

# 71. ZJAZD CHEMIKOV

## Zborník abstraktov



Technický redaktor: RNDr. Michal Procházka, PhD.

Recenzenti:

doc. Ing. Lubomír Švorc, PhD.  
prof. Ing. Peter Šimon, DrSc.  
Ing. Mária Omastová, DrSc.  
doc. Ing. Ján Moncol', PhD.  
prof. Ing. Viktor Milata, DrSc.  
Mgr. Martin Danko, PhD.  
doc. RNDr. Jozef Kuruc, CSc.  
doc. Ing. Ján Reguli, CSc.  
prof. Ing. Štefan Schmidt, PhD.  
prof. Ing. Ján Híveš, PhD.  
Ing. Theodor Petřík, CSc.

Zborník abstraktov vychádza ako špeciálne číslo časopisu ChemZi 15/1 (2019) formou elektronickej verzie v náklade 320 kusov na USB kľúčoch, prevažne distribuovaných účastníkom 71. Zjazdu chemikov.

Zborník je taktiež dostupný online na adrese [71zjazd.schems.sk/Zborník\\_Abstraktov.pdf](http://71zjazd.schems.sk/Zborník_Abstraktov.pdf)

Vydala: Slovenská chemická spoločnosť, Bratislava 2019, Počet strán: 196

# 71. ZJAZD CHEMIKOV

9. – 13. september 2019  
Vysoké Tatry, Horný Smokovec

## HLAVNÝ ORGANIZÁTOR

Slovenská chemická spoločnosť a Česká společnost chemická



v spolupráci s

Európskou chemickou spoločnosťou (EuChemS)

a

Medzinárodnou úniou pre čistú a aplikovanú chémiu (IUPAC)



## ORGANIZAČNÝ VÝBOR 71. ZJAZDU

Predsedníčka: **Mária Omastová**

Predseda: **Viktor Milata**

Vedeckí tajomníci: **Peter Šimon, Jan John**

Hospodárka: **Michaela Halinkovičová**

Výkonná tajomníčka: **Simona Procházková**

Technický tajomník: **Michal Procházka**

**PROGRAMOVÝ VÝBOR**

doc. RNDr. Milan Drábik, PhD.	Slovenská chemická spoločnosť
RNDr. Dalma Gyepesová, CSc.	Slovenská chemická spoločnosť
Ing. Roman Karlubík, MBA	Zväz chemického a farmaceutického priemyslu
prof. Ing. Ivan Hudec, PhD.	Slovenská spoločnosť priemyselnej chémie
Ing. Vladimír Mastihuba, PhD.	Slovenská chemická spoločnosť
Dr.h.c. prof. Ing. Karol Florián, DrSc.	Slovenská chemická spoločnosť
prof. Ing. Ján Labuda, DrSc.	Slovenská technická univerzita v Bratislave
doc. Ing. Ján Moncol, PhD.	Slovenská technická univerzita v Bratislave
prof. Ing. Ján Híveš, PhD.	Slovenská technická univerzita v Bratislave
Ing. Michal Korenko, PhD.	Slovenská akadémia vied v Bratislave
Mgr. Martin Danko, PhD.	Slovenská akadémia vied v Bratislave
doc. RNDr. Andrej Boháč, CSc.	Univerzita Komenského v Bratislave
doc. Ing. Milan Vrška, CSc.	Slovenská technická univerzita v Bratislave
prof. RNDr. Milan Hutta, CSc.	Univerzita Komenského v Bratislave
RNDr. Robert Góra, PhD.	Univerzita Komenského v Bratislave
doc. RNDr. Jozef Kuruc, PhD.	Univerzita Komenského v Bratislave
doc. Mgr. Radoslav Šebesta, PhD.	Univerzita Komenského v Bratislave
prof. Ing. Štefan Schmidt, PhD.	Slovenská technická univerzita v Bratislave
doc. Ing. Ľubomír Švorc, PhD.	Slovenská technická univerzita v Bratislave
doc. Ing. Tomáš Mackuľák, PhD.	Slovenská technická univerzita v Bratislave
doc. Ing. Milena Reháková, PhD.	Slovenská technická univerzita v Bratislave
Ing. Ján Hirsch, DrSc.	Slovenská akadémia vied v Bratislave
doc. RNDr. Martin Putala, PhD.	Univerzita Komenského v Bratislave
doc. RNDr. Zuzana Vargová, PhD.	Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach
doc. RNDr. Katarína Reiffová, CSc.	Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach
prof. RNDr. Renáta Oriňáková, CSc.	Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach
prof. RNDr. Nadežda Številová, PhD.	Technická univerzita v Košiciach
RNDr. Slávka Hamul'áková, PhD.	Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach
doc. RNDr. Mária Ganajová, CSc.	Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach
doc. RNDr. Magdaléna Bálintová, PhD.	Technická univerzita v Košiciach
doc. RNDr. Miroslav Medved', PhD.	Univerzita Mateja Bela v Banskej Bystrici
Ing. Elena Kulichová	Slovenská chemická spoločnosť
RNDr. Beáta Vranovičová, PhD.	Univerzita sv. Cyrila a Metóda v Trnave

**PROGRAM 71. ZJAZDU CHEMIKOV****Pondelok 9. 9. 2019**

- 14:00 – 18:30 Príchod účastníkov a registrácia, recepcia Grand hotela Bellevue  
 19:00 – 22:00 Uvítací večierok sponzorovaný firmou PRAGOLAB

**Utorok 10. 9. 2019**

- 09:30 – 10:00 Slávnostné otvorenie zjazdu, príhovory predstaviteľov chemických spoločností, funkcionárov SAV a univerzít s chemickým profilom  
 10:00 – 11:00 Plenárna prednáška – Prof. Dr. B. L. Feringa, nositeľ Nobelovej ceny za chémiu 2016  
 11:00 – 11:30 Príhovory partnerov a sponzorov  
 11:30 – 11:45 Pozvánka na 72. zjazd chemikov  
 12:00 – 14:00 Obed  
 14:00 – 14:45 Pozvaná prednáška PP1 Miroslav Fojta  
 14:45 – 15:30 Pozvaná prednáška PP2 Andrea Straková Fedorková  
 16:00 – 18:30 Prednášky v sekciách  
 Sekcia 3 Nanomateriálová chémia  
 Sekcia 5 Organická chémia  
 Sekcia 9 Životné prostredie, potravinárstvo a biotechnológie  
 Sekcia 10 Chemprogress - chemické technológie  
 18:30 – 20:00 Večera  
 20:00 – 23:00 Posterové prezentácie, vínný večer  
 20:30 Seminár IYPT 2019 a 90. výročie SCHS

**Streda 11. 9. 2019**

- 08:30 – 09:15 Pozvaná prednáška PP3 Ján Reguli  
 09:15 – 10:00 Pozvaná prednáška PP4 Zuzana Ciesarová  
 10:30 – 11:15 Pozvaná prednáška PP5 Ján Labuda  
 11:15 – 12:00 Pozvaná prednáška PP6 Dušan Velič  
 12:00 – 13:30 Obed  
 13:30 – 14:30 Prezentácie sponzorov: Pragolab, Lachner, Optic Instrument  
 14:30 – 14:30 Seminár k novej definícii Mólu  
 14:30 – 18:30 Prednášky v sekciách  
 Sekcia 1 Analytická chémia  
 Sekcia 4 Anorganická a materiálová chémia  
 Sekcia 5 Organická chémia  
 Sekcia 6 Polyméry  
 18:30 – 20:00 Večera  
 20:00 – 23:00 Posterové prezentácie, pívny večer  
 20:30 Seminár mladých chemikov (EYCN)

**Štvrtok 12. 9. 2019**

- 08:30 – 12:00 Prednášky v sekciách  
 Sekcia 2 Fyzikálna chémia  
 Sekcia 7 Jadrová chémia  
 Sekcia 8 Vyučovanie a história chémie  
 Sekcia 9 Životné prostredie, potravinárstvo a biotechnológie  
 Sekcia 10 Chemprogress - chemické technológie
- 08:30 – 12:00 Súťaž o cenu Shimadzu
- 12:00 – 14:00 Obed, hotel Grand Bellevue
- 19:00 – 24:00 Slávnostný večierok s vyhodnotením súťaže o Cenu Shimadzu, posterových súťaží,

**Piatok 13. 9. 2019**

- 09:30 – 10:15 Prednáška PP7 Miroslav Kríž
- 10:45 – 11:30 Diskusia o stave vysokého školstva na Slovensku
- 11:30 – 12:00 Záver zjazdu
- 12:00 – 14:00 Obed

## SEKCIE ZJAZDU A GARANTI

**1. Analytická chémia**

doc. Ing. Ľubomír Švorc, PhD.

**2. Fyzikálna chémia**

prof. Ing. Peter Šimon, DrSc.

**3. Nanomateriálová chémia**

Ing. Mária Omastová, DrSc.

**4. Anorganická a materiálová chémia**

doc. Ing. Ján Moncol', PhD.

**5. Organická chémia**

prof. Ing. Viktor Milata, DrSc.

**6. Polyméry**

Mgr. Martin Danko, PhD.

**7. Jadrová chémia**

doc. RNDr. Jozef Kuruc, CSc.

**8. Vyučovanie a história chémie**

doc. Ing. Ján Reguli, CSc.

**9. Životné prostredie, potravinárstvo a biotechnológie**

prof. Ing. Štefan Schmidt, PhD.

**10. Chemprogress – chemické technológie**

prof. Ing. Ján Híveš, PhD.

**Garant súťaže posterov**

prof. Ing. Peter Šimon, DrSc.

## OBSAH

### ZOZNAM PREDNÁŠOK A POSTEROV PODĽA SEKCIÍ

<b>Plenárna prednáška .....</b>	<b>59</b>
"DYNAMIC MOLECULAR SYSTEMS" - FROM SWITCHES TO MOTORS <u>Bernard Lucas Feringa</u> .....	59
<b>Pozvané prednášky.....</b>	<b>59</b>
PP1 RTUŤOVÉ ELEKTRODY A JEJICH MÍSTO V SOUČASNÉM VÝZKUMU BIOMOLEKUL <u>Miroslav Fojta</u> .....	59
PP2 OD SÍRY K PROTOTYPU - NOVÝ TYP KONVERZNÝCH ELEKTRODOVÝCH MATERIÁLOV PRE LI-S BATÉRIE <u>Andrea Straková Fedorková, Dominika Capková, Renáta Oriňaková, Tomáš Kazda, Elena Shembel, Pedro Gomez-Romero</u> .....	59
PP3 CHEMICKÁ GRAMOTNOSŤ ALEBO ČO POTREBUJEME VEDIEŤ Z CHÉMIE <u>Ján Reguli</u> .....	60
PP4 POTRAVINY BEZ AKRYLAMIDU: TEÓRIA A PRAX <u>Zuzana Ciesarová</u> .....	60
PP5 ZELENÁ ANALYTICKÁ CHÉMIA <u>Ján Labuda</u> .....	61
PP6 ULTRARÝCHLA LASEROVÁ SPEKTROSKOPIA: OD ČASOVÉHO ROZLIŠENIA PO ADAPTÍVNE RIADENIE <u>Dušan Velič</u> .....	61
PP7 OD PRÍRODNÝCH DROG K SYNTETICKÝM, ŠTRUKTÚRA, VLASTNOSTI A SYNTÉZA <u>Miroslav Kríž</u> .....	62
<b>Prednášky sponzorov .....</b>	<b>63</b>
MIKROPLASTY V OCEÁNOCH AJ PIVE <u>Mariana Danková</u> .....	63
PREZENTÁCIA FIRMY LACHNER <u>Eva Cengelová</u> .....	63
NOVÉ TRENDY A INOVACE V OBLASTI MOLEKULOVÉ VIBRAČNÍ SPEKTROMETRIE <u>David Matoušek, Jan Neuman, Jozef Priboj</u> .....	64
<b>Prednášky - Sekcia 1: Analytická chémia .....</b>	<b>65</b>
1P01 POKROČILÉ ELEKTROCHEMICKÉ SENZORY NA RÝCHLU A SPOLEHLIVÚ ANALÝZU ČOKOLÁDOVÝCH VÝROBKOV <u>Ľubomír Švorc, Olha Sarakhman, Marek Haššo</u> .....	65
1P02 POKROKY VO VÝVOJI MIKROEXTRAKČNÝCH TECHNÍK PRI SLEDOVANÍ VYBRANÝCH XENOBIOTÍK <u>Svetlana Hrouzková, Agneša Szarka, Silvia Zichová, Adriana Brisudová, Kristína Búčiková, Nikola Kubasová</u> .....	65
1P03 STUDIUM ELEKTROCHEMICKÉHO CHOVÁNÍ AZOBARVIVA SUDAN I JAKO MARKEROVÉHO SUBSTRÁTU PRO SLEDOVÁNÍ HYDROXYLAČNÍCH REAKCÍ KATALYZOVANÝCH CYTOCHROMY P450 <u>Karolína Schwarzová, Anna Ondráčková, Marie Stiborová, Miroslav Fojta</u> .....	66
1P04 VOLTAMETRICKÁ ANALÝZA PROTIZÁNĚTLIVÝCH LÉČIV ZE SKUPINY OXICAMŮ <u>Renáta Šelešovská, Frederika Hlobeňová, Martina Mandincová</u> .....	66
1P05 HPLC-MS/MS - A VERY POWERFUL TOOL FOR THERAPEUTIC DRUG MONITORING OF ANTIBIOTICS SUCH AS PIPERACILLIN/TAZOBACTAM AND MEROPENEM <u>Dušan Krnáč, Katarína Reiffová</u> .....	67
1P06 CHARAKTERIZACE NOVÉHO TYPU SORBENTŮ PRO KAPALINOVOU CHROMATOGRÁFII <u>David Sýkora, Pavel Řezanka, Kamil Záruba, Ameneh Tatar</u> .....	68



1P07 CHROMATOGRAPHIC DETERMINATION OF PRODUCTS FROM THE AGED FIBROUS CELLULOSIC MATERIALS <u>Katarína Hroboňová, Katarína Vizárová, Michal Jablonský, Radovan Tiňo, Milan Králik</u> .....	68
1P08 FIRST VOLTAMMETRIC PROTOCOL FOR SENSITIVE AND SELECTIVE QUANTIFICATION OF NON-OPIOID ANALGESIC NEFOPAM <u>Olha Sarakhman, Ľubomír Švorc</u> .....	68
1P09 EFFECT OF THE PROTEINS COMPOSITION ON THEIR ELECTROCHEMICAL RESPONSE <u>Eva Melníková, Nasim Izadi, Miroslav Gál, Veronika Ostatná</u> .....	69
1P10 VOLTAMPÉROMETRICKÉ STANOVENIE ANTIMÓMU V PRÍRODNEJ VODE POMOCOU KATODICKY PREDUPRAVENEJ MIKROKRYŠTALICKEJ ELEKTRODY Z DIAMANTU DOPOVANÉHO BÓROM <u>Eva Culková, Zuzana Lukáčová-Chomisteková, Renata Bellová, Danica Melicherčíková, Jaroslav Durdiak, Miroslav Rievaj, Peter Tomčík</u> .....	69
1P11 NEENZYMATICÁ DETEKCIA GLUKÓZY NA ZLATÝCH MIKROELEKTRODACH <u>Jana Hovancová, Ivana Šišoláková, Renáta Oriňaková, Ivan Shepa, Marek Vojtko, Andrej Oriňak</u> .....	70
1P12 PHEOLIC ACIDS IN PROTECTED WINES FROM MALOKARPATSKY REGION IN SLOVAKIA <u>Jarmila Švancarová Laštincová</u> .....	70
1P13 LUMINESCENCE DETECTION IN FLOW ANALYSIS <u>Petr Solich, Hana Sklenářová, Petr Chochoľouš</u> .....	71
<b>Prednášky - Sekcia 2: Fyzikálna chémia</b> .....	<b>72</b>
2P01 ROZLOŽITELNÉ ŽELEZNÉ BIOMATERIÁLY S POLYMÉRNÝM POVLAKOM <u>Renáta Oriňaková, Radka Gorejová, Zuzana Orsagová Kráľová, Andrej Oriňak, Miriam Kupková, Monika Hrubovčáková</u> .....	72
2P02 ZNO/CU NANOROZMERNÉ KATALYZÁTORY V TERMOCHEMICKÉJ PREMENE CO <sub>2</sub> NA UŽITOČNÉ CHEMIKÁLIE <u>Natália Podrojková, Andrej Oriňak, Renáta Oriňaková</u> .....	72
2P03 SYNTÉZA PD-NIFE <sub>2</sub> O <sub>4</sub> /SIO <sub>2</sub> KATALYZÁTORA PRE TERMÁLNY ROZKLAD METÁNU NA VODÍK <u>Katarína Sisáková, Andrej Oriňak, Renáta Oriňaková</u> .....	73
2P04 SPEKTROSKOPICKÉ ŠTÚDIUM KOPOLYMÉRU P33 S PCBM PRE FOTOVOLTICKÉ APLIKÁCIE <u>Lenka Pribusová Slušná, Ľudovít Haizer, Monika Jerigová, Dmitrij Bondarev, Vojtech Szocs, Milan Držík, Daniel Repovský, Dušan Lorenc, Dušan Velič</u> .....	74
2P05 TOPOGRAFIA POVRCHU PEROVSKITU POMOCOU ATÓMOVEJ SILOVEJ MIKROSKOPIE <u>Jakub Michalík, Dušan Velič, Daniel Repovský, Lenka Pribusová Slušná</u> .....	74
2P06 INTRAMOLEKULOVÝ PRENOS PROTÓNU V EXCITOVANOM STAVE: MOŽNOSTI TEORETICKÉHO ŠTÚDIA <u>Šimon Budzák, Denis Jacquemin</u> .....	75
2P07 SPEKTROELEKTROCHEMICKÁ STUDIE REDOXNÍCH VLASTNOSTÍ KONJUGÁTŮ PYRENU A CYKLOBUTENU <u>Lucie Koláčná, Peter Polák, Jiří Klíma, Tomáš Tobrman, Jiří Ludvík</u> .....	75
2P08 ANALYSIS OF SUPERHYPERFINE SPLITTING IN EPR SPECTRA OF COPPER COMPLEXES <u>Karina Strečanská, Milan Mazúr</u> .....	76
<b>Prednášky - Sekcia 3: Nanomateriálová chémia</b> .....	<b>77</b>
3P01 NANOČÁSTICE PRO FOTODYNAMICKOU INAKTIVACI PATOGENŮ <u>Petr Henke, Pavel Kubát, Jiří Mosinger</u> .....	77
3P02 2D PLATFORMY PRE CIELENÚ DETEKCIU RAKOVINY <u>Nikola Bugárová, Michal Bodík, Peter Šiffalovič, Matej Mičušík, Zdeno Špitálsky, Vlasta Závišová, Martina Koneracká, Miriam Zaťovičová, Silvia Pastoreková, Mária Omastová</u> .....	77
3P03 JSOU DICHALKOGENIDY PŘECHODNÝCH KOVŮ NA VZDUCHU STABILNÍ? <u>Jana Martincová, Petr Lazar, Michal Otyepka</u> .....	78

3P04 MXENE-BASED POLYMERIC COMPOSITES <u>Mária Omastová</u> , Michal Procházka, Matej Mičušík, Simona Procházková, Andrii Misiura, Oleksiy Gogotsi, Daiva Zeleniakienė, Andrey Aniskevich .....	78
3P05 PLAZMOU REDUKOVANÉ GRAFÉN OXIDOVÉ ELEKTRODY PRE HYBRIDNÚ FOTOVOLTIKU A BIOSENZORIKU <u>Pavol Gemeiner</u> , Tomáš Homola, Lenka Lorencová, Lucia Parráková, Michaela Pavličková, Ján Tkáč, Milan Mikula.....	79
3P06 PLASMA TREATMENT OF COMPOSITE PRECERAMIC NANO/MICROFIBERS <u>I. Shepa</u> , E. Mudra, D. Pavlinak, M. Vojtko, V. Antal, M. Stupavska, J. Kelar, J. Dusza.....	79
3P07 ANTIBAKTERIÁLNI VLASTNOSTI NANOČÁSTIC STRĚBRA <u>Šárka Hradilová</u> , Aleš Panáček.....	80
3P08 ANORGANICKO-ORGANICKÉ NANOKOMPOZITNÉ VRSTVY NA SKLE <u>Alfonz Pliško</u> , Marianna Čierniková, Jana Pagáčová, Iveta Papučová, Katarína Faturíková, Petr Exnar .....	80
3P09 NANOSTRUCTURE COMPOSITION MODULATION FOR EFFICIENT ELECTROCATALYSIS <u>Peter Kasák</u> .....	80
<b>Prednášky - Sekcia 4: Anorganická a materiálová chémia .....</b>	<b>82</b>
4P01 UNUSUAL PHASE TRANSFORMATIONS IN TERNARY FLUORIDE SYSTEMS <u>Miroslav Boča</u> , Michal Šimurda, Peter Švec, Peter Švec Jr., Dušan Janičkovič, Adriana Czimerová, Blanka Kubíková, Zuzana Netriová, Jarmila Mlynáriková.....	82
4P02 DIFFERENT PHOTOINDUCED EFFECTS IN HEAVY METAL OXIDE GLASS <u>Jan Smolík</u> , Jirí Schwarz, Petr Kutálek, Petr Knotek, Jakub Staněk, Eva Černošková .....	82
4P03 PREPARATION OF SMALL CERAMIC OBJECTS BY FUSED FILAMENT FABRICATION <u>Zora Hajdúchová</u> , Peter Veteška, Jozef Feranc, Katarína Tomanová, Roderik Plavec, Leona Omaníková, Ľuboš Bača, Marián Janek.....	83
4P04 POROZITA VLHKÝCH MATERIÁLŮ POMOCÍ 1H-NMR RELAXOMETRIE <u>Václav Slovák</u> , Eva Kinnertová, Tomáš Zelenka .....	83
4P05 INORGANIC ENAMELS FOR CORROSION PROTECTION OF DEPLETED URANIUM <u>Volodymyr Lobaz</u> , Magdalena Konefał, Martin Hrubý, Jirí Pánek, Tomáš Chmela, Pavel Krupička .....	84
4P06 EXPERIMENTAL ELECTRONIC STRUCTURE AND CHEMICAL BONDING <u>Jozef Kožíšek</u> .....	84
4P07 POLYDENTÁTNE SCHIFFOVE ZÁSADY NA BÁZE 2-PYRIDÍN-KARBOXALDEHYD N-OXIDU A ICH KOMPLEXY S PRECHODNÝMI KOVMÍ <u>Peter Baran</u> .....	85
4P08 MAGNETIC BISTABILITY IN MOLECULAR SYSTEMS <u>Ivan Šalitroš</u> .....	85
4P09 INHIBIČNÝ EFEKT KOMPLEXOV STRIEBRA NA RAST VYBRANÝCH MIROORGANIZMOV AKO AJ RAKOVINOVÝCH BUNKOVÝCH LÍNÍ <u>Zuzana Vargová</u> , Michaela Rendošová, Gabriela Kuzderová, Miroslav Almáši, Danica Sabolová, Mária Vilková, Róbert Gyepes, Daniela Hudecová, Petra Olejníková, Martin Kello, Dagmar Mudroňová.....	86
4P10 CYTOTOXICKÁ AKTIVITA KOMPLEXOV PD(II) S HALOGÉNDERIVÁTMI 8-HYDROXYCHINOLÍNU A DIMETYLAMÍNOM <u>Andrea Lükóová</u> , Ivan Potočný, Erika Samol'ová, Juraj Kuchár, Mária Vilková, Vladislav Volarevič .....	87
4P11 STRUCTURALLY DIVERSE OF POLYMERIC MANGANESE(III) - SALPN AND MANGANESE(III) - SALPN COMPLEXES WITH BRIDGING FORMATE LIGAND <u>Ján Moncol'</u> , Martin Schoeller .....	87
<b>Prednášky - Sekcia 5: Organická chémia .....</b>	<b>88</b>
5P01 ASYMMETRIC ORGANOCATALYSIS UNDER SOLVENT-FREE CONDITIONS <u>Radovan Šebesta</u> .....	88
5P02 SYNTHESIS OF MULTI-FUNCTIONALIZED AMIDES USING TANDEM REACTIONS <u>Denisa Vargová</u> , Radovan Šebesta, Syuzanna R. Harutyunyan .....	88
5P03 JEDNODUCHÉ FLUOROVANÉ AZIDOALKANY <u>Svatava Voltrová</u> , Athanasios Markos, Zsófia E. Blastik, Petr Beier.....	89

