, stearidonová, 14-methylhexadekanová, palmitová a trans vakcenová. Ze zvolených markerů se ukázal v nejsilnějším vztahu ke všem vyšetřovaným mastným kyselinám marker zánětlivé reakce C-reaktivní protein. Vícenásobná lineární regrese prokázala v nejsilnější pozitivní korelaci k plazmatickému růstu C-reaktivního proteinu kyselinu cerotovou, naopak negativně koreluje kyselina eikosatetraenová. Se zvyšováním koncentrace malondialdehydu je v pozitivní korelaci především kyselina cerotová, naopak negativně korelují kyseliny tetrakosatetraenová a nonadekanová. Na zvyšování hladiny sérového amyloidu A v době 24 hodin po implantaci stentu se podílela kyselina trans vakcenová. Opačně, čili snižujícím způsobem, působila na sérový amyloid A kyselina 12-methyltetradekanová. S růstem hladin interleukinu-6 během prvních 24 hodin po implantaci intenzivně pozitivně koreluje kyselina pentadekanová, naopak negativně koreluje pak kyselina α -linolenová. Oběma vícerozměrným statistickým metodám předcházela exploratorní analýza, analýza hlavních komponent, faktorová analýza a analýza shluků, které odhalily vzájemně skryté vnitřní vztahy a vazby 37 mastných kyselin.

LITERATURA

- Meloun M., Militký J.: *Interaktivní statistická analýza dat*, Karolinum, Praha 2012.

10L-08**DISOCIAČNÍ KONSTANTY LÉČIVA
ELTROMBOPAGU NELINEÁRNÍ REGRESÍ
UV/VIS-SPEKTER A POROVNÁNÍ S ODHADY
Z POTENCIOMETRICKÉ pH-TITRACE****LUCIE PILAŘOVÁ^a, MILAN MELOUN^{a*}, TOMÁŠ
PEKÁREK^b**^a Katedra analytické chemie, Univerzita Pardubice, CZ 532 10
Pardubice, ^b Zentiva K.S., U kabelovny 130, CZ 102 37 Praha,
Česká republika
lucie.pilarova91@centrum.cz

Dvěma instrumentálními metodami, potenciometrickou a spektrofotometrickou pH-titrací byly porovnány vyčíslené odhady disociačních konstant léčiva Eltrombopagu. Toto léčivo se užívá při nízkém počtu krevních destiček u dospělých pacientů s chronickou imunitní idiopatickou trombocytopenií ITP. Eltrombopag vykazuje tři protonizovatelná místa v molekule, a to v rozmezí pH od 0 do 12, kde dvě disociační konstanty jsou daleko od sebe ($\Delta pK > 3$) a dvě jsou blízké ($\Delta pK < 3$). Predikční program MARVIN teoreticky předpověděl hodnoty pK a místa protonace/disociace v molekule. V neutrálním prostředí se Eltrombopag vyskytuje v rozpustné formě H_3L , která může být protonována na rozpustný kation H_4L^+ . Molekula H_3L může postupně disociovat až na obtížně rozpustný anion L^{3-} . Soubor spekter při hodnotě pH od 2 do 11 byl měřen v rozsahu 280 až 620 nm, kde chromofory reagují na změnu pH. Vzhledem k omezené rozpustnosti eltrombopagu nad pH 9,5 byla protonace studována jenom do pH 10. Tři disociační konstanty mohou být spolehlivě určeny programem SPECFIT/32 a SQUAD(84) a oba programy vedou ke shodným odhadům, $pK_{a1} = 3,17$ (00), $pK_{a2} = 6,73$ (01), a $pK_{a3} = 7,93$ (00), při 25 °C a $pK_{a1} = 3,34$ (01), $pK_{a2} = 6,77$ (01), a $pK_{a3} = 7,59$ (01), při teplotě 37 °C. Potenciometrickou pH-titrací při teplotě 25 °C byly určeny a porovnány disociační konstanty programy ESAB a HYPERQUAD, resp., $pK_{a1} = 6,86$ (01), a 6,87 (03), $pK_{a2} = 8,35$ (02), a 8,38 (03), $pK_{a3} = 9,38$ (01), a 9,44 (04), při 25 °C a za použití programu ESAB pak odhady $pK_{a1} = 6,82$ (02), $pK_{a2} = 7,99$ (02) a $pK_{a3} = 9,33$ (04) při teplotě 37 °C.

LITERATURA

- Meloun M., Militký J.: *Interaktivní statistická analýza dat*, Karolinum, Praha 2012.
- Meloun M., Militký J.: *Kompendium statistického zpracování dat*, Karolinum, Praha 2012.
- Meloun M., Militký J., Hill M.: *Statistická analýza vícerozměrných dat v příkladech*, Academia, Praha 2012.

10L-09**APLIKACE NELINEÁRNÍ REGRESE PŘI VOLBĚ
MODELŮ JAKOSTI POVRCHŮ****VLADIMÍR PATA**Ústav výrobního inženýrství, Vavrečkova 275, 760 01 Zlín,
Česká republika
pata@ft.utb.cz

Při hodnocení jakosti povrchů s využitím normy ISO 4278 a ISO 4288 jsou definovány mimo jiné dva základní parametry R_a a R_z , které jsou klíčové pro určení základních amplitudových charakteristik povrchů.

Tyto dva parametry se vyjadřují v linearizované formě již řadu desetiletí, i když byly nalezeny regresní nelineární modely, které jsou mnohem vhodnější a především přesnější. Nejznámějšími z nich jsou model dle autora Whitehouse a model vytvořený firmou Taylor Hobson, nazývaný „Model simplifikovaný“

V 80. letech minulého století vznikl též model, dle českého autora „tzv. Bumbalkuv model“

Přednesená přednáška bude pojednávat o vhodnosti jednotlivých modelů a možnosti jejich aplikací při různých typech snímání parametrů jakosti povrchů.

10L-10**NALEZENÍ VHODNÉHO MODELU PRO POPIS
REAKCE TAQMAN REAL-TIME PCR STANOVENÍ
FYTOPATOGENNÍ HOUBY PYRENOPHORA TERES
V PLETIVECH HOSTITELE HORDEUM VULGARE****LEONA LEIŠOVÁ-SVOBODOVÁ^a, MILAN MELOUN^b**^a Molekulární genetik, Výzkumný ústav rostlinné výroby,
v.v.i., Drnovská 507, 161 06 Praha 6 - Ruzyně, ^b Katedra
analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická,
Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice,
Česká republika
leisova@vurv.cz

TaqMan real-time PCR je polymerázová řetězová reakce prováděná v uspořádání v tzv. reálném čase. Součástí reakce jsou primery, které uvozují úsek DNA, který je pomocí Taq polymerázy množěn do detekovatelného množství. Detekce probíhá pomocí CCD kamery, která odečítá míru fluorescence při vlnové délce, kterou vyzářuje použitý zářič navázaný na 5' konci tzv. TaqMan sondy. Tato sonda se na základě komplementarity váže do cíleného úseku DNA ohraničeného výše zmíněnými primery. Na 3' konci obsahuje tzv. zhášec, kterému zářič předává energii, a proto není detekována fluorescence při sledované vlnové délce zářiče. Ve chvíli, kdy dojde k navázání primerů a polymeráza syntetizuje komplementární řetězec, dojde díky 5'-3' exonukleázové aktivitě Taq polymerázy k degradaci sondy. Zářič a zhášec se od sebe oddálí a energie zářiče již není zhášena, ale detekována jako růst fluorescence při sledované vlnové délce zářiče. Cyklus PCR, ve kterém hodnota fluorescence překročí hodnotu fluorescence pozadí se nazývá Ct hodnota a je programem odečítána pro vypočtení kalibrační křivky a další zpracování dat.

Bylo a je snahou mnoha autorů matematicky popsat průběh reakce a bylo navrženo několik modelů: logistický model se 4 parametry¹, logistický model s 5 parametry², sigmoidální model³, Gompertzův model⁴ a Chapmanův model⁵.

Cílem této práce bylo porovnat uvedené modely a zvolit ten nejlepší pro výpočet Ct hodnot pro navržené kalibrační křivky stanovení fytopatogenní houby *Pyrenophora teres* v pletivech hostitele. Porovnání bylo provedeno metodou nelineární regrese pomocí programu ADSTAT a QC Expert⁶.

Jako nevhodnější byl na základě kritérií AIC, MEP, s(e) a RSC zvolen logistický model s 5 parametry, kde parametr p1 představuje hodnotu fluorescence pozadí, parametr p2 je rozdíl mezi maximální hodnotou fluorescence dosaženou v průběhu reakce a hodnotou fluorescence na počátku reakce, parametr p3 představuje cyklus, v průběhu kterého dojde k dosažení poloviční hodnoty fluorescence a parametry p4 a p5 nemají přímý fyzikální smysl, popisují tvar reakční křivky, s tím, že u parametru p4 neodpovídá znaménko reálnému tvaru křivky. Výsledný model by měl být upraven na:

$$f(x) = p1 + p2 / (((1 + (x/p3)^{-p4})^{p5}).$$

Tato práce vznikla za podpory grantu MZe ČR – RO0415.

LITERATURA

1. Glover C. J., Hartman K. D., Felsted R. L.: *J. Biol. Chem.* 272, 28680 (1997).
2. Gottschalk P. G., Dunn J. R.: *Analytical Biochemistry* 343, 54 (2005).
3. Schlereth W., Bassukas I. D., Deubel W., Lorentz R., Hempel K.: *Int. J. Mol. Med.*, 1, 463 (1998).
4. Tichopad A., Dzidic A., Pfafl M. W.: *Biotechnology Letters* 24, 2053 (2002).
5. Tichopad A., Dilger M., Schwarz G., Pfafl M. W.: *Nucleic Acid Research* 31(20), e122 (2003).
6. Meloun M., Militký J.: *Interaktivní statistická analýza dat*, Karolinum, Praha 2012.

10L-11

VYUŽITIE LA-ICP-MS PRE FORENZNÚ ANALÝZU SKLA

VERONIKA DILLINGEROVÁ^a, TOMÁŠ VACULOVIC^{a,b}, VIKTOR KANICKÝ^{a,b}, NATÁLIE VENCLOVÁ, KATEŘINA TOMKOVÁ^c, EVA ČERNÁ^d

^a Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova Univerzita, Brno, ^b CEITEC – Středoevropský technologický institut, Masarykova Univerzita, Brno, ^c Archeologický ústav AVČR, Praha, ^d Ústav archeologické památkové péče severozápadních Čech, Česká republika
veronika@dilli.sk

Prvková analýza sa využíva ako nástroj forenznej chémie stále častejšie. Táto práca sa zaoberá metódou LA-ICP-MS v obore forenznej chémie, vyhodnocovaním výstupných dát, štatistickým spracovaním výsledkov a následnou klasifikáciou skiel či už archeologických alebo vzoriek autoskiel. Na základe týchto analýz bolo spravené vyhodnotenie nameraných dát použitím moderných štatistických metód,

ktorého výsledkom je rozdelenie vzoriek do rôznych skupín na základe odlišného prvkového zloženia.

Pre kvantifikáciu boli porovnané dve metódy korekcie: korekcia na sumu oxidov a korekcia na porovnávací prvok – kremík. Na základe štatistických testov vyšli výsledky korekcií zhodné, a preto bola pre ďalšie analýzy vybraná korekcia na sumu oxidov, ktorá nevyžaduje komplementárne meranie na ďalšom prístroji. Na vyhodnocovanie výstupu bol vytvorený skript v jazyku R, ktorý automaticky spracováva namerané dáta.

Na tri sety skiel boli aplikované metódy analýza hlavných komponentov a zhluková analýza, ktoré ponúkajú grafické zobrazenie klasifikácie vzoriek. Pre tieto analýzy bol spravený výber prvkov na základe sledovania korelácie (⁷Li, ¹¹B, ²⁴Mg, ²⁷Al, ³⁹K, ⁴⁷Ti, ⁵²Cr, ⁵⁵Mn, ⁵⁶Fe, ⁵⁹Co, ⁶⁶Zn, ⁸⁵Rb, ⁸⁸Sr, ⁹⁰Zr, ¹¹⁸Sn, ¹³⁷Ba). Vzorky autoskiel boli rozdelené do 8 skupín na základe rozdielneho výrobcu. Z výsledkov analýz boli zistené rozdiely medzi jednotlivými výrobcami autoskiel, avšak u niektorých výrobcov boli výrazné rozdiely nájdené aj v rámci skupiny, spôsobené rozdielnym zložením čelných a bočných skiel ako aj vrstvami čelného skla. Medzi vzorkami archeologických skiel sa nachádzali úlomky nádob, okenných tabúl a koráliky. U starovekých skiel sa podarilo odlišiť skupinu označenú ako moderné sklá na základe obsahu Na₂O a taktiež skupinu rímskych skiel, u ktorých bol zistený zvýšený obsah Fe₂O₃. U stredovekých skiel bola pozorovaná značná nehomogenita vzoriek spôsobená zvetraním skla.

Tato práca vznikla za podpory projektu CEITEC (CZ.1.05/1.1.00/02.0068), projektu Špecifického výskumu MUNI/A/1461/2014 a projektu GA14-13600S.