5P04 RECYKLOVATELNÝ KATALYZÁTOR PRO SHARPLESSOVU EPOXIDACI ALLYLALKOHOLŮ <u>Miloš Sedlák</u> , Jan Bartáček, Jiří Váňa, Pavel Drabina.....	90
5P05 MONOLITICKÉ KOLONY, VHODNÉ JAKO KATALYZÁTORY ASYMETRICKÉ HENRYHO REAKCE V PRŮTOČNÝCH SYSTÉMECH <u>Jan Svoboda</u> , Martin Vrbický, Gabriela Nováková, Miloš Sedlák, Pavel Drabina .....	91
5P06 DEVELOPMENT OF ATROPISOMERIC ORGANOCATALYSTS FOR ASYMMETRIC HENRY REACTION <u>Jan Otevřel</u> , David Švestka, Pavel Bobál .....	91
5P07 VYUŽITÍ C–F VAZBY PRO ZNAČENÍ DEUTERIEM / TRITIEM <u>Břetislav Brož</u> , Aleš Marek .....	92
5P08 ALKENES AS PRO-NUCLEOPHILES IN COPPER CATALYSED ADDITIONS TO ALDIMINES <u>Ivana Némethová</u> , Denisa Vargová, Brigita Mudráková, Radovan Šebesta.....	93
5P09 LATE STAGE FLUOROALKYLATION OF THIOLS BY HYPERVALENT IODINE REAGENTS <u>Iveta Klimánková</u> , Martin Hubálek, Václav Matoušek, Petr Beier .....	94
5P10 <i>ORTHO</i> -FERROCENYLIMINOBORONIC ACID AS A MODEL OF A THERAPEUTIC AGENT FOR TWO-STEP DRUG-RELEASE <u>Karel Lacina</u> , Martin Konhefr, Zdenka Fohlerová .....	95
5P11 STEREOSELECTIVE SYNTHESIS DRIVEN BY CRYSTALLIZATION <u>Pavol Jakubec</u> , Oľga Karľubíková, Dušan Berkeš .....	95
5P12 TOTAL SYNTHESIS OF BERKELEYLACTONE A Branislav Ferko, Marián Zeman, Michele Formica, Sebastián Veselý, Jana Doháňošová, Ján Moncol, Petra Olejníková, Dušan Berkeš, Pavol Jakubec, Darren J. Dixon, <u>Oľga Caletková</u> .....	96
5P13 SYNTHESIS OF NOVEL BOLA-TYPE AMPHIPHILIC PEPTIDE DENDRIMERS AS NANOCARRIERS FOR DELIVERY OF SIRNA OR DRUGS <u>Maciej Cieślak</u> , Magdalena Stolarska, Zofia Urbanczyk-Lipkowska.....	97
5P14 NOVÁ METODA PŘÍPRAVY ANTIKOAGULANCIA RIVAROXABANU <u>Pavel Drabina</u> , Viola Feixová, Miloš Sedlák.....	97
5P15 TUFTSINOVÉ NOSIČE A JEJICH KONJUGÁTY S ANTITUBERKULOTIKY ODVOZENÝMI OD SALICYLOVÉ KYSELINY: SYNTÉZA A HODNOCENÍ <u>Martin Krátký</u> , Zsuzsa Baranyai, Lilla Horváth, Szilvia Bösze, Jarmila Vinšová.....	98
5P16 DIZAJN, SYNTÉZA, STABILITA A AKTIVITA NOVÝCH INHIBÍTOROV TRANZITNÉHO STAVU ĽUDSKÝCH GLYKOZYLTRANSFERÁZ A MYKOBAKTERIÁLNYCH GALAKTOFURANOZYLTRANSFERÁZ Jana Jakubčínová, Stanislav Kozmon, <u>Marek Baráth</u> .....	98
5P17 NOVÉ DONOR-AKCEPTOROVÉ ZLÚČENINY PRE SVETLOEMITUJÚCE DIÓDY <u>Róbert Balogh</u> , Anita Eckstein Andicsová, Martin Danko .....	99
5P18 STRUCTURE-PROPERTIES RELATIONSHIP OF OLIGOTHIENYL ACENES IN ORGANIC ELECTRONICS <u>Martin Putala</u> .....	100
<b>Prednášky - Sekcia 6: Polyméry .....</b>	<b>101</b>
6P01 VLIV MODIFIKACÍ GRAFEN OXIDU NA VZNIK KOMPLEXNÍCH STRUKTUR V TERMOSETECH <u>Ivan Kelnar</u> , Ludmila Kaprálková .....	101
6P02 FORCE-DISPLACEMENT RELATIONS AT COMPRESSION OF DNA MACROMOLECULES Tomáš Bleha, <u>Peter Cifra</u> .....	101
6P03 KOMPATIBILIZACE POLYMERNÍCH SMĚSÍ BLOKOVÝMI KOPOLYMERY <u>Josef Jůza</u> , Ivan Fortelný .....	102
6P04 POLYCARBONATE-BASED POLYURETHANE NANOCOMPOSITE FILMS <u>Milena Špírková</u> , Jiří Hodan, Sabina Krejčíková, Luďka Machová.....	102
6P05 SAMOUSPOŘÁDANÉ POLYMERNÍ SYSTÉMY CITLIVÉ NA VNĚJŠÍ PODNĚTY <u>Martin Hrubý</u> .....	103

6P06 CHELATUJÍCÍ POLYMERY PRO LÉČBU HEMOCHROMATÓZY <u>Ondřej Groborz</u> , Lenka Poláková, Pavel Švec, Kristýna Kolouchová, Jiří Trousil, Pavla Francová, Jan Kučka <sup>1</sup> , Jan Krijt, Petr Páral, Luděk Šefc, Martin Hrubý.....	103
6P07 POLYMERNÍ DIAGNOSTICKÉ A THERANOSTICKÉ KONTRASTNÍ LÁTKY PRO <sup>19</sup> F MRI <u>Kristýna Kolouchová</u> , Ondřej Sedláček, David Babuka, Ondřej Groborz, Pavel Švec, Daniel Jiráček, Martin Hrubý.....	104
6P08 INFLUENCING REACTIVE OXYGEN SPECIES CONTENT IN TUMOR CELLS BY SELF- ASEMBLED FLUORINATED SELENOCYSTINE NANOPARTICLES <u>Miroslav Vetrík</u> , Libor Kobera, Rafal Konefal, Volodymyr Lobaz, Martin Hruby, Guillem Prax ..... 104	104
6P09 VLIV STRUKTURY OXYAMINOVÉHO LINKERU NA ZESÍTĚNÍ HYALURONANU <u>Petra Šedová</u> , Lenka Kovářová, Radovan Buffa, Jiří Bednařík.....	105
6P10 ASPEKTY TESTOVÁNÍ POLYMERNÍCH SYSTÉMŮ <i>IN VIVO</i> , VE SPOLUPRÁCI S 1. LF UK (CAPI) <u>Jan Kučka</u> .....	105
6P11 MODULATION OF THERMO- AND ION RESPONSIVENESS, WATER STATE, MECHANICAL PROPERTIES AND CELL ADHESION OF SULFOBETAINE AND CARBOXYBETAINE COPOLYMERS AND HYDROGELS <u>Martin Danko</u> , Zuzana Kroneková, Miroslav Mrlík, Jozef Osička, Peter Kasák.....	105
<b>Prednášky - Sekcia 7: Jadrová chémia.....</b>	<b>107</b>
7P01 NOVÁ POTENCIÁLNÍ FLUORIDOVÁ MATRICE PRO STANOVENÍ <sup>236</sup> U PROSTŘEDNICTVÍM URYCHLOVAČOVÉ HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE <u>Tomáš Prášek</u> , Mojmír Němec, Peter Steier, Maki Honda, Karin Hain, Xiaohe Zhang.....	107
7P02 DIFÚZE CHLORIDU NA NÍZKOALKALICKÝCH CEMENTOVÝCH MATERIÁLECH: VLIV POVRCHOVÝCH A STRUKTURNÍCH VLASTNOSTÍ <u>Tomáš Rosendorf</u> , Petr Večerník, Radek Červinka, Dušan Vopálka.....	107
7P03 PŘÍPRAVA MODELOVÉ KOROZNÍ VRSTVY PRIMÁRNÍ SMYČKY REAKTORU VVER <u>Martin Kašpar</u> , Martin Strejc.....	108
<b>Prednášky - Sekcia 8: Vyučovanie a história chémie.....</b>	<b>109</b>
8P01 150 ROKOV OD OBJAVU PERIODICKÉHO ZÁKONA <u>Viktor Milata</u> .....	109
8P02 KHANOVA METODA – MOŽNOSTI VYUŽITÍ METODY „PŘEVŘÁCENÉ TŘÍDY“ VE VÝUCE CHEMIE <u>Jana Prášilová</u> .....	109
8P03 COOPERATION IN EDUCATION AND TRAINING IN NUCLEAR- AND RADIOCHEMISTRY IN EUROPE0 <u>M. Šácha</u> , J. John, M. Němec, P. Distler, C. Walther.....	110
8P04 PROJEKT SKVALITNENIA VÝUČBY ANORGANICKEJ CHÉMIE NA FAKULTE CHEMICKÉJ A POTRAVINÁRSKEJ TECHNOLÓGIE <u>Peter Segľa</u> , Vladimír Jorík, Ján Pavlík, Jozef Švorec, Miroslav Tatarko.....	110
8P05 REFLEXE BADATELSKÝCH AKTIVIT <u>Kateřina Trčková</u> .....	111
8P06 HISTÓRIA SKLÁRSKEHO PRIEMYSLU NA SLOVENSKU Ludovít Hallon, Štefan Škultéty, <u>Michal Uher</u> , Viktor Milata, Miroslav Sabol.....	111
8P07 NATURE - 150 ROKOV <u>Ján Čaplovič</u> .....	112
8P08 OD IZOTOPŮ K PROTEOMICE – STOLETÍ HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE <u>Pavel Zachař</u> , David Sýkora.....	112
<b>Prednášky - Sekcia 9: Životné prostredie, potravinárstvo a biotechnológie .....</b>	<b>113</b>
9P01 AKO SA ODSTRAŇUJÚ FARMACEUTIKÁ NA ČISTIARŇACH ODPADOVÝCH VÔD <u>Igor Bodík</u> , Petra Szabová, Michaela Plekancová, Tomáš Mackuľak.....	113

9P02 CHEMICAL ANALYSIS OF PLASTIC WASTE IN AND ALONG THE DANUBE RIVER Matej Mičušík, Jaroslav Kuliček, Angela Kleinová, <u>Michal Procházka</u> , Silvia Podhradská, Gudrun Obersteiner, Mária Omastová .....	113
9P03 ČIŠTĚNÍ PROCESNÍCH A ODPADNÍCH VOD Z VÝROBY VISKOZNÍCH VLÁKEN <u>Libor Dušek</u> , Petr Herink .....	114
9P04 TESTOVANIE ELEKTRODOVÝCH MATERIÁLOV PRE ODFARBENIE ODPADNÝCH VÔD <u>Gabriela Kuchtová</u> , Libor Dušek .....	114
9P05 ODSTRAŇOVÁNÍ LÉČIVA DIKLOFENAK Z VOD ADSORPCÍ NA SORBENTU BIOCHAR: VLIV IMPREGNACE SORBENTU POMOCÍ IONTOVÝCH KAPALIN <u>Barbora Kamenická</u> , Tomáš Weidlich .....	114
9P06 OD POLAROGRAFIE S OBNOVOVANOU RTUŤOVOU ELEKTRODOU K ELEKTROCHEMII S KOMPRESNĚ-EXPAZNÍMI/STACIONÁRNÍMI REŽIMY S ŘÍZENOU VELIKOSTÍ <u>Ladislav Novotný</u> .....	115
9P07 TESTOVÁNÍ POTENCIÁLU STŘÍBRNÉ AMALGÁMOVÉ ELEKTRODY JAKO INDIKÁTORU ZMĚN ZNEČIŠTĚNÍ <u>Aneta Karásková</u> , <u>Ladislav Novotný</u> .....	115
9P08 POUŽITIE KÔROVCOV Z ČELADE DAPHNIIDAE V AKÚTNOM EKOTOXIKOLOGICKOM TESTE <u>Miloš Lukáč</u> , Martin Pisárčik, Renáta Horáková, Ferdinand Devínsky .....	116
9P09 BIOAKTÍVNE LÁTKY Z ODPADOV POTRAVINÁRSKÝCH VÝROB <u>Stanislav Sekretár</u> , Zuzana Burčová, František Kreps, Štefan Schmidt .....	116
9P10 REGIOSELEKTÍVNE ACYLÁCIE KYSELINY KOJOVEJ Klaudia Karkeszová, Mária Mastihubová, <u>Vladimír Mastihuba</u> .....	117
9P11 PHOTOACOUSTICS BASED ON ICG AS A TOOL FOR NON-INVASIVE MONITORING OF BURIED FREE FLAPS IN VASCULARIZED LYMPH NODE TRANSFER Filip Jonas, Ondrej Mestak, <u>Karla Palma-Alejandro</u> , Petr Kesa, Ludek Sefc .....	117
9P12 HYDROSTIMULAČNÁ MODIFIKÁCIA OSIVA „AQUAHOLDER® SEED“ POMOCO SUPERABSORBČNÉHO POLYMÉRU <u>Marian Valentin</u> , Viktor Gelinger, Lukáš Petra .....	118
9P13 DEGRADÁCIA TOKOFEROLOV A VZNIK OXIDAČNÝCH PRODUKTOV TOKOFEROLOV V TEPELNE NAMÁHANÝCH RASTLINNÝCH OLEJOCH <u>Zuzana Burčová</u> , František Kreps, Mária Greifová, Štefan Schmidt, Stanislav Sekretár .....	118
9P14 ESTERY TOKOFEROLOV S MASTNÝMI KYSELINAMI <u>František Kreps</u> , Zuzana Burčová, Štefan Schmidt, Stanislav Sekretár .....	119
9P15 PALMOVÝ OLEJ – ÁNO ALEBO NIE? <u>Štefan Schmidt</u> , Zuzana Burčová, František Kreps, Stanislav Sekretár .....	119
<b>Prednášky - Sekcia 10: Chemprogress - chemické technológie .....</b>	<b>121</b>
10P01 PROGRES V ELEKTROLYTICKEJ VÝROBE HLINÍKA <u>Vladimír Danielík</u> .....	121
10P02 MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ JAKO NÁSTROJ K POCHOPENÍ DYNAMIKY PROUDĚNÍ V PLYNOVĚ DIFÚZNÍ VRSTVĚ PALIVOVÉHO ČLÁNKU Monika Draxselová, Roman Kodým, <u>Karel Bouzek</u> .....	121
10P03 MEMBRÁNOVÁ ALKALICKÁ ELEKTROLÝZA VODY: STANOVENÍ PROVOZNÍCH CHARAKTERISTIK TRÍČLÁNKOVÉHO SVAZKU <u>Karel Denk</u> , Jaromír Hnát, Jan Žitka, Martin Páidar, Karel Bouzek .....	122
10P04 PŘÍPRAVA A OPTIMALIZACE ANION SELEKTIVNÍ MEMBRÁNY MODIFIKOVANÉ KATALYTICKOU VRSTVOU PRO ALKALICKOU ELEKTROLÝZU VODY <u>Michaela Plevová</u> , J. Hnát, J. Žitka, M. Páidar, K. Bouzek .....	122
10P05 VLIV POUŽITÉ MEMBRÁNY NA VÝKON PALIVOVÉHO ČLÁNKU TYPU PEM <u>Jakub Malíš</u> , Veronika Marková, Martin Páidar, Karel Bouzek .....	123
10P06 ODSTRAŇOVANIE FARMACEUTÍK Z ODPADOVÝCH VÔD <u>Daniela Pavúková</u> , Lucia Fašková, Eva Králiková, Ján Híveš .....	123

10P07 ELEKTROCHEMICKÉ ZPRACOVÁNÍ VOD S VYSOKOU KONCENTRACÍ ORGANICKÝCH POLUTANTŮ <u>Adam Giurg</u> , Karel Denk, Maksim Gridchin, Martin Prokop, Martin Páidar .....	124
10P08 ODSTRAŇOVANIE TOLUÉNU Z ODPADOVÝCH VÔD: POROVNANIE TROCH METÓD <u>Lucia Fašková</u> , Daniela Pavúková, Peter Zelenka, Ján Híveš .....	124
10P09 EFFECT OF FERRATES ON MICROBIOLOGICAL POLLUTION OF WATER <u>Ján Híveš</u> , Emília Kubiňáková, Lucia Fašková, Daniela Pavúková .....	124
10P10 STUDIUM PŘEPRACOVÁNÍ HEPTAHYDRÁTU SÍRANU ŽELEZNATÉHO <u>Kateřina Bednářová</u> , Jan Videnský, Martin Zlámal, Ivona Sedlářová.....	125
10P11 BASIC INORGANIC COMPOUNDS AS COMPONENTS FOR DEACIDIFICATION AND PRESERVATION OF CELLULOSIC MATERIALS <u>Jana Jurišová</u> , Milan Králík, Vladimír Danielik, Katarína Vizárová, Michal Jablonský, Radovan Tiňo .....	125
10P12 MOŽNOSTI VYUŽITÍ REDUKCE V TECHNOLOGII ODSTRAŇOVÁNÍ KYSELÝCH BARVIV Z KONTAMINOVANÝCH VOD <u>Tomáš Weidlich</u> , Barbora Kamenická .....	126
10P13 ELECTROCHEMICAL PREPARATION OF AL-ZR ALLOYS <u>Emília Kubiňáková</u> , Ján Híveš, Kristína Debnárová .....	126
10P14 CHARAKTERIZACE VLIVU STRUKTURY STABILIZOVANÉHO ZRO <sub>2</sub> NA IONTOVOU VODIVOST: POROVNÁNÍ MONOKRYSTALICKÉHO A POLYKRYSTALICKÉHO ZRO <sub>2</sub> <u>Michal Carda</u> , Veronika Rečková, Martin Páidar, Karel Bouzek.....	127
10P15 STUDIUM KINETICKÝCH PARAMETRŮ A DEGRADAČNÍCH DĚJŮ VE VYSOKOTEPLNÍCH ČLÁNCÍCH S KERAMICKÝMI OXIDY Daniel Budáč .....	127
<b>Prednášky – Súťaž Shimadzu .....</b>	<b>128</b>
Sh01 NEOČAKÁVANÝ VZNIK PYRAZOLOAZEPÍNŮV Z 5-AMINOPYRAZOLOV PRI CLAUSON-KAASOVEJ REAKCII <u>Dušan Bortňák</u> , Daniel Végh, Jakub Šofranko, Michal Šoral, Viktor Milata .....	128
Sh02 ŠTUDIUM VLASTNOSTÍ A APLIKÁCIÍ NOVÉHO METALOPORFYRÍNOVÉHO PÓROVITÉHO POLYMÉRU <u>Nikolas Király</u> , Andrej Hovan, Anna Berkutová, Adriana Zeleňáková, Erik Čizmár, Vladimír Zeleňák, Miroslav Almáši, Gregor Banó, Robert Gyepes .....	128
Sh03 HYPOGLYCIN A: SKRYTÁ HROZBA PRO KONĚ ANALÝZA HYPOGLYCINU A V PRODUKTECH JAVORU KLENU METODOU DVOUDIMEZIONÁLNÍ PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE S HMOTNOSTNÍ DETEKČÍ <u>Petr Doležal</u> , Jana Doležalová, Tereza Morávková, Roman Stupka.....	129
Sh04 FRAGMENTAČNÍ MECHANISMY ECHINOKANDINŮ <u>Jiří Houšť</u> , Dominika Luptáková, Anton Škríba, Jiří Novák, Vladimír Havlíček.....	130
Sh05 ELEKTROCHEMICKÁ DETEKČIA TUMOR-ASOCIOVANEJ PROTILÁTKY 2C4 POMOCOU GLYKÁNOVÉHO BIOSENZORA <u>Filip Květoň</u> , Ján Tkáč.....	130
Sh06 SPEKTROMETRIA SEKUNDÁRNÝCH IÓNOV AKO METÓDA ANALÝZY A IDENTIFIKÁCIE MIMOZEMSKÝCH VZORIEK <u>Justína Nováková</u> , Monika Jerigová, Dušan Velič .....	131
Sh07 POROUS GRAPHITIC CARBON BASED HPLC-MS/MS – AN INNOVATIVE APPROACH IN HIGHLY EFFECTIVE THERAPEUTIC DRUG MONITORING OF THIOPURINES FOR INFLAMMATORY BOWEL DISEASE THERAPY OPTIMIZATION <u>Daniel Pecher</u> , Svetlana Dokupilová, Zuzana Zelinková, Jana Lučeničová, Maikel Peppelenbosch, Peter Mikuš .....	131
Sh08 FORENZNÍ IDENTIFIKACE STŘELCE – LA-ICP-MS ZOBRAZOVÁNÍ POVÝSTŘELOVÝCH ZPLODIN <u>Tomáš Pluháček</u> , Martin Švidrnoch, Vítězslav Maier, Vladimír Havlíček, Karel Lemr .....	132

Sh09 SALIVA AS A POTENTIAL DIAGNOSTIC FLUID FOR DETERMINATION OF IMMUNE SYSTEM ACTIVATION MARKERS, CREATININE AND URIC ACID <u>Andrea Vernerová, Lenka Kujovská Krčmová</u> .....	133
Sh10 VÝVOJ METODIKY PŘÍPRAVY NOVÝCH PLASMONICKÝCH KOMPOZITNÍCH SUBSTRÁTŮ PRO POKROČILÉ TECHNIKY VIBRAČNÍ (MIKRO)SPEKTROSKOPIE <u>Oleksandr Volochanskyi, Marie Švecová, Vadym Prokopec</u> .....	133
<b>Seminár k novej definícii Mólu</b> .....	<b>135</b>
NOVÉ DEFINÍCIE ZÁKLADNÝCH JEDNOTIEK SI A ICH VÝZNAM PRE MERANIA <u>Ján Garaj</u> .....	135
NOVÁ DEFINÍCIA ZÁKLADNEJ JEDNOTKY MÓL V POLITIKE IUPAC <u>Ján Labuda</u> .....	135
NOVÁ DEFINÍCIA JEDNOTKY MÓL A JEJ APLIKÁCIA DO CHEMICKÝCH MERANÍ <u>Dušan Kordík</u> .....	136
<b>Postery - Sekcia 1: Analytická chémia</b> .....	<b>137</b>
1Po01 COLORECTAL CANCER GLYCOPROFILING AND POTENTIAL BIOMARKERS <u>Juvisan Aguedo, Jan Tkac</u> .....	137
1Po02 PŘÍPRAVA NANOŠTRUKTUROVANÝCH GLYKÁNOVÝCH POVRCHOV <u>Anna Blšáková, Ján Tkáč</u> .....	137
1Po03 VIBRAČNĚ-SPEKTROSKOPICKÉ STUDIUM INTERAKCE FLUORIDOVÉHO SENZORU NA N,N'-DISUBSTITUOVANÉ MOČOVINOVÉ BÁZI POMOCÍ MAGNETICKÝCH NANOČÁSTIC S PLASMONICKOU STRUKTUROU JAKO ANALYTICKÉ SONDY <u>Bui Duong Thuy, Lenka Marková, Pavel Režanka, Ondřej Kaman</u> .....	138
1Po04 BEING IN EVERY CORNER OF THE RESEARCH BOX <u>Justína Čuchorová, Peter Podolec</u> .....	138
1Po05 SILVER AMALGAM PARTICLES: SUITABLE ELECTRODE MATERIAL FOR SPECTRO-ELECTROCHEMISTRY AND PLASMONICS <u>Aleš Daňhel, Pavlína Havranová, Michal Horák, Lukáš Kejík, Filip Ligmajer, Peter Šebest, Miroslav Fojta</u>	139
1Po06 BIOSENSOR BASED ON THE IMPEDIMETRIC DETECTION OF PROTEIN RESIDUES OF INFLUENZA VIRUS <u>Miroslav Gál, Aneta Anna Dunajová, Kornélia Tomčíková</u> .....	139
1Po07 STANOVENÍ BISFENOLŮ V ENERGETICKÝCH NÁPOJÍCH POMOCÍ PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE S HMOTNOSTNÍ DETEKČÍ <u>Martin Jaček, Petr Tůma</u> .....	140
1Po08 VYUŽITIE NANOSORBENTOV NA EXTRAKCIU A KONCENTROVANIE TOXICKÝCH PRVKOV VO VODNÝCH VZORKÁCH <u>Katarína Kriegerová, Simona Procházková, Radoslav Halko</u> .....	140
1Po09 THERAPEUTIC DRUG MONITORING OF THE MOST USED IMMUNOSUPPRESSIVE DRUGS IN WHOLE BLOOD USING HPLC-MS/MS <u>Dušan Krnáč, Katarína Reiffová</u> .....	141
1Po10 MIKROEXTRAKCIA JEDNOU KVAPKOU NA IZOLÁCIU REZÍDUÍ PESTICÍDOV Z MLIEKA <u>Nikola Kubasová, Adriana Brisudová, Svetlana Hrouzková</u> .....	141
1Po11 ŠTÚDIUM VYBRANÝCH PARAMETROV METÓDY LC-MS/MS NA DETEKCIU FENYLALANÍNU A TYROZÍNU <u>Martina Micháliková, Martina Machková, Svetlana Hrouzková</u> .....	142
1Po12 OCURRENCE OF UV STABILIZERS IN SEWAGE, SEAWATER AND MARINE SEDIMENTS FROM GRAN CANARIA (CANARY ISLANDS, SPAIN) <u>S. Montesdeoca-Esponda, C. Álvarez-Raya, M.E. Torres-Padrón, Z. Sosa-Ferrera, J.J. Santana-Rodríguez</u>	142
1Po13 VYUŽITÍ AMPÉROMETRICKÝCH TECHNIK PŘI STANOVENÍ TUMOROVÝCH MARKERŮ: HOMOANILOVÉ KYSELINY, VANILMANDLOVÉ KYSELINY A 5-HYDROXY-3-INDOLOCTOVÉ KYSELINY <u>Anna Němečková-Makrlíková, Vojtěch Hrdlička, Jiří Barek, Vlastimil Vyskočil, Tomáš Navrátil</u> .....	143

1Po14 ANALÝZA GLYKÁNOV FIBRINOGENU, TRANSFERÍNU, ALFA-2-MAKROGLOBULÍNU A SÉR PACIENTOV S PERITONEÁLNOU DIALÝZOU POMOCOU LEKTÍNOVEJ MICROARRAY METÓDY <u>Lucia Pažitná</u> , Zuzana Hľasová, Goran Miljuš, Dragana Robajac, Miloš Šunderić, Ana Penezić, Nikola Gligorijević, Marko Baralić, Olgica Nedić, Jaroslav Katrlík.....	143
1Po15 VYUŽITIE TECHNIKY DÁVKOVANIA JEMNEJ SUSPENZIE NA STANOVENIE KOVOV V ENVIRONMENTÁLNYCH A BIOLOGICKÝCH VZORKÁCH <u>Simona Procházková</u> , Katarína Kriegerová, Radoslav Halko .....	144
1Po16 PACKED-COLUMN CAPILLARY ELECTROCHROMATOGRAPHY USING MULTIMODAL STATIONARY PHASE <u>Pavel Řezanka</u> , Ameneh Tatar.....	144
1Po17 SIMULTANEOUS VOLTAMMETRIC DETERMINATION OF URIC ACID AND CAFFEINE AT A BARE THICK FILM BORON-DOPED DIAMOND ELECTRODE Alžbeta Benková, <u>Olha Sarahman</u> , Lubomír Švorc.....	145
1Po18 STANOVENÍ CHOLESTEROLU A 7-DEHYDROCHOLESTEROLU V MLÉKU Tomáš Sulovský, Petr Barták, Jana Nádvorníková, <u>Jana Skopalová</u> .....	145
1Po19 NANO-ETCHED FS CAPILLARY FOR CONCENTRATION, SEPARATION AND DETECTION OF <i>ASPERGILLUS</i> CONIDIA WITH OFF-LINE MATRIX-ASSISTED LASER DESORPTION/IONIZATION TIME-OF-FLIGHT MASS SPECTROMETRY CHARACTERIZATION <u>J. Šalplachta</u> , M. Horká, P. Karásek, F. Růžicka, M. Roth.....	146
1Po20 VYUŽITÍ DEPOZICE STŘÍBRNÉHO AMALGAMU NA POVRCHU PYROLITICKÉ GRAFITOVÉ ELEKTRODY V ANALÝZE PROTEINŮ <u>Peter Šebest</u> , Veronika Ostatná, Miroslav Fojta, Aleš Daňhel .....	146
1Po21 VYUŽITÍ DTNA PRO STANOVENÍ AKTIVITY ACETYLCHOLINESTERÁZY V KRVI <u>Šárka Štěpánková</u> , Katarína Vorčáková, Karolína Sejkorová .....	147
<b>Postery - Sekcia 2: Fyzikálna chémia .....</b>	<b>148</b>
2Po01 ANTIOXIDANT ACTIVITY OF KERATIN HYDROLYSATES IN POLYETHYLENE GLYCOL STUDIED BY NONISOTHERMAL DSC <u>Zuzana Cibulková</u> , Anna Vykydalová, Peter Šimon, Tibor Dubaj.....	148
2Po02 BENCHMARKING THE ISOCONVERSIONAL METHODS: HOW GOOD IS GOOD ENOUGH? <u>Tibor Dubaj</u> , Peter Šimon .....	148
2Po03 PHOTOSWITCHING BEHAVIOUR OF HETEROCYCLIC IMINES: THEORETICAL, NMR AND EPR STUDY Michal Hricovíni, James Asher, Olga L. Malkina, <u>Miloš Hricovíni</u> .....	149
2Po04 HMOTNOSTNÁ SPEKTROMETRIA SEKUNDÁRNÝCH IÓNOV: POROVNANIE METEORITU A VULKANITU <u>Karina Kulpová</u> , Justína Nováková, Dušan Velič, Monika Jerigová.....	149
2Po05 EPR STUDY OF POLYMER PROTECTIVE COATINGS FOR DEPLETED URANIUM COMPONENTS <u>Miroslava Lukešová</u> , Volodymyr Lobaz, Jiří Pánek, Zdeňka Sedláková, Peter Černoch, Miroslava Dušková, Martin Hrubý, Tomáš Chmela, Pavel Krupička .....	150
2Po06 VZNIK TERAHERTZOVÉHO ŽIARENIA V OPTICKY NELINEÁRNÝCH VLÁKNACH Z CYKlickÝCH OLEFÍNOCH <u>Eva Noskovičová</u> , Dušan Lorenc, Dušan Velič.....	150
2Po07 ADSORPCE MĚDNATÝCH IONTŮ NA OXIDOVANÝCH UHLÍKATÝCH MATERIÁLECH <u>Alžběta Parchaňská</u> , Gabriela Hotová, Václav Slovák .....	150
2Po08 NEKATALYZOVANÝ BROMIČNANOVÝ OSCILÁTOR S ANILÍNOM AKO SUBSTRÁTOM <u>Marek Pribus</u> , Jaroslav Blaško, Juraj Filo, Ivan Valent.....	151
2Po09 PREDICTIONS OF THERMAL AND THERMOOXIDATIVE STABILITIES OF MATERIALS <u>Peter Šimon</u> , Tibor Dubaj, Zuzana Cibulková, Anna Vykydalová.....	151
2Po10 VISKOELASTICKÉ A TRIBOLOGICKÉ VLASTNOSTI NOVÉHO MATERIÁLU NA BÁZI HYALURONANU PRO VISKOSUPPLEMENTACI SYNOVIÁLNÍ TEKUTINY <u>Evgeniy Toropitsyn</u> , Martin Pravda, David Rebenda, Vladimír Velebný .....	152



2Po11 STRUCTURE AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF NOVEL MIXED COPPER (II) COMPLEXES WITH NON-STEROIDAL ANTI-INFLAMMATORY DRUGS TOLFENAMIC, MEFENAMIC AND FLUFENAMIC ACIDS AND PHENANTHROLINE Miriama Simunkova, Peter Lauro, Klaudia Jomova, Lenka Hudecova, Martin Danko, Simona Rajcaniova, Zuzana Kozovska, Lucia Kucerova, Jan Moncol, Lubomir Svorc, <u>Marian Valko</u> .....	153
2Po12 SPEKTROSKOPIA ORGANICKO-ANORGANICKÝCH PEROVSKITOVÝCH ŠTRUKTÚR PRE FOTOVOLTIKÉ ČLÁNKY <u>Tatiana Vojteková</u> , Eva Noskovičová, Dušan Lorenc, Dušan Velič .....	153
2Po13 THERMOOXIDATIVE STABILITY OF POLYETHYLENE CABLE INSULATION STUDIED BY DSC <u>Anna Vykydalová</u> , Zuzana Cibulková, Tibor Dubaj, Peter Šimon .....	154
2Po14 SYNTHETIC METAL COMPLEXES AS DOUBLE-EDGED SWORD TOWARDS CANCER: ROS MODULATION AND DNA INTERCALATION <u>Miriama Šimunková</u> , Peter Lauro, Marián Valko, Klaudia Jomová .....	154
2Po15 PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF ELECTRODES MANUFACTURED BY 3D PRINTING <u>Viliam Kolivoška</u> , Táňa Sebechlebská, Eva Vaněčková, Violetta Shestivska .....	154
<b>Postery - Sekcia 3: Nanomateriálová chémia .....</b>	<b>155</b>
3Po01 HYBRIDNÍ NANOMATERIÁLY NA BÁZI KOV-PVA KOMPOZITU <u>Vilém Bartůnek</u> , Michal Kohout .....	155
3Po02 SLEDOVANIE VPLYVU LEPTANTOV NA ELEKTROCHEMICKÉ SPRÁVANIE VZORIEK MXÉNU $Ti_3C_2T_x$ <u>Veronika Gajdošová</u> , Lenka Lorencová, Mária Omastová, Michal Procházka, Simona Procházková, Monika Jerigová, Dušan Velič, Ján Tkáč .....	155
3Po03 TLAČENÉ UHLÍKOVÉ ELEKTRÓDY PRE BIOSENZORIKU A HYBRIDNÚ FOTOVOLTIKU Michal Hatala, <u>Pavol Gemeiner</u> , Michaela Pavlíčková, Lucia Parráková, Lenka Lorencová, Aleš Ház, Ján Tkáč, Milan Mikula .....	156
3Po04 DIZAJN 2D ŠTRUKTÚR DOPOVANÝCH NANOČASTICAMI KOBALTU PRE APLIKÁCIE V ENERGETIKE <u>M. Hečková</u> , M. Strečková, R. Oriňaková, A. Guboova, J. Hovancová, Z. Danková, V. Girman .....	156
3Po05 DVOU-KROKOVÁ SYNTÉZA NANOČÁSTIC STRĚBRA <u>Lucie Hochvaldová</u> , Libor Kvítek .....	157
3Po06 PRÍPRAVA BLOKAČNÝCH VRSTIEV Z NANO-OXIDOV A ICH VYUŽITIE V PEROVSKITOVÝCH SOLÁRNÝCH ČLÁNKOCH SO ZADNOU UHLÍKOVOU ELEKTRÓDOU <u>Matej Hvojník</u> , Anna Mária Popovičová, Michaela Pavlíčková, Michal Hatala, Pavol Gemeiner, Milan Mikula .....	157
3Po07 BIOLOGICAL EFFECTS OF NANOSTRUCTURED METALS <u>Markéta Kaimlová</u> , Jakub Siegel, Václav Švorčík .....	158
3Po08 SIMPLE ELECTROCHEMICAL NANOSCALE FABRICATION OF PT AND RU ON PT@PD CORE-SHELL NANOCUBES AND UTILIZATION AS ANODE MATERIAL FOR DIRECT METHANOL FUEL CELLS Ammar Bin Yousaf, Syed Javaid Zaidi, <u>Peter Kasak</u> .....	158
3Po09 STUDIUM KATALYTICKÉ HYDROGENACE $CO_2$ <u>Martina Kubíková</u> , Libor Kvítek .....	159
3Po10 POROVNÁNÍ KATALYTICKÉ AKTIVITY NANOČÁSTIC PLATINOVÝCH KOVŮ <u>Libor Kvítek</u> , Tomáš Stryšovský, Karolína Simkovičová, Robert Prucek, Lucie Hochvaldová, Aleš Panáček .....	159
3Po11 CU LAYERS SPUTTERED ON PTFE: EFFECT OF ANNEALING ON SURFACE PROPERTIES AND ANTIBACTERIAL ACTIVITY <u>V. Lacmanova</u> , H. Y. Nguyenova, B. Vokata, V. Svorcik, A. Reznickova .....	160
3Po12 STABILNÝ $Ti_3C_2T_x$ (MXÉN)/PT NANOKOMPOZIT PRE APLIKÁCIE V SENZOROCH <u>Lenka Lorencová</u> , Tomáš Bertók, Jaroslav Filip, Monika Jerigová, Dušan Velič, Peter Kasák, Ján Tkáč ....	161

3Po13 PREPARATION METHOD EFFECT ON ANTIBACTERIAL PROPERTIES OF SILVER NANOPARTICLES GRAFTED ONTO POLYETHYLENE TEREPHTHALATE <u>H. Y. Nguyenova, B. Vokata, V. Lacmanova, V. Svorcik, A. Reznickova</u> .....	161
3Po14 PEROVSKITOVÉ SOLÁRNE ČLÁNKY <u>Mária Omastová, Agnieszka Iwan, Riyas Subair, Vojtech Nádaždy, Matej Micušik, Matej Jergel, Peter Šiffalovič, Eva Majková</u> .....	162
3Po15 SILVER NANOPARTICLES AS POTENTIAL ANTIBACTERIAL AGENT: HOW SILVER CAN OVERCOME ANTIBIOTIC RESISTANCE AND HOW BACTERIA CAN RESIST SILVER <u>Aleš Panáček, Libor Kvítek, Lucie Hochvaldová, Renata Večeřová, Milan Kolář</u> .....	163
3Po16 NANOČASTICE STRIEBRA. VZŤAH MOLEKULOVÁ ŠTRUKTÚRA STABILIZÁTORA – FYZIKÁLNE VLASTNOSTI – BIOLOGICKÁ AKTIVITA STRIEBORNÝCH NANOČASTÍČ <u>Martin Pisárčik, Miloš Lukáč, Renáta Horáková, Ferdinand Devínsky</u> .....	163
3Po17 PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE KOLOIDNÍCH ROZTOKŮ ZLATÝCH NANOČÁSTIC <u>Markéta Pišlová, Kateřina Kolářová, Zdeňka Kolská, Václav Švorčík</u> .....	164
3Po18 MEDIATORLESS NANOPARTICLE COATINGS OF POLYMER: PROMISING PLATFORMS FOR BIOENGINEERING AND CATALYSTS <u>Jakub Siegel, Markéta Polívková, Pavla Šuláková, Václav Švorčík</u> .....	164
3Po19 ADVANCED EPOXY COMPOSITES FILLED WITH NOVEL 2D NANOMATERIAL – MXENES Michal Procházka, Simona Procházková, <u>Anastasiia Stepura, Kateřina Kopecká, Vladimír Špaček, Mária Omastová</u> .....	165
3Po20 HYDROPHILIC MODIFICATION OF SURFACES VIA PLASMA POLYMERIZATION <u>Monika Stupavská, Hana Dvořáková, Lubomír Prokeš, Vilma Buršíková, Jan Čech, Pavel Štáhel</u> .....	165
3Po21 NON-CONTACT THICKNESS MEASUREMENT OF PROBLEMATIC LAYERS USING SEM WITH EDS DETECTOR <u>Tomáš Ingr</u> .....	166
3Po22 SEPARACE A REGENERACE TĚŽKÝCH KOVŮ POMOCÍ DVOUDIMENZIONÁLNÍ KARBOXYLOVÉ KYSELINY <u>Jan Kolařík, Aristides Bakandritsos, Radek Zbořil</u> .....	166
3Po23 ANTIMIKROBÁLNÍ ÚPRAVA TKANIN ZA VYUŽITÍ NANOČÁSTIC STŘÍBRA <u>Robert Pucek, Barbora Krívová, Aleš Panáček, Milan Kolář, Libor Kvítek</u> .....	166
<b>Postery - Sekcia 4: Anorganická a materiálová chémia</b> .....	<b>167</b>
4Po01 MOŽNOSTI ANALÝZY OBSAHU ANORGANICKÉHO UHLÍKU V PREKURZORECH PRO PŘÍPRAVU VYSOKOTEPLNÍCH SUPRAVODIČŮ <u>Mario Babuněk, Ondřej Jankovský, Tomáš Hlásek, Vilém Bartůněk</u> .....	167
4Po02 ALKYLSILYL- A ALKYLSTANYLSELENIDY JAKO ALD PREKURZORY PRO DEPOZICE NANOVRSTEV <u>Jaroslav Charvot, Filip Bureš, Jan Macák</u> .....	167
4Po03 NIKLEM AKTIVOVANÉ ŠTĚPENÍ PEPTIDŮ – DFT ANALÝZA REAKČNÍHO MECHANISMU <u>Adéla Gottwaldová, Michal Čajan</u> .....	168
4Po04 PREPARING ULTRA-HARD TITANIUM CERMETS Vlastimil Brožek, Libor Mastný, Pavel Rohan, <u>Jan Horníček, Miroslav Šimek</u> .....	168
4Po05 FOTOASISTOVANÉ LEPTÁNÍ TENKÝCH VRSTEV CHALKOGENIDOVÉHO SKLA AS <sub>2</sub> S <sub>3</sub> <u>Jiří Jančálek, Karel Pálka, Miroslav Vlček</u> .....	169
4Po06 COMPOUNDS OF 1H-PYRAZOLE-1-CARBOXAMIDINE – CRYSTAL STRUCTURE; NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES AND INTERPRETATION OF VIBRATIONAL SPECTRA USING QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS <u>Soňa Kohúteková, Irena Matulková, Ivana Císařová, Róbert Gyepes, Ivan Němec</u> .....	169
4Po07 PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF MOLTEN LANTHANIDE SYSTEMS <u>Blanka Kubíková, Jarmila Mlynáriková, Eva Mikšíková, Miroslav Boča</u> .....	170
4Po08 SYNTÉZA KURKUMINOIDOV A ICH KOVOVÝCH KOMPLEXOV AKO POTENCIÁLNE BIOLOGICKY AKTÍVNE LÁTKY <u>Jana Leskovská, Jindra Valentová, Natalia Miklášová</u> .....	170

4Po09 ADSORPCE DUSÍKU A OXIDU UHLIČITÉHO NA BIOCHAR <u>Miloslav Lhotka</u> .....	170
4Po10 SYNTÉZA A VLASTNOSTI ČÁSTEČNĚ NAOXIDOVANÉHO NANOGRAFITU <u>Boris Lochman</u> , <u>Michal Lojka</u> , <u>Adéla Jiříčková</u> , <u>Ondřej Jankovský</u> .....	171
4Po11 DESTRUCTION OF TETRAFLUOROMETHANE IN A SLIDING ELECTRIC DISCHARGE <u>Libor Mastný</u> , <u>Oldřich Živný</u> , <u>Vlastimil Brožek</u> , <u>Jan Horníček</u> , <u>Miroslav Šimek</u> .....	171
4Po12 STRUKTUROVÁNÍ TENKÝCH VRSTEV AMORFNÍCH CHALKOGENIDŮ POMOCÍ ELEKTRONOVÉ LITOGRAFIE <u>Karel Pálka</u> , <u>Jiří Jančálek</u> , <u>Michal Kurka</u> , <u>Stanislav Šlang</u> , <u>Miroslav Vlček</u> .....	172
4Po13 VÝBĚR A VYUŽITÍ SKELNÝCH VLÁKEN VE HMOTĚ TVRZENÉHO KAMENE <u>Jakub Píchal</u> , <u>Libor Mastný</u> , <u>Renáta Slavětínská</u> .....	172
4Po14 HODNOCENÍ FOTOAKTIVITY RŮZNÝCH TYPŮ TITANOVÉ BĚLOBY V DLAŽDICÍCH TVRZENÉHO KAMENE <u>Michaela Drozdová</u> , <u>Libor Mastný</u> , <u>Daniel Bartoň</u> , <u>Ondřej Ruml</u> .....	173
4Po15 ROZKLAD FLUOROVANÝCH UHLOVODÍKŮ TECHNOLOGIÍ GLID-ARC <u>Libor Mastný</u> , <u>Michaela Drozdová</u> , <u>Miroslav Šimek</u> , <u>Vlastimil Brožek</u> .....	173
4Po16 FLUORO-, OXO- AND OXOFLUORO-ALUMINATES: SYNTHESIS, AND THEIR STABILITY <u>František Šimko</u> , <u>Aydar Rakhmatullin</u> , <u>Emmanuel Véron</u> , <u>Mathieu Allix</u> , <u>Pierre Florian</u> , <u>Tomáš Bučko</u> , <u>Zuzana Netriová</u> , <u>Michal Korenko</u> , <u>Catherine Bessada</u> .....	174
4Po17 PŘÍPRAVA RŮZNÝCH VELIKOSTÍ NANO-PINNINGOVÝCH CENTER PRO VYSOKOTEPLTNÍ SUPRAVODIVÝ SYSTÉM REBCO <u>Kryštof Skrbek</u> , <u>Ondřej Jankovský</u> , <u>Tomáš Hlásek</u> , <u>Vilém Bertůnek</u> .....	174
4Po18 KRYŠTALOCHEMIA VYBRANÝCH KOMPLEXOV NIKLU(II) S 2-(AMINOETYL)PYRIDÍNOM <u>Slavomíra Šterbinská</u> , <u>Juraj Kuchár</u> , <u>Juraj Černák</u> .....	174
4Po19 POMALÁ MAGNETICKÁ RELAXÁCIA V NI-LN (LN = CE, GD, DY) DVOJJADROVÝCH KOMPLEXOCH <u>Anna Vráblová</u> , <u>Tomás Milagros</u> , <u>Larry R. Falvello</u> , <u>Eubor Dlháň</u> , <u>Juraj Černák</u> , <u>Roman Boča</u> .....	175
<b>Postery - Sekcia 5: Organická chémia</b> .....	<b>176</b>
5Po01 CONSTRAINT ANALOGS OF ARYL CERAMIDE HPA-12 <u>Branislav Ferko</u> , <u>Marián Zeman</u> , <u>Dušan Berkeš</u> .....	176
5Po02 SUZUKIHO REAKCIA S DERACEMIZÁCIU BINAFTALÉNOVÉHO SUBSTRÁTU <u>Filip Bulko</u> , <u>Martin Putala</u> .....	176
5Po03 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA SPIRO-B-LAKTÓNOVÉHO DERIVÁTU <u>Martin Fábian</u> , <u>Jozef Gonda</u> .....	177
5Po04 MICROWAVE ASSISTED SYNTHESIS OF A HYPNOTIC DRUG: ZOLPIDEM <u>Nikola Fajkis</u> , <u>Marcin Kolaczowski</u> , <u>Monika Marcinkowska</u> .....	177
5Po05 SYNTÉZA PUSH-PULL CHROMOFORŮ S SF <sub>5</sub> AKCEPTORNÍ SKUPINOU <u>Michaela Fecková</u> , <u>Filip Bureš</u> .....	178
5Po06 SYNTHESIS AND ANALYSIS OF MOLECULAR PROPERTIES OF ACENE DERIVATIVES WITH ELECTRON-WITHDRAWING GROUPS AS POTENTIAL N-TYPE SEMICONDUCTORS <u>Lucia Feriancová</u> , <u>Martin Putala</u> .....	178
5Po07 CONSTRAINT ANALOGS OF ARYL CERAMIDE HPA-12 <u>Branislav Ferko</u> , <u>Marián Zeman</u> , <u>Dušan Berkeš</u> .....	179
5Po08 CYTOTOXICITY OF THE LIPOPHOSPHONOXINS, NEW POTENT ANTIMICROBIAL COMPOUNDS FOR PROSPECTIVE APPLICATIONS IN PREVENTION AND THERAPY OF MUSCULOSKELETAL INFECTIONS <u>Adéla Galandáková</u> , <u>Jitka Ulrichová</u> , <u>Jiří Gallo</u> , <u>Milan Kolář</u> , <u>Libor Krásný</u> , <u>Dominik Rejman</u> .....	180
5Po09 SYNTÉZA 1-(FENYLKARBAMOYL)NAFTALEN-2-YL ALKYLKARBAMÁTŮ JAKO POTENCIÁLNÍCH ANTITUBERKULOTIK <u>Tomáš Goněc</u> , <u>Šárka Pospíšilová</u> , <u>Lukáš Fukan</u> , <u>Adriana Tomanová</u> , <u>Vladimíra Vysoká</u> , <u>Andrea Nagyidayová</u> , <u>Hana Michnová</u> , <u>Jiří Kos</u> , <u>Alois Čížek</u> , <u>Josef Jampílek</u> .....	180

5Po10 SYNTÉZA A FLUORESCENČNÍ VLASTNOSTI 2,5-DIFENYL-4-HYDROXY- A 2,5-DIFENYL-4-ACETOXYHETEROAZOLŮ Vladimír Finger, <u>Jiří Hanusek</u> .....	181
5Po11 DESIGN, SYNTHESIS AND BIOLOGICAL ACTIVITIES OF NEW SYNTHETIC GALLOTANNINS Jana Hricovíniiová, Hana Michnová, Andrea Ševčovičová, Šárka Pospíšilová, Josef Jampílek, <u>Zuzana Hricovíniiová</u> .....	182
5Po12 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA NOVÝCH TYPOV C-VETVENÝCH SFINGOZÍNŮV <u>Dominika Jacková</u> , Miroslava Martinková, Jozef Gonda, Mária Brunderová .....	182
5Po13 IMIDAZO[1,2-C]PYRIMIDIN-5(6H)-ON: NOVÝ SKELET PRO INHIBITORY CYKLIN-DEPENDENTNÍ KINÁZY 2 <u>Josef Jansa</u> , Antonín Lyčka, Vladimír Kryštof, Martin Lepšík .....	183
5Po14 ORGANOKATALYTICKÉ DOMINO MANNICHOVE REAKCIE/ FLUORÁCIE V PODMIENKACH MECHANICKEJ AKTIVÁCIE <u>Dominika Krištofiková</u> , Mária Mečiarová, Radovan Šebesta .....	184
5Po15 STRUCTURE OF AMINO BENZOSELENADIAZOLES <u>Ján Lokaj</u> , Ján Moncol, Viktor Milata .....	184
5Po16 TRITIUM-LABELED TRACERS HOW TO BOOST STABILITY? <u>Aleš Marek</u> , Ján Tarábek .....	185
5Po17 IZOLÁCIA A CHEMICKÁ MODIFIKÁCIA POLYFENOLOVÝCH BISBIBENZYLOV Z PORASTNICE MNOHOTVAREJ <u>Mário Markuliak</u> , Miloš Lukáč, Branislav Horváth .....	186
5Po18 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA SFINGOIDNÝCH BÁZ SO ZABUDOVANÝMI MOLEKULOVÝMI PREPÍNAČMI <u>Tatiana Mitříková</u> , Jozef Gonda, Simona Fazekašová.....	186
5Po19 SYNTETICKÉ CESTY PRÍPRAVY SULFO ANALÓGU OSELTAMIVIRU <u>Viktória Modrocká</u> , Mária Mečiarová, Radovan Šebesta.....	187
5Po20 EFFECT OF STRUCTURAL MODIFICATION ON PHOTOCHROMIC PROPERTIES OF BENZOYL PYRIDINE BASED HYDRAZONES <u>Bernard Mravec</u> , Juraj Filo, Klaudia Csiesai, Marek Cigáň .....	188
5Po21 VYUŽITÍ ASYMETRICKÉ HENRYHO REAKCE PRO PŘÍPRAVU CLAVAMINOLU A A XESTOAMINOLU C <u>Gabriela Nováková</u> , Pavel Drabina, Miloš Sedlák .....	188
5Po22 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA REGIOIZOMÉRNÝCH AZA-ANALÓGOV JASPÍNU B <u>Michaela Novotná</u> , Miroslava Martinková, Jozef Gonda .....	189
5Po23 SKVARAMIDOVÉ A TIOSKVARAMIDOVÉ KATALYZÁTORY V STEREOSELEKTÍVNEJ SYNTÉZE PREKURZOROV 3,4-DISUBSTITUOVANÝCH PYROLIDÍNŮV <u>Kristína Ormandyová</u> , Stanislav Bilka, Mária Mečiarová, Radovan Šebesta.....	190
5Po24 4,7-BIS(PHENYLETHYNYL)-SUBSTITUTED BENZOTHIAZOLES AND BENZOTHIAZOLIDIAZOLES AS FLUORESCENT DYES FOR BIOIMAGING <u>Patrik Osuský</u> , Peter Hrobárik, Peter Magdolen.....	190
5Po25 NOVÉ HALOGÉNSUBSTITUOVANÉ BENZODITIOFÉNOVÉ HETEROCYKLY AKO FOTO- / ELEKTROAKTÍVNE MATERIÁLY <u>Branislav Pavilek</u> , Daniel Végh, Júlia Kožíšková, Viktor Milata.....	191
5Po26 HOW ORGANOCATALYSTS AFFECT STEREOSELECTIVITY OF [2,3]-WITTIG REARRANGEMENT <u>Tibor Peňaška</u> , Melinda Meyer Mojzes, Mária Mečiarová, Radovan Šebesta .....	191
5Po27 NOVÉ SACHARIDOVÉ TIOMOČOVINY AKO POTENCIÁLNE ORGANOKATALYZÁTORY <u>Róbert Rončák</u> , Monika Tvrdoňová, Jozef Gonda .....	192
5Po28 SYNTÉZA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA NOVÝCH AKRIDÍN-CHALKÓNŮV <u>Paulína Slepčíková</u> , Mária Vilková, Ján Imrich.....	193