10P-01**NMR AND DFT ANALYSIS OF 3D STRUCTURE AND SPIN-SPIN COUPLING CONSTANTS IN HEPARIN PENTASACCHARIDE****MILOŠ HRICOVÍNI**

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

High-resolution NMR and density functional theory (DFT) calculations have been applied in analysis of heparin pentasaccharide conformation in aqueous solution. The fully optimized molecular geometry of two pentasaccharide conformations (differing from each other in the form, i.e. 1C_4 and 2S_0 , of the sulfated iduronic acid residue) were obtained using the B3LYP/6-311+G(d,p) level of theory in the presence of solvent, the latter included as explicit water molecules¹. The presented approach enabled the insight into variations of the bond lengths, bond angles and torsion angles, formations of intra- and intermolecular hydrogen bonds and ionic interactions in two pentasaccharide conformations. Rather complex hydrogen bond network is formed including inter-residue and intra-residue bonds between the NH group in the GlcN,3,6S with oxygens linked to C-2 at the IdoA2S residue, the glycosidic O-1 and the neighboring OSO_3^- group linked to C-3 in the same residue. On the other hand, as the first hydration shell is strongly influenced by strong ion-ion and ion-dipole interactions among sodium ions, sulfates, carboxylates, -OH groups, ionic interactions seems to play an important role in the stabilization of 3D structure. The DFT-computed three-bond proton-proton coupling constants also showed that the agreement with experiment was obtained with a weighted average of 15:85 (1C_4 : 2S_0) of the sulfated iduronic acid forms indicating that ratio is even more shifted towards the 2S_0 form than that previously observed. The DFT-computed pentasaccharide conformation differs compared to the previously published data where main changes were at the glycosidic linkages, namely, γ_1 torsion angles and the ϕ_3 angle. The comparison of the glycosidic linkage torsion angles values in solution with the antithrombin-pentasaccharide complex also indicate that the pentasaccharide conformation varies upon binding to antithrombin III. The data supports the assumption that the protein selects the more populated 2S_0 conformer of heparin pentasaccharide and, consequently, the binding process of heparin pentasaccharide with antithrombin III is energetically more favorable than formerly expected.

This work was supported by the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA 2/0100/14).

REFERENCE

1. Hricovíni M.: J. Phys. Chem. B 119, 12397 (2015).

**11L-01
INTERDISCIPLINARY FIVE-YEAR MASTERS
PROGRAM GRADUATE PROFILE TECHNOLOGY,
MANAGEMENT AND ECONOMICS IN CHEMISTRY**

DUŠAN BARAN, ZDENĚK BĚLOHLAV

*VSCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha, Czech Republic
dusan.baran@vscht.cz, zdenek.belohlav@vscht.cz*

Competitiveness growth is currently associated with the development and introduction of new products and services in accordance with the requirements of the market and the society, as well as with the effective use of existing and new resources and technologies. Scientific, technological and trade cooperation with enterprises and institutions in diverse business fields is typical for successful organizations and enterprises in the chemical industry. The preparation of graduates to be ready to operate in such conditions requires an effective combination of technical and technological knowledge and skills with competencies in management and economics.

Technology, Management and Economics in Chemistry is built to adapt to the current status and expected developments in science, technology, economic environment and society and is based on the necessity to respect specific requirements for management in different areas of engineering education, which also include chemical engineering. The profile also reflects the present and future need to meet the requirements for the preparation of managers with engineering education for the profession on which the college is focused and in which its graduates achieve excellent results in the practice of engineering, management and efficiency of production, purchasing, sales and research in the chemical industry.

Knowledge and skills of graduates is divided into seven areas:

1. theoretical knowledge gained by studying inorganic, organic, physical and analytical chemistry, biochemistry and mathematics including statistics and physics;
2. knowledge of macroeconomics and microeconomics, business process management and business economics, marketing, logistics, accounting, finance, selected legal issues and human resources management;
3. insight into raw material and material resources for chemical and food industry, issues connected with their use, qualitative and quantitative knowledge of identification and consumption of chemical, biochemical and food products, including specialtychemicals;
4. knowledge of the available chemical and food processing technologies, biochemical processes and principles, trends of further development and their design using the knowledge of chemical engineering;
5. knowledge and skills in project management in research and development, industrial practice, structuring and management of supply chains and systemic assessment of their effectiveness;
6. skills in mathematical modeling, including simulation of complex systems and their software support;

7. ability to work in teams or lead teams of experts from various fields of business supported by the acquisition of soft skills in communication and negotiation, creativity, organization and planning, problem solving and leadership.

Occupation Opportunities for the Program Graduates

The structure of teaching in the program, especially the combination of technical, technological, managerial and economic knowledge and skills, aims to enable graduates to solve problems related to the management of enterprises in the chemical, pharmaceutical and food industries and connected fields of business. After the necessary practice the graduates are able to hold managerial positions in production, research and distribution companies, financial institutions and consulting firms. This corresponds with the wide occupation opportunities: (Baran 2015)

- in chemical and food industry in terms of the job position as product manager, process engineer, quality manager, environmental protection;
- as project managers in small and medium-sized chemical enterprises;
- as managers, expert managers in marketing, logistics, quality, environmental protection, investment development, purchasing, customer service, sales, SCM;
- team members or managers of research institutions focusing on continuous monitoring of the effectiveness of new technologies, creating conditions for cooperation with practice, and the transfer of scientific results into industrial production;
- as specialists for providing business loans and credit risk management in banks.

REFERENCES

1. Baran D.: Controlling. Publ. STU, Bratislava 2015.
2. The National Register of Occupations.
3. Examples of professions are taken from the National Register of Occupations and are complemented by professions actually occupied by ICT graduates.
4. The National Science Foundation, from Chang C. M.: Engineering Management Challenge in the New Millennium, Prentice Hall, New York 2005.

**11L-02
CONTROLLING AND MANAGEMENT SYSTEM**

DUŠAN BARAN

*VSCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha, Czech Republic
dusan.baran@vscht.cz*

In defining the term management it is possible to speak about the complex of mutually integrated managerial activities proceeding by various methods and forms as well as through adequate management instruments. It means that the above-indicated complex of activities constitutes the essence of the management system. Although it is true that this system can have special features given by the particular conditions in

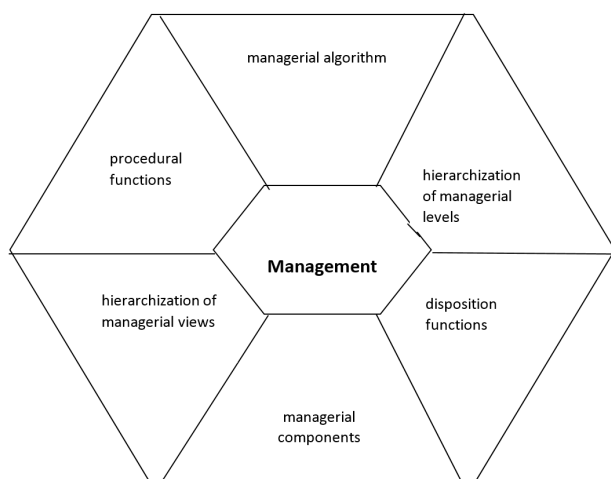


Fig. 1. **Basic activators of system of management;** Source: Baran, D.: Controlling. Publ. STU p. 170, Bratislava 2015

which it operates, there must exist, at the same time, also a part of the complex which is generally valid for any management system. The company under pressure of the competition is obliged to permanently innovate its internal processes and the management system and thus react to current situations by fulfilling the new managerial functions. The fulfilment of these functions is supported by the up-to-date subsystem of managing the company – controlling.

The term management can be defined as a complex of mutually integrated managerial procedures implemented by various methods and forms as well as by adequate management means and instruments. It follows that the above-indicated complex which can have special features given by the particular conditions in which it operates represents the substance of the management system, although there must exist also a part of the complex which is generally valid for any management system.

The activators of the management system are inevitable, complex-forming managerial components acting through their mutual activity between the managerial subjects and controlled objects in such a way to fulfil the outlined goals the most effectively. The basic activators of the management system are shown in Fig. 1.

From the scheme it follows that there are at least six crucial activators that must be counted on in the management system. They are:

- disposition functions of the management (outlined target behaviour of the system with the subsequent possibility of corrections in the development),
- procedural functions of the management (ensuring the transformation process within the entrepreneurial subject),
- managerial algorithm (applying the procedure to achieve, for example, the planning document, etc.),
- managerial components (ensuring managerial activities, determination of suitable methods, instruments, means and forms of management),
- hierarchization of managerial views (determination of the

basic classification of individual managerial recommendations and attitudes),

- hierarchization of managerial levels (determination of managerial rights and responsibilities within individual management levels in the company).

REFERENCES

1. Baran D.: Controlling. Publ. STU s. 170, Bratislava 2015
2. Baran D.: The Application of controlling in the praxis of company, s. 173, ES STU Bratislava 2008.
3. Baran, D. a kol.: Application of Business process Reengineering in the Company practice, ES STU Bratislava 2005.
4. Eschenbach, R. a kol.: Controlling, Praha: ASPI, 2004.
5. Vollmuth, H. J.: Controlling nový nástroj řízení, Proffes Consulting s.r.o., 1999.
6. Wöhe G.: Übungsbuch zur Einführung in die Allgemeine Betriebswirtschaftslehre, Aufl. Verlag Franz Vahlen, München 2013.

11L-03

EMPLOYEE TURNOVER IN CERAMIC PLANT

MAREK BOTEK

*UCT Prague, Technická 5, 166 28 Praha 6, Czech Republic
marek.botek@vscht.cz*

Employee turnover is a natural, permanent phenomenon, and it can be beneficial, if number of employees with poor performance and work behavior is decreasing. Vnoučková¹ states that if for the company it is not difficult and expensive to obtain and train new employees, no need to deal with turnover rates. However, employee departure, amongst cost of acquiring and training new employee, bears and other risks and disadvantages. Organization loses manpower and investment that was put in it, may lose the know-how and receives a trained competitor, high staff turnover rate decreases the company's image and causes overworking employees. Therefore, it is appropriate to monitor the fluctuation, and if it is possible to control it. It is therefore important to distinguish voluntary turnover (caused by the employee) and involuntary (of the employer) one².

To minimize undesirable voluntary turnover it is suitable to monitor factors, what influence employee departures. It is possible to distinguish them to external, so called pull factors and internal (push factors)³. External factor is for example better job offer, an internal one can be dissatisfaction with current position or company culture. These internal factors are very important; they can form 80–90 per cent of all departures³.

Employee departure is usually not an immediate decision. It is possible to reverse it, if we react for the first symptoms of alienation⁴.

In the presented article it is shown the specific situation in an important ceramic plant in the Czech Republic. They are discussed results of research that was focused on affecting factors of turnover decision. Research was focused on workers posts, because there is the highest company turnover. Sources for the research were internal documents, interview with

personal manager of the company and questionnaires. It was distributed 710 questionnaires with 20.1% returnability. Based on these 143 fulfilled questionnaires it was found, that main reason for turnover tendency is incongruity between employees' conception of job and reality. Recommendation is to inform potential employees more realistic in recruitment and particularly in selection process. There seems to be also other potential sources of dissatisfaction they should be solved.

REFERENCES

1. Vnoučková L.: *Fluktuace a retence zaměstnanců*. Adart, Praha 2013.
2. Mathis R. L., Jackson J.: *Human Resource Management*. Cengage Learning, New York 2010.
3. Branham L.: *7 skrytých důvodů, proč zaměstnanci odcházejí z firem*. Grada, Praha 2009.
4. Albattat A. R. S., Som A. P. M.: *Int. J. of Business and Manag.* 8, 62 (2013).

11L-04

NÁKUPNÍ STRATEGIE V PODMÍNKÁCH DODAVATELSKÝCH SYSTÉMŮ

STANISLAVA GROSOVÁ, IVAN GROS

*Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice, Česká republika
stanislava.grosova@vscht.cz*

V prostředí dodavatelských systémů a postupně globalizace nabývá nákup stále větší význam. Podíl nákladů na nákup ve vlastních nákladech výkonů v typickém výrobním podniku se pohybuje od 50 % až po 70 %, v podnicích chemického průmyslu činí až 80 %. Nejenom velikost podílu výdajů na nákup, ale i cenová volatilita některých vstupních materiálů zvyšují význam správných nákupních rozhodnutí v podniku. Strategický nákup se přímo podílí výběrem dodavatelů na koncipování struktury dodavatelského řetězce. Vhodná nákupní strategie, implementace tažných principů řízení materiálových toků v oblasti zásobování vede k razantnímu snížení stavu zásob.

Mimořádné postavení nákupu vyžaduje hledání cest, jak vlastní proces nákupu řídit. Růst podílu firem využívajících v této oblasti systémy řízení vztahů se dodavateli (SRM Supplier Relationship Management) je významný. Nové koncepty řízení dodavatelských systémů, např. systémy společného plánování, předpovědi poptávky a vlastní realizace dodávek (CPFR Collaborative Planning, Forecasting and Replenishment) jsou postaveny mimo jiné i na těsné koordinaci nákupních aktivit mezi výrobcí surovin, polotovarů, dílů a výrobců finálních výrobků.

Návrh vhodné struktury nákupního procesu je dlouhodobě předmětem výzkumu. Autoři zpracovali a v praxi ověřili osmi etapový proces, který je třeba při aplikaci modifikovat pro jednotlivé obory. Chemie je jedním z oborů, kde je třeba tato specifika identifikovat.

Pro kvalitní funkci dodavatelského systému má mimořádný význam výběr partnerů. Implementace metod vícekritériálního rozhodování v nákupu je další oblastí

výzkumu autorů v oblasti nákupu.

LITERATURA

1. Carp, R., Moder M., Plasschaer P., Ziegler M.: *Pursuing purchasing excellence in chemicals*. <http://www.mckinsey.com/industries/chemicals/our-insights/pursuing-purchasing-excellence-in-chemicals> 2016
2. Gros I., Grosová S.: *Tajemství moderního nákupu*.
3. Gros I.: *Matematické modely pro manažerské rozhodování*. VŠCHT, Praha 2009.
4. Gros I. a kol.: *Velká kniha logistiky*. VŠCHT, Praha 2016.

11L-05

PERSPEKTÍVY CHEMICKÉHO PRIEMYSLU V SR

JANA KAJANOVÁ

*Fakulta managementu Univerzity Komenského v Bratislave, Odbojárov 10, 820 05 Bratislava, Slovensko
jana.kajanova@fm.uniba.sk*

Zámerom príspevku je analyzovať vývoj a tendencie chemického priemyslu, identifikovať možné príležitosti a hrozby determinujúce konkurencieschopnosť tohto odvetvia. Príspevok sa orientuje na špecifické aspekty riadenia chemických podnikov, na analýzu ich rentability a stability, poukazuje na aktuálny vývoj chemického priemyslu na Slovensku prostredníctvom vzorky analyzovaných chemických podnikov. Poukazuje na dôležitosť zodpovedného prístupu spoločnosti i jednotlivca v kľúčových otázkach chemického priemyslu.

Hlavnými piliermi chemických výrobných budov budú i naďalej výrobcovia pohonných hmôt, plastových dielov pre automobilový či elektrotechnický priemysel, výrobcovia pneumatík a ďalších oblastí. Úspešnosť chemických podnikov však bude závislá od schopnosti konkurenčného boja, využitia príležitostí z rozšírenia trhov, porovnávania kvality, na konfrontácii našich podnikov a výrobcov zahraničných krajín disponujúcich ťažko napodobiteľnými konkurenčnými výhodami. V globálnom konkurenčnom prostredí je potrebné, aby sa chemický priemysel priblížil úrovni krajín Európskej únie a ekonomiky vyspelých štátov v sortimentnej štruktúre, v úrovni technologických procesov zabezpečujúcich nižšiu energetickú a surovinovú náročnosť produkcie a najmä v produktivite práce.

V rámci výsledkov predmetného výskumu dochádza k sumarizácii údajov a faktov umožňujúcich identifikovať problematické oblasti riadenia chemických podnikov v podmienkach slovenského konkurenčného prostredia. Vzhľadom na podobný vývoj s Českou republikou je možné závery a odporúčania zovšeobecniť aj na úrovni Európskej únie, minimálne v rámci krajín V4, kde dlhodobo sledujeme podobné tendencie vývoja.

Zhodnotenie výkonnosti chemických podnikov prostredníctvom finančných výkazov umožňuje dôslednejšie zmapovať vplyvy externého prostredia na samotné riadenie chemických podnikov. Včasné reakcie na zmeny v podnikateľskom a konkurenčnom prostredí a dôsledné

analýzy vlastnej činnosti snižujú riziká podnikov a umožňujú uskutočňovať kvalitné a zodpovedné rozhodnutia.

Metallurgy and Materials, str. 1781–1788. Tanger, Ostrava 2012.

11L-06 VÝVOJ HODNOTOVÉ PRODUKTIVITY PODNIKŮ VE VYBRANÝCH ODVĚTVÍCH PŘI CESTĚ Z KRIZE 2010–2014

JIRÍ KLEČKA

*Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28
Praha 6 – Dejvice, Česká republika
jiri.klecka@vscht.cz*

Hodnotová produktivita je významným indikátorem úrovně a změn v technickoekonomické účinnosti transformace vstupů na výstupy ve výrobě, a tedy i technickoekonomické racionality podniku. Její současné pojetí vyjadřuje hodnotu vstupů jako náklady na spotřebu (a opotřebení) a náklady na vázání. Náklady vázání jsou zjištěny jako náklady kapitálu, kterým jsou financována aktiva podniku. O významu hodnotové produktivity, možných ukazatelích a o úskalích jejího měření pojednává např. Klečka, 2014. Produktivitu lze analyzovat na úrovni mikroekonomické i makroekonomické, ale i na úrovni mezzoeconomické (tj. za jednotlivá odvětví).

Vývoj hodnotové celkové i parciálních produktivit bude analyzován pro vybrané podniky následujících odvětví – chemický průmysl, potravinářský průmysl a metalurgie. Produktivita bude měřena v několika stech českých podnicích, jejichž data budou získána z korporátní databáze Albertina. Analyzovaná data pokrývají období po překonání poslední globální ekonomické krize v letech 2008–2009, tedy časový interval 2010–2014. Důsledky ekonomicko-finanční krize a jejího překonávání jsou silným impulsem k vědeckému bádání (např. Kula a kol., 2012).

Budou zjištěny odlišnosti jednotlivých odvětví, pokud jde o úroveň celkové produktivity i její vývoj. Hodnotám větším než 1 odpovídá kladná úroveň modifikovaného ekonomického zisku, resp. modifikované ekonomické přidané hodnoty (EVA). Ze zjištěných hodnot časových indexů celkových produktivit budou patrné rozdíly ve vývoji produktivit a odlišnosti tohoto vývoje mezi odvětvími a zároveň srovnání s vývojem HDP České republiky. Prohlubující analýza vybraných parciálních produktivit ukáže příčiny případných rozdílů mezi odvětvími. Platí, že rychlejší růst, resp. alespoň pomalejší pokles, určité parciální produktivity v závislosti na změnách objemu výroby a prodeje je důsledkem větší (lepší) adaptability podniku při využívání příslušného výrobního faktoru.

LITERATURA

1. Klečka J.: Indicators measuring the level and development of enterprise productivity. *The 8th International Days of Statistics and Economics Conference Proceedings* (Löster, T., Pavelka, T., eds.), str. 668–677. Melandrium, Slaný 2014.
2. Kula D., Bobek M., Čámská D., Hájek J.: Impact of the financial crisis on profitability and liquidity of companies in metallurgical industry in the Czech Republic. *Proceedings of 21st International Conference on*

11L-07 ZNAČKY KVALITY ČESKÝCH POTRAVIN

OLGA KUTNOHORSKÁ

*VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika
olga.kutnohorska@vscht.cz*

Značka představuje důležitý nástroj marketingové komunikace. Podle americké marketingové asociace (American Marketing Association) je značka definována jako „jméno, termín, označení, symbol či design nebo kombinace těchto pojmů sloužících k identifikaci výrobku a služeb jednoho či více prodejců a k jejich odlišení v konkurenci trhu.“¹ Budování a strategické řízení značky je náročným, nákladným a dlouhodobým procesem, na jehož konci v případě úspěchu stojí silné a stabilní značky, které svým vlastníkům poskytují množství výhod. Aby se značka stala úspěšnou, musí splňovat následující předpoklady² – produkt je originální, má špičkovou kvalitu, je doplněn dodatečnými službami, značka se dostatečně odlišuje od ostatních, má dlouhodobou perspektivu a je součástí integrované marketingové komunikace.

Význam značky pro spotřebitele spočívá především ve snazší identifikaci produktu, pomáhá lépe se orientovat v nabídce, zapamatovat si produkt a posoudit jeho kvalitu. Značka umožňuje snížit rizika spojená s nákupem neznámého produktu nebo uspořit čas, který by jinak musel spotřebitel věnovat hledání produktu nového. Jídlo hraje v životě spotřebitele velmi významnou roli. Steenkamp³ sestavil model spotřebního jednání pro potraviny, ve kterém rozlišuje rozhodovací proces o nákupu a tří soubory faktorů (vlastnosti potraviny, faktory osobní a faktory prostředí). Jméno značky řadí mezi přední faktory, které mohou ovlivnit vnímanou kvalitu potraviny.

Na českém trhu s potravinami se vyskytuje množství značek kvality, jako např. národní „značka domácí kvality“, Klasa, regionální potravina, „bio“ apod. Text příspěvku poukazuje na význam značky pro spotřebitele u potravinářských výrobků, uvádí přehled nejčastěji používaných značek kvality na českém trhu a představuje výzkum na téma orientace českého spotřebitele v těchto značkách. Na základě výsledků kvantitativního dotazníkového šetření bylo zjištěno, že český spotřebitel považuje označování kvality potravin prostřednictvím značek za přínosné, ale ve významu konkrétních značek se příliš neorientuje.

LITERATURA

1. Interbrand Group: *World's Greatest Brands: An International Review*. Wiley, New York 1992.
2. De Pelsmacker P., Geuens M., Van Den Bergh J.: *Marketingová komunikace*. Grada, Praha 2003.
3. Steenkamp J. B.: *Dynamics in consumer behavior with respect to agricultural and food products*. In: Wierenga et al.: *Agricultural Marketing and Consumer Behavior in a Changing World*. Springer, US 1997.

**11L-08
INTERCONNECTION BETWEEN CHEMICAL
COMPANIES AND THEIR CUSTOMERS – THE BASIS
FOR STRENGTHENING COMPETITIVENESS OF
CHEMICAL COMPANIES IN THE CURRENT
MARKET ENVIRONMENT**

**HANA LOŠŤÁKOVÁ, VLADIMÍRA VLČKOVÁ,
MARTINA JELÍNKOVÁ**

The market globalization and the increasing intensity of competition lead, in the chemical industry, to integration of value network subjects and their deeper technological, information, and business bonds, often resulting in proprietary interconnection. These efforts have been induced by the need to increase the negotiation power on the market, to improve understanding of the customers' needs and wants, and to be able to adapt to them quickly, flexibly, and effectively in terms of the offer and services. Interconnection and integration of entities into the form of a value network significantly increases the chance of chemical companies of succeeding in the competition. The paper summarizes the theoretical background relating to the significance and forms of interconnection of value network subjects within strengthening mutual relationships, particularly between suppliers and customers on B2B markets with products intended for manufacturing consumption. It presents the outcomes of a primary quantitative research conducted in 2015 – 2016 among 106 managers of customer companies in the Czech Republic in three selected chemical products – industrial explosives, dyes and pigments, and inorganic salts and acids. This research looked into the perceived benefits of different forms and aspects of inter-bonding and interconnection between suppliers and customers in this industry for strengthening mutual relationships and for increasing loyalty of the customer companies. The research showed that the following activities are greatly beneficial for strengthening mutual relationships and customer loyalty: common product research and development, common product testing at the customer's premises, and provision of the product usage/processing know-how. What was also beneficial was sharing information on the development of the industry and the market conditions between suppliers and their customers, sharing on-line information systems for monitoring the order settlement status, participation of the supplier in modernization of the customer's operations, assistance in promotion of the customer's products, and lending equipment and devices to facilitate analyses or processing of the supplied products at the customer's premises.

**11L-09
ŘÍZENÍ RIZIK V PODNIKU**

JAN RANČÁK

*VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika
jan.rancak@vscht.cz*

Efektivní systém řízení rizik v podniku musí tvořit integrální součást jeho strategického řízení. Je to proces, který vede ke snížení, nebo v ideálním případě k úplné eliminaci vnějších i vnitřních hrozeb¹.

Základním důvodem, proč stále více podniků zavádí integrovaný systém řízení rizik, je zvyšování počtu rizikových faktorů. Cílem rizikového managementu je identifikace a kvantifikace rizik, která působí na daný podnik. Zjištěná rizika je třeba roztřídit, zaznamenat a co je důležité – informovat příslušné struktury společnosti, na která tato rizika působí nebo budou působit v budoucnosti. Další podstatnou náležitostí systému je nutnost aktualizovat informace (tzv. monitoring rizik) o hrozbách a průběžně kvantifikovat pravděpodobnost realizace rizika a jeho úroveň dopadu na podnik. Nicméně hlavním cílem není pouhá identifikace rizik, ale především snížení pravděpodobnosti jejich výskytu a snížení závažnosti dopadu. Toho se dosahuje pomocí různých nástrojů². Dalšími úlohami rizikového managementu je vytvoření postupů, jak reagovat na vzniklá rizika, koordinace činností společnosti, reporting pro vnitřní i vnější zainteresované strany³.

Jedním z nástrojů risk managementu je mapa (matice) rizik, která byla aplikována v podmínkách gumárenského podniku a to pro oblast vstupních surovin. Pro určení rizika jednotlivých surovin byly vybrána kritéria: cena, kvalita, včasnost dodání, měnové a kurzové riziko, dostupnost a rizika spojená s dodavatelem. Ze sledovaných surovin vychází přírodní kaučuk jako nejrizikovější položka. Je to způsobeno především vysokou volatilitou ceny a výkyvy v kvalitě, způsobenými různými vlivy – od počasí přes zpracování až po dopravu.

LITERATURA

1. Clarke CH. J., Varma S: *Strategic Risk Management: The New Competitive Edge*, L.R.P., Vol. 32 (1999), No. 4, p. 414–424
2. Smejkal, V., Rais K: *Řízení rizik ve firmách a jiných organizacích*. Edtion ed. Praha: Grada Publishing, 2010. 360 p. ISBN 978-80-247-3051-1.
3. CONSULTANTS, R. A.: *A Risk Management Standard*. In Překlad a interpretace pro české prostředí. Praha: Risk Analysis Consultants, s. r. o., 2007.

11L-10 RESULTS OF THE CZECH CHEMICAL INDUSTRY IN 2015 IN EUROPEAN CONTEXT

IVAN SOUČEK

*VSCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha, Czech Republic
souceki@vscht.cz*

The results of the Czech chemical industry for 2015 were influenced by the accident of ethylene unit in Zaluží. Due to different development in sectors, two aggregations ended in red figures – refining of petroleum (crisis of European refinery industry, low utilization of capacity) and chemical industry (CZ Nace 20 – weak domestic demand and lower sales). On the contrary very good results were achieved in rubber and plastics processing, where the increase of sales was 5,7 p.p., thanks to a favourable situation in some processing sectors, mainly automotive industry. In pharmaceutical industry (CZ Nace 21), sales increased by 7,2 per cent, because of better demand in the Czech Republic.

The results of performance of the Czech Chemical Industry in 2015:

- Solid increase of key industrial indicators in comparison with 2014, except sales. 2014. Good results in rubber and plastics processing and pharma industry, but huge decreasing of sales in refining of petroleum (–35,5 %) and in CZ Nace 20-chemicals (–6,2 per cent). Increasing of number of employees by 4,1 %, mainly due to rubber and plastics processing (+ 3980 persons). Favourable development in tangible investment (increase year-on-year by 19 per cent to CZK 28,1 bill.).
- year-on-year decrease of export by 0,8%, while the growth dynamic in import – + 4,5 per cent. The negative balance of chemistry was increased year-on-year by CZK 28,5 billion to CZK minus 151,7 bn. Share of the export reached to 77,6 per cent of the total sales (in 2014 72,6 %). Highest share was in pharmaceutical industry (179,3 per cent), lowest in refining of petroleum (39,1 %).
- Favourable economic development in Czech industry last year caused that volume of book value added year-on-year increased in Czech chemistry by 8 per cent points. The increase was achieved in all sectors of chemical industry, highest in pharma industry (+ 9,1, per cent) and in CZ Nace 20 (+ 11,7 per cent).