5Po29 ENAMINONITRILY A DIAZONIOVÉ SOLI JAKO STAVEBNÍ BLOKY PRO SYNTÉZU BOROVÝCH HETEROCYKLŮ <u>Markéta Svobodová, Petra Škraňková</u> .....	193
5Po30 SYNTÉZA NOVÝCH AMINOCYKLITOLŮ AKO POTENCIÁLNÝCH INHIBÍTORŮ GLYKOZIDŮ <u>Michael Široký, Vladimír Bindzár, Jozef Gonda, Miroslava Martinková</u> .....	194
5Po31 TOTÁLNÁ SYNTÉZA IZOMÉRNÝCH ANALÓGOV D-ERYTRO-SFINGOZÍNU S POTENCIÁLNŮ CYTOTOXICKOU AKTIVITOU <u>Jana Špaková Raschmanová, Miroslava Martinková, Jozef Gonda, Martina Bago Pilátová</u> .....	195
5Po32 IMOBILIZÁCIA FUNKČNÝCH HYDRAZÓNŮ <u>Pavol Tisovský, Jana Donovalová, Anton Gáplovský</u> .....	195
5Po33 ORGANOKATALYTICKÁ SYNTÉZA CHIRÁLNYCH DISUBSTITUOVANÝCH PYROLIDÍNŮ S POTENCIÁLNŮ ANTIMIKROBIÁLNU AKTIVITOU <u>Lenka Turčíková, Mária Mečiarová, Radovan Šebesta, Helena Bujdaková</u> .....	196
5Po34 SYNTHESIS OF NEW PERFLUOROPHENYL SUBSTITUTED PI-CONJUGATED HETEROCYCLIC COMPOUNDS AS POTENTIAL NOVEL OPTO-ELECTRONIC AND BIOLOGICALLY ACTIVE MATERIALS <u>Daniel Végh, Jakub Šofranko, Dušan Bortňák, Viktor Milata</u> .....	196
5Po35 NOVÉ SLOUČENINY PŮSOBÍCÍ NA <i>MYCOBACTERIUM ABSCESSUS</i> : MALÉ MOLEKULY A JEJICH PEPTIDOVÉ KONJUGÁTY Martin Krátký, Lilla Horváth, Zsuzsa Baranyai, Rudolf Vosátka, Szilvia Bősze, <u>Jarmila Vinšová</u> .....	197
<b>Postery - Sekcia 6: Polyméry</b> .....	<b>198</b>
6Po01 EXTRACELLULAR BIOPOLYMERS PRODUCED BY GREEN MICROALGAE <u>Peter Capek, Michal Halaj, Ema Paulovičová, Lucia Paulovičová, Soňa Jantová, Jozef Turjan, Vladislav Cepák, Jaromír Lukavský</u> .....	198
6Po02 FORMULACE FDM FILAMENTU PRO PŘÍPRAVU LÉKOVÝCH FOREM S OKAMŽITÝM UVOLŇOVÁNÍM LÉČIVA <u>Jan Elbl, Jan Muselík, Aleš Franz, Natália Janigová</u> .....	198
6Po03 INTERPRETÁCIA MS SPEKTIER HETEROGÉNNÝCH NEOGLYKOKONJUGÁTOV <u>Pavol Farkaš, Jana Valáriková, Alžbeta Čížová</u> .....	199
6Po04 THE TOXICITY AND BIOCOMPATIBILITY OF THE FILM BASED ON NATURAL POLYMERS (CHITOSAN-HYALURONIC ACID) <u>Jana Franková, Rash M. Abdelrahman, Renáta Sklenářová, M. Abdel-Mohsen, Jitka Ulrichová, Josef Jancar</u> .....	199
6Po05 VÝVOJ PERORÁLNEJ LIEKOVEJ FORMY KU KOLONICKÉMU PODANIU BIOLOGICKÉHO MATERIÁLU <u>Nicole Fülöpová, Aleš Franc, Michaela Garajová, Jana Koščová, Miroslava Pavelková</u> .....	199
6Po06 THE EFFECT OF PROCESSING PARAMETERS ON THE PREPARATION OF BIO-DERIVED POLYMERIC NANOPARTICLES <u>Jozef Kollár, Ludmila Hřčková, Jaroslav Mosnáček</u> .....	200
6Po07 POVRCHOVÉ ÚPRAVY POLYMERŮ (CELULÓZY) PRO RŮZNÉ APLIKACE <u>Zdeňka Kolská, Viktorie Neubertová, Monika Benkocká, Kateřina Kolářová, Václav Švorčík</u> .....	200
6Po08 CÍLENÁ INHIBICE METASTATICKÝCH PROCESŮ POMOCÍ BIODEGRADABILNÍCH KONJUGÁTŮ S INHIBITORY MMP <u>Jana Kousalová, Tomáš Etrych, Libor Kostka, Vladimír Šubr, Marek Kovář, Ladislav Sivák</u> .....	201
6Po09 RUBBER COMPOSITES ABLE TO ABSORB ELECTROMAGNETIC RADIATION Ján Kruželák, <u>Jozef Prečo, Ján Hronkovič, Jarmila Vilčáková, Ivan Hudec</u> .....	202
6Po10 POLYSACCHARIDE-BASED POLYMERS FOR IMMUNORADIOTHERAPY <u>Lenka Loukotová, Linda Srbová, Mariia Rabyk, Jan Kučka, Kristýna Venclíková, Daniela Machová, Olga Janoušková, Jan Pankrác, Tomáš Heizer, Luděk Šefc, Petr Štěpánek, Martin Hrubý</u> .....	202
6Po11 BIOLOGICAL ACTIVITY OF POLY(2-ISOPROPENYL-2-OXAZOLINE) <u>Monika Majerčíková, Vladimír Raus, Juraj Kronek, Zuzana Kroneková</u> .....	203

6Po12 POLYMER PROTECTIVE COATINGS FOR DEPLETED URANIUM COMPONENTS <u>Jiří Pánek</u> , Zdeňka Sedláková, Peter Černoch, Miroslava Dušková, Martin Hrubý, Tomáš Chmela, Pavel Krupička .....	203
6Po13 VLIV FORMULAČNÍCH A PROCESNÍCH PARAMETRŮ NA VLASTNOSTI Cu <sup>2+</sup> /ALGINÁTOVÝCH ČÁSTIC PŘIPRAVENÝCH VNĚJŠÍ IONTOVOU GELACÍ HODNOCENÝ ANALÝZOU HLAVNÍCH KOMPONENT <u>Miroslava Pavelková</u> , Jakub Vysloužil, Kateřina Kubová, Sylvie Pavloková.....	204
6Po14 PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE POLYMERNÍCH, ENZYMOVĚ ŠTĚPITELNÝCH NOSIČŮ KANCEROSTATIK <u>Michal Pechar</u> , Jan Zelený, Robert Pola, Jozef Parnica, Olga Janoušková, Tomáš Etrych .....	205
6Po15 ANTIBAKTERIÁLNÍ VLASTNOSTI STŘÍBREM DEPONOVANÉHO POVRCHU CELULÓZY <u>Václav Švorčík</u> , Kateřina Kolářová, Zdeňka Kolská.....	205
6Po16 SAMOUSPOŘÁDANÉ POLYMERNÍ SYSTÉMY NESOUCÍ FLUOROVANÉ DERIVÁTY FERROCENU <u>Pavel Švec</u> , Kristýna Kolouchová, Ondřej Groborz, Ondřej Sedláček, Martin Hrubý .....	206
6Po17 ADHÉZIA BRONZU A ZMESI PŘÍRODNÉHO KAUCUKU METÓDOU MOLEKULÁRNEJ ADHÉZIE <u>Oravec Ján</u> , Meluš Pavol, Preťo Jozef, Hidetoshi Hirahara, Jing Sang .....	206
6Po18 VPLYV ÚPRAVY POVRCHU DRÔTU SILANMI NA POČIATOČNÚ ADHÉZIU GUMOVEJ ZMESI VO VÝROBE PÁTKOVÝCH LÁN <u>Pavol Meluš</u> , Ján Oravec, Ján Hronkovič, Jozef Preťo.....	207
<b>Postery - Sekcia 7: Jadrová chémia .....</b>	<b>208</b>
7Po01 VÝVOJ FLUORIDOVÝCH TERČOVÝCH MATRIC PRO STANOVENÍ <sup>26</sup> AL METODOU AMS <u>Kateřina Fenclová</u> , Josef Tecl, Tomáš Prášek, Maryana Bilous, Mojmir Němec .....	208
7Po02 STANOVENÍ PŘÍRODNÍCH RADIONUKLIDŮ <u>Alena Kelnarová</u> , Šárka Maříková, Michal Fejgl .....	208
7Po03 SROVNÁVACÍ STUDIE SORPCE RADIA A STRONCIA NA CEMENTOVÉ MATERIÁLY <u>Jana Kittnerová</u> , Barbora Drtinová, Dušan Vopálka.....	208
7Po04 ZAKONCENTROVANIE TECHNECISTANU NA UHLIKOVÝCH SORBENTOCH PRE MERANIE METÓDOU URÝCHLOVAČOVEJ HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRIE <u>Martin Daňo</u> , Jan Kujan, Karel Štamberg, Eva Viglašová, Michal Galamboš .....	209
7Po05 VLIV NANOKOMPOZITNÍCH MATERIÁLŮ VYVÍJENÝCH PRO PDTX NA ŽIVÉ BUŇKY V PŘÍTOMNOSTI RENTGENOVÉHO ZÁŘENÍ <u>Barbora Neužilová</u> , Kseniya Popovich, Jindřich Fleišmann, Viliam Múčka, Václav Čuba .....	209
7Po06 PRODUKCE SINGLETOVÉHO KYSLÍKU PRO FOTODYNAMICKOU TERAPII INDUKOVANOU RENTGENOVÝM ZÁŘENÍM <u>Iveta Terezie Pelikánová</u> , Kseniya Popovich, Lenka Procházková, Jindřich Fleišmann, Eva Mihóková, Václav Čuba.....	210
<b>Postery - Sekcia 8: Vyučovanie a história chémie .....</b>	<b>211</b>
8Po01 MOBILNÍ APLIKACE PRO STUDENTY VŠCHT <u>Daniel Bartoň</u> , Tomáš Mládek.....	211
8Po02 MLADÍ BADATELÉ NA ZŠ <u>Petra Blokešová</u> , Kateřina Trčková .....	211
8Po03 BUDOVANIE STÁLEJ EXPOZÍCIE VÝVOJA LABORATÓRNYCH PRÍSTROJOV <u>Monika Jerigová</u> , Ján Benko.....	211
8Po04 ELEKTRONICKÉ VÝUKOVÉ APLIKACE PRO PODPORU VÝUKY ZÁKLADNÍCH PŘEDMĚTŮ <u>Tomáš Mládek</u> , Martin Mastný, Miroslav Šimek, Jan Horníček, Ondřej Ruml .....	212
8Po05 INOVÁCIA PRAKTICKÝCH CVIČENÍ JEDNOTLIVÝCH CHEMICKÝCH ODBOROV S ÚČASŤOU POTENCIÁLNYCH ZAMESTNÁVATEĽOV Z PRAXE <u>Zuzana Vargová</u> , Renáta Oriňáková, Miroslav Almáši, Rastislav Serbin, Rastislav Varháč, Mária Ganajová Jana Dinajová .....	212

**Postery - Sekcia 9: Životné prostredie, potravinárstvo a biotechnológie..... 213**

- 9Po01 ADSORPCE LÉČIV Z VODNÉHO PROSTŘEDÍ NA AKTIVNÍ UHLÍ NA BÁZI BIOMASY  
Jan Bednárek, Ivan Koutník, Barbora Sokolová, Lenka Matějová, Gerardo Juan Francisco Cruz ..... 213
- 9Po02 KONTAMINACE ANTIMONEM V MÍSTECH ZATÍŽENÝCH DOPRAVOU  
Barbora Doušová, Miloslav Lhotka, František Bůzek, David Koloušek, Bohuslava Čejková, Iva Jačková .. 213
- 9Po03 COMPLEX PROCESSING OF PLANTAIN  
Alžbeta Chochulová, Vladimír Štefuca, Jana Kubincová, Jozef Višňovský ..... 214
- 9Po04 KONTAMINACE ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ PLATINOVÝMI KOVY V ZÁVISLOSTI NA INTENZITĚ AUTOMOBILOVÉ DOPRAVY – SROVNÁVACÍ STUDIE  
Stanislav Ježek, Renata Komendová ..... 214
- 9Po05 VYBRANÉ PODMÍNKY UŽITÍ STŘÍBRNÉ AMALGAMOVÉ ELEKTRODY JAKO POTENCIOMETRICKÉHO ČIDLA INDIKUJÍCÍHO NEČISTOTY VE VODÁCH  
Ladislav Novotný, Aneta Karasková, Renáta Petránková, Abraham Kabutey ..... 215
- 9Po06 CHEMICKÁ ANALÝZA PLASTOVÉHO ODADU POMOCOU FTIR A XPS ZO ZBERU USKUTOČNENÉHO POZDÍŽ DUNAJA V BRATISLAVE  
Matej Mičušík, Angela Kleinová, Michal Procházka, Silvia Podhradská, Alexandra Rabayová, Gabriel Bodor, Mária Omastová ..... 215
- 9Po07 SELEKTIVNÍ ODSTRANĚNÍ OXOANIONTŮ SELENU (IV) A (VI) Z VODNÝCH ROZTOKŮ  
Lenka Matoušková, Helena Parschová ..... 216
- 9Po08 VLIV TĚŽBY POROSTU BOROVICE LESNÍ NA KVALITU PODPOVRCHOVÝCH A PODZEMNÍCH VOD  
Jiří Palarčík, Miloslav Slezák, Petra Peroutková, Ondřej Špulák, Jan Leugner, Jiří Mikeš..... 216
- 9Po09 ZMENA PH AKO SPÔSOB ZVYŠOVANIA ÚČINNOSTI SORPCIE FARMACEUTÍK  
Petra Szabová, Michaela Plekancová, Monika Kováčová, Igor Bodík..... 217
- 9Po10 SELEKTIVNÍ ODSRANĚNÍ IONTŮ KOVŮ Z MODELOVÝCH ROZTOKŮ KYSELÝCH DŮLNÍCH VOD  
Yelena Toropitsyna, Luděk Jelínek ..... 217
- 9Po11 RHEOLOGICAL PROPERTIES AND CONTENT OF ACRYLAMIDE PRECURSORS OF HYBRID CEREAL TRITICALE  
Kristína Kukurová, Zuzana Ciesarová, Viera Jelemenská, Jana Horváthová, Miona Belović, Alexandra Torbica..... 218
- 9Po12 ODSTRAŇOVÁNÍ HALOGENOVANÝCH ORGANICKÝCH LÁTEK Z KONTAMINOVANÝCH VOD METODOU REDUKTIVNÍ DEHALOGENACE S VYUŽITÍM RANEYOVY SLITINY  
Petr Lacina, Michal Hegedüs, Miroslav Plotěný, Jaroslav Lev, Barbora Kamenická ..... 218

**Postery - Sekcia 10: Chemprogress - chemické technológie..... 220**

- 10Po01 THE INFLUENCE OF DIENE LIGANDS AND ANIONIC PART OF RUTHENIUM COMPLEXES ON HYDROGENATION OF BUTYL SORBATE  
M. Kotova, K. Kollárová, E. Vyskočilová, L. Červený ..... 220
- 10Po02 PŘÍPRAVKY S OBSAHEM ALARELINU NEBO METOKLOPRAMIDU K OVLIVNĚNÍ REPRODUKCE RYB  
Jan Muselík, Jakub Vysloužil, Kateřina Kubová, Tamás Kázmer, Nikola Dvořáková, Martina Holická, Peter Podhorec, David Vetchý ..... 221
- 10Po03 STUDIUM MOŽNOSTI VYUŽITÍ KONVERZNÍ REAKCE K PŘEPRACOVÁNÍ PRŮMYSLOVÝCH SÁDROVCŮ  
Ivona Sedlářová, Jan Vídenský, Patrik Volner, Kateřina Bednářová ..... 221
- 10Po04 STABILITNÍ STUDIE INOVATIVNÍHO DETEKTORU VE FORMĚ PELET S PATENTOVANOU KOMPOZICÍ PRO DETEKCI INHIBITORŮ CHOLINESTERÁZY  
David Vetchý, Jiří Zeman, Sylvie Pavloková, Vladimír Pitschmann, Aleš Franc, Martina Urbanová, Ivana Šeděnková..... 222

**Autorský index..... 223**

## PLENÁRNA PREDNÁŠKA

### "DYNAMIC MOLECULAR SYSTEMS" - FROM SWITCHES TO MOTORS

Bernard Lucas Feringa

## POZVANÉ PREDNÁŠKY

### PP1

#### RTUŤOVÉ ELEKTRODY A JEJICH MÍSTO V SOUČASNÉM VÝZKUMU BIOMOLEKUL

Miroslav Fojta

*Biofyzikální ústav AVČR, v.v.i., Královopolská 135, 612 65 Brno, Česká republika, [fojta@ibp.cz](mailto:fojta@ibp.cz)*

V tomto roce si připomínáme 60. výročí udělení Nobelovy ceny prof. Jaroslavu Heyrovskému za vynález polarografie. Tato metoda je založená na využití kapající rtuťové elektrody (DME). Ta má některé unikátní vlastnosti, zejména atomárně hladký dokonale obnovitelný povrch a široké negativní potenciálové okno i v protických rozpouštědlech. Tyto vlastnosti předurčují rtuťové elektrody k aplikacím v oblasti analýzy nejen jednoduchých anorganických a organických redukovatelných analytů, ale i biomakromolekul (v jejichž případě je práce ve vodném prostředí obvykle nezbytností). První práce věnované polarografií proteinů byly zveřejněny již koncem dvacátých let minulého století ve spojení se jmény Jaroslava Heyrovského a Rudolfa Brdičky. Ve druhé polovině padesátých let byla Emilem Palečkem objevena polarografická aktivita nukleových kyselin (NK). Elektrochemický výzkum v oblasti těchto biopolymerů byl prakticky až do sedmdesátých let spojen se rtuťovými elektrodami, ať již v podobě DME nebo s visící rtuťovou kapkovou elektrodou (HMDE) (přehledně např. v [1,2]). Přes pozdější rozmach aplikací tuhých elektrod v elektroanalýze biopolymerů si rtuťové elektrody stále drží svůj primát v oblasti studia struktury proteinů a nukleových kyselin, zejména relativně malých změn jejich struktury, a specificky v těch případech, kdy je výhodné pro tento účel využívat katalytické vylučování vodíku. Příklady těchto studií z poslední doby budou prezentovány v přednášce.

*Tato práce vznikla za podpory projektu SYMBIT reg. č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000477 financovaného z ERDF.*

#### Literatura:

[1] Paleček, E., Tkáč, J., Bartosik, M., Bertok, T., Ostatná, V., Paleček, J.: *Chem Rev* 115, 2045 (2015).

[2] Paleček, E., Bartošík, M.: *Chem Rev* 112, 3427 (2012).

### PP2

#### OD SÍRY K PROTOTYPU - NOVÝ TYP KONVERZNÝCH ELEKTRÓDOVÝCH MATERIÁLOV PRE LI-S BATÉRIE

Andrea Straková Fedorková<sup>1</sup>, Dominika Capková<sup>1</sup>, Renáta Oriňaková<sup>1</sup>, Tomáš Kazda<sup>2</sup>, Elena Shembel<sup>3</sup>, Pedro Gomez-Romero<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovensko*

<sup>2</sup>*Ústav elektrotechnológie, Elektroetnická fakulta, Vysoké Učení Technické v Brně, Technická 10, 616 00 Brno, Česká Republika*

<sup>3</sup>*Ukrainian State University of Chemical Technology, Gagarin Ave. 8, Dnipropetrovsk, Ukraine, 49005*

<sup>4</sup>*Institut Català de Nanociència i Nanotecnologia, ICN2, CIN2 / Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Campus UAB, E-08193 Bellaterra, Barcelona, Spain 4*

*E-mail: [andrea.fedorkova@upjs.sk](mailto:andrea.fedorkova@upjs.sk)*

Li-iónové batérie majú mnohostranné využitie v prenosných elektronických zariadeniach, pri hybridnom pohone áut a v dopravných prostriedkoch s elektrickým pohonom. Ich najväčšou výhodou je dostupnosť mnohých tvarov, rozmerov a hlavne nízka hmotnosť keďže lítium je tretí najľahší prvok. Problémom sú však katódové materiály, ktoré vo väčšine prípadov tvoria oxidy kovov ako kobalt, nikel, vanád a iné. V prípade širšieho využitia týchto batérií v automobilovom priemysle nie je kobalt práve najvhodnejší – z hľadiska stability a taktiež z cenového a environmentálneho hľadiska. Preto sa dnešný výskum sústreďuje na hľadanie nových alternatív. Vhodnou náhradou týchto materiálov je síra, ktorá je dostupná, lacná, netoxická v porovnaní s ťažkými kovmi a jej teoretická



kapacita je desať násobne vyššia ako u dnešných Li-iónových batérií. Aj tu sa však stretávame s viacerými problémami, ako sú stabilita, nízka cyklovateľnosť, zlá vodivosť síry a tvorba nerozpustných polysulfidov. Tieto problémy sa však dajú riešiť s použitím nanomateriálov na báze uhlíka či vodivých polymérov. Cieľom nášho výskumu je pripraviť kompozitné materiály s vysokým obsahom síry s čo najvyššou kapacitou, účinnosťou a cyklovateľnosťou. Následne sú tie najlepšie materiály otestované aj v reálnych malých prototypoch Li-S batérií. Tieto články by mali byť hlavne oveľa bezpečnejšie, stabilnejšie a lacnejšie ako dnešné batérie.

*Tento výskum bol podporený projektom NATO Science for Peace and Security 985148.*

### PP3

## CHEMICKÁ GRAMOTNOSŤ ALEBO ČO POTREBUJEME VEDIEŤ Z CHÉMIE

Ján Reguli

*Katedra chémie, Pedagogická fakulta Trnavskej univerzity, Priemyselná 4, 918 43 Trnava; jreguli@gmail.com*

*Chemická gramotnosť* obyvateľstva zahŕňa schopnosť bezpečne narábať s látkami, s ktorými bežne prichádzame do styku a ktorých fungovanie má chemickú podstatu (a toto sú vlastne všetky látky okolo nás – nielen látky z chemického laboratória). Počet nových pripravených zlúčenín exponenciálne rastie a v júni 2015 presiahol 100 miliónov. Mal by podobne exponenciálne rásť aj rozsah predmetu chémie? Asi nie – z väčšiny žiakov sa stanú občania, ktorí vo svojom živote nepotrebujú podrobné vedomosti o chemickej podstate a štruktúre látok [1].

Cieľom tohto príspevku je nájsť odpovede alebo aspoň podnietiť diskusiu vedcov na viaceré otázky, týkajúce sa komunikácie vedy, vzťahu vedy a vzdelávania, ale aj výchovy a vzdelávania navzájom – a to všetko s dôrazom na chémiu [2]. Je potrebné ujasniť si aj vzťah vysokoškolského vedca a vysokoškolského učiteľa, vzťah chemikov a didaktikov chémie. Súčasný stav nepraje tvorbe nových učebníc, ktorých kvalitný obsah aj forma majú rovnakú dôležitosť.

Jedným z možných prístupov k zlepšeniu chemickej gramotnosti verejnosti je nahradenie klasickej chémie v stredných školách s nechemickým zameraním alternatívnym obsahom predstavujúcim chemickú podstatu látok a dejov, s ktorými prichádzame v bežnom živote do styku [3]. Súčasťou tohto predmetu musí byť aj boj proti konšpiračným teóriám a hoaxom s prírodovedným obsahom.

Sústavami, s ktorými sa najčastejšie stretávame a ktoré najviac svojou činnosťou ohrozujeme sú voda a vzduch. Zmena globálneho životného prostredia Zeme zapríčinená ľuďmi predstavuje hrozbu pre našu budúcu existenciu. Keďže prebiehajúce zmeny sú najmä zmenami chemickými, potrebujeme poskytnúť žiakom dostatok vedomostí na prijímanie informovaných a zodpovedných rozhodnutí. Treba pritom povedať, že pre prijímanie takýchto rozhodnutí a pre zodpovedné správanie je z dvoch súčastí slova *edukácia* významnejšia *výchova* než *vzdelanie*.

[1] Reguli, J.: Stačí jedna stredoškolská chémie? *Výskum, teorie a praxe v didaktice chemie*, XXIII. Mezinárodní konference o výuce chemie, Hradec Králové, 15. – 17. 9. 2014, str. 95-102. ISBN 978-80-7435-417-5.

[2] Reguli J. a kol.: *Veda, komunikácia, verejnosť, škola*. Trnava : TYPI Universitatis Tyrnaviensis, 200 str. (2011). ISBN 978-80-8082-508-9.

[3] Reguli J. a kol.: *Chémia a spoločnosť*. Trnava : TYPI Universitatis Tyrnaviensis, 570 str. (2018). ISBN 978-80-568-0156-7.