Key indicators of the Czech chemical industry in 2015

Indicator	Unit	2014	2015	Index 15/14 %	
				Chemical Industry	Manufacturing Industry
Sales (current prices)	CZK bn	603,9	561,0	92,9	104,2
Number of employees	Thous persons	115,7	120,4	104,1	103,2
Exports	CZK bn	438,4	435,2	99,2	107,3
Imports	CZK bn	561,7	587,0	104,5	115,1
Booked value added	CZK bn	128,9	139,2	108,0	110,4

Position of the chemical industry in EU specialtychemicals

The world chemicals sales (excluding pharmaceuticals) were valued at EUR 3 232 bn and increased by 2,6 per cent

compared to the previous year. European chemicals industry including the EU-28 and Rest of Europe is still in strong top position with EUR 649 bn, or 20 per cent of world chemicals sales in value terms. But world competition is getting fiercer and EU losing its top ranking in terms of sales to China (EUR 1 111 bill.). Chemicals sales in Asia are almost triple that of the EU (1 859 bill. EUR). Taken together, Europe, Asia and North American Free Trade zone account for 94 per cent of world chemicals turnover. Development during the previous ten years from 2004 to 2014 indicate that the EU was the overall leader in terms of world chemicals sales, but the region has gradually lost ground to China and Asia (excluding Japan). EU contribution to the world chemicals sale declined in 2014 by 13,9 percentage points compared with 2004, mainly due to the dynamic rise of China and India. In fact the total value of sales in the EU has been growing continuously, but overall world chemicals sales are growing at even faster clip.

Germany remains the largest chemical producer in Europe (sales EUR 147,1 bn), followed by France, Italy and the Netherlands. Together, those four countries generate in 2014 59,5 % of the EU chemicals sales (EUR 327,7 bn). When including UK, Spain and Belgium the share rises to 80,2 per cent (EUR 441,9 bn). The other 21 EU countries in 2014 generated 19,8 per cent of EU chemicals sales, and more than half of which was attributable to five EU countries – Poland, Sweden, Austria, Czech Republic and Finland. Poland is biggest contributor from new EU member states bloc, representing cca 2,8 per cent of total EU chemicals sales, second place from other countries ranking Austria, third Sweden and fourth Czech Republic and Finland, each with cca 1,2 per cent.

Value added in the chemical industry of the CR

Aggregation/branch	Book value added		
	CZK million 2014	2015	Index 15/14 %
Refining of petroleum	2 256	2 440	108,2
Chemicals and pharmaceuticals	49 777	54 292	109,1
Rubber and plastics processing	76 837	82 454	107,3
Chemical industry, total	128 870	139 186	108,0
Manufact. industry, total	939 526	987 289	105,1

The VA-to-sales ratio in chemicals industry increased by 3,5 per cent points and was higher in all chemicals aggregations. In manufacturing industry CR VA-to-sales increased in 2015 by 0,2 per cent points.

REFERENCES

1. Annual Report of SCHP ČR 2015.
2. Yearbook of the Czech Chemical Industry 2015.
3. Chemical Industry in EU – Cefic web site.
4. Czech Custom Statistics 2015.
5. Data from the Czech Statistical Office 2015.

11L-11 VYUŽITÍ METOD PRŮMYSLOVÉHO INŽENÝRSTVÍ V PODNIKOVÉ PRAXI

DANA STRACHOTOVÁ

*VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika
dana.strachotova@vscht.cz*

Produktivita a efektivita podnikových činností jsou jedněmi z nejdůležitějších parametrů úspěšnosti firem ve vztahu k zákazníkovi a i k celému trhu. Jedním z oborů, které se zabývá zvyšováním produktivity a efektivity je Průmyslové inženýrství. Podle Business Strategy Review se jedná o obor, který stojí na pomezí ekonomických, manažerských a technologických disciplín¹. Definice Průmyslového inženýrství se u mnoha autorů v mnohém liší, ale v zásadě se všichni shodují, že se jedná o štíhlý přístup k řízení podnikových procesů, který umožňuje provádět činnosti jednodušeji, kvalitněji, rychleji, s nižšími náklady a to vše za účelem splnění požadavků zákazníků.

V prostředí českých firem objevily Průmyslové inženýrství v 90. letech minulého století společnosti napojené na automobilový průmysl. Postupem času se tzv. Lean Management² rozšířil i do ostatních průmyslových odvětví.

Význam Průmyslového inženýrství nespočívá jen v tlaku na produktivitu, identifikaci všech činností, které představují plýtvání a podpoře činností přidávajících hodnotu. Podle amerického institutu průmyslových inženýrů³ se musí zabývat již návrhem produktu, dále zaváděním a zlepšováním integrovaných systémů lidí, materiálů, informací, technického vybavení a energií. Proto je nezbytné využívat znalostí z oblastí matematiky, fyziky i sociálních věd a spolu s metodami inženýrské analýzy a syntézy navrhovat efektivní a produktivní výrobní systémy. Tato myšlenka je využívána již od dob proklamace amerického reengineeringu. Její uplatnění v praxi s sebou obvykle nese uplatnění celé řady metod, které se zaměřují na čtyři hlavní pilíře – štíhlou výrobu, štíhlou logistiku, štíhlý vývoj a štíhlou administrativu⁴.

V českých průmyslových podnicích se využívá celá řada rozmanitých metod Průmyslového inženýrství zaměřených na analýzy a standardizace pracoviště a práce, monitoring plýtvání, efektivitu údržby či logistických operací, atd. Text příspěvku prokazuje význam a možnosti využití jednotlivých metod Průmyslového inženýrství. A dále je na základě výsledků kvantitativního šetření prokázána využitelnost metod v různých průmyslových podnicích (vzhledem k ekonomické činnosti a velikosti podniku, vzhledem k podnikové činnosti).

LITERATURA

1. Ballé F., Ballé M.: Business Strategy Review 3, 16 (2013).
2. Košturiak J., Frolík Z.: *Štíhlý a inovativní podnik*, Alfa Publishing, Praha 2006.
3. Saunders B.: *The Industril Engineering Profession*, John Wiley&Sons, New Jersey 1982.
4. Oppenheim B.: Lean Product Development 4, 2 (2009).

SEZNAM PLENÁRNÍCH PŘEDNÁŠEK

PL-01	<i>P. Hobza</i>	Překvapivé objevy ve světě nekovalentních interakcí
PL-02	<i>P. Kočovský</i>	Aldolová reakce a organokatalýza: principy, mechanismus a použití v enantioselektivní syntéze
PL-03	<i>J. M. Macák</i>	Fotovoltaické procesy na nanotubulární titanii a hybridních chromoforech
PL-04	<i>M. Kuchař</i>	Kontrolované látky z pohledu vědce a kriminalisty
PL-05	<i>A. Breier, Z. Sulová</i>	P-Glykoprotein – membránový transportér způsobující viacílekovou rezistenci nádorových tkání. (Implikácie pre návrh efektivních chemoterapeutik)
PL-06	<i>P. Štěpánek</i>	Moderní chemie v kosmetice

SEZNAM PŘÍSPĚVKŮ PODLE SEKČÍ

Sekce 1 – Analytická chemie

Přednášky

1L-01	<i>M. Macka</i>	<i>On-site analysis using diverse platforms: portable capillary liquid chromatography and paper-based microfluidic devices</i>
1L-02	<i>L. Trnková</i>	Perspektivy eliminační voltametrie
1L-03	<i>J. Valentová, L. Habala, F. Devínský</i>	Identifikace syntetických kanabinoidů přímou spektrometrií DART-LTQ Orbitrap
1L-04	<i>M. Bancířová, L. Bolelli</i>	Microdialysis sampling – possibility of haemoglobine elimination during the nitric oxide detection?
1L-05	<i>R. Sokolová, I. Degano, Š. Ramešová, J. Kocábová, J. Fiedler, J. Tarábek</i>	Analýza oxidačních produktů vybraných bioflavonoidů
1L-06	<i>R. Bleha, A. Synytsya, T. Shevtsova, J. Brindza, J. Čopíková</i>	Spectroscopic discrimination of bee pollen samples
1L-07	<i>T. Navrátil, Š. Skalová, I. Šestáková, V. Vyskočil, J. Barek</i>	Přenos xenobiotik přes biomimetické membrány
1L-08	<i>M. Doležalová, S. Daňková, L. Veverková</i>	Kvalita hovězího masa z ekologického a konvenčního chovu u plemene Galloway
1L-09	<i>P. Smrčková, R. Filepová, D. A. Chena Aldao, E. Šárka</i>	Sledování vlivu extruze na RVA-křivky laboratorně připravených extrudátů
1L-10	<i>M. Fojta, A. Daňhel, L. Havran, L. Trnková</i>	Vliv katalytického vylučování vodíku na rtuťových elektrodách na redukci guaninových zbytků v DNA
1L-11	<i>L. Habartová, H. Logerová, J. Vavřinec, V. Sejnička</i>	Vývoj nových spektroskopických metod pro klinickou diagnostiku diabetu mellitu 1. typu
1L-12	<i>D. Novák, M. Zatloukalová, M. Mojovic, A. Pavicevic, J. Vacek</i>	Elektrochemie a EPR spektroskopie cytochromu c a jeho strukturních analog
1L-13	<i>P. Tůma</i>	Kapilární elektroforéza ve spojení s mikrodialýzou jako účinný nástroj pro fyziologický výzkum
1L-14	<i>J. Horská, K. Vítková, J. Ševčík, J. Petr</i>	Perspektivy využití kapilární elektroforézy v medicíně
1L-15	<i>J. Piechocka, R. Głowacki</i>	On-column derivatization by <i>o</i> -phthalaldehyde – pros and cons

1L-16	<i>J. Labuda</i>	Analytical chemistry of nanomaterials
1L-17	<i>J. Petr, D. Baron, J. Horská, A. Šebestová</i>	Charakterizace nanočástic kapilární elektroforézou
1L-18	<i>A. Boruň, A. Bald</i>	Conductometric study of triple ion formation of ionic liquids in dichloromethane
1L-19	<i>Z. Kinart, A. Bald</i>	Conductometric studies of formation of complexes 15-crown-5 ether with NaBr and NaCl in H ₂ O – 2-methoxyethanol mixtures at 298.15 K
1L-20	<i>L. Švorc, K. Cínková</i>	Analýza vybraných liečiv na elektrodách z bórom dopovaného diamantu
1L-21	<i>P. Martinková, R. Šelešovská, M. Štěpánková, J. Chýlková</i>	Voltametrické chování dantrolenu na amalgámových a bismutových elektrodách
1L-22	<i>T. Zelenka</i>	Kinetika adsorpce a desorpce N ₂ (–196 °C) v průběhu zaplňování mikropórů a mezopórů o různých velikostech

Sekce 1 – Analytická chemie

Cena Shimadzu

1S-01	<i>Š. Belický, D. Pihiková, Z. Pakanová, J. Mucha, J. Tkáč</i>	Nový přístup k diagnostice rakoviny prostaty – MALDI/TOF vs. biosenzor
1S-02	<i>E. Beňo, R. Góra, M. Hutta</i>	Charakterizácia vybraných makromolekul rozmerovo-vylučovacou chromatografiou s použitím kolón malých rozmerov
1S-03	<i>L. Borovcová, V. Pauk, K. Lemr</i>	Fast separation in new designer drugs screening
1S-04	<i>P. Darebná, P. Novák, R. Kučera, O. Topolčan, M. Šanda, R. Goldman, P. Pompach</i>	Změny glykosylace u pacientů s hepatocelulárním a kolorektálním karcinomem kvantifikované pomocí FT-ICR a MRM
1S-05	<i>L. Habartová, M. Tatarkovič, Ž. Hádková, T. Brůha, J. Votruba, V. Setnička</i>	Ramanova spektroskopie pro <i>in vivo</i> klinickou diagnostiku karcinomu plic
1S-06	<i>A. Hájková</i>	Elektrochemický DNA biosenzor pro výzkum poškození DNA
1S-07	<i>K. Hajtmanová, L. Kučera, E. M. Peña-Méndez, J. E. Conde-González, P. Vaňhara, A. Hampl, J. Havel</i>	Highly sensitive mass spectrometric method for determination of retinoic acid using metal organic frameworks
1S-08	<i>A. Kokaislová, V. Parchaňský, P. Matějka</i>	Spektroskopie povrchem zesílené infračervené absorpce pro studium tenkých vrstev vitamínů adsorbovaných na měděných substrátech
1S-09	<i>M. Komendová, R. Metelka, J. Urban</i>	Monolitická kapilární kolona s integrovaným elektrochemickým detektorem
1S-10	<i>A. Liška, J. Ludvík</i>	Electrochemical analysis of calixarenes

Sekce 1 – Analytická chemie

Postery

1P-01	<i>J. Zeman, D. Vetchý, A. Franc, J. Vysloužil, V. Pitschmann, L. Matějovský</i>	The effect of neusilin® on the properties of carriers used for the detection of cholinesterase inhibitors
1P-02	<i>K. Vítková, J. Horská, J. Jurčíková, R. Papoušek, P. Barták, V. Procházka, J. Petr</i>	Studium chemické stability alloxanu pomocí kapilární zónové elektroforézy
1P-03	<i>M. Bukáčková, R. Maršálek</i>	Vliv pH, teploty a koncentrace na zeta potenciál BSA
1P-04	<i>L. Veverková, R. Slavík, M. Doležalová</i>	Syntetické zeolity, jejich příprava, charakterizace a vlastnosti

1P-05	<u>J. D. Dazie</u> , <u>J. Ludvík</u>	Electrochemical and spectrometric study of reactivity of orthophthalaldehyde with primary diamines
1P-06	<u>T. V. Shishkanova</u> , <u>V. Smetana</u> , <u>L. Marek</u> , <u>K. Řezanková</u> , <u>P. Řezanka</u>	Influence of surface properties on the deposition of a polyaniline film and detection of tumor markers
1P-07	<u>E. Potocká</u> , <u>P. Kis</u> , <u>M. Mastihubová</u> , <u>V. Mastihuba</u>	Metóda stanovenia a screening β -D-apiozidáz
1P-08	<u>L. Kolářová</u> , <u>L. Prokeš</u> , <u>P. Vaňhara</u> , <u>C. F. Calvarons</u> , <u>V. Salvado</u> , <u>A. Hampl</u> , <u>J. Havel</u>	<i>In situ</i> generation of high Au _n cluster ions for mass calibration
1P-09	<u>Z. Kinart</u> , <u>A. Bald</u>	Viscosity coefficients B of KCl, NaCl, NaI, KNO ₃ , LiNO ₃ , NaBPh ₄ , and Bu ₄ NI in rich of water binary mixtures containing dimethyl sulfoxide (DMSO) at 298.15 K
1P-10	<u>V. Holečková</u> , <u>D. Biedermann</u> , <u>A. Křenková</u> , <u>V. Křen</u>	Vývoj přípravy 2,3-dehydrosilychristinu
1P-11	<u>A. Boruň</u> , <u>A. Bald</u>	Conductance and ionic association of ionic liquids in <i>N,N</i> -dimethylacetamide
1P-12	<u>M. Mazur</u> , <u>M. Hricovíni</u> , <u>Z. Hricovíniová</u>	X- and Q-band electron paramagnetic resonance investigation of molybdate complexes with selected aldoses
1P-13	<u>K. Křenková</u> , <u>M. Haluzík</u> , <u>A. Lochmanová</u>	Studium vnějších faktorů, které ovlivňují izolaci a stabilitu CD14+ monocytů z periferní krve
1P-14	<u>L. Novotný</u> , <u>V. Kočanová</u> , <u>A. Kabutey</u> , <u>L. Dušek</u>	Porovnání citlivosti potenciometrie se zinkovou a se zinkovou amalgamovou elektrodou pro potřeby nanofiltrace
1P-15	<u>M. Svoboda</u> , <u>V. Šindelářová</u> , <u>J. Kratzer</u> , <u>A. Michels</u> , <u>J. Franzke</u> , <u>J. Hraniček</u> , <u>J. Dědina</u>	Nové atomizátory těkavých specií založené na dielektrickém bariérovém výboji pro AAS a AFS
1P-16	<u>T. V. Shishkanova</u> , <u>V. Smetana</u> , <u>L. Marek</u> , <u>T. Bříza</u> , <u>V. Král</u>	Polymethinium salts and electrochemical detection of heparin
1P-17	<u>I. Petry-Podgórska</u> , <u>B. Balcarová</u> , <u>T. Matoušek</u>	Fast synthesis and separation of the arsenogluthathione complexes
1P-18	<u>J. Sokol</u> , <u>M. Maliarová</u> , <u>K. Kulichová</u>	Stanovenie biogénnych aminov v potravinách

Sekce 2 – Anorganická chemie

Přednášky

2L-01	<u>M. Horáček</u>	Sloučeniny kovů 4. skupiny s cyklopentadienylovými a dusík obsahujícími ligandy
2L-02	<u>M. Pižl</u> , <u>I. Hoskocová</u> , <u>S. Zálíš</u>	IR spektra komplexů kovů první přechodné řady: experimentální a DFT studie
2L-03	<u>R. Boča</u> , <u>C. Rajnák</u>	Single molecule magnets based upon mononuclear Co(II) complexes
2L-04	<u>M. Novák</u> , <u>R. Jambor</u> , <u>Z. Růžičková</u>	Hydrosilylační reakce indukované N→Si intramolekulární koordinací
2L-05	<u>R. Jambor</u>	Chemie nízkovalečních sloučenin prvků 14. skupiny
2L-06	<u>M. Machata</u> , <u>I. Nemeč</u> , <u>R. Herchel</u> , <u>R. Marx</u> , <u>J. Van Slageren</u> , <u>Z. Trávníček</u>	Magnetismus jednojadrových Mn(III) komplexov schiffových báz
2L-07	<u>P. Urbanovský</u> , <u>J. Kotek</u> , <u>P. Hermann</u> , <u>M. Botta</u> , <u>F. Carniato</u> , <u>D. Jiráček</u>	pH responzivne kontrastné látky pre angioMRI
2L-08	<u>T. Řičica</u> , <u>R. Jambor</u> , <u>Z. Růžičková</u>	Příprava prvků 13. skupiny v nízkém oxidačním stavu
2L-09	<u>I. Matulková</u> , <u>I. Císařová</u> , <u>I. Nemeč</u>	Molekulární systémy s potenciálním využitím v nelineární optice a jejich studium pomocí rentgenové difrakce a vibrační spektroskopie
2L-10	<u>I. Nemeč</u> , <u>I. Matulková</u> , <u>I. Císařová</u> , <u>R. Gyepes</u> , <u>M. Kloda</u>	Anorganické anionty – klíčové nástroje krystalového inženýrství molekulárních materiálů pro nelineární optiku

- 2L-11 P. Antal, B. Drahoš, R. Herchel,
Z. Trávníček Heptakoordinované komplexy Mn(II), Fe(II), Co(II) a Ni(II)
s 15-členným pyridinovým makrocyclickým ligandem; syntéza, struktura,
magnetické a redoxné vlastnosti
- 2L-12 M. Izakovič, Z. Lukačovičová,
I. Ondrejkočičová, M. Koman Příprava a vlastnosti tetrachlorido-železitanov vybraných
protonizovaných derivátov pyridínu
- 2L-13 M. Záborský, I. Císařová,
P. Štěpnička Hybridní fosfinoferrocenové ligandy s methylenovými spojkami
- 2L-14 P. Bartoš, M. Nečas Coordination polymers of lanthanides and uranyl
with 4-(diphenylphosphoryl)-benzoic acid

Sekce 2 – Anorganická chemie

Postery

- 2P-01 L. Lintnerová, J. Valentová,
F. Devínsky Syntéza a štúdium antiradikálovej aktivity med'natých komplexov
s ligandami typu redukovaných Schiffových báz
- 2P-02 J. Švorec, M. Puchoňová, J. Pavlik,
D. Valigura Salicylátomed'naté komplexy s kofeínom: EPR charakterizácia a DFT
výpočty
- 2P-03 M. Guricová, Z. Smékal,
I. Hoskocová Syntéza a vlastnosti komplexů Co(II), Ni(II) a Cu(III)
s pyridoxalaurinátom
- 2P-04 M. Mucha Reakce vysokopecní strusky s vodou
- 2P-05 N. Miklášová, E. Fischer-Fodor,
R. Mikláš, F. Devínsky Biologicky aktívne paládnaté komplexy derivátu kurkumínu na ľudské
nádorové kmeňové bunky hrubého čreva a pečene
- 2P-06 F. Koucký, J. Kotek, I. Císařová ¹⁹F-MRI kontrastní látky využívající ionty d-kovů
- 2P-07 J. Pavlik, M. Puchoňová, J. Moncol',
D. Valigura Magnetická výmenná interakcia v med'natých komplexoch
sprostredkovaná vodíkovými väzbami
- 2P-08 J. Šulc, L. Mastný, T. F. Kubatík,
M. Janata, V. Brožek Preparation of aluminum phosphide by reactive spark plasma sintering
- 2P-09 L. Karolová, Ž. Dohnalová, J. Luxová Vliv mineralizátorů na pigmentově-aplikační vlastnosti kasiteritových
pigmentů
- 2P-10 M. Puchoňová, J. Moncol',
V. Jorík, D. Valigura Štruktúrne modifikácie salicylátomed'natých komplexov
s n-metylnikotínamidom
- 2P-11 Z. Puterová-Tokárová, J. Kožíšek,
R. Boča Magnetostructural correlations in Schiff-base copper(II) complexes deri-
ved from aminoacids
- 2P-12 M. Vavra, M. Hegedüs, K. Ráczová,
E. Čížmár Kryštalová štruktúra a magnetické vlastnosti 3D zlúčeniny obsahujúca
kyanidové Cu(II)–CN–Cr(III) mostíky
- 2P-13 B. Vranovičová, R. Boča Použitie chemometrických metód pri štúdiu J-magnetoštruktúrnych kore-
lácií
- 2P-14 J. Mlynáriková, M. Boča,
E. Hadzimová Objemové vlastnosti roztavených fluoridových systémov MF–K₂TaF₇
(MF = LiF, NaF, KF)
- 2P-15 F. Šimko, A. Rakhmatullin,
M. Kontrík, P. Florian, Z. Netriová,
C. Bessada Formation of new rubidium oxofluoroaluminate in RbF–Al₂O₃ system

Sekce 3 – Chemické vzdělávání a historie chemie

Přednášky

- 3L-01 P. Zachař Česká společnost chemická – 150 let
- 3L-02 A. Mittererová, K. Grecová,
K. Zdeňková, P. Šmejkalová,
V. Popová Studium a další působení žen na vysoké škole chemicko-technologické
v Praze, proměny v průběhu posledních 100 let
- 3L-03 M. Novák Pokusy o znázornění struktury benzenu v 19. století

3L-04	<i>P. Koloros</i>	Jak a co učit v chemii
3L-05	<i>J. Prášilová</i>	Směřujeme učitele k aktivní výuce
3L-06	<i>P. Pařík</i>	Organické molekuly jako aktéři popularizačních akcí Univerzity Pardubice

Sekce 4 – Jaderná chemie

Přednášky

4L-01	<i>J. Mizera</i>	Fotonová aktivační analýza: principy a aplikace metody ve srovnání s neutronovou aktivační analýzou
4L-02	<i>D. Marešová, B. Sedlářová, E. Juranová</i>	Stanovení velmi nízkých objemových aktivit tritia s využitím elektrolytického nabohacení vzorků
4L-03	<i>S. Dulanská, J. Bilohuščin, B. Remenec, L. Mátel</i>	Sekvenčné stanovení ^{93}Zr , ^{94}Nb , ^{126}Sn a ^{99}Tc v radioaktivních odpadech
4L-04	<i>V. Brynych, J. Pospěchová, K. Kolomá, M. Kolářová, L. Szatmáry, J. Šubrt</i>	Sorpce vybraných radionuklidů na TiO_2
4L-05	<i>K. Ficenzová</i>	Homogenita plošných etalonů radioaktivity (ČMI)
4L-06	<i>V. Múčka</i>	Radiačně chemický výzkum v oblasti biologicko-medicínských aplikací
4L-07	<i>A. Čepa, J. Ráliš, L. Marešová, M. Kleinová, D. Seifert, I. Siegllová, V. Král, O. Lebeda, M. Lázníček</i>	$^{61,64}\text{Cu}$ -(SCN)-fosfinát-imunoglobulin-G M75 a jeho <i>in vitro</i> testování
4L-08	<i>J. Červenák, O. Lebeda</i>	Meranie excitačných funkcií jadrových reakcií protónov na ^{nat}Mo
4L-09	<i>P. Mičolová, E. Kukleva, E. Málková, M. Vlk, P. Nykl, M. Sakmár, J. Kozempel</i>	Příprava, stabilizace a značení oxidu titaničitého ^{99m}Tc a ^{223}Ra pro nukleární medicínu
4L-10	<i>A. Marek, S. Šírová, T. Elbert</i>	Frustrated lewis pairs-assisted tritium labeling
4L-11	<i>M. Němec, I. Špendlíková, J. Kučera, J. John, I. Světlík, D. Dreslerová</i>	Accelerator mass spectrometry in the Czech Republic – abilities and applications
4L-12	<i>J. John, F. Šebesta, V. Čuba, P. Distler, K. V. Mareš, J. Kondé</i>	Sustainable future nuclear fuel cycles – separations, radiation stability, and innovative processes for nuclear fuels production
4L-13	<i>V. Havlová, D. Trpkošová, E. Hofmanová, A. Vokál</i>	Safety assesment approach for deep geological repository in Czech Republic
4L-14	<i>T. Rosendorf, E. Hofmanová, R. Červinka</i>	Vliv horninového prostředí a cementových materiálů na difúzi radiokontaminantů v bentonitu
4L-15	<i>L. Mátel, S. Petercová, S. Dulanská</i>	Kompozitný biosorbent pre separáciu rádionuklidov
4L-16	<i>B. Basarabová, K. Čubová, M. Němec</i>	Solvent extraction of europium (III) from complexing solutions into ionic liquids containing CMPO extractant
4L-17	<i>P. Bartl, M. Němec, J. John</i>	Stanovení kinetických parametrů kapalinové extrakce radionuklidů pomocí mikrofluidní slug-flow metody
4L-18	<i>J. Janda, L. Kaňka</i>	Studium alternativních elučních činidel pro diphonix resin
4L-19	<i>E. Juranová, E. Hanslík</i>	Sorpce umělých radionuklidů v hydrosféře – distribuční koeficient

Sekce 4 – Jaderná chemie

Postery

4P-01	<i>V. Havlová, V. Brynych, L. Szatmáry, P. Franta, M. Kotouč, E. Hofman</i>	Treatment of large volumes of liquid wastes, being produced by severe NPP accident
4P-02	<i>M. Chlupáčová, P. Kůs, H. Parschová</i>	Sorption of nickel from aqueous solutions with citric acid using selective sorbents