### PP4

## POTRAVINY BEZ AKRYLAMIDU: TEÓRIA A PRAX

Zuzana Ciesarová

*NPPC Výskumný ústav potravinársky, Priemyselná 4, 824 75 Bratislava, zuzana.ciesarova@nppc.sk*

Akrylamid ako procesný kontaminant, zaradený podľa Medzinárodnej agentúry pre výskum rakoviny v skupine 2A medzi pravdepodobne karcinogénne látky, sa vyskytuje v mnohých bežných potravinách, ktoré prešli tepelnou úpravou. Patria medzi ne smažené, vyprážené, opekané, fritované a pečené potraviny zo zemiakov, z niektorých druhov zeleniny a zo širokého spektra obilnín, taktiež nápoje z praženej kávy a kávovín. Snaha o zníženie jeho výskytu vyústila do Nariadenia Komisie EÚ č. 2017/2158 [1], ktorým sa stanovujú referenčné hodnoty akrylamidu, nariaďuje sa povinné meranie akrylamidu vo výrobkoch a zavedenie opatrení na jeho minimalizáciu už počas priemyselného spracovania, a to v prípadoch, ak sú referenčné hodnoty prekročené. Opatrenia pre prax ponúkané v aktualizovanej príručke Acrylamide Toolbox 2019 [2] vychádzajú z vedeckých informácií o mechanizme vzniku akrylamidu a faktoroch, ktorými sa dá modifikovať jeho tvorba a eliminácia. Ich zavedenie v praxi si však vyžaduje komplexný prístup tak, aby sa opatrenia čo najmenej dotkli očakávanej kvality výrobkov [3]. Skúsenosti z prvého roka uplatňovania tohto nariadenia v rôznych odvetviach technologického spracovania potravín na Slovensku sú predmetom tohto príspevku.

Tento príspevok bol vytvorený s využitím infraštruktúry „Centra excelentnosti pre kontaminujúce látky a mikroorganizmy v potravinách“ (ITMS 26240120042) a Špecializovaného laboratória cereálnych technológií zriadeného v rámci projektu „Stratégia eliminácie akrylamidu v technologickom procese výroby potravín“ (ITMS 26240220091). Výskum bol realizovaný s podporou projektov APVV-17-0212 „Bioaktívne látky rakyníka rešetliakového a ich uplatnenie vo funkčných potravinách“ a APVV-16-0088 „Komplexné využitie rastlinnej biomasy v biopotravinách s pridanou hodnotou“.

- [1] Nariadenie Komisie (EÚ) 2017/2158 z 20. novembra 2017, ktorým sa stanovujú opatrenia na minimalizáciu množstiev akrylamidu a jeho referenčné hodnoty v potravinách. Úradný vestník Európskej únie z 21.11.2017, L 304/24-304/44. Available from <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/SK/ALL/?uri=CELEX:32017R2158>
- [2] Acrylamide Toolbox 2019. Food Drink Europe, Belgium 2019. Available from: [https://www.fooddrinkeurope.eu/uploads/publications\\_documents/FoodDrinkEurope\\_Acrylamide\\_Toolbox\\_2019.pdf](https://www.fooddrinkeurope.eu/uploads/publications_documents/FoodDrinkEurope_Acrylamide_Toolbox_2019.pdf)
- [3] Palermo, M., Gökmen, V., De Meulenaer, B., Ciesarová, Z., Zhang, Y., Pedreschi, F., Fogliano, V.: Acrylamide mitigation strategies: Critical appraisal of the FoodDrinkEurope toolbox. Food and Function, 2016, 7(6), pp. 2516-2525

## PP5

### ZELENÁ ANALYTICKÁ CHÉMIA

Ján Labuda<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav analytickej chémie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, [jan.labuda@stuba.sk](mailto:jan.labuda@stuba.sk)

Znečistenie životného prostredia, globálne klimatické zmeny a riziká pre zdravie človeka predstavujú dnes veľké obavy vedúce k požiadavkám na zmeny v chemických výrobách a vo využívaní chemikálií. Kľúčovým prvkom pri eliminácii chemických rizík je myslenie na chémiu. To je hlavnou myšlienkou Zelenej chémie [1]. Sledujúc jednotlivé kroky procesu chemickej analýzy je analytický chemik riešiteľom problémov a uvedené myslenie na chémiu patrí do jeho každodennej činnosti. Dobrá analytická chémia je tak zo svojej podstaty zelenou chémiou [2, 3].

S ohľadom na udržateľný rozvoj – koncepciu vytvorenú v roku 1987 Svetovou komisiou pre životné prostredie a rozvoj Spojených národov (United Nations World Commission on Environment and Development), analytická chémia by mala ísť ešte ďalej. Udržateľnou analytickou chémiou je chémia idúca za zelenú chémiu. K cieľom analytickej chémie v tomto zmysle patrí: (i) detekcia/stanovenie stále menšieho a menšieho množstva analytu v menšom a menšom množstve vzorky viac a viac zložitej matrice pri zachovaní správnosti a presnosti výsledku, (ii) byť environmentálne udržateľnou ako je to len možné.

Prednáška prezentuje smery vývoja analytickej chémie a to najmä vo vzťahu k vybraných moderných experimentálnym prístupom ako sú separačné techniky na základe mikroextrakcie, úpravy vzorky pre stopovú prvkovú analýzu, nové materiály v elektroanalytickej chémii, prietokové analytické systémy ako aj vo vzťahu k úlohám analytickej chémie pri detekcii a hodnotení polutantov a potenciálne rizikových látok.

Táto práca vznikla za podpory Vedeckej grantovej agentúry VEGA (Projekt 1/0489/16), Agentúry na podporu vedy a výskumu (APVV-0797-11) a Kompetenčného centra inteligentných technológií pre elektronizáciu a informatizáciu systémov a služieb, ITMS 26240220072.

- [1] Anastas P., Warner J., *Green Chemistry: Theory and Practice*, Oxford University Press, Oxford (1998)
- [2] *Handbook of Green Analytical Chemistry*, de la Guardia M. and Garrigues S., eds., Wiley, 2012
- [3] Turner Ch., *Pure Appl. Chem.* 85, 2217 (2013)

## PP6

### ULTRARÝCHLA LASEROVÁ SPEKTROSKOPIA: OD ČASOVÉHO ROZLIŠENIA PO ADAPTÍVNE RIADENIE

Dušan Velič<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Mlynská dolina, 84215 Bratislava

<sup>2</sup> Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 84104 Bratislava  
[duvellabs@gmail.com](mailto:duvellabs@gmail.com)

Čas je dôležitý fenomén a rovnako je tomu aj v chémii. Premena chemickej látky v čase, ako rýchlosť reakcie, patrí medzi fundamentálny koncept chémie. Rýchlosťou chemickej reakcie sa zaoberá kinetika a výsledkom je stanovenie rýchlostnej konštanty. Inverznou veličinou rýchlostnej konštanty je doba života reakčného stavu,

ktorého skúmaním sa zaoberá dynamika. Určenie doby života prešlo historicky vývojom, kde sa technicky skracovalo časové rozlíšenie určenia tejto doby. Van't Hoff začínal so sekundami, s príchodom laserov sa prešlo na nanosekundy a v súčasnosti je pre chémiu relevantné najlepšie rozlíšenie femtosekundové. Pre chémiu relevantné znamená, že valenčné elektróny, ktoré sprostredkujú chemickú reakciu, majú takúto dobu excitovaného života. Dynamika elektrónov bude predstavená na ultrarýchlej fluorescencii, v systémoch cyklodextrínov, micel a polytiofénov. Možno ešte zaujímavejší koncept, ako určenie dynamiky, je pokus o riadenie dynamiky. Lebo ak máme ultrakrátku dobu života a vieme ich mapovať pomocou ultrarýchlych impulzov lasera, podobne môžeme tieto krátkožijúce excitované stavy riadiť pomocou ultrakrátkych impulzov fotónov. V tomto koncepte je fotón reakčným médiom, ktoré ale neustále excituje ten istý elektrón a tak ho usmerňuje po potenciálovej ploche k žiadanému minimu, eventuálne k žiadanému produktu. S ohľadom na vopred zadaný výsledok je takéto usmerňujúce riadenie potrebné uskutočniť cez spätnú väzbu prostredníctvom riešiaceho algoritmu a modifikácie spektrálneho zloženia laserového impulzu. Takéto adaptívne riadenie bude predstavené na príklade post-ionizácie v hmotnostnej spektrometrii. Ultrarýchla spektroskopia je tak predstavená, ako nielen snaha o detailné pochopenie chemických interakcií v reálnom čase, ale aj ako potenciálna metóda riadenia fotochemických reakcií.

*Pod'akovanie patrí najmä mojim najbližším kolegom a študentom, s veľkým príspevom ktorých teraz môžem prezentovať tieto výsledky a to s vďačnosťou podporení grantami APVV, VEGA a QUTE.*

## PP7

### **OD PRÍRODNÝCH DROG K SYNTETICKÝM, ŠTRUKTÚRA, VLASTNOSTI A SYNTÉZA**

Miroslav Kríž

*Fedinova 6, 85101 Bratislava, miro.kriz@post.sk*

To „čarovné“ slovo droga máta ľudí od nepamäti. Evokuje falošné nádeje, dáva možnosť sniť nereálny svet, svet plných čudesností, svet rozprávok, ale aj krutých a trpkých prebudení zo snov do skutočnosti. Droga to je množstvo zničených i zmarených životov, predovšetkým, mladých ľudí na prahu skutočného života...nie toho vysnivaného, farebného so zvláštnymi zvukmi z iných svetov...

V prednáške sa oboznámime s históriou používania prírodných drog, s ich najbežnejšími zástupcami, rozdelenie drog podľa jednotlivých kategórií, ich účinky na ľudské telo. V ďalšej časti sa oboznámime s najbežnejšími syntetickými drogami, ich vývojom z minulosti až do dnešných dní. Zoznámime sa s ich vlastnosťami i rizikami pri ich užívaní. Na niektorých príkladoch sa oboznámime aj s ich syntézou a prípravou pre jednotlivé typy drog. Prednáška má za účel priblížiť nebezpečný svet drog bežnému človeku, aby sa mohol vyvarovať sklznutia na cestu do pekla.

## PREDNÁŠKY SPONZOROV

### MIKROPLASTY V OCEÁNOCH AJ PIVE

Mariana Danková

*PRAGOLAB, s.r.o., Drieňová 34, 821 02 Bratislava, dankova@pragolab.sk*

Čo sú to mikroplasty a odkiaľ sa berú?

Za týždeň zje bežný človek v priemere dvetisíc mikročastíc plastov. Spolu vážia päť gramov, rovnakú hmotnosť má napríklad kreditná karta, 4 gramy váži hygienicky balený cukor, ktorý dostaneme v kaviarni ku káve..

Mikroplasty sú plasty s dĺžkou (veľkosťou) menšou ako 5 milimetrov. Do prírody sa dostávajú z rôznych zdrojov, napríklad z kozmetiky, oblečenia či pri priemyselných procesoch. Podľa ich pôvodu sa ďalej rozdeľujú do dvoch skupín - primárne a sekundárne.

"Čelíme plastovej kríze a svet potrebuje spojiť sily pri jej riešení. Okamžite konať musia nielen vlády, ale i firmy - producenti plastov a konzumenti," vysvetľuje v tlačovej správe riaditeľ WWF International (Svetový fond na ochranu prírody) Marco Lambertini [1].

Analýza mikroplastov v rôznych matriciach sa stala výzvou pre mnohé analytické techniky, pracujúce na rôznych princípoch. Thermo Fisher Scientific prináša riešenia uvedeného analytického problému FTIR a Ramanovou spektroskopiou, ktoré umožňujú identifikovať, charakterizovať a kvantifikovať mikroplasty z rôznych zdrojov vzoriek (flašková voda, morská voda, priemyselné odpadové toky) bez toho, aby bolo potrebné byť odborníkom na spektroskopiu.

[1] [http://wwf.panda.org/wwf\\_news/press\\_releases/?348337/Revealed-plastic-ingestion-by-people-could-be-equating-to-a-credit-card-a-week](http://wwf.panda.org/wwf_news/press_releases/?348337/Revealed-plastic-ingestion-by-people-could-be-equating-to-a-credit-card-a-week)

### PREZENTÁCIA FIRMY LACHNER

Eva Cengelová

*Lach-Ner, s.r.o., Račianska 66, 831 02 Bratislava*

Som riaditeľkou firmy Lach-Ner s.r.o., na Slovensku a chcela by som Vám priblížiť do akej hĺbky siahajú korene terajšej firmy **lach:ner**. Určite každý z nás pozná spoločnosť Lachema Brno a tým spojený aj o.z. Lachema Brno Neratovice. V roku 2000 sa novým vlastníkom Lachemy stala známa farmaceutická firma PLIVA z chorvátskeho Záhrebu a došlo k zmene názvu Lachema-Pliva a.s.. V roku 2002 na čele s doterajším majiteľom firmy vznikol samostatný právnický subjekt s názvom Lach-Ner, s.r.o., (Lach-Lachema ;Ner-Neratovice) ktorý bol nástupcom PLIVA-Lachema.



Slovensko do minulého roka 2018 poznalo spoločnosť **lach:ner** vďaka materskej firme so sídlom v Neratoviciach a jej obchodným zástupcom. Moderná doba si vyžaduje posuny vpred. Otvorením dcérskej firmy na Slovensku, bola práve snaha o bližší kontakt so Slovenskou akademickou obcou. Chceme poznať nielen Vás, ale aj vaše ciele, ambície a aj problémy pred ktorými stojíte a pomôcť Vám ich prekonať.

Práve osobný prístup vnímame ako náš záväzok pre vybudovanie dlhodobých partnerstiev.

Naším záujmom bola vždy kvalita. Či už sa jedná o chemikálie alebo služby. Kým na služby sme tu sami, v oblasti chemikálií sa môžeme oprieť aj o partnerstvá s najvýznamnejšími svetovými výrobcami Thermo Fisher Scientific v oblasti chemikálií a reagensii (**Acros Organics, Alfa Aesar, Fisher Chemical, Fisher Bioreagents, Mybridge**). Aj vďaka tomu sa nám už 14 rokov darí podporovať vedu, výskum a výrobu kvalitnou a čistou chémiou nielen značky **lach:ner**.

Staviame na zdravých základoch. Kvalite, ktorá nie je len slovom, ale realitou vďaka prvotriednemu výberu chemikálií, vlastným kontrolným akreditovaným laboratóriám, globálnej pôsobnosti a na viac než 100 ročných skúsenostiach.



**Podporujeme materské, základné a stredné školy.** Aktívne sa venujeme nášmu vlastnému projektu "Chémia do škôl", ktorý má na Slovensku veľký úspech. Naša práca tak dostáva vyšší rozmer, pretože budujeme lásku k chémii u detí a vnímame to, že o pár rokov môžu byť medzi nimi naši budúci kolegovia/kolegyne a výborní vedci/vedkyne.

Som hrdá, že môžem byť na čele Slovenského tímu **lach:ner**.

Aj tento rok budeme ďalej šíriť molekuly, ktoré tvoria náš svet.



## **NOVÉ TRENDY A INOVACE V OBLASTI MOLEKULOVÉ VIBRAČNÍ SPEKTROMETRIE**

David Matoušek, Jan Neuman, Jozef Priboj

*Optik Instruments s.r.o., Purkyňova 649/127, 612 00 Praha, info@brukeroptics.cz*

Infračervená spektrometrie (FTIR) a Ramanova spektrometrie jsou nejrozšířenější techniky molekulové vibrační spektrometrie s širokým využitím v mnoha oblastech vědy i průmyslu. Na několika příkladech nejnovějších přístrojů z dílny německého výrobce Bruker Optics jsou prezentovány nejnovější technologie a pokroky v těchto technikách, jako jsou např:

- Softwarová zjednodušení a moderní postupy práce s přístroji a daty
- FM technologie pro měření ve vzdálené i střední IČ oblasti jedním měřením
- Technologie sekvenčně posunuté excitace (SSE™) pro potlačení fluorescence v Ramanově spektrometrii
- Technologie plošného detektoru (FPA) pro rychlý FTIR imaging s vysokým prostorovým rozlišením

Nové technologie přinášejí i lepší uplatnění přístrojů, a proto neustále roste množství potenciálních aplikací pro FTIR i Ramanovu instrumentaci. Výše uvedené technologie proto budou prezentovány spolu s konkrétními výzkumnými aplikacemi, pro které mají tyto technologické inovace značný přínos.

## PREDNÁŠKY - SEKCIA 1: ANALYTICKÁ CHÉMIA

### 1P01

#### POKROČILÉ ELEKTROCHEMICKÉ SENZORY NA RÝCHLU A SPOĽAHLIVÚ ANALÝZU ČOKOLÁDOVÝCH VÝROBKOV

Lubomír Švorc, Olha Sarakhman, Marek Haško

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

Vývoj nových a perspektívnych elektrochemických senzorov patrí v súčasnosti k jedným z určujúcich smerov v oblasti moderných elektroanalytických metód. Na ich spoľahlivé použitie v praxi musia byť splnené niektoré základné požiadavky ako napr. dostatočná citlivosť, postačujúca selektivita, primeraný potenciálový rozsah, reprodukovateľnosť odozvy senzora a rýchle a jednoduché použitie. Príspevok sa zaoberá vývojom a využitím nového postupu na stanovenie teobromínu (xantínový alkaloid štruktúrne podobný s kofeínom a teofylínom) v rôznych čokoládových výrobkoch za využitia miniaturizovaných elektrochemických senzorov z bórom dopovaného diamantu (BDD). Tento elektródový materiál je v súčasnosti považovaný za citlivý elektrochemický senzor na rýchle a spoľahlivé stanovenie rôznych štruktúrne a biologicky zaujímavých látok vo vzorkách farmaceutického, klinického, environmentálneho a potravinárskeho charakteru [1-3]. V tejto súvislosti budú diskutované aj prednosti elektrochemických senzorov na báze BDD, ich obmedzenie a perspektívy ďalšieho rozvoja v oblasti elektroanalýzy. Hlavným cieľom príspevku bude objasnenie elektrochemického správania teobromínu na BDD elektróde, optimalizácia experimentálnych podmienok, stanovenie základných analytických (validačných) parametrov, zhodnotenie vplyvu potenciálnych interferentov (selektivita) a dôraz bude kladený aj na využiteľnosť týchto senzorov v analýze vzoriek rôznych čokoládových výrobkov.

*Autori ďakujú za podporu Vedeckej grantovej agentúre VEGA MŠ SR a SAV (projekt č. 1/0489/16) a Programu na podporu mladých výskumníkov.*

- [1] Švorc L., Haško M., Sarakhman O., Kianičková K., Stanković, D., Otrísal, P.: *Microchem. J.* 142, 297 (2018).  
 [2] Švorc L., Strežová I., Kianičková K., Stanković D., Otrísal P., Samphao A.: *J. Electroanal. Chem.* 822, 144 (2018).  
 [3] Pysarevska S., Dubenska L., Plotycya S., Švorc L.: *Sens. Actuators B* 270, 9 (2018).

### 1P02

#### POKROKY VO VÝVOJI MIKROEXTRAKČNÝCH TECHNÍK PRI SLEDOVANÍ VYBRANÝCH XENOBIOTÍK

Svetlana Hrouzková<sup>1</sup>, Agneša Szarka<sup>1</sup>, Silvia Zichová<sup>1</sup>, Adriana Brisudová<sup>1</sup>, Kristína Búčiková<sup>1</sup>, Nikola Kubasová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav analytickej chémie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika, svetlana.hrouzkova@stuba.sk*

Miniaturizácia sa v súčasnosti stala kľúčovým faktorom pri tvorbe nových efektívnych riešení v rámci prípravy vzorky [1]. Zníženie počtu operácií prináša výhody v podobe zvýšenia výkonu a zníženia negatívnych matricových efektov, čo je dôležité najmä pri sledovaní stopových a ultrastopových koncentrácií analytov v komplexných matriciach. S cieľom odstrániť nevýhody konvenčných extrakčných metód sa vyvíjajú analytické metódy aplikujúce mikroextrakčné techniky kvapalinou (LPME, liquid phase micro-extraction) a tuhou fázou [2]. LPME je možné realizovať rôznymi módmi extrakcie, poukážeme na výhody aplikácie extrakcie jednou kvapkou a disperznej mikroextrakcie kvapalina-kvapalina. Neustále pribúdajú ďalšie nové prístupy k modifikovaniu týchto metód, čo poukazuje na variabilitu a perspektívu týchto techník [3]. V rámci techník mikroextrakcie tuhou fázou sa fokusujeme na mikroextrakciu sorbentom naplneným v ihle mikrostriekačky.

Na extrakciu tuhých vzoriek sa popri konvenčných metódach používa celý rad techník v kombinácii s druhým stupňom extrakcie vo verzii „mikro“ na dosiahnutie zakonzentrovania analytov, re-extrakcie do iného rozpúšťadla s benefitom zvýšenej selektivity.

Cieľom prezentácie je demonštrácia výhod mikroextrakčných techník a ich kombinácií na riešenie aktuálnych problémov prípravy vzorky pred analýzou v oblasti bezpečnosti potravín, analýzy vzoriek v klinickej, environmentálnej a forennej oblasti.

*Autori ďakujú za podporu nadačného fondu AXA Nadačný fond v Nadácii Pontis za podporu v rámci programu Mladý inovátor a Programu na podporu excelentných tímov mladých výskumníkov STU.*

- [1] Hrouzková S.: In: *Food analysis: Innovative analytical tools for safety and quality assessment*, John Wiley&Sons, Hoboken (2017).  
 [2] Andraščíková M., Hrouzková S.: *Sep. & Purif. Revs.* 44, 1 (2015).  
 [3] Hrouzková S., Brišová M., Szarka A.: *J. Chromatogr. A* 1506, 18 (2017).

### 1P03

#### STUDIUM ELEKTROCHEMICKÉHO CHOVÁNÍ AZOBARVIVA SUDAN I JAKO MARKEROVÉHO SUBSTRÁTU PRO SLEDOVÁNÍ HYDROXYLAČNÍCH REAKCÍ KATALYZOVANÝCH CYTOCHROMY P450

Karolina Schwarzová<sup>1</sup>, Anna Ondráčková<sup>2</sup>, Marie Stiborová<sup>3</sup>, Miroslav Fojta<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 43 Praha 2, Česká republika, kpeckova@natur.cuni.cz

<sup>2</sup>Biofyzikální ústav AVČR, v.v.i., Královopolská 135, 612 65 Brno, Česká republika

<sup>3</sup>Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra biochemie, Albertov 6, 128 43 Praha 2, Česká republika

Sudan I ((fenylazo)-2-naftol) je synteticky vyráběné červené azobarvivo, které se používá na barvení plastů, leštících prostředků, rozpouštědel a olejů [1]. V minulosti byl používán i v potravinářství, nicméně prokázaná genotoxicita a karcinogenita pro laboratorní zvířata a studie karcinogenity pro člověka vedly k zákazu používání této látky v potravinářství. Za těmito účinky stojí reaktivní metabolity vznikající v průběhu reakcí katalyzovaných cytoplazmatickými derivatizačními enzymy či mikrosomálními subcelulárními systémy jater obsahujícími cytochromy P450 (CYP), např. P450 hydroxylázy [2]. Sudan I je využíván jako markerový substrát pro studium těchto enzymových hydroxylačných reakcí.

Strukturální motivy Sudanu I umožňují uplatnění elektrochemických metod pro jeho detekci v různých matricích, největší pozornost je věnována potravinářským produktům, do kterých je toto barvivo stále nelegálně přidáváno [1, 3]. Sudan I obsahuje redukovatelnou azo skupinu, zároveň ho lze snadno oxidovat díky přítomnosti fenolické skupiny.

Cílem této studie je studium elektrochemického chování Sudanu I a jeho synteticky připravených modelových metabolitů zaměřené na vyhodnocení elektrochemických reakcí následujících po primární oxidaci a redukcii Sudanu I. Na základě komparativních studií se standardy předpokládaných reakčních produktů (např. chinonů, anilin, 1-amino-2-naftol) byla studována možnost odlišení jednotlivých hydroxylačných produktů. Měření byla prováděna na borem dopované diamantové elektrodě a elektrodě z pyrolytického grafitu. Byly porovnávány voltametrická odezva jednotlivých derivátů v katodické a anodické oblasti a adsorpční vlastnosti mateřských molekul a jejich derivátů na obou elektrodách. Výsledky naznačují možnost použití jednoduchých elektrochemických metod pro analýzu enzymových reakčních směsí s využitím Sudanu I jako substrátu.

*Tento výzkum byl proveden v rámci specifického vysokoškolského výzkumu (SVV 260 440). Autoři děkují za finanční podporu Grantové agentuře České republiky (GAČR 18-01710S).*

- [1] Chailapakul O., Wonsawat W., Siangproh W., Grudpan K., Zhao Y.F., Zhu. Z.W.: *Food Chemistry* 109, 876-882 (2008).  
 [2] Stiborova M., Martinek V., Rydlova H., Hodek P., Frei E.: *Cancer Research* 62, 5678-5684 (2002).  
 [3] Li B.L., Luo J.H., Luo H.Q., Li N.B.: *Food Chemistry* 173, 594-599 (2015).

### 1P04

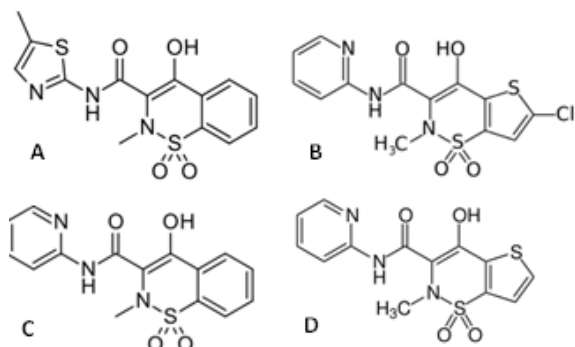
#### VOLTAMETRICKÁ ANALÝZA PROTIZÁNĚTLIVÝCH LÉČIV ZE SKUPINY OXICAMŮ

Renáta Šelešovská<sup>1</sup>, Frederika Hlobeňová<sup>1</sup>, Martina Mandincová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika, renata.selesovska@upce.cz

Oxicamy představují skupinu strukturálně úzce příbuzných léčiv s protizánětlivými, analgetickými a antipyretickými účinky [1]. V rámci této práce bylo studováno voltametrické chování čtyř látek z této skupiny, konkrétně meloxicamu, lornoxicamu, piroxicamu a tenoxicamu. Použitou pracovní elektrodou byla borem dopovaná diamantová elektroda (BDDE), která byla zvolena pro své výjimečné elektrochemické vlastnosti, zejména široký využitelný potenciálový rozsah umožňující sledovat oxidační signály při značně pozitivních potenciálech [2, 3]. Mechanismus elektrochemické oxidace byl studován s využitím vysokoúčinné kapalinové chromatografie s hmotnostním detektorem, kdy byly analyzovány roztoky analytů po elektrolýze na uhlíkové

elektrodě. Na závěr byly vyvinuty voltametrické metody pro stanovení výše zmíněných léčiv, které byly úspěšně aplikovány při analýze farmaceutických přípravků.