4P-03	<i>J. Strišovská, D. Galanda, J. Kuruc</i>	Extrakčná chromatografia ako metóda simultánneho stanovenia Pu a Np v kontaminovaných pôdach
4P-04	<i>B. Neužilová, V. Múčka</i>	Snížení radiační citlivosti buněk ozářených UV zářením pomocí vychytávačů OH radikálů
4P-05	<i>L. Ondrák, V. Múčka</i>	Vliv vychytávačů OH radikálů na radiační citlivost buněk za různých ozařovacích podmínek
4P-06	<i>I. Hupka, A. Zavadilová, B. Drtinová</i>	Vplyv matrice na stanovenie nízkych koncentrácií uránu metódou TRLFS
4P-07	<i>L. Rábara, P. Chnappko, M. Pražský</i>	Nároky na akreditované laboratórium merania aktivity
4P-08	<i>K. Popovich, L. Procházková, I. T. Pelikánová, V. Čuba, V. Jarý, M. Nikl, M. Vlk</i>	Nanohybrid systems based on scintillating nanoparticles for x-ray induced photodynamic therapy
4P-09	<i>J. Kittnerová, B. Drtinová, D. Vopálka</i>	Charakterizace cementového kamene CEM II pomocí vybraných analytických metod a sorpce stroncia
4P-10	<i>M. Straka, L. Szatmáry</i>	Využití iontových kapalin pro dekontaminaci radioaktivních odpadů
4P-11	<i>J. Mízerá, R. Šefců, D. Koloušek</i>	Charakterizace fluoritů a uměleckých pigmentů s fialovým fluoritem neutronovou aktivací analýzou
4P-12	<i>K. Tomanová, L. Vyšín, V. Čuba</i>	Effect of selected parameters on radiation induced peroxidation of monounsaturated phospholipid

Sekce 5 – Nanomateriálová chemie

Přednášky

5L-01	<i>P. Cígler</i>	Fluorescent nanodiamonds as non-photobleachable responsive probes
5L-02	<i>P. Filipczak, M. Kozanecki</i>	Raman analysis of graphene
5L-03	<i>N. Bugárová, Z. Špitálský, P. Šiffalovič, M. Bodík, M. Koneracká, M. Zaťovičová, M. Omastová</i>	Biosenzory na báze modifikovaného grafén oxidu
5L-04	<i>J. Grégr, S. Nevyhoštěný, K. Havlíček, E. Kuželová-Košťáková</i>	Kompozitní nanovlákná
5L-05	<i>J. Homola</i>	Plasmonic biosensors and their applications
5L-06	<i>V. Ranc, A. Balzerová, A. Fargašová, Z. Chaloupková, Z. Medříkova, R. Zbořil</i>	Magneticky asistovaná povrchem zesílená Ramanova spektroskopie (MA-SERS) jako nástroj detekce fyziologicky aktivních sloučenin
5L-07	<i>O. Petruš, A. Oriňak, R. Oriňaková, Z. Orságová Králová, K. Koval', E. Múdra, L. Kvetková, F. Lofaj</i>	Plazmonové nanoštrukturované povrchy pripravené koloidnou litografiou
5L-08	<i>A. Panáček, M. Smékalová, Š. Hradilová, R. Večeřová, M. Kolář, R. Prucek, L. Kvítek, R. Zbořil</i>	Biologická aktivita nanočástic stříbra: historie, současnost a perspektiva
5L-09	<i>Š. Hradilová, A. Panáček</i>	Modifikace povrchu ortopedických implantátů pomocí nanočástic stříbra
5L-10	<i>L. Markušová-Bučková, R. Oriňaková, A. Oriňak, M. Giretová, E. Medvecký, M. Kupková, M. Hrubovčáková, K. Koval'</i>	Biodegradovatelné materiály pre ortopedické aplikácie
5L-11	<i>J. Macko, R. Oriňaková, A. Oriňak</i>	Modulácia hydrofobicity mikro- a nanotextúrnych povrchov pre adhéziu živých bunkových línií
5L-12	<i>M. B. Gawande</i>	Recent advances in nanocatalysis
5L-13	<i>K. Poláková, Z. Marková, T. Malina, A. Bakandritsos, A. Malá, J. Skopalík, R. Zbořil</i>	Superparamagnetic iron oxides nanoparticles as contrast agents for MRI application

- 5L-14 I. Smoradová, R. Oriňaková, A. Oriňak, J. Hovancová, J. Radoňák, K. Budzová Enkapsulácia langerhansových ostrovčekov a elektrochemické stanovenie glukózy a inzulínu

Sekce 5 – Nanomateriálová chemie

Postery

- 5P-01 E. Adamek, W. Baran, M. Cholewiński, R. Adamczyk, B. Pelczar Differentiation of the photocatalytic degradation mechanisms of organic compounds based on sulfonamides
- 5P-02 W. Baran, E. Adamek, R. Adamczyk, M. Cholewiński, J. Wilk, A. Szymkiewicz Classification of the treatment methods of wastewater that contain high concentration of antibiotics
- 5P-03 Z. Kolská, S. Lupínková, M. Benkocká, A. Řezníčková, V. Švorčík Roubování povrchů polymerních substrátů pro bioaplikace
- 5P-04 P. Henke, J. Mosinger Antibakteriální nanočástice připravené z nanovláknenných materiálů
- 5P-05 V. Pivodová, A. Galandáková, A. Panáček, R. Pucek, J. Gallo, J. Ulrichová Hodnocení cytotoxicity materiálů používaných k výrobě kloubních náhrad
- 5P-06 A. Vitásková Studium biokompatibilních vrstev polymerů kyseliny mléčné (PLA)
- 5P-07 O. Kvítek, D. Fajstavr, A. Řezníčková, P. Slepíčka, Z. Kolská, V. Švorčík Žihání tenkých vrstev Au naprášených na polyimidu a polyetheretherketonu
- 5P-08 A. Řezníčková, O. Kvítek, Z. Kolská, M. Orendáč, V. Švorčík Magnetic properties of polyethylene coated with sulfonated copper phthalocyanine
- 5P-09 V. Brožek, R. Mušálek, M. Vilémová, T. F. Kubatík, M. Janata, L. Mastný, V. Sýkora Decomposition of silver chloride by water stabilized plasma radiation
- 5P-10 L. Kvítek, K. Kostelanská, R. Pocklanová, A. Panáček, R. Pucek Porovnání způsobu termické iniciace při redukční přípravě nanočástic stříbra
- 5P-11 R. Vyhňálková, J. Soukupová, R. Zbořil Příprava antimikrobiálně aktivního kompozitního materiálu pomocí *in-situ* deponovaných stříbrných nanočástic na micelách z blokových kopolymerů
- 5P-12 V. Urbanová, M. Otyepka, R. Zbořil Fluorografen pro pokročilé elektrochemické senzory
- 5P-13 J. Filip, P. Skácelová, J. Oborná, E. Petala, R. Zbořil Využití redoxních vlastností nanomateriálů na bázi železa v technologiích čištění vod: laboratorní *versus* terénní zkušenosti

Sekce 6 – Organické materiály

Přednášky

- 6L-01 M. Kivala, N. Hammer, U. Meinhardt, B. D. Gliemann *N*-Heterotriangulenes as versatile platforms for the construction of nitrogen-doped polyaromatics
- 6L-02 J. Čermák, T. Strašák, L. Červenková Štátná, V. Bílková Křemík jako větvicí atom: ligandy, komplexy a iontové kapaliny
- 6L-03 H. Macíčková Cahová Od umělých DNA modifikací k nové přirozené modifikaci RNA
- 6L-04 O. Pytela Počty a výpočty v organické chemii
- 6L-05 M. Kličar, F. Bureš Vliv strukturálního uspořádání push-pull chromoforů na jejich optoelektronické vlastnosti
- 6L-06 L. Soukupová, J. Kolena Zpracování koncentráту mastných kyselin z rafinace rostlinných olejů na FAME kyselé katalyzovanou esterifikací a transesterifikací

6L-07 *F. Bureš*

Push-pull deriváty pyrazin-2,3-dikarbonitrilu jako efektivní fotoredox katalyzátory

Sekce 6 – Organické materiály

Postery

6P-01 *Z. Hricovíniová, M. Hricovíni, V. Brezová, P. Magdolen**N*-Aryl- and *N*-heteroaryl- β -D-glucuron amides as potential anticancer agents: synthesis and spectroscopic analysis6P-02 *Z. Hloušková, F. Bureš*

Push-pull chromofory ve službách fotoredox katalýzy

6P-03 *J. Tydlitát, F. Bureš, J. Kulhánek*

3,4-Dinitrothiofen jako centrální jednotka v kvadrupolárních systémech

6P-04 *C. A. Pujol, E. B. Damonte, J. Turjan, P. Capek*The antiviral effect of *Fagus sylvatica* 4ome-glucuronoxylan sulfates6P-05 *J. Podlesný, F. Bureš*3,6-Disubstituované deriváty 2,5-dihydropyrrolo[3,4-*c*]pyrrol-1,4-dionu6P-06 *P. Tisovský, M. Horváth, M. Cigáň, K. Jakusová, J. Filo, M. Gáplovský, A. Gáplovský*

Sensitive strongly basic anion sensing by pentafluorophenylhydrazones of isatin

6P-07 *R. Šandrik, P. Tisovský, M. Cigáň, J. Donovalová, A. Gáplovský*

Synthesis of modified phenanthrolines – isatin structural pattern

6P-08 *M. Lukáč, F. Devínsky, B. Horváth, I. Pechová*

Neočakávaná reakcia 1-fosfanorbomadién-2-karbaldehydu s alkoholmi v zásaditom prostredí

6P-09 *L. Rišiaňová, N. Miklašová, J. Valentová, F. Devínsky*

Antiradikálová aktivita nových derivátov kurkumínu

6P-10 *M. Kloda, I. Cisařová, I. Němec*

Nové molekulární materiály pro nelineární optiku – produkty reakcí 3-amino-1,2,4-triazinu s kyselinou malonovou

6P-11 *M. Kotova, E. Vyskočilová, L. Červený*

Selektivní hydrogenace butylsorbátu

6P-12 *P. F. J. Lipiński*

Substituent effect in theoretical ROA spectra

6P-13 *J. Cz. Dobrowolski, M. H. Jamróz, P. F. J. Lipiński*On chiral graph topological indices of α -amino acids**Sekce 7 – Polymery**

Přednášky

7L-01 *P. Štenclová, J. Svoboda, J. Vohlidal*

Příprava a vlastnosti konjugovaných metalo-supramolekulárních polymerů rozpustných v alkoholech

7L-02 *P. Sysel, A. Patrova, J. Vyšohlíd*

Membrány na bázi polyimidů pro separaci plynů

7L-03 *J. Kulíček, P. Gemeiner, M. Mičušík, L. Švorc, M. Omastová*

Comparison of chemical and electrochemical preparation of polypyrrole/multiwall carbon nanotube nano-composites for solar cells application

7L-04 *M. Prochazka, I. Votta, M. Valentin, M. Omastova, P. N. Stavrinou, N. Stingelin*

Nanoindentation testing of titanium oxide hydrate/polyvinyl alcohol thin films after post deposition annealing

7L-05 *R. Kalousková, H. Minaříková, Z. Jouklová*

Chemická odolnost měkčených směsí PVC

7L-06 *J. Jůza, I. Fortelný*

Komplikace u modelů tokem indukované koalescence ve viskoelastické matici

7L-07 *O. Vopička, D. Radotínský, K. Pilnáček, M. Lanč, P. Číhal, A. Randová, K. Friess*

Sorpce plynů, par a jejich směsí ve sklovitých a kaučukovitých polymerech: univerzální popis GAB modelem vícevrstvé adsorpce?

7L-08 *I. Novák, M. Valentin, M. Mičušík, M. Lehocný, J. Prachár*

Antibacterial treatment of poly(lactic acid) by effect of radio-frequency plasma

- 7L-09 M. Janata, V. Raus, E. Čadová Nový pohled na ATRP polymerizaci POSS monomerů do vysokých polymerizačních stupňů
- 7L-10 J. Brožek, D. Lennerová, F. Kovanda, D. Jaksch, L. Malinová Mechanismus polymerace ϵ -kaprolaktamu a exfoliace vrstevnatých plniv

Sekce 7 – Polymery

Postery

- 7P-01 P. Jurkovič, I. Novák, J. Prachár, O. Žigo, J. Matyášovský Study of polyamide surface treatment by plasma and adhesion to rubber by collagen addition
- 7P-02 I. Novák, I. Krupa, O. Žigo, J. Prachár, J. Matyášovský, P. Jurkovič Thermal and mechanical properties of graphite-based polyolefin micro composites
- 7P-03 I. Novák, I. Krupa, Z. Nógellová, O. Žigo, J. Prachár, J. Matyášovský, P. Jurkovič Investigation of date wood-based composites behavior
- 7P-04 Z. Nógellová, D. Johec Mošková, M. Sedničková, E. Jankovič, P. Komadel, I. Chodák Reologická charakterizácia plniv na báze vrstevnatých ílov v kompozitoch s polymérou matricou
- 7P-05 J. Matyášovský, P. Jurkovič, P. Duchovič, I. Novák Výskum možností využitia prírodných polymérov z kožiarskych odpadov
- 7P-06 K. Piechocki, M. Kozanecki Polymer hydrogels as future materials – potential application

Sekce 8 – Průmyslová chemie

Přednášky

- 8L-01 J. Lederer Potenciál uhlí pro výrobu klíčových chemikálií
- 8L-02 J. Lederer Omezování negativních environmentálních dopadů při výrobě paliv a petrochemikálií
- 8L-03 E. Hájeková, P. Benžová, P. Hudec, M. Horňáček Pyrolýza odpadových plastov zo starých vozidiel v prítomnosti prírodných zeolitov
- 8L-04 V. Danielik, J. Jurišová, P. Fellner, M. Králik Utilization of flue gas desulphurization gypsum into ammonium sulphate fertilizer
- 8L-05 E. Kubiňáková, J. Híveš Low temperature sodium cryolite electrolytes with higher addition of AlF_3

Sekce 8 – Průmyslová chemie

Postery

- 8P-01 J. Jurišová, V. Danielik, P. Fellner, M. Králik Calcium carbonate prepared from the flue gas desulphurization gypsum
- 8P-02 H. Parschová, H. Parschová Porovnání různých anexů při opakované sorpci uranu z vody
- 8P-03 M. Němeček, H. Parschová Odstraňování chromanů z vodných roztoků pomocí chelatačních sorbentů