**Obr. 1.** Strukturní vzorce meloxicamu (A), lornoxicamu (B), piroxicamu (C) a tenoxicamu (D).

*Tato práce byla financována z prostředků Grantové agentury České republiky (GAČR, projekt č. 17-03868 S) a Univerzitou Pardubice (projekt č. SGS\_2019\_001).*

[1] Olkkola K. T., Brunetto A. V., Mattila M. J.: *Clin. Pharmacokinet.* 26, 107 (1994).

[2] Swain G. M., Anderson A. B., Angus J. C.: *MRS. Bull.* 23, 56 (1998).

[3] Pecková K., Musilová J., Barek J.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 39, 148 (2009).

## 1P05

### HPLC-MS/MS - A VERY POWERFUL TOOL FOR THERAPEUTIC DRUG MONITORING OF ANTIBIOTICS SUCH AS PIPERACILLIN/TAZOBACTAM AND MEROPENEM

Dušan Krnáč<sup>1</sup>, Katarína Reiffová<sup>2</sup>

<sup>1</sup> ELBLAB GmbH Zentrum für LaborMedizin Meißen Riesa Radebeul, Weinbergstraße 8, 01589 Riesa, Germany, [dusan.krnac@gmail.com](mailto:dusan.krnac@gmail.com)

<sup>2</sup> Department of Analytical Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, SK-041 54 Košice, Slovak Republic

Piperacillin/Tazobactam is one of the most frequently used antibiotics in intensive care units. Piperacillin/Tazobactam is a  $\beta$ -lactam/ $\beta$ -lactamase inhibitor combination with broadspectrum antibacterial activity against Gram-positive and -negative aerobic and anaerobic bacteria [1].

Meropenem is a recently developed carbapenem antibiotic, similar to Imipenem, with a wide spectrum of activity against Gram-positive and Gramnegative bacteria, including *Pseudomonas aeruginosa* and anaerobes. The Meropenem stability against most  $\beta$ -lactamases produced by Gram-negative as well as by Gram-positive bacteria, is resulting in a wide spectrum of activity [2].

Inadequate antibiotic treatment is one of the most important independent variables affecting the overall mortality of these patients. The therapeutic drug monitoring (TDM) provides an advanced option for therapy optimization, especially by seriously ill intensive care patients [3].

The major problem in determination of antibiotics is the complicated matrix and interferences from comedication or endogenous substances, especially by critically ill patient on intensive care. Several analytical methods for determination of antibiotics in human plasma has been described, such as microbiological assay or HPLC-UV. These methods are often not enough specific or included complicated sample preparation. HPLC-MS/MS has an adequate specificity and sensitivity to simultaneously determination multiple analytes in highly complex biological matrices without complicated and time consuming sample preparation.

[1] Lee N., Yuen K.Y., Kumana C.R.: *Drugs* 63, 1511 (2003)

[2] Mouton J.W., Anker J.W.: *Clin. Pharmacokinet.* 28, 275 (1995)

[3] Frey O.R., Helbig S., Röhr A.C., Preisenberger J., Köberer A., Fuchs T., König C., Brinkmann A.: *Intensiv-News* 19, 30 (2015)



**1P06****CHARAKTERIZACE NOVÉHO TYPU SORBENTŮ PRO KAPALINOVOU CHROMATOGRAPHII**David Sýkora<sup>1</sup>, Pavel Řezanka<sup>1</sup>, Kamil Záruba<sup>1</sup>, Ameneh Tatar<sup>2</sup><sup>1</sup>*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav analytické chemie, Technická 5, 166 28 Praha, David.Sykora@vscht.cz*<sup>2</sup>*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav přírodních látek, Technická 5, 166 28 Praha*

Byla připravena série stacionárních fází pro vysoko-účinnou kapalinovou chromatografii. Pro jejich syntézu byla aplikována vícesložková Ugiho reakce umožňující získání sorbentů s velmi odlišnými vlastnostmi. Jako výchozí materiál byl použit silikagel od dvou různých výrobců modifikovaný aminopropylou skupinou. Připravené stacionární fáze byly charakterizovány elementární analýzou a především chromatografickými postupy. Celkem bylo uvedeným protokolem syntetizováno více než dvacet modifikací značně se lišících polaritou a schopností poskytovat různé typy interakcí, včetně např. hydrofobní, iontové, dipólové a vodíkové interakce. Při charakterizaci sorbentů byla zvláštní pozornost věnována studiu použitelnosti materiálů v znovu objeveném hydrofilně interakčním modu. Získaná data ukázala, že koncept syntézy založený na čtyřsložkové Ugiho reakci je životaschopný a vede k prakticky použitelným stacionárním fázím majícím zajímavé a především poměrně snadno laditelné vlastnosti.

*Tato práce byla podpořena grantem 18-02597S Grantové agentury České Republiky.*

**1P07****CHROMATOGRAPHIC DETERMINATION OF PRODUCTS FROM THE AGED FIBROUS CELLULOSIC MATERIALS**

Katarína Hroboňová, Katarína Vizárová, Michal Jablonský, Radovan Tiňo, Milan Králik

*Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, katarina.hrobonova@stuba.sk, katarina.vizarova@stuba.sk, michal.jablonsky@stuba.sk, radovan.tino@stuba.sk, milan.kralik@stuba.sk*

Typical products generated during aging/degradation of fibrous cellulosic materials are acids (e.g. formic, acetic), esters, ketones, cyclic oxygen compounds (e.g. furfural), sugars and in less extent some nitrogen compounds (e.g. oxides). During ageing, concentration of acids increased which apparently accelerates the cellulose degradation. In the first stages of accelerated ageing, cellulose depolymerization takes place homogeneously (as mainly due to hydrolysis), after which other reactions (such as oxidation, crosslinking) occur [1]. As reported by Area and Cheradame [2] a wide set of physical, spectral and chemical methods was applied for evaluation of degradation processes, including IR, UV-VIS, NMR, RTG, EDS, WDS, chromatographic methods and others. From 2003 a special focus on determination of products from degradation was established in the framework of project KNIHA<sup>sk</sup> [3]. Development of the methodology and methods continues (see e.g. [1]); some results dealing mainly with HPLC are subject of this presentation. In study of degradation products of paper, HPLC methods were used for analysis of extracts of paper. Saccharides were quantified by RP-HPLC with fluorescence detection based on pre-column derivatization with dansylhydrazine. IEX HPLC was applied for quantification of acids.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under contract no. APVV-18-0155 (Synthesis, compatibilization and transport of components of multifunctional systems suitable for the stabilization of cellulosic materials - MUFUSCEM).*

[1] Jablonský M., Botková M., Hroboňová K.: *Wood Research* 57(3), 419 (2012).

[2] Area M. C., Cheradame H.: *BioResources* 6(4), 5307 (2011).

[3] <http://www.knihask.eu> (11.6.2019)

**1P08****FIRST VOLTAMMETRIC PROTOCOL FOR SENSITIVE AND SELECTIVE QUANTIFICATION OF NON-OPIOID ANALGESIC NEFOPAM**

Olha Sarakhman, Lubomír Švorc

*Institute of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, Bratislava, SK-812 37, Slovak Republic, olha.sarakhman@stuba.sk*

Although mechanism of action is not been fully explained, nefopam (NEF) is a non-opioid central analgesic widely used as killer of postoperative pain and pain associated with cancer [1]. Up to now, there are no electroanalytical methods in scientific literature reported for the determination of NEF. A key problem encountered is the high

potential which is required for its electrochemical oxidation, resulting in the fact that the most conventional electrodes cannot be reliably used for this aim. On the other hand, boron-doped diamond electrode (BDDE) is a progressive electrode material that opens a novel branch of electrochemistry due to its outstanding properties as a wide electrochemical potential window, morphological and microstructural stability at extreme anodic and cathodic potentials and current densities [2]. Keeping this knowledge in mind, the main objective of this work consisted of the evaluation of redox behavior of NEF and choice of the suitable experimental conditions for developing the pioneering protocol for its voltammetric determination at the unmodified BDDE. Apart from this, estimation of the sensitivity and selectivity was also conducted. The developed method was successfully utilized to quantification of NEF in environmental, biological and pharmaceutical samples with good recoveries.

*This research was supported by the Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA No. 1/0489/16) and STU Grant Scheme for Support of Young Researchers.*

[1] Girard F., Chauvin M., Verleye M.: *Clin. Exp. Pharmacol. Physiol.* 43, 3 (2016).

[2] He Y., Lin H., Guo Z., Zhang W., Li H., Huang W.: *Sep. Purif. Technol.* 212, 802 (2019).

## 1P09

### EFFECT OF THE PROTEINS COMPOSITION ON THEIR ELECTROCHEMICAL RESPONSE

Eva Melníková,<sup>a</sup> Nasim Izadi,<sup>b,c</sup> Miroslav Gál,<sup>a</sup> Veronika Ostatná,<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Slovak University of Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Department of Inorganic Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, [eva.melnikova@stuba.sk](mailto:eva.melnikova@stuba.sk)

<sup>b</sup> Institute of Biophysics of the Czech Academy of Sciences, Královopolská 135, 61265 Brno, Czech Republic

<sup>c</sup> Department of Experimental Biology, Faculty of Science, Masaryk University, Kotlářská 2, 611 37 Brno Czech Republic

The structure and amino acid composition affect proteins electrochemical response. During the last decades, enormous progress in electrochemical analysis of proteins using constant current chronopotentiometric stripping analysis (CPS) in combination with catalytic hydrogen evolution reaction (CHER) was made. In this work, CHER of five selected proteins (namely: human serum albumin, lysozyme,  $\beta$ -synuclein, histones H2A, and H3) was studied using CPS and AC voltammetry. Differences in proteins response were due to its amino acid content. Peaks H of Cys-containing proteins appeared at less negative potentials in comparison to proteins without Cys, suggesting easier CHER. We showed that the peak H height and potential differ in dependence on accumulation potential. The content of electroactive amino acids residues (especially Cys residues) and their ability to catalyze CHER can be estimated from these dependencies. Acidic and basic proteins not containing Cys can also be recognized due to different CPS response after their adsorption at charged interface.

**Keywords:** Catalytic hydrogen evolution reaction, Chronopotentiometric stripping analysis, Protein analysis, AC voltammetry, Mercury electrode

*This research was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-17-0149 and by project No. 18-18154S from the Czech Science Foundation.*

[1] Melnikova, E., Izadi, N., Gal, M., Ostatna, V.: *Electroanalysis*. 2019, in press, doi:10.1002/elan.201900239.

## 1P10

### VOLTAMPÉROMETRICKÉ STANOVENIE ANTIMÓMU V PRÍRODNEJ VODE POMOCOU KATODICKY PREDUPRAVENEJ MIKROKRYŠTALICKEJ ELEKTRÓDY Z DIAMANTU DOPOVANÉHO BÓROM

Eva Culková<sup>1</sup>, Zuzana Lukáčová-Chomisteková<sup>1</sup>, Renata Bellová<sup>1</sup>, Danica Melicherčíková<sup>1</sup>, Jaroslav Durdiak<sup>1</sup>, Miroslav Rievaj<sup>1</sup>, Peter Tomčík<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Katedra chémie a fyziky, Pedagogická fakulta, Katolícka univerzita v Ružomberku, Hrabovská cesta 1, 034 01 Ružomberok, [eva.culkova@ku.sk](mailto:eva.culkova@ku.sk)

Rôzne formy antimónu v dnešnej dobe pútajú pozornosť mnohých analytických chemikov. Jeho koncentrácia v zemskej kôre je 0,2-0,3 mg kg<sup>-1</sup> [1]. Do vodného prostredia vstupuje v dôsledku zvetrávania pôdy, prostredníctvom odpadových vôd z ťažby a tavenia, môže sa akumulovať v biologických maticiach. Toxickejšie sú antimonitné zlúčeniny Sb(III) v porovnaní s antimoničnými zlúčeninami Sb(V) [2]. Monitoring antimónu v životnom prostredí je nevyhnutný kvôli jeho širokým aplikáciám a nepriaznivým účinkom na zdravie človeka.

V tomto príspevku predstavujeme veľmi jednoduchú a rýchlu elektroanalytickú metódu pre stanovenie antimónu na chemicky nemodifikovanej elektróde z diamantu dopovaného bórom (BDDE). Voltampérometrické správanie antimónu sa skúmalo v rôznych kyslých základných elektrolytoch, ale najvhodnejšie médium pre stanovenie Sb(III) na holej BDDE sa ukázala 6 mol L<sup>-1</sup> HClO<sub>4</sub>. Analytické charakteristiky sa študovali diferenčnou pulzovou anodickou rozpúšťacou voltampérometriou s optimalizovaným potenciálom depozície (-1 V vs. Ag/AgCl) a časom depozície (240 s). Vyšetroval sa vplyv možných interferujúcich kovových iónov na signál Sb(III). Významný vplyv As(III) sa eliminoval v slabo kyslom základnom elektrolyte NaH<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> s prídavkom EDTA ako selektívneho komplexačného činidla pre Sb(III). Navrhnutou technikou sa dosiahol detekčný limit 1,08 × 10<sup>-7</sup> mol L<sup>-1</sup>. Metóda sa aplikovala na reálne vzorky prírodnej vody tečúcej v blízkosti bývalej antimónovej bane [3].

*Autori ďakujú agentúram KEGA (projekt č. 006KU-4/2017) a GAPF (projekt č. 1/6/2018) za finančnú podporu tejto práce.*

[1] Mihaltan A. I., Frentiu T., Ponta M., Petreus D., Frentiu M., Darvasi E., Marutoiu C.: *Talanta* 109, 84 (2013).

[2] Haragová I., Kubová J.: *Chem. Listy* 102, 782 (2008).

[3] Lukáčová-Chomisteková Z., Culková E., Bellová R., Melicherčíková D., Durdiak J., Beinrohr E., Rievaj M., Tomčík P.: *Talanta* 178, 943 (2018).

## 1P11

### NEENZYMATICKÁ DETEKCIA GLUKÓZY NA ZLATÝCH MIKROELEKTRÓDACH

Jana Hovancová<sup>1</sup>, Ivana Šišoláková<sup>1</sup>, Renáta Oriňaková<sup>1</sup>, Ivan Shepa<sup>2</sup>, Marek Vojtko<sup>2</sup>, Andrej Oriňak<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Katedra fyzikálnej chémie, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice

<sup>2</sup>Ústav materiálového výskumu, Slovenská akadémia vied, Watsonova 47, 040 01 Košice

Vývoj glukózových senzorov púta veľa pozornosti na základe možnosti ich aplikácie v rôznych odvetviach. Pri vývoji ideálneho senzora bolo použitých množstvo techník, medzi ktorými sa ukázali elektrochemické metódy ako najvhodnejší kandidát. Elektrochemické metódy disponujú vysokou citlivosťou, možnosťou rýchlej detekcie a pomerne nízkou cenou. Navyše, zlepšenie celkovej kinetiky oxidácie glukózy môže byť dosiahnuté využitím dobrých katalytických vlastností nanomateriálov, ktoré pramenia z ich veľkosti, tvaru a morfológie. Prechodné kovy (obzvlášť zlato) pútajú veľa pozornosti medzi rôznymi nanomateriálmi. Hlavnou výhodou zlatých nanoštruktúr je možnosť detegovať glukózu v zásaditom, ale aj neutrálnom prostredí [1]. Na základe týchto vlastností boli použité zlaté mikroelektrody modifikované zlatými nanoštruktúrami vylúčenými na elektródu elektrochemickou depozíciou a preskúvané z hľadiska ich aplikácie ako neenzymatických senzorov pre stanovenie glukózy. Zlaté nanoklastre vykazovali veľmi dobré analytické charakteristiky porovnateľné s ostatnými modifikáciami, ktoré boli doteraz publikované v rôznych vedeckých časopisoch. Vykazovali široký lineárny rozsah koncentrácií (0,5 – 50 mM), dobrú citlivosť (185,2 μAmM<sup>-1</sup>cm<sup>-2</sup>) a nízky limit detekcie (218 μM). Okrem iného, tieto elektródy boli dostatočne selektívne, mali dobrú reprodukovateľnosť a stabilitu. Na základe ich malých rozmerov a toho, že na stanovenie je potrebné veľmi malé množstvo vzorky sú nielen vhodným kandidátom na potenciálny neenzymatický senzor, ale aj na celkovú miniaturizáciu systému.

*Táto práca bola podporená VEGA 1/0074/17, APVV-16-0029, VVGS-PF-2018-794 a VVGS-PF-2018-795.*

[1] Hovancová J., Šišoláková I., Oriňaková R., Oriňak A.: *J. Solid State Electrochem.* 21, 2147 (2017).

## 1P12

### PHEHOLIC ACIDS IN PROTECTED WINES FROM MALOKARPATSKY REGION IN SLOVAKIA

Jarmila Švancarová Laštincová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústredný kontrolný a skúšobný ústav poľnohospodársky v Bratislave, Matúškova 21, 833 16 Bratislava  
jarmila.lastincova@uksup.sk

Comparison of concentration of phenolic acids in wines vintage 2016 with protected designation of origin „Malokarpatský“ was made. Determination of gallic, vanillic, caffeic and p-coumaric acid was performed by HPLC with fluorescence detector. Different content of phenolic compounds in different Slovak wine varieties was found but on the other hand there were comparable with Czech and German wines [1].

The wide spread of organic compounds are presented in the white wine aromas and some of them have got fluorescence character. Odor active volatile compounds in the wine varieties Traminer rose, Pálava, Rheinriesling and Pinot gris was achieved. The identities of the different chromatographic peaks were determined by comparing

their spectral characteristics to standards. The detection limits were calculated as three times the standard deviation of the background noise and were 0,9-1,6 µg/l.

The fluorescence detector was operated at  $\lambda_{\text{ex}} = 278$  nm and at  $\lambda_{\text{em}} = 360$  nm for gallic and vanillic acids or at  $\lambda_{\text{ex}} = 278$  nm at  $\lambda_{\text{em}} = 454$  nm for caffeic and p-coumaric acids. The mobile phase was mixture of methanol/water/formic acid and temperature was kept at 40°C. The sample injection was 20 µl and with fluorescence detection linear calibration range was 5-500 µg/l.

*Rada by som vyjadrila poďakovanie Slovenskej chemickej spoločnosti a vedeniu ÚKSÚP za možnosť zúčastniť sa tejto konferencie vo Vysokých Tatrách.*

[1] Goliáš J., Létal, J., Veselý, O.: Evaluation of volatile compounds during the ripening in South Moravian “Gewurztraminer” and “Sauvignon Blanc” from Pálava region *Mitteilungen Klosterneuburg* 66:189-197 (2016).

### 1P13

#### LUMINESCENCE DETECTION IN FLOW ANALYSIS

Petr Solich<sup>1</sup>, Hana Sklenářová<sup>1</sup>, Petr Chocholouš<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Department of Analytical Chemistry, Faculty of Pharmacy, Charles University, 50005 Hradec Králové  
solich@faf.cuni.cz*

Various Flow techniques (FIA, SIA, SIC, MSFIA, LOV, etc.) are already well established analytical methods, which are characterized by several factors essential for research or routine analysis, e.g. simplicity of fundamental principles, inexpensive instrumentation, automated sampling and analytical procedures, low sample consumption and short analysis time. Connection of flow methods with luminescence detection can further increase the sensitivity and selectivity of these methods.

For example, in vitro permeation studies are one of the methods widely used in pharmaceutical research in evaluation of drug interaction with membrane transporter proteins or drug-drug interactions. These tests are performed using cellular monolayers seeded on a semi-permeable membrane of commercially produced inserts. The universal set-up is based on a sequential injection (SIA) manifold connected to the liberation unit, a Franz diffusion cell (FDC), with on-line fluorimetric detection, thus allowing to monitor automated drug transport to get more detailed kinetic profile of the interaction. Another application will show the advantage of microSIA method for fluorescence determination of zinc in seawater as a portable manifold for shipboard use. Several examples of the use of luminescence detection in various applications connected to flow methods will be discussed.

*The authors gratefully acknowledge the financial support of the project STARSS (Reg. No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000465) co-funded by the European Union.*

[1] Zelená L., Marques S.S, Segundo M.A., Miro M., Pávek P., Sklenářová H., Solich P., *Anal. Bioanal. Chem.* 408, 971 (2016)

[2] Grand M. M., Chocholouš P., Ruzicka J., Solich P., Measures Ch., *Anal. Chim. Acta* 923, 45 (2016)

## PREDNÁŠKY - SEKCIA 2: FYZIKÁLNA CHÉMIA

### 2P01

#### ROZLOŽITEĽNÉ ŽELEZNÉ BIOMATERIÁLY S POLYMÉRNYM POVLAKOM

Renáta Oriňaková<sup>1</sup>, Radka Gorejová<sup>1</sup>, Zuzana Orságová Kráľová<sup>1</sup>, Andrej Oriňak<sup>1</sup>, Miriam Kupková<sup>2</sup>, Monika Hrubovčáková<sup>2</sup>

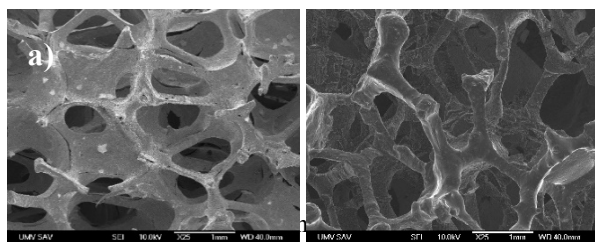
<sup>1</sup>Katedra fyzikálnej chémie, Ústav chemických vied, PF UPJŠ v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice, [renata.orinakova@upjs.sk](mailto:renata.orinakova@upjs.sk)

<sup>2</sup>Ústav materiálového výskumu SAV, Watsonova 47, 040 01 Košice

Po desaťročiach venovaných úsiliu o minimalizáciu korózie kovových biomateriálov sa čoraz väčšia pozornosť venuje materiálom podliehajúcim korózií. Pre túto relatívne novú skupinu degradovateľných kovových biomateriálov pre medicínske aplikácie sa používa termín biodegradovateľné kovy a množstvo nových poznatkov bolo publikovaných za posledných desať rokov.

Biodegradovateľné kovy sú kovové materiály, od ktorých sa očakáva, že budú napomáhať pri procese hojenia/obnovy tkaniva, pritom budú postupne korodovať *in vivo* s primeranou odozvou hostiteľa na uvoľnené korózne produkty, a po splnení svojej úlohy sa úplne rozložia a nezanechajú žiadne zvyšky po implantáte. Z tohto dôvodu musia byť hlavnými zložkami biodegradovateľných kovových materiálov esenciálne kovové prvky, ktoré môžu byť metabolizované ľudským organizmom a vykazujú primeranú rýchlosť a spôsob korózie v ľudskom organizme.

Železo a jeho zliatiny sa ukázali byť vhodnými materiálmi pre ortopedické aplikácie. Avšak, rýchlosť korózie Fe je považovaná za príliš pomalú. Medzi nevýhody korózie železa tiež patrí to, že je náchylné k jamkovej korózií, ktorá môže viesť k nepredvídateľnému zlyhaniu implantátu. Hromadenie väčšieho množstva korózných produktov v okolí implantátu môže skomplikovať funkciu okolitého tkaniva. Aplikáciou rozložiteľných polymérnych povlakov (obr. 1) sme dosiahli zlepšenie mechanických vlastností, zvýšenie rýchlosti korózie a biokompatibility železných biomateriálov [1, 2].



Fe (a), Fe s vrstvou polyetylénglykolu na povrchu (b).

Príspevok vznikol s podporou Agentúry na podporu výskumu a vývoja a vedeckej grantovej agentúry MŠ SR vo forme grantov APVV-16-0029 a VEGA 1/0074/17.

[1] Oriňaková R., Gorejová R., Macko J., Oriňak A., Kupková M., Hrubovčáková M., Ševc J., Smith R.M.: *Appl. Surf. Sci.* 475, 515 (2019).

[2] Haverová L., Oriňaková R., Oriňak A., Gorejová R., Baláž M., Vanýsek P., Kupková M., Hrubovčáková M., Mudroň P., Radoňák J., Orságová Kráľová Z., Morovská Turoňová A.: *Metals* 8, 499 (2018).

### 2P02

#### ZNO/CU NANORozMERNÉ KATALYZÁTORY V TERMOCHEMICKEJ PREMENE CO<sub>2</sub> NA UŽITOČNÉ CHEMIKÁLIE

Natália Podrojková<sup>1</sup>, Andrej Oriňak, Renáta Oriňaková

<sup>1</sup>Katedra fyzikálnej chémie, Prírodovedecká fakulta, UPJŠ v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovenská republika, [natalia.podrojkova@student.upjs.sk](mailto:natalia.podrojkova@student.upjs.sk), [andrej.orinak@upjs.sk](mailto:andrej.orinak@upjs.sk), [renata.orinakova@upjs.sk](mailto:renata.orinakova@upjs.sk)

Aby sa zabránilo nárastu koncentrácie oxidu uhličitého v atmosfére a zvyšovaniu jeho negatívneho vplyvu na teplotu Zeme, vytvárajú sa rôzne chemické spôsoby jeho spracovania. Jedným z nich je hydrogenácia, kde k hlavným produktom patrí metanol. Kvôli vysokej chemickej stabilite a aktivačnej energii CO<sub>2</sub> sú potrebné špecifické katalyzátory. Hlavnými katalyzátormi používanými v syntéze metanolu sú katalyzátory na báze Cu, ZnO a Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (CZA). ZnO zvyšuje životnosť katalyzátora odstránením kyslých miest vo fáze oxidu hlinitého, čím

zabraňuje premene metanolu na dimetyléter. Avšak CZA katalyzátory vykazujú nízku aktivitu pri hydrogenácii CO<sub>2</sub> v dôsledku tvorby vody a silného hydrofilného charakteru oxidu hlinitého [1].

Sľubnými štruktúrami sú core-shell nanočastice, ktoré môžu inhibovať nežiaduce sekundárne reakcie, ako je reakcia vzniku vodného plynu. Okrem toho, reakčný mechanizmus nie je úplne preskúmaný pre niektoré typy rozhraní a môže byť doplnený v súčasnosti veľmi žiadanými simuláciami.

Predložený príspevok je zameraný na core-shell nanočastice a ich použitie v hydrogenácii oxidu uhličitého. Nanokatalyzátory sa pripravujú dvojstupňovou sol-gel syntézou. Pripravené nanočastice budú charakterizované röntgenovou difrakciou (XRD), transmisnou elektrónovou mikroskopiou (TEM) a použité pri katalytickej hydrogenácii CO<sub>2</sub> na skúmanie účinku ZnO/Cu na tvorbu metanolu. Výsledky budú porovnané so simuláciami rozhrania ZnO/CuO pre lepšie pochopenie reakčného mechanizmu a tvorby metanolu.

*Táto práca je podporená Vedeckou grantovou agentúrou MŠVVaŠ SR a SAV [VEGA 1/0074/17], Vnútroštruktúrnym vedeckým grantovým systémom PF UPJŠ [VVGGS-PF-2019-1052]. Poďakovanie taktiež patrí Slovenskej chemickej spoločnosti za finančný príspevok na konferenciu.*

[1] Shahrarun S. et al.: *Sains Malaysiana* 47, 207, (2018)

## 2P03

### SYNTÉZA Pd-NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/SiO<sub>2</sub> KATALYZÁTORA PRE TERMÁLNY ROZKLAD METÁNU NA VODÍK

Katarína Sisáková<sup>1</sup>, Andrej Oriňak, Renáta Oriňaková

<sup>1</sup>Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice, [k.sisakova@gmail.com](mailto:k.sisakova@gmail.com)

Keďže termálny rozklad metánu neprodukuje žiadne emisie CO<sub>2</sub>, priťahuje pozornosť ako vhodná metóda výroby vodíka s nízkou environmentálnou záťažou. Katalytický rozklad metánu sa môže stať ekologickým procesom výroby vodíka. Pri rozklade metánu za účelom syntézy vodíka sa zvyčajne používajú katalyzátory na báze niklu nanosené na vhodnom nosiči. Okrem zvýšenia katalytickej aktivity je potrebné znížiť teplotu, pri ktorej reakcia prebieha [1]. Pd a NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> nanočastice nanosené na SiO<sub>2</sub> nosiči vykazujú vysokú aktivitu už pri veľmi nízkej teplote. Cieľom práce je pripraviť katalyzátor na báze niklu, ktorý by bolo možné využiť ako katalyzátor pre termálny rozklad metánu [2].

Pripravené katalyzátory budú študované z hľadiska ich štruktúry a katalytickej aktivity. Katalytická aktivita bude študovaná pyrolýznou plynovou chromatografiou v teplotnom intervale 300-500°C. V tejto štúdii bude pripravená kvapalná zmes s rovnomerne dispergovanými nanočasticami Pd a oxidov kovov Ni a Fe. Zmes týchto nanočastíc bude nanosená na nosič SiO<sub>2</sub>. Týmto spôsobom môžu tieto dva druhy nanočastíc získať koordinovanú distribúciu tak, aby každá nanočastica Pd mohla byť od seba oddelená nanočasticami oxidu kovu okolo neho a naopak. Táto koordinovaná distribúcia vytvára dostatočné rozhranie medzi nanočasticami Pd a oxidov kovov, kde mobilita kyslíka významne zvyšuje katalytickú aktivitu. Katalyzátor teda dosiahne vysokú aktivitu a schopnosť odolávať spekaniu.

*Táto práca je podporená Vedeckou grantovou agentúrou MŠVVaŠ SR a SAV [VEGA 1/0074/17] a taktiež Vnútroštruktúrnym vedeckým grantovým systémom prírodovedeckej fakulty Univerzity Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach [VVGGS-PF-2019-1061].*

[1] W. Wang, H. Wang, Y. Yang, and S. Jiang, “Ni-SiO<sub>2</sub> and Ni-Fe-SiO<sub>2</sub> catalysts for methane decomposition to prepare hydrogen and carbon filaments,” *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 7, pp. 2–10, (2012).

[2] Q. Huang et al., “Catalytic performance of Pd-NiCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/SiO<sub>2</sub> in lean methane combustion at low temperature,” *J. Energy Inst.*, vol. 91, no. 5, pp. 733–742, (2018).

**2P04****SPEKTROSKOPICKÉ ŠTÚDIUM KOPOLYMÉRU P33 S PCBM PRE FOTOVOLTICKÉ APLIKÁCIE**

Lenka Pribusová Slušná<sup>1</sup>, Ľudovít Haizer<sup>2</sup>, Monika Jerigová<sup>1,2</sup>, Dmitrij Bondarev<sup>3</sup>, Vojtech Szocs<sup>2</sup>, Milan Držik<sup>2</sup>, Daniel Repovský<sup>4</sup>, Dušan Lorenc<sup>1,2</sup>, Dušan Velič<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Prírodovedecká fakulta, UK, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Ilkovičova 6, 842 15, Bratislava 4

<sup>2</sup>Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04, Bratislava 4

<sup>3</sup>Ústav polymérov, SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava 45

<sup>4</sup>Technologický inštitút A. Ruprecht, Dubová 2243/11, 931 01 Šamorín-Čilistov.

Nový kopolymér P33 (poly(tiopfén-2,5-diyl-2,5-dioctyloxykarbonyl-1,4-fenylénu) bol testovaný ako materiál vhodný pre fotovoltaické aplikácie [1,2]. Na štúdium kopolyméru P33 sme použili UV/VIS spektroskopiu, infračervenú spektroskopiu s fourierovou transformáciou a fluorescenčnú spektroskopiu spolu s časovo-rozlišenou fluorescenciou. P33 bol študovaný vo forme čistého filmu a taktiež ako donorno/akceptorový systém P33/PCBM ([6,6]-phenyl-C61-butyrac acid methyl ester). Výskum je zameraný najmä na fluorescenčnú dynamiku, ktorou môžeme nepriamo sledovať elektrónovú dynamiku [3]. Povrchy filmov sme ďalej charakterizovali pomocou atómovej silovej mikroskopie a hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov.

Prídavok PCBM do filmu P33 viedlo k modrému posunu z 524 na 505 nm a k zhasaniu fluorescencie, čo podporuje teóriu, že dochádza k interakcii týchto dvoch látok. Globálne fity  $\tau_1$  pre P33 a P33/PCBM sú stanovené na 8,9 a 3,8 ps. Doba života fluorescencie P33 sa skrúti z 850 na 230 ps po pridaní PCBM, čo dokazuje prenos náboja. Skenovanie povrchu zmesného filmu P33/PCBM odhalilo pomerne hladký povrch s priemernou drsnosťou 5,3 nm a zhluky PCBM až do 1000 nm. Študovali sme koreláciu medzi dynamikou filmu a štruktúrou filmu. Okrem toho sme testovali hĺbkový profil na vrstevnatých štruktúrach P33/PCBM/Si, aby sme získali predstavu o štruktúre vytvoreného filmu.

*Táto práca vznikla s podporou grantu UK/134/2019 „Spektroskopické štúdium systému P33/PCBM pre fotovoltaické aplikácie.*

[1] Kordt, P. Walter de Gruyter GmbH & Co KG (2016)

[2] Dang, M. T.; Hirsch, L.; Wantz, G. *Advanced Materials*, 23(31), 3597-3602 (2011)

[3] Keller, B.; McLean, A.; Kim, B. G.; Chung, K.; Kim, J.; Goodson III, T. *J.Phys. Chem C*, 120(17), 9088-9096 (2016)

**2P05****TOPOGRAFIA POVRCHU PEROVSKITU POMOCOU ATÓMOVEJ SILOVEJ MIKROSKOPIE**

Jakub Michalík<sup>1</sup>, Dušan Velič<sup>2</sup>, Daniel Repovský<sup>3</sup>, Lenka Pribusová Slušná<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Ilkovičova 6, Mlynská dolina, 84215 Bratislava, Slovenská republika

<sup>2</sup>Medzinárodné laserové centrum v Bratislave, Ilkovičova 3, 84104 Bratislava, Slovenská republika, [michalijkakub307@gmail.com](mailto:michalijkakub307@gmail.com)

Perovskity sú anorganicko-organické zlúčeniny s výbornými fotoelektrickými vlastnosťami, ktoré sa dajú použiť v solárnych článkoch. Účinnosť perovskitových solárnych článkov závisí od homogenity štruktúry perovskitovej vrstvy, ktorá závisí od metódy jej prípravy. Štruktúru perovskitovej vrstvy možno odvodiť od topografie jej povrchu, ktorú možno určiť atómovou silovou mikroskopiou. Atómová silová mikroskopia je povrchová skenovacia technika, ktorá využíva interakciu nanohrotu sondy s povrchom tuhej látky na určenie topografie daného povrchu. Nami skúmané vzorky boli vrstvy perovskitu  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ , ktoré boli pripravené nanosením roztoku prekursorov  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I}$  a  $\text{PbI}_2$  v pomere 3:1 na sklené platničky a následným zahriatím platničiek na 120 °C v dusíkovej atmosfére. Povrch niektorých platničiek bol upravený plazmou. Výsledné skeny povrchu ukázali že perovskit vytvára guľovité útvary zoskupujúce sa do klastrov a že vrstvy pripravené na plazmovaných platničkách majú väčšiu homogenitu ako vrstvy na neplazmovaných platničkách. Bola stanovená aj drsnosť týchto povrchov ktorá pre neplazmovaný povrch bola 81 nm a pre plazmovaný 19 nm. Z výsledkov vyplýva že perovskitové vrstvy pripravené na plazmovanom sú perspektívnejšie pre solárne články.

*Chcem sa poďakovať Doc. Ing. Dušanovi Veličovi, DrSc. Za vedenie tejto práce. Taktiež RNDr. Danielovi Repovskému, PhD. Za oboznámenie z atómovým silovým mikroskopom. Ako aj RNDr. Lenke Pribusovej Slušnej za poskytnutie vzoriek.*

**2P06****INTRAMOLEKULOVÝ PRENOS PROTÓNU V EXCITOVANOM STAVE: MOŽNOSTI TEORETICKÉHO ŠTÚDIA**Šimon Budzák<sup>1</sup>, Denis Jacquemin<sup>2,3</sup><sup>1</sup>Univerzita Mateja Bela, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica, [Simon.Budzak@umb.sk](mailto:Simon.Budzak@umb.sk)<sup>2</sup>CEISAM, UMR CNRS 6230, Université de Nantes, BP 92208, Rue de la Houssinière 2, 44322 Nantes, Cedex 3, France<sup>3</sup>Institut Universitaire de France, rue Descartes 1, F-75005 Paris Cedex 05, France

Intramolekulový prenos protónu v excitovanom stave (ESIPT) je veľmi rýchlym procesom odohrávajúcim sa na úrovni rádovo pikosekúnd až nanosekúnd. V našom príspevku ukážeme tri možné aplikácie tohto procesu a zároveň možnosti použitia metód teoretickej chémie pri ich bližšom vysvetlení. Prvou aplikáciou je vývoj organických svetlo-emitujúcich diód. Existujú mnohé molekulové systémy schopné emitovať špecifické vlnové dĺžky (farby), ktorých kombinácie sú potom používané na dosiahnutie dokonalého obrazu v obrazovkách kategórie OLED. Zakódovať do jednej molekuly viacero rôznych farebných emisií by zabránilo zhoršeniu obrazu rozdielne rýchlou fotodegradáciou rôznych molekúl. Vďaka TD-DFT výpočtom môžeme predikovať duálnu emisiu v závislosti od štruktúry molekuly a tak podporovať experimentálne skupiny pri tomto výskume [1, 2]. Naopak, zánik slabej duálnej emisie pochádzajúcej z ESIPT procesu a silnú „turn-on“ fluorescenciu je možné využiť pri vývoji senzorov niektorých kovov. Veľmi slabá fluorescencia bez prítomnosti hlinítych kationov bola pripísaná deaktivácii excitovaného stavu cez neďaleké kónické križenie hyperplôch excitovaného a základného stavu. Prístup k tomuto križeniu je v prítomnosti Al<sup>3+</sup> blokovaný [3]. ESIPT je zodpovedný aj za extrémne vysokú fotostabilitu známeho farbiva indiga. Pomocou molekulovej dynamiky ukážeme rýchlu deaktiváciu excitovaného stavu po prenesení vodíkového protónu.

*Tento príspevok vznikol vďaka podpore Vedeckej grantovej agentúry VEGA, číslo projektu 1/0737/17. Výpočty boli realizované v Centre pre vysokovýkonné počítanie UMB, ktorého infraštruktúra bola vybudovaná v rámci projektov ITMS 26230120002 and 26210120002 financovaných z Európskeho fondu regionálneho rozvoja.*

[1] Heyer E. et al.: *Chem. Eur. J.* 23, 7324 (2017).[2] Budzák Š., Jacquemin D.: *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20, 25031 (2018).[3] Budzák Š., Jacquemin D.: *J. Phys. Chem. B* 120, 6730 (2016).**2P07****SPEKTROELEKTROCHEMICKÁ STUDIE REDOXNÍCH VLASTNOSTÍ KONJUGÁTŮ PYRENU A CYKLOBUTENU**Lucie Koláčná<sup>1</sup>, Peter Polák<sup>2</sup>, Jiří Klíma<sup>1</sup>, Tomáš Tobrman<sup>2</sup>, Jiří Ludvík<sup>1</sup><sup>1</sup>Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy, Dolejškova 3, Praha 8, 182 23, e-mail: [lucie.kolacna@jh-inst.cas.cz](mailto:lucie.kolacna@jh-inst.cas.cz);<sup>2</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav organické chemie, Technická 5, Praha 6, 166 28

Konjugované aromatické uhlovodíky nacházejí široké uplatnění v materiálové chemii [1] – v naší studii pro přípravu organických polovodičů. Vlastnosti těchto látek lze jednoduše upravit změnou jejich struktury pomocí chemických modifikací. Naše práce se věnuje derivátům pyrenu a jiných aromatických látek vzájemně spojených cyklobutenovým můstkem, který představuje čtyřikrát substituovanou dvojnou vazbu. Studované molekuly obsahovaly tři typy systémů: I. pyren se substituenty s indukčním efektem, II. pyren a další nezávislé redukční centrum, III. látky obsahující cyklobuten v konjugaci s dalšími aromáty a/nebo pyrenem. Spektroelektrochemické studium těchto látek je nezbytné pro podrobnou analýzu redoxních vlastností uvedených rozsáhlých konjugovaných systémů.

Elektrochemické a spektroelektrochemické chování vybraných molekul bylo studováno v bezvodém prostředí v různých systémech, na různých elektrodách a také pomocí elektronové paramagnetické rezonance. Redoxní vlastnosti nezávisí na materiálu elektrody (rtuť, skelný uhlík), v dimethylformamidu vykazují vyšší reverzibilitu a potenciály jsou posunuté oproti acetonitrilu k méně negativním. Samotný pyren je redukován ve dvou krocích – nejprve na stabilní radikálový aniont, při zápornějších potenciálech vzniká nestabilní dianiont. Pomocí EPR byl stabilní radikálový aniont potvrzen u všech studovaných látek. Při redukci cyklobutenového kruhu dochází nejprve k tvorbě nestabilního aniontového radikálu, dále pak k prosté redukci cyklobutenu na cyklobutan (naše předběžné výsledky) nebo k redukтивnímu otevírání kruhu [2,3].

*Poděkování: Tato práce vznikla s podporou projektu GAČR 18-12150 S.*

[1] Figueira-Duarte T. M., Mullen K.: *Chem. Rev.* 111, 7260 (2011).



- [2] Bauld N. L., Cessac J., Farr F. R., Holloway R.: *J. Am. Chem. Soc.* 98, 4561 (1976).  
 [3] Boehm A., Meerholz K., Heinze J., Muelllen K.: *J. Am. Chem. Soc.* 114, 688 (1992).

**2P08****ANALYSIS OF SUPERHYPERFINE SPLITTING IN EPR SPECTRA OF COPPER COMPLEXES**

Karina Strečanská, Milan Mazúr

*Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK - 812 37 Bratislava, Slovak Republic; e-mail: milan.mazur@stuba.sk*

The  $^{14}\text{N}$  superhyperfine splitting in the EPR spectra of the copper complexes with N-donor ligands was studied. Firstly, the theoretical EPR spectra was computed by SimFonia (Bruker). The line shape of  $^{14}\text{N}$  superhyperfine multiplets was analysed as a function of these parameters: 1)  $y_{\parallel} = A^{\text{N}_{\parallel}} / A^{\text{Cu}_{\parallel}}$ , where  $A^{\text{N}_{\parallel}}$  is parallel superhyperfine and  $A^{\text{Cu}_{\parallel}}$  is parallel hyperfine splitting constant and  $y_{\perp} = A^{\text{N}_{\perp}} / A^{\text{Cu}_{\perp}}$ , where  $A^{\text{N}_{\perp}}$  is perpendicular superhyperfine and  $A^{\text{Cu}_{\perp}}$  is perpendicular hyperfine splitting constant. 2)  $z_{\parallel} = \Delta B_{\parallel} / A^{\text{N}_{\parallel}}$ , where  $\Delta B_{\parallel}$  is peak-to-peak width of parallel hyperfine splitting and  $z_{\perp} = \Delta B_{\perp} / A^{\text{N}_{\perp}}$ , where  $\Delta B_{\perp}$  is peak-to-peak width of perpendicular hyperfine splitting. 3) Number of nitrogens ( $N = 0, 1, 2, 3, 4$ ) coordinated to the central Cu(II) ion of copper complexes. Secondly, the copper complexes containing two Cu(II) salts (copper acetate or copper sulphate) and two neutral N-donor ligands, *N,N'*-diethylnicotinamide (denia) or 3-pyridylmethanol (ronicol) with varying ligand/metal ratio,  $x$ ,  $[\text{Cu}(\text{ac})_2(\text{aq}) \text{ or } \text{CuSO}_4(\text{aq}) + x(\text{N-donor ligand}(\text{solv}))]$ , where  $x = 0, 1, 2, 4, 6, 8, 12, 16$ , were prepared. The EPR spectra were recorded in the frozen water/methanol solution at 100 K. The possible number of the nitrogens, which could be coordinated to the central Cu(II) ion was discussed.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contact No. APVV-15-0053 and by the Scientific Grant Agency of the Slovak Republic, VEGA 1/0041/15 and VEGA 1/0686/17. We thank Ministry of Education, Science, Research and Sport of the Slovak Republic for funding within the scheme "Excellent research teams".*

## PREDNÁŠKY - SEKCIA 3: NANOMATERIÁLOVÁ CHÉMIA

### 3P01

#### NANOČÁSTICE PRO FOTODYNAMICKOU INAKTIVACI PATOGENŮ

Petr Henke<sup>1</sup>, Pavel Kubát<sup>2</sup>, Jiří Mosinger<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup> Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze, Hlavova 2030, 128 43 Praha 2, Česká republika, henke@natur.cuni.cz

<sup>2</sup> Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského Akademie věd České republiky, v.v.i., Dolejškova 3, 18223 Praha 8, Česká republika

<sup>3</sup> Ústav anorganické chemie Akademie věd České republiky, v.v.i., Řež 1001, 250 68 Řež, Česká republika

Rostoucí výskyt multirezistentních kmenů bakterií způsobuje poptávku po alternativě k antibiotické léčbě a obecněji po antimikrobiálních materiálech jako součásti prevence. V popředí zájmu je fotodynamická inaktivace bakterií a dalších patogenů způsobená fotogenerovaným singletovým kyslíkem.

Tato prezentace se bude soustředit na fotoaktivní sulfonované polystyrenové nanočástice generující singletový kyslík při ozáření viditelnou oblastí spektra [1,2]. Byly připraveny nanočástice s externě vázaným nebo enkapsulovaným fotosenzitizerem, které byly charakterizovány pomocí dynamického rozptylu světla, 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*.

Tyto materiály efektivně produkují vysoce reaktivní, cytotoxický singletový kyslík, schopný omezené difúze do vnějšího prostředí. Výsledky našeho výzkumu demonstrují antibakteriální a antivirotický efekt, který může být významně zvýšen přidáním netoxického jodidu draselného [3]. V porovnání s roztokem volného fotosenzitizeru, disperse těchto nanočástic nevykazují fotoindukovanou agregaci způsobenou vznikajícím trijodidem. Dále bylo pozorováno snížení dob života singletového kyslíku a zvýšení intenzity singletovým kyslíkem způsobené zpožděné fluorescence s rostoucí teplotou. Oba efekty jsou způsobeny s teplotou se zvyšujícím difúzním koeficientem pro kyslík v polystyrenových nanočásticích, což vede i ke zvýšení antibakteriálního účinku při fyziologické teplotě v porovnání s laboratorní teplotou.

Tato práce byla podporována Grantovou agenturou České Republiky (Grant 19-09721S).

[1] Henke P., Kiracki K., Kubát P., Fraiberk M., Forstová J., Mosinger J.: *ACS Appl. Mater. Interfaces* 8, (2016).

[2] Kubát P., Henke P., Berzediová V., Štěpánek M., Lang K., Mosinger J.: *ACS Appl. Mater. Interfaces* 9, (2017).

[3] Kubát P., Henke P., Mosinger J.: *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces* 176, (2019).

### 3P02

#### 2D PLATFORMY PRE CIELENÚ DETEKCIU RAKOVINY

Nikola Bugárová<sup>1</sup>, Michal Bodík<sup>2</sup>, Peter Šiffalovič<sup>2</sup>, Matej Mičušík<sup>1</sup>, Zdeno Špitálsky<sup>1</sup>, Vlasta Závašová<sup>3</sup>, Martina Koneracká<sup>3</sup>, Miriam Zaťovičová<sup>4</sup>, Silvia Pastoreková<sup>4</sup>, Mária Omastová<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Ústav polymérov, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovensko, email: nikola.bugarova@savba.sk

<sup>2</sup> Fyzikálny ústav, Dúbravská cesta 9, 845 11 Bratislava, Slovensko

<sup>3</sup> Ústav experimentálnej fyziky, Watsonova 47, 040 01 Košice, Slovensko

<sup>4</sup> Virologický ústav, Biomedicínske centrum SAV, Dúbravská cesta 9, 845 05 Bratislava, Slovensko

Grafén oxid (GO) pripravený modifikovanou reakciou Hummer a Offeman z exfoliovaného grafítu, bol charakterizovaný röntgenovou fotoelektrónovou spektroskopiou (XPS) a mikroskopiou atómových síl (AFM). Na svojom povrchu má funkčné skupiny kyslíka, ktoré zvyšujú jeho reaktivitu a znižujú toxický efekt, čo prispieva k vhodným vlastnostiam nosiča.

Diagnostika onkologických ochorení zostáva v popredí súčasného medicínskeho výskumu. Pre včasnú diagnostiku je k dispozícii veľký počet onkologických markerov. CA IX (karbonická anhydráza IX) je hypoxiou indukovaný enzým nachádzajúci sa na povrchu bunky, ktorý sa exprimuje v agresívnych nádoroch, a preto sa môže použiť ako nádorový biomarker [1]. Pripravila sa funkcionalizovaná GO platforma, na modifikáciu sa použili magnetické nanočástice a monoklonálna protilátka špecifická pre marker CA IX [2]. Bola uskutočnená cytometria a imunofluorescencia, aby sa preskúmala selektívna odozva pripravenej nanoplatformy na báze GO.

Okrem toho sa hľadajú ďalšie 2D materiály, ako alternatívy na vytvorenie nanonosičov. Funkcionalizovaná MoS<sub>2</sub> monovrstva vykazuje mimoriadne vysokú citlivosť na detekciu antigénov súvisiacich s rakovinou. Výhodou MoS<sub>2</sub> je silný Ramanov signál a fotoluminiscencia v červenej časti (nad 600 nm) viditeľného spektra. Tieto vlastnosti MoS<sub>2</sub> predurčujú jeho použitie ako biosenzor pre ciele detekciu rakovinových buniek. Včasná diagnóza

pomocou funkcionalizovaných 2D nanoplatforiem spolu s cieľným dodaním liečiva môže výrazne pomôcť pri liečbe ochorenia bez vedľajších účinkov.

*Táto práca bola podporovaná Agentúrou pre výskum a vývoj na základe Zmluvy č. APVV-14-0120 a APVV-15-0641 a Vedeckou grantovou agentúrou Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu Slovenskej republiky a Slovenskej akadémie vied na základe Zmluvy č. VEGA 02/0010/18.*

[1] Pastoreková S., Zaťovičová M., Pastorek, J.: *Curr. Pharm. Des.*, 14, 685–698, (2008).

[2] Bugárová N., et al., *Cancers*. 11, 753, (2019).

### 3P03

#### JSOU DICHALKOGENIDY PŘECHODNÝCH KOVŮ NA VZDUCHU STABILNÍ?

Jana Martincová<sup>1</sup>, Petr Lazar<sup>1</sup>, Michal Otyepka<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, 17. listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc, [jana.martincova01@upol.cz](mailto:jana.martincova01@upol.cz)

Dichalkogenidy přechodných kovů (TMDs, z angl. *transition metal dichalcogenides*) jsou dvoudimenzionální sendvičově uspořádané materiály se strukturálním vzorcem MX<sub>2</sub>, kde M představuje prvek přechodného kovu a X označuje síru, selen nebo telur. Atomy v dané vrstvě jsou mezi sebou vázány kovalentně, zatímco jednotlivé vrstvy jsou vázány slabými Van der Waalsovými silami, což je umožňuje exfoliovat do monovrstev. TMDs si získaly pozornost hlavně svými unikátními vlastnostmi, jako jsou supravodivost, vysoká hodnota Youngova modulu pružnosti, katalytická aktivita, anebo také velmi bohatý fázový diagram. Nejen kvůli těmto vlastnostem, ale také díky jejich polytypismu se některé z TMDs jeví jako vhodné kandidáty pro aplikaci v elektronických nanozařízeních. Nicméně, abychom mohli materiál použít jako součást zařízení, musí být stabilní a nesmí u něj docházet k jeho degradaci. TMDs byly považovány za materiály na vzduchu stabilní až do roku 2016, kdy Gao et. al. publikovali experimentální práci, v níž prokázali nestabilitu u 2H polytypů MoS<sub>2</sub> a WS<sub>2</sub> [1]. V rámci naší práce byla potvrzena degradace monovrstvy MoS<sub>2</sub> pomocí výpočtů založených na teorii funkcionálu hustoty (DFT, z angl. *density functional theory*) [2]. Oxidace MoS<sub>2</sub> začínala na hraně materiálu s limitním krokem ve formě disociace molekuly kyslíku a následně se šířila k jeho středu, což se shoduje s experimentem.