Sekce 9 – Termická analýza

Přednášky

- | | | |
|-------|--|--|
| 9L-01 | <i>J. Šesták, P. Holba</i> | Temperature and its meaning under varying conditions: from newton cooling law to theoretical thermal analysis and even further |
| 9L-02 | <i>E. Fueglein</i> | About the use of a software-based library for characterization of thermoanalytical data |
| 9L-03 | <i>G. Hotová, V. Slovák</i> | Termoanalytické studium povrchové oxidace uhlíkatých materiálů |
| 9L-04 | <i>E. Kinnertová, P. Veselá, V. Slovák</i> | Tání jako míra polykondenzace resorcinolu a formaldehydu ve vodném roztoku |
| 9L-05 | <i>P. Veselá, P. Buchta</i> | Termická studie pyrolýzy organických xerogelů na bázi furfuralu |
| 9L-06 | <i>J. Shánělová</i> | Krystalizační mechanismus a jeho projevy v kinetické analýze |
| 9L-07 | <i>P. Šimon, T. Dubaj, Z. Cibulková</i> | Isoconversional methods – how to apply them correctly? |
| 9L-08 | <i>V. Slovák, J. Štefelová</i> | Kinetika pyrolýzy nanovláknitých celulosových materiálů |
| 9L-09 | <i>P. Bělina, P. Šulcová</i> | Studium syntézy vybraných spinelových sloučenin pomocí metod termické analýzy |
| 9L-10 | <i>B. Smetana, S. Zlá, M. Kawuloková, A. Kalup, J. Dobrovská, O. Martiník, P. Dostál</i> | Liquidus, solidus and other phase transition temperatures and heat capacity of low carbon steel |
| 9L-11 | <i>P. Šulcová</i> | Aktivity odborné skupiny termické analýzy |

Sekce 9 – Termická analýza

Postery

- | | | |
|-------|--|--|
| 9P-01 | <i>P. Holba, J. Šesták, T. Kovařík, P. Martinec, J. Kadlec</i> | CENTEM: Thermoanalytical center at the Czech Westbohemian University and its international cooperative program |
|-------|--|--|

Sekce 10 – Analýza dat

Přednášky

- | | | |
|--------|---|--|
| 10L-01 | <i>S. Dulanská, L. Mátel, M. Nodilo</i> | Nová metoda pre stanovenie ⁹⁰ Sr v kostiach |
| 10L-02 | <i>L. Menšík, E. Kunzová, K. Komprdová, J. Kulhavý, M. Meloun</i> | Statistická analýza chemických vlastností (parametrů) u zemědělských a lesních půd metodou hlavních komponent a exploratorní analýzou vícerozměrných dat |
| 10L-03 | <i>L. Husáková, M. Šafránková, I. Urbanová, T. Šídová</i> | The use of fractional factorial design for optimization of direct determination of be in soil and sediment samples by HR-CS-ET-AAS with slurry sampling |
| 10L-04 | <i>T. Pekárek</i> | Využití analýzy hlavních komponent při screeningu polymorfních forem a solí Ramonovou spektroskopií ve farmaceutickém vývoji |
| 10L-05 | <i>T. Šídová, L. Husáková, I. Urbanová</i> | Development of a simple and fast microwave-assisted extraction method for trace element determination in fly ash samples using inductively coupled plasma time-of-flight mass spectrometry |
| 10L-06 | <i>M. Meloun, Z. Ferenčíková, M. Javůrek</i> | Porovnání rozlišovací schopnosti regresní analýzy spekter a spolehlivosti výpočtu disociačních konstant programy SQUAD(84) a SPECFIT/32 |
| 10L-07 | <i>J. Handl, V. Mužáková, M. Meloun</i> | Analýza vlivu rizikových faktorů na profilu mastných kyselin membrán erytrocytů při zánětlivé reakci po implantaci koronárního stentu u nemocných s ischemickou chorobou srdeční |
| 10L-08 | <i>L. Pilařová, M. Meloun, T. Pekárek</i> | Disociační konstanty léčiva eltrombopagu nelineární regresí UV/VIS-spekter a porovnání s odhady z potenciometrické pH-titrace |
| 10L-09 | <i>V. Pata</i> | Aplikace nelineární regrese při volbě modelů jakosti povrchů |

- 10L-10 L. Leišová-Svobodová, M. Meloun Nalezení vhodného modelu pro popis reakce taqman real-time PCR stanovení fytopatogenní houby *Pyrenophora teres* v pletivech hostitele *Hordeum vulgare*
- 10L-11 V. Dillingerová, T. Vaculovič, V. Kanický, N. Venclová, K. Tomková, E. Černá Využití LA-ICP-MS pre forenznú analýzu skla

Sekce 10 – Analýza dat

Postery

- 10P-01 M. Hricovíni NMR and DFT analysis of 3D structure and spin-spin coupling constants in heparin pentasaccharide

Sekce 11 – Ekonomika a řízení chemického průmyslu

Přednášky

- 11L-01 D. Baran, Z. Bělohav Interdisciplinary five-year masters program graduate profile technology, management and economics in chemistry
- 11L-02 D. Baran Controlling and management system
- 11L-03 M. Botek Employee turnover in ceramic plant
- 11L-04 S. Grosová, I. Gros Nákupní strategie v podmínkách dodavatelských systémů
- 11L-05 J. Kajanová Perspektivy chemického priemyslu v SR
- 11L-06 J. Klečka Vývoj hodnotové produktivity podniků ve vybraných odvětvích při cestě z krize 2010–2014
- 11L-07 O. Kutnohorská Značky kvality českých potravin
- 11L-08 H. Lošťáková, V. Vlčková, M. Jelínková Interconnection between chemical companies and their customers – the basis for strengthening competitiveness of chemical companies in the current market environment
- 11L-09 J. Rančák Řízení rizik v podniku
- 11L-10 I. Souček Results of the Czech chemical industry in 2015 in european context
- 11L-11 D. Strachotová Využití metod průmyslového inženýrství v podnikové praxi

AUTORSKÝ REJSTŘÍK

- Adamczyk R. 5P-01, 5P-02
Adamek E. 5P-01, 5P-02
Antal P. 2L-11
- Bakandritsos A. 5L-13
Balcarová B. 1P-17
Bald A. 1L-18, 1L-19, 1P-09, 1P-11
Balzerová A. 5L-06
Banciřová M. 1L-04
Baran D. 11L-01, 11L-02
Baran W. 5P-01, 5P-02
Barek J. 1L-07
Baron D. 1L-17
Barták P. 1P-02
Bartl P. 4L-17
Bartoš P. 2L-14
Basarabová B. 4L-16
Belický Š. 1S-01
Bělina P. 9L-09
Bělohav Z. 11L-01
Benkocká M. 5P-03
Beňo E. 1S-02
Benzová P. 8L-03
Bessada C. 2P-15
Biedermann D. 1P-10
Bílková V. 6L-02
Bilohuščin J. 4L-03
Bleha R. 1L-06
Boča M. 2P-14
Boča R. 2L-03, 2P-11, 2P-13
Bodík M. 5L-03
Bolelli L. 1L-04
Borovcová L. 1S-03
Boruň A. 1L-18, 1P-11
Botek M. 11L-03
BOTTA M. 2L-07
Breier A. PL-05
Brezová V. 6P-01
Brindza J. 1L-06
Brožek J. 7L-10
Brožek V. 2P-08, 5P-09
Brůha T. 1S-05
Brynych V. 4L-04, 4P-01
Břiza T. 1P-16
Budzová K. 5L-14
Bugárová N. 5L-03
Buchta P. 9L-05
Bukáčková M. 1P-03
Bureš F. 6L-05, 6L-07, 6P-02, 6P-03, 6P-05
- Calvarons C. F. 1P-08
Capek P. 6P-04
CARNIATO F. 2L-07
Cibulková Z. 9L-07
Cigán M. 6P-06, 6P-07
- Cígler P. 5L-01
Činková K. 1L-20
Čiśařová I. 2L-09, 2L-10, 2L-13, 2P-06, 6P-10
Conde-González J. E. 1S-07
- Čadová E. 7L-09
Čepa A. 4L-07
Čermák J. 6L-02
Černá E. 10L-11
Červenák J. 4L-08
Červenková Šťastná L. 6L-02
Červený L. 6P-11
Červinka R. 4L-14
Číhal P. 7L-07
Čiřmár E. 2P-12
Čopíková J. 1L-06
Čuba V. 4L-12, 4P-08, 4P-12
Čubová K. 4L-16
- Damonte E. B. 6P-04
Daňhel A. 1L-10
Danielik V. 8L-04, 8P-01
Daňková S. 1L-08
Darebná P. 1S-04
Dazie J. D. 1P-05
Dědina J. 1P-15
Degano I. 1L-05
Devínsky F. 1L-03, 2P-01, 2P-05, 6P-08, 6P-09
Dillingerová V. 10L-11
Distler P. 4L-12
Dobrovská J. 9L-10
Dobrowolski J. Cz. 6P-13
Dohnalová Ž. 2P-09
Doleřalová M. 1L-08, 1P-04
Donovalová J. 6P-07
Dostál P. 9L-10
Drahoř B. 2L-11
Dreslerová D. 4L-11
Drtinová B. 4P-06, 4P-09
Dubaj T. 9L-07
Duchovič P. 7P-05
Dulanská S. 10L-01, 4L-03, 4L-15
Dušek L. 1P-14
- Elbert T. 4L-10
- Fajstavr D. 5P-07
Fargařová A. 5L-06
Fellner P. 8L-04, 8P-01
Ferenčíková Z. 10L-06
Ficenzová K. 4L-05
Fiedler J. 1L-05
Filepová R. 1L-09
Filip J. 5P-13
- Filipczak P. 5L-02
Filo J. 6P-06
Fischer-Fodor E. 2P-05
Florian P. 2P-15
Fojta M. 1L-10
Fortelný I. 7L-06
Franc A. 1P-01
Franta P. 4P-01
Franzke J. 1P-15
Friess K. 7L-07
Fueglein E. 9L-02
- Galanda D. 4P-03
Galandáková A. 5P-05
Gallo J. 5P-05
Gáplovský A. 6P-06, 6P-07
Gáplovský M. 6P-06
Gawande M. B. 5L-12
Gemeiner P. 7L-03
Giretová M. 5L-10
Gliemann B. D. 6L-01
Głowacki R. 1L-15
Goldman R. 1S-04
Góra R. 1S-02
Grecová K. 3L-02
Grégr J. 5L-04
Gros I. 11L-04
Grosová S. 11L-04
Guricová M. 2P-03
Gyepes R. 2L-10
- Habala L. 1L-03
Habartová L. 1L-11, 1S-05
Hádková Ž. 1S-05
Hadzimová E. 2P-14
Hájeková E. 8L-03
Hájková A. 1S-06
Hajtmanová K. 1S-07
Haluzík M. 1P-13
Hammer N. 6L-01
Hampl A. 1P-08, 1S-07
Handl J. 10L-07
Hanslík E. 4L-19
Havel J. 1P-08, 1S-07
Havlíček K. 5L-04
Havlová V. 4L-13, 4P-01
Havran L. 1L-10
Hegedüs M. 2P-12
Henke P. 5P-04
Herchel R. 2L-06, 2L-11
HERMANN P. 2L-07
Híveř J. 8L-05
Hlouřková Z. 6P-02
Hobza P. PL-01
Hofman E. 4P-01
Hofmanová E. 4L-13, 4L-14

- Holba P. 9L-01, 9P-01
 Holečková V. 1P-10
 Homola J. 5L-05
 Horáček M. 2L-01
 Horňáček M. 8L-03
 Horská J. 1L-14, 1L-17, 1P-02
 Horváth B. 6P-08
 Horváth M. 6P-06
 Hoskovcová I. 2L-02, 2P-03
 Hotová G. 9L-03
 Hovancová J. 5L-14
 Hradilová Š. 5L-08, 5L-09
 Hraniček J. 1P-15
 Hricovíni M. 1P-12, 6P-01, 10P-01
 Hricovíniová Z. 1P-12, 6P-01
 Hrubovčáková M. 5L-10
 Hudec P. 8L-03
 Hupka I. 4P-06
 Husáková L. 10L-03, 10L-05
 Hutta M. 1S-02

 Chaloupková Z. 5L-06
 Chena Aldao D. A. 1L-09
 Chlupáčová M. 4P-02
 Chnapko P. 4P-07
 Chodák I. 7P-04
 Cholewiński M. 5P-01, 5P-02
 Chýlková J. 1L-21

 Izakovič M. 2L-12

 Jaksch D. 7L-10
 Jakusová K. 6P-06
 Jambor R. 2L-04, 2L-05, 2L-08
 Jamrůz M. H. 6P-13
 Janata M. 2P-08, 5P-09, 7L-09
 Janda J. 4L-18
 Jankovič E. 7P-04
 Jarý V. 4P-08
 Javůrek M. 10L-06
 Jelínková M. 11L-08
 JIRÁK D. 2L-07
 John J. 4L-11, 4L-12, 4L-17
 Jocheč Mošková D. 7P-04
 Jorík V. 2P-10
 Jouklová Z. 7L-05
 Juranová E. 4L-02, 4L-19
 Jurčíková J. 1P-02
 Jurišová J. 8L-04, 8P-01
 Jurkovič P. 7P-01, 7P-02, 7P-03, 7P-05
 Jůza J. 7L-06

 Kabutey A. 1P-14
 Kadlec J. 9P-01
 Kajanová J. 11L-05
 Kalousková R. 7L-05
 Kalup A. 9L-10
 Kanický V. 10L-11
 Kaňka L. 4L-18
 Karolová L. 2P-09
 Kawuloková M. 9L-10

 Kinart Z. 1L-19, 1P-09
 Kinnertová E. 9L-04
 Kis P. 1P-07
 Kittnerová J. 4P-09
 Kivala M. 6L-01
 Klečka J. 11L-06
 Kleinová M. 4L-07
 Klikar M. 6L-05
 Kloda M. 2L-10, 6P-10
 Kocábová J. 1L-05
 Kočanová V. 1P-14
 Kočovský P. PL-02
 Kokaislová A. 1S-08
 Kolář M. 5L-08
 Kolářová L. 1P-08
 Kolářová M. 4L-04
 Kolena J. 6L-06
 Kolomá K. 4L-04
 Koloros P. 3L-04
 Koloušek D. 4P-11
 Kolská Z. 5P-03, 5P-07, 5P-08
 Komadel P. 7P-04
 Koman M. 2L-12
 Komendová M. 1S-09
 Komprdová K. 10L-02
 Kondé J. 4L-12
 Koneracká M. 5L-03
 Kontrík M. 2P-15
 Kostelanská K. 5P-10
 KOTEK J. 2L-07, 2P-06
 Kotouč M. 4P-01
 Kotova M. 6P-11
 Koucký F. 2P-06
 Koval' K. 5L-07, 5L-10
 Kovanda F. 7L-10
 Kovařík T. 9P-01
 Kozaneckí M. 5L-02, 7P-06
 Kozempel J. 4L-09
 Kožíšek J. 2P-11
 Král V. 4L-07, 1P-16
 Králik M. 8L-04, 8P-01
 Kratzer J. 1P-15
 Krupa I. 7P-02, 7P-03
 Křen V. 1P-10
 Křenková A. 1P-10
 Křenková K. 1P-13
 Kubatík T. F. 2P-08, 5P-09
 Kubiňáková E. 8L-05
 Kučera J. 4L-11
 Kučera L. 1S-07
 Kučera R. 1S-04
 Kuchař M. PL-04
 Kukleva E. 4L-09
 Kulhánek J. 6P-03
 Kulhavý J. 10L-02
 Kulicek J. 7L-03
 Kulichová K. 1P-18
 Kunzová E. 10L-02
 Kupková M. 5L-10
 Kuruc J. 4P-03
 Kůs P. 4P-02

 Kutnohorská O. 11L-07
 Kuželová-Košťáková E. 5L-04
 Kvetková L. 5L-07
 Kvítek L. 5L-08, 5P-10
 Kvítek O. 5P-07, 5P-08

 Labuda J. 1L-16
 Lanč M. 7L-07
 Lázníček M. 4L-07
 Lebeda O. 4L-07, 4L-08
 Lederer J. 8L-01, 8L-02
 Lehocký M. 7L-08
 Leišová-Svobodová L. 10L-10
 Lemr K. 1S-03
 Lennerová D. 7L-10
 Lintnerová L. 2P-01
 Lipiński P. F. J. 6P-12, 6P-13
 Liška A. 1S-10
 Lofaj F. 5L-07
 Logerová H. 1L-11
 Lochmanová A. 1P-13
 Lošťáková H. 11L-08
 Ludvík J. 1P-05, 1S-10
 Lukáč M. 6P-08
 Lukačovičová Z. 2L-12
 Lupínková S. 5P-03
 Luxová J. 2P-09

 Macák J. M. PL-03
 Macíčková Cahová H. 6L-03
 Macka M. 1L-01
 Macko J. 5L-11
 Magdolen P. 6P-01
 Machata M. 2L-06
 Malá A. 5L-13
 Maliarová M. 1P-18
 Malina T. 5L-13
 Malinová L. 7L-10
 Málková E. 4L-09
 Marek A. 4L-10
 Marek L. 1P-06, 1P-16
 Mareš K. V. 4L-12
 Marešová D. 4L-02
 Marešová L. 4L-07
 Marková Z. 5L-13
 Markušová-Bučková L. 5L-10
 Maršálek R. 1P-03
 Martinec P. 9P-01
 Martiník O. 9L-10
 Martinková P. 1L-21
 Marx R. 2L-06
 Mastihuba V. 1P-07
 Mastihubová M. 1P-07
 Mastný L. 2P-08, 5P-09
 Matějka P. 1S-08
 Matějovský L. 1P-01
 Mátel Ľ. 4L-03, 4L-15, 10L-01
 Matoušek T. 1P-17
 Matulková I. 2L-09, 2L-10
 Matyašovský J. 7P-01, 7P-02, 7P-03, 7P-05

- Mazur M. 1P-12
 Medříková Z. 5L-06
 Medvecký L. 5L-10
 Meinhardt U. 6L-01
 Meloun M. 10L-02, 10L-06, 10L-07,
 10L-08, 10L-10
 Menšík L. 10L-02
 Metelka R. 1S-09
 Mičolová P. 4L-09
 Míčušík M. 7L-03, 7L-08
 Michels A. 1P-15
 Mikláš R. 2P-05
 Miklášová N. 2P-05, 6P-09
 Minaříková H. 7L-05
 Mittnerová A. 3L-02
 Míza J. 4L-01, 4P-11
 Mlynáriková J. 2P-14
 Mojovic M. 1L-12
 Moncof J. 2P-07, 2P-10
 Mosinger J. 5P-04
 Můčka V. 4L-06, 4P-04, 4P-05
 Můdra E. 5L-07
 Mucha J. 1S-01
 Mucha M. 2P-04
 Mušálek R. 5P-09
 Mužáková V. 10L-07

 Navrátil T. 1L-07
 Nečas M. 2L-14
 Nemeč I. 2L-06, 2L-09, 2L-10, 6P-10
 Němec M. 4L-11, 4L-16, 4L-17
 Němeček M. 8P-03
 Netriová Z. 2P-15
 Neužilová B. 4P-04
 Nevyhoštěný S. 5L-04
 Níkl M. 4P-08
 Nodilo M. 10L-01
 Nógellová Z. 7P-03, 7P-04
 Novák D. 1L-12
 Novák I. 7L-08, 7P-01, 7P-02, 7P-03,
 7P-05
 Novák M. 2L-04
 Novák M. 3L-03
 Novák P. 1S-04
 Novotný L. 1P-14
 Nykl P. 4L-09

 Oborná J. 5P-13
 Omastová M. 5L-03, 7L-03, 7L-04
 Ondrák L. 4P-05
 Ondřejkovičová I. 2L-12
 Orendáč M. 5P-08
 Oriňák A. 5L-07, 5L-10, 5L-11, 5L-14
 Oriňáková R. 5L-07, 5L-10, 5L-11,
 5L-14
 Orságová Králová Z. 5L-07
 Otyepka M. 5P-12

 Pakanová Z. 1S-01
 Panáček A. 5L-08, 5L-09, 5P-05, 5P-10
 Papoušek R. 1P-02

 Parchaňský V. 1S-08
 Parschová H. 4P-02, 8P-02, 8P-03
 Pařík P. 3L-06
 Pata V. 10L-09
 Patrova A. 7L-02
 Pauk V. 1S-03
 Pavicevic A. 1L-12
 Pavlík J. 2P-02, 2P-07
 Pechová I. 6P-08
 Pekárek T. 10L-04, 10L-08
 Pelczar B. 5P-01
 Pelikánová I. T. 4P-08
 Peňa- Méndez E. M. 1S-07
 Petala E. 5P-13
 Petercová S. 4L-15
 Petr J. 1L-14, 1L-17, 1P-02
 Petruš O. 5L-07
 Petry-Podgórska I. 1P-17
 Piechocka J. 1L-15
 Piechocki K. 7P-06
 Pihíková D. 1S-01
 Pilařová L. 10L-08
 Pilnáček K. 7L-07
 Pitschmann V. 1P-01
 Pivodová V. 5P-05
 Pižl M. 2L-02
 Pocklanová R. 5P-10
 Podlesný J. 6P-05
 Poláková K. 5L-13
 Pompach P. 1S-04
 Popová V. 3L-02
 Popovich K. 4P-08
 Porschová H. 8P-02
 Pospěchová J. 4L-04
 Potocká E. 1P-07
 Prachár J. 7L-08, 7P-01, 7P-02, 7P-03
 Prášilová J. 3L-05
 Pražský M. 4P-07
 Prochazka M. 7L-04
 Procházka V. 1P-02
 Procházková L. 4P-08
 Prokeš L. 1P-08
 Prucek R. 5L-08, 5P-05, 5P-10
 Puchoňová M. 2P-02, 2P-07, 2P-10
 Pujol C. A. 6P-04
 Puterová-Tokárová Z. 2P-11
 Pytela O. 6L-04

 Rábara L. 4P-07
 Ráciová K. 2P-12
 Radoňák J. 5L-14
 Radoťinský D. 7L-07
 Rajnák C. 2L-03
 Rakhmatullin A. 2P-15
 Ráliš J. 4L-07
 Ramešová Š. 1L-05
 Ranc V. 5L-06
 Rančák J. 11L-09
 Randová A. 7L-07
 Raus V. 7L-09
 Remenec B. 4L-03

 Rišiaňová L. 6P-09
 Rosendorf T. 4L-14
 Růžičková Z. 2L-04, 2L-08

 Řezanka P. 1P-06
 Řezanková K. 1P-06
 Řezníčková A. 5P-03, 5P-07, 5P-08
 Řičica T. 2L-08

 Sakmár M. 4L-09
 Salvado V. 1P-08
 Sedlářová B. 4L-02
 Sedničková M. 7P-04
 Seifert D. 4L-07
 Setnička V. 1L-11, 1S-05
 Shánělová J. 9L-06
 Shevtsova T. 1L-06
 Shishkanova T. V. 1P-06, 1P-16
 Siegllová I. 4L-07
 Skácelová P. 5P-13
 Skalová Š. 1L-07
 Skopalík J. 5L-13
 Slavík R. 1P-04
 Slepíčka P. 5P-07
 Slovák V. 9L-03, 9L-04, 9L-08
 Smékal Z. 2P-03
 Smékalová M. 5L-08
 Smetana B. 9L-10
 Smetana V. 1P-06, 1P-16
 Smoradová I. 5L-14
 Smrčková P. 1L-09
 Sokol J. 1P-18
 Sokolová R. 1L-05
 Souček I. 11L-10
 Soukupová J. 5P-11
 Soukupová L. 6L-06
 Stavrinou P. N. 7L-04
 Stingelin N. 7L-04
 Strachotová D. 11L-11
 Straka M. 4P-10
 Strašák T. 6L-02
 Strišovská J. 4P-03
 Sulová Z. 1P-05
 Světlík I. 4L-11
 Svoboda J. 7L-01
 Svoboda M. 1P-15
 Sýkora V. 5P-09
 Synytsya A. 1L-06
 Sysel P. 7L-02
 Szatmáry L. 4L-04, 4P-01, 4P-10
 Szymkiewicz A. 5P-02

 Šafránková M. 10L-03
 Šanda M. 1S-04
 Šandrik R. 6P-07
 Šárka E. 1L-09
 Šebesta F. 4L-12
 Šebestová A. 1L-17
 Šefců R. 4P-11
 Šelešovská R. 1L-21
 Šesták J. 9L-01, 9P-01

- Šestáková I. 1L-07
Ševčík J. 1L-14
Šídová T. 10L-03, 10L-05
Šiffalovič P. 5L-03
Šimko F. 2P-15
Šimon P. 9L-07
Šindelářová V. 1P-15
Široká S. 4L-10
Šmejkalová P. 3L-02
Špendlíková I. 4L-11
Špitálský Z. 5L-03
Štefelová J. 9L-08
Štenclová P. 7L-01
Štěpánek P. PL-06
Štěpánková M. 1L-21
Štěpnička P. 2L-13
Šubrt J. 4L-04
Šulc J. 2P-08
Šulcová P. 9L-09, 9L-11
Švorc E. 1L-20, 7L-03
Švorčík V. 5P-03, 5P-07, 5P-08
Švorec J. 2P-02
- Tarábek J. 1L-05
Tatarkovič M. 1S-05
Tisovský P. 6P-06, 6P-07
Tkáč J. 1S-01
Tomanová K. 4P-12
Tomková K. 10L-11
Topolčan O. 1S-04
Trávníček Z. 2L-06, 2L-11
- Trnková L. 1L-02, 1L-10
Trpkošová D. 4L-13
Tůma P. 1L-13
Turjan J. 6P-04
Tydlitát J. 6P-03
- Ulrichová J. 5P-05
Urban J. 1S-09
Urbanová I. 10L-03, 10L-05
Urbanová V. 5P-12
Urbanovský P. 2L-07
- Vacek J. 1L-12
Vaculovič T. 10L-11
Valentin M. 7L-04, 7L-08
Valentová J. 1L-03, 2P-01, 6P-09
Valigura D. 2P-02, 2P-07, 2P-10
Van Slageren J. 2L-06
Vaňhara P. 1P-08, 1S-07
Vavra M. 2P-12
Vavřínek J. 1L-11
Večeřová R. 5L-08
Venclová N. 10L-11
Veselá P. 9L-04, 9L-05
Vetchý D. 1P-01
Veverková L. 1L-08, 1P-04
Vilémová M. 5P-09
Vitásková A. 5P-06
Vítková K. 1L-14, 1P-02
Vlčková V. 11L-08
Vlk M. 4L-09, 4P-08
- Vohlídal J. 7L-01
Vokál A. 4L-13
Vopálka D. 4P-09
Vopička O. 7L-07
Votruba J. 1S-05
Votta I. 7L-04
Vranovičová B. 2P-13
Vyhnálková R. 5P-11
Vyskočil V. 1L-07
Vyskočilová E. 6P-11
Vysloužil J. 1P-01
Vyšín L. 4P-12
Vyšohlíd J. 7L-02
- Wilk J. 5P-02
- Zábranský M. 2L-13
Zachař P. 3L-01
Záliš S. 2L-02
Zatloukalová M. 1L-12
Zaťovičová M. 5L-03
Zavadilová A. 4P-06
Zbořil R. 5L-06, 5L-08, 5L-13, 5P-11,
5P-12, 5P-13
Zdeňková K. 3L-02
Zelenka T. 1L-22
Zeman J. 1P-01
Zlá S. 9L-10
- Žigo O. 7P-01, 7P-02, 7P-03