*Autoři děkují za finanční podporu vnitřního grantu UP Olomouc projekt IGA\_PrF\_2017\_028.*

[1] Gao J., Li B., Tan J., Chow P., Lu T. M., Koratkar N.: *ACS Nano* 10, 2628 (2016).

[2] Martincová J., Otyepka M., Lazar P.: *Chem. - A Eur. J.* 23, 13233 (2017).

### 3P04

#### MXENE-BASED POLYMERIC COMPOSITES

Mária Omastová<sup>1</sup>, Michal Procházka<sup>1</sup>, Matej Mičušík<sup>1</sup>, Simona Procházková<sup>2</sup>, Andrii Misiura<sup>3</sup>, Oleksiy Gogotsi<sup>4</sup>, Daiva Zeleniakienė<sup>5</sup>, Andrey Aniskevich<sup>6</sup>

<sup>1</sup> Polymer Institute SAS, Dubravska cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovakia, [maria.omastova@savba.sk](mailto:maria.omastova@savba.sk)

<sup>2</sup> Department of Analytical Chemistry, Faculty of Natural Sciences Comenius University, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovakia

<sup>3</sup> Taras Shevchenko National University of Kyiv, Faculty of Physics, 4 Prospekt Hlushkova, Kyiv 03022, Ukraine

<sup>4</sup> Materials Research Centre, St. Ak. Krzhizhanovskogo, 3, Kiev, Ukraine

<sup>5</sup> Department of Mechanical Engineering, Faculty of Mechanical Engineering and Design, Kaunas University of Technology, Studentu st. 56, 51424 Kaunas, Lithuania

<sup>6</sup> Institute for Mechanics of Materials, University of Latvia, 1 Kalku Street, Riga LV-1658, Latvia

MXenes are a new class of 2D inorganic materials, first described in 2011 [1]. Different MXenes are prepared from different MAX phases of the formula M<sub>n+1</sub>AX<sub>n</sub>, where M is the most common transition metal, A is an element of the 13 or 14 group of the periodic table of elements, X is usually C and/or N. By etching of the A layers from MAX phase, MXene are formed. The surface of etched MXenes contains functional group e.g., -O, -F, -OH, leads negatively charged surface. Polymeric composites used MXene as fillers have interesting properties and started to be topic of intensive research [2].

MAX phase Ti<sub>3</sub>AlC<sub>2</sub>, particle size 40 μm (MRC, Ukraine) was used for MXene preparation. As polymeric matrix polymethylmethacrylate (PMMA) Plexiglas® 7N, was used for preparation of composites by solution casting method. PMMA composites with various amount of MXenes from 1.0 wt.% to 10.0 wt.% were prepared.

Electrical properties composite were measured by Broadband Dielectric Spectrometer (BDS). BDS measurements showed increasing of conductivity with increasing content of MXene in polymeric composites. Experimental condition of MAX phase etching and methods of MXene preparation significantly influence the final electrical conductivity of this filler. The higher the MXene conductivity, the higher the final conductivity of polymeric composites. Prepared composites showed antistatic properties, therefore they can be used for further application.

*This work is part of project which received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No 777810, and from agency VEGA 02/0010/18 (Slovakia).*

- [1.] Naguib M., Kurtoglu M., Presser V., Lu J., Niu J., Heon M, Hultman L., Gogotsi Y., Barsoum M. W., *Adv. Materials*, 23, 4248 (2011).  
 [2.] Zhang, H., Wang, L., Chen, Q., Li, P., Zhou, A., Cao, X., Hu, Q., *Materials & Design* 92, 682 (2016).

### 3P05

#### PLAZMOU REDUKOVANÉ GRAFÉN OXIDOVÉ ELEKTRÓDY PRE HYBRIDNÚ FOTOVOLTIKU A BIOSENZORIKU

Pavol Gemeiner<sup>1</sup>, Tomáš Homola<sup>2</sup>, Lenka Lorencová<sup>3</sup>, Lucia Parráková<sup>1</sup>, Michaela Pavličková<sup>1</sup>, Ján Tkáč<sup>3</sup>, Milan Mikula<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Oddelenie polygrafie a aplikovanej fotochémie, FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko, pavol.gemeiner@stuba.sk

<sup>2</sup> R&D Center for Low-Cost Plasma and Nanotechnology Surface Modifications (CEPLANT), Ústav fyzikálnej elektorniky, Prírodovedecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 267/2, 611 37 Brno, Česká Republika

<sup>3</sup> Oddelenie glykobiotechnológie, Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovensko

Cieľom práce bola príprava tenkých vrstiev grafén oxidových (GO) elektród z nízko-viskózných vodných GO disperzií pomocou rotačného ovrstvovania a následná redukcia pripravených GO elektród pomocou nízko-teplotnej plazmy difúzneho koplánarneho povrchového bariérového výboja (DCSBD) v prostredí vodíkovej atmosféry. Pozitívny vplyv redukčnej plazmy sa pri rGO elektródach prejavil poklesom kvantitatívneho zastúpenia kyslíkových väzieb a zároveň znížením ich elektrického povrchového odporu.

rGO elektródy boli následne úspešne použité a skúmané ako náhrada Pt protielektródy (CE) v hybridných farbivom senzibilizovaných solárnych článkoch (DSSC) a taktiež ako elektrochemické biosenzory pri detekcii malých organických molekúl (dopamín, kys. askorbová, acetaminofen a kys. močová).

rGO CE dosiahli v porovnaní s GO CE zvýšenú katalytickú aktivitu a zároveň dvojnásobne vyššiu konverznú účinnosť DSSC na úrovni 0,9 %. V prípade použitia rGO elektród ako biosenzorov boli dosiahnuté detekčné limity sledovaných organických zlúčenín na nanomolárnej úrovni: kys. askorbová = 0,030  $\mu\text{M}$ , dopamín = 0,069  $\mu\text{M}$ , acetaminofen = 0,036  $\mu\text{M}$ , kys. askorbová = 0,063  $\mu\text{M}$ .

Potenciál využitia DCSBD plazmy na redukciiu GO elektród sa preukázal najmä pri biosenzoroch, kde sú dosiahnuté výsledky porovnateľné s publikovanými výsledkami iných autorov. V prípade použitia rGO v DSSC sa ako hlavný problém ukazuje vysoký odpor rGO CE, čo sa prejavilo aj na celkovo nízkych fotovoltických parametroch DSSC.

*Na tomto mieste by chceli autori poďakovať za finančnú podporu projektu VEGA 1/0488/19, projektu LO1411 (NPU I) podporenému MŠMT Českej republiky, projektu CZ.1.05/2.1.00/03.0086 podporenému z Európskeho fondu regionálneho rozvoja a projektu GACR 19-14770Y.*

### 3P06

#### PLASMA TREATMENT OF COMPOSITE PRECERAMIC NANO/MICROFIBERS

I. Shepa<sup>1</sup>, E. Mudra<sup>1</sup>, D. Pavlinak<sup>2</sup>, M. Vojtko<sup>1</sup>, V. Antal<sup>3</sup>, M. Stupavska<sup>2</sup>, J. Kellar<sup>2</sup>, J. Dusza<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institute of Materials Research, Slovak Academy of Sciences, Kosice, Slovakia

<sup>2</sup> Department of Physical Electronics, Masaryk University, Brno, Czechia

<sup>3</sup> Institute of Experimental Physics, Slovak Academy of Sciences, Kosice, Slovakia

This work describes the influence of the low-temperature DBD plasma impact on the preceramic composite TiO<sub>2</sub>/PVP microfiber mats prepared by needle-less electrospinning. The electrospun fibers were treated by low-temperature so-called, Diffuse Coplanar Surface Barrier Discharge (DCSBD). Plasma treatment was performed in three different by nature atmospheres: oxidative – air, reductive – H<sub>2</sub> and inert – N<sub>2</sub>. The distance between samples and the ceramic electrode plate was 0.3 mm, exposure times were 10, 30 and 60 min at the input power of 400 W. This type of treatment led to the formation of flexible composite TiO<sub>2</sub>/PVP core/shell fibers. For evaluation of polymer decomposition process and ceramics formation – DSC/TG, Raman spectroscopy and FTIR analysis were used. For the characterization of the morphology and chemical composition of the fiber surfaces XPS and the scanning electron microscopy coupled with EDX analysis were applied. It was found that the thin ceramic layer was formed on the surface of the fibers, thickness, and morphology of which depends directly on the exposure time and atmosphere. The main aim of this work is to compare the impact of the plasma treatment in the atmosphere with different chemical nature on the same composite system.

*This work was supported by project VEGA No. 2/0099/18, by Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-15-0469, APVV-19-0625, by project „Research Centre of Advanced Materials and Technologies for Recent and Future Applications "PROMATECH", ITMS 26220220186, supported by the Operational Program "Research and Development" financed through European Regional Development Fund, and the project LO1411 (NPU I) funded by Ministry of Education Youth and Sports of Czech Republic.*

### 3P07

#### ANTIBAKTERIÁLNI VLASTNOSTI NANOČÁSTIC STRÍBRA

Šárka Hradilová, Aleš Panáček

*Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Universita Palackého Olomouc, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, Česká republika. Sarka.hradilova@upol.cz*

V posledních letech pozorujeme obrovský nárůst zájmu o nanočástice (NPs), který jde ruku v ruce s tím, jak je umíme lépe a efektivněji připravovat a následně využívat. Prakticky neexistuje odvětví, kde by se NPs nedaly aplikovat. Každý z nás je denně v kontaktu s NPs bez toho, abychom si to plně uvědomovali. NPs jsou v textilních výrobcích, ve stavebních materiálech i kosmetice.

Miniaturní rozměry a obrovský povrch vztahený k malému objemu propůjčuje NPs unikátní vlastnosti, které u větších struktur nepozorujeme. Naše skupina se zabývá NPs s výrazným antibakteriálním účinkem – především stříbrem. Stříbro samo o sobě vykazuje antibakteriální vlastnosti, což je známo už celá staletí. Nanočástice stříbra (AgNPs) si vlastnosti kovového/iontového stříbra ponechaly a navíc mají celou řadu dalších vlastností, které lze využít. Značnou výhodou AgNPs proti iontovému stříbru je nižší toxicita pro vyšší organismy. Právě ono „okno“ mezi koncentrací, které spolehlivě usmrtí bakterie a koncentrací, která je bezpečná pro eukaryotické buňky je využíváno tam, kde je žádoucí eliminovat bakterie bez ohrožení hostitele.

Slibně se jeví také využití synergie mezi stříbrem a antibiotiky (ATB). Rostoucí počet rezistentních bakteriálních kmenů si žádá nový přístup k léčbě infekcí. Ukazuje se, že přidání malého množství AgNPs k ATB obnoví jejich schopnost smrtit bakterie tam, kde bez přítomnosti AgNPs léčba neúčinkovala.

Na druhou stranu nesmíme zapomínat, že stříbro je těžký kov, toxický nejen pro bakterie, ale i pro člověka, záleží pouze na dávce. Nehledě na to, že toxický účinek vůči bakteriím je nespecifický, zabity jsou veškeré bakterie bez ohledu na to, zda nám škodí, či prospívají, což může být problém třeba pro čističky vod. Proto je nutné cíleně studovat toxicitu AgNPs, pochopit mechanismy působení AgNPs a poznat kde a v jakém množství se AgNPs v těle kumulují a právě na tyto otázky se snažíme odpovědět.

*Tato práce vznikla za finanční podpory projektu LO1305 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky, GAČR (projekt No. 19-22720S) a vnitřního grantu University Palackého v Olomouci (IGA PrF\_2019\_033).*

### 3P08

#### ANORGANICKO-ORGANICKÉ NANOKOMPOZITNÉ VRSTVY NA SKLE

Alfonz Pliško<sup>1</sup>, Marianna Čierniková<sup>1</sup>, Jana Pagáčová<sup>2</sup>, Iveta Papučová<sup>2</sup>, Katatrína Faturíková<sup>1</sup>, Petr Exnar<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *FunGlass – Centrum pre funkčné a povrchovo funkcionalizované sklá, Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne, Študentská 2, 911 50 Trenčín, alfonz.plisko@tuni.sk*

<sup>2</sup> *Fakulta priemyselných technológií v Púchove, Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov*

<sup>3</sup> *Fakulta prírodovedno-humanitná a pedagogická, Technická univerzita v Liberci, Studentská 1402/2, 461 17 Liberec, Česká republika*

Metódy sól-gél sa s výhodou používajú pre prípravu vrstiev na kovoch, plastoch, sklách a iných materiáloch. Na rozdiel od iných metód prípravy vrstiev, metódami sól-gél je možné pripravovať aj nanokompozitné anorganicko-organické vrstvy [1-3].

Prezentovaná štúdia sa zaoberá sledovaním vzťahu “zloženie - príprava - vlastnosti” anorganicko-organických nanokompozitných vrstiev v systéme  $\text{Si}(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_4$  -  $\text{Si}(\text{C}_8\text{H}_{17})(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_3$  -  $\text{H}_2\text{O}$  -  $\text{izo}-(\text{C}_3\text{H}_7\text{OH})$  -  $\text{HNO}_3$ . V prvej časti práce sa sleduje vplyv zloženia sólu, vyjadreného mólovým pomerom  $K = \text{Si}(\text{C}_8\text{H}_{17})(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_3 / (\text{Si}(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_4 + \text{Si}(\text{C}_8\text{H}_{17})(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_3)$ , ktorý sa mení od 0 do 0,5, a mólovým pomerom  $R = \text{H}_2\text{O} / (\text{Si}(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_4 + \text{Si}(\text{C}_8\text{H}_{17})(\text{C}_2\text{H}_5\text{O})_3)$ , ktorý sa mení od 2 do 6, a tiež tepelného spracovania vrstiev na výsledné vlastnosti pripravených vrstiev. V druhej časti práce sa sleduje vplyv podmienok prípravy sólu na výsledné vlastnosti vrstiev, a to povrchovú energiu, hydrofobicitu, optické vlastnosti a morfológiu.

Pre vyhodnotenie zistených závislostí sa využíva “modelový” prístup s využitím Akaikeho informačného kritéria. Zistené závislosti sú diskutované z pohľadu aplikácií anorganicko-organických vrstiev na sklách.

*Podakovanie: Výskum bol podporený projektom VEGA 1/0431/18. Príspevok je financovaný s podporou programu Európskej únie pre výskum a inovácie Horizont 2020 v rámci projektu FunGlass na základe grantovej zmluvy č. 739566.*

[1] Brinker CJ, Scherer GW. Academic Press, Boston, (1989).

[2] Plško A, Exnar P, *Silikaty* 33, 69 (1989).

[3] Sanchez C., Julián B., Belleville P., Popall M. *J Mater Chem* 15, 3559 (2005).

### **3P09**

#### **NANOSTRUCTURE COMPOSITION MODULATION FOR EFFICIENT ELECTROCATALYSIS**

Peter Kasák

*Center for Advanced Materials, Qatar University, Doha 2713, Qatar  
peter.kasak@qu.edu.qa*

This contribution is focused on fabrication process of nanostructured material based on metal and metal alloys (Pt, Pd) embedded in different matrices as  $Ti_3C_2X$  (MXene), carbon nanotube (CNT) and reduced graphen oxide (rGO) and their application in heterogenous electrocatalytic reaction. In the first part a hybrid PtNP-decorated MXene nanomaterial (MX-Pt) with significantly high hydrogen evolution reaction (HER) catalytic properties will be summarized. The effect of initial Pt concentration, reduction time and presence of additional reducing agents will be elucidated. Composites containing 14 wt.% Pt showed HER with an onset potential of -75.9 mV and a current density of -10 mA cm<sup>-2</sup> achieved at -226 mV. Furthermore, good stability of the electrode modified by the MX-Pt was achieved without any polymeric binder and the the HER reaction achieved only a negligible decrease over 3 000 potentiodynamic cycles. In second part, a fabrication PtPd alloy nanoparticles (NPs) with tailored compositions on highly conductive rGO-CNTs support will be introduced. The highly active components of the metals and powerful electron transfer material as a support, these combined characteristics in one nanostructure facilitate the fast chemisorptions of methanol with durable performance in DMFCs.

*This work was made possible by NPRP grant #9 – 219-2-105 from the Qatar National Research Fund (A Member of The Qatar Foundation). The finding achieved herein is solely the responsibility of the authors.*

## PREDNÁŠKY - SEKCIA 4: ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA

### 4P01

#### UNUSUAL PHASE TRANSFORMATIONS IN TERNARY FLUORIDE SYSTEMS

Miroslav Boča<sup>a</sup>, Michal Šimurda<sup>a</sup>, Peter Švec<sup>b</sup>, Peter Švec Jr.<sup>b</sup>, Dušan Janičkovič<sup>b</sup>, Adriana Czímerová<sup>a</sup>, Blanka Kubíková<sup>a</sup>, Zuzana Netriová<sup>a</sup>, Jarmila Mlynáriková<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK-845 36 Bratislava, Slovakia. E-mail: Miroslav.Boca@savba.sk*

<sup>b</sup> *Institute of Physics, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK-84 511 Bratislava, Slovakia*

Phase transformations of the systems at equilibrium state as well as phase transformations of the systems at non-equilibrium state were studied on several examples of ternary fluorides.

The analysed systems were  $(\text{LiF} - \text{CaF}_2)_{\text{eut}}$  with the addition of  $\text{LaF}_3$ ,  $\text{SmF}_3$  and  $\text{GdF}_3$ . These systems were let to melt and then either let to spontaneously cool or freeze extremely fast. The appearance of new phases was monitored by XRD, TEM/STEM or by luminescence measurements. Relaxation of formed metastable phases was monitored by DTA, XRD TEM/STEM or by luminescence measurements.

The phase composition of these rapidly cooled samples revealed the presence of a metastable fcc type phase based on  $(\text{Ca}_{0.65}\text{La}_{0.35})\text{F}_{2.35}$ , in contrast to when the system was spontaneously cooled, which showed only the presence of the initial components. The cell parameters of the metastable phase vary based on the composition and due to fast cooling. After thermal relaxation the metastable phase decomposes to  $\text{CaF}_2$  and  $\text{LaF}_3$  phases. The existence of  $\text{Ca}/\text{Sm}/\text{F}$  and  $\text{Ca}/\text{Gd}/\text{F}$  phases was observed, as well. The cell parameters of the metastable phases vary based on the composition and due to fast cooling, too.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-15-0479 and by the Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic and the Slovak Academy of Sciences under no. 2/0114/16.*

### 4P02

#### DIFFERENT PHOTOINDUCED EFFECTS IN HEAVY METAL OXIDE GLASS

Jan Smolík<sup>1</sup>, Jiří Schwarz<sup>1</sup>, Petr Kutálek<sup>2</sup>, Petr Knotek<sup>1</sup>, Jakub Staněk<sup>1</sup>, Eva Černošková<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Department of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, jan.smolik@student.upce.cz*

<sup>2</sup>*Joint Laboratory of Solid State Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 84, 532 10 Pardubice*

Photoinduced effects occur during the interaction between material and radiation with appropriate intensity and energy of photons. The interaction results in changes of material properties i.e. changes of electronic structure, dimensions, creation of amorphous/crystalline phase, changes of different physico-chemical (frequently optical) properties [1].

In this work, photoinduced effects were studied on surface of bulk glassy  $74.7\text{PbO}-25.3\text{Ga}_2\text{O}_3$ . This glass combines advantages of chalcogenide and oxide glasses as stability to ambient atmosphere, high refractive index, high photosensitivity [2], good transmission in the IR region, low glass transition temperature ( $T_g$ ) and high coefficient of the thermal expansion [3] and thus it has potential applications in optics.

It was found that the photoinduced effects differ with photon intensity. In case of low laser intensity (typically  $< 500 \text{ mW/cm}^2$ ), the value of the optical band gap energy ( $E^{03}$ ) was shifted by 25 meV. The observed effect was reversible and after the annealing below  $T_g$ , the optical change was erased.

At higher laser intensities ( $\sim 1000 \text{ W/cm}^2$ ), expansion or melting were observed depending on exposition time. Using certain combination of laser intensity and exposition time we were able to form  $1.9 \mu\text{m}$  height microlenses or craters with the depth  $117 \mu\text{m}$ .

[1] Kolobov A.V.: Photo-Induced Metastability in Amorphous Semiconductors, *Cambridge: Wiley-VCH*, 23 (2003).

[2] Heo J., Quan C.Z.: *J. Am. Ceram. Soc.* 93, 913 (2010).

[3] Dumbaugh W.H., Lapp J.C.: *J. Am. Ceram. Soc.* 75, 2315 (1992).

**4P03****PREPARATION OF SMALL CERAMIC OBJECTS BY FUSED FILAMENT FABRICATION**

Zora Hajdúchová<sup>1</sup>, Peter Veteška<sup>1</sup>, Jozef Feranc<sup>2</sup>, Katarína Tomanová<sup>2</sup>, Roderik Plavec<sup>2</sup>, Leona Omaníková<sup>2</sup>, Ľuboš Bača<sup>1</sup>, Marián Janek<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>*Department of Inorganic Materials, FCHPT, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia.*

<sup>2</sup>*Department of Plastics Rubber and Fibers, FCHPT, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia.*

<sup>3</sup>*Department of Physical and Theoretical Chemistry, Comenius University, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, CH-1, 842 15 Bratislava, Slovakia.*

*Corresponding author: zora.hajduchova@stuba.sk*

Fused filament fabrication is a process that creates 3D solid objects from a computer aided object design data by deposition of molten material layer by layer. Materials suitable for this method are thermoplastics which can be modified by adding small amounts of diverse powder or fiber materials to enhance mechanical or thermal properties of printed thermoplastic 3D objects. In order to fabricate pure ceramic 3D products, ceramic fillers such as zirconia, alumina, silica, mullite, silicon nitride, silicon carbide, lead zirconium titanate and hydroxyapatite are mainly foreseen for production of ceramic-loaded composite filaments.

The aim of this work is to study of ceramic-polymer system and to specify the composition of the composite filament suitable for preparation of small ceramic objects by fused filament fabrication.

The composite filament was prepared from the mixture of ceramic powders and thermoplastic binder which was extruded through the nozzle. Green bodies in a form of cylinders with a diameter of 3 cm and height 6 mm have been successfully fabricated using a commercial 3D printing device (Leapfrog 3D Printers, Netherlands) with the modified 0.8 mm diameter printing nozzle. These bodies were subsequently debinded and sintered, obtaining 3D ceramic objects.

*The financial support from the Slovak Grant for Science and Technology VEGA No. 1/0906/17 and APVV-16-0341 is gratefully acknowledged.*

**4P04****POROZITA VLHKÝCH MATERIÁLŮ POMOCÍ 1H-NMR RELAXOMETRIE**

Václav Slovák<sup>1</sup>, Eva Kinnertová<sup>2</sup>, Tomáš Zelenka<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Katedra chemie, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, vaclav.slovak@osu.cz, tomas.zelenka@osu.cz*

<sup>2</sup>*Institut environmentálních technologií, VŠB-TUO, 17. listopadu 15/2172, 708 00, Ostrava-Poruba, eva.kinnertova@vsb.cz*

Běžné metody charakterizace porozity pevných látek jsou založeny na adsorpci plynů na předem dobře vysušeném materiálu. Porézní materiály jsou však často aplikovány ve vodném prostředí nebo za takových podmínek, kde je určitá míra vlhkosti přirozená. Porozita materiálů v suchém a vlhkém stavu se může zásadně lišit, je proto vhodné hledat metody charakterizace porozity vlhkých materiálů. Jednou z perspektivních metod je NMR relaxometrie založená na sledování relaxace zmagnetizovaných jader.

Základem využití NMR relaxometrie pro charakterizaci porozity je skutečnost, že rychlost relaxace závisí na mobilitě molekul. Pokud jde o jádra vodíku v molekulách vody v pórech nebo dutinách porézního materiálu, pak čím menší póry voda obsazuje, tím rychlejší relaxace je zaznamenána. Při <sup>1</sup>H-NMR relaxometrickém měření získáme tzv. relaxační křivku – závislost magnetizace na čase. Vhodnými postupy lze experimentální data proložit multiexponenciální funkcí, určit počet přítomných komponent odpovídajících skupinám pórů různé velikosti, jejich relaxační časy a intenzity a získat distribuci relaxačních časů. Tu pak lze pro některé materiály převést na distribuci pórů.

Nevýhodami metody, které brání jejímu většímu rozšíření, jsou určité matematické obtíže spojené s hledáním počtu komponent a složité určování hodnoty tzv. relaxivity pro daný systém nutné pro přepočítání distribuce relaxačních časů na distribuci pórů (obvykle jsou nutná další nezávislá měření, příp. kalibrace).



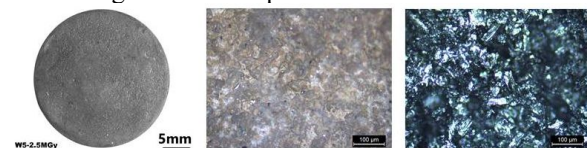
**4P05****INORGANIC ENAMELS FOR CORROSION PROTECTION OF DEPLETED URANIUM**

Volodymyr Lobaz<sup>1</sup>, Magdalena Konefał<sup>1</sup>, Martin Hrubý<sup>1</sup>, Jiří Pánek<sup>1</sup>, Tomáš Chmela<sup>2</sup>, Pavel Krupička<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Macromolecular Chemistry AS CR, Heyrovsky Sq. 1888/2, 162 06 Prague 6, Czech Republic, lobaz@imc.cas.cz*

<sup>2</sup>*UJP PRAHA a.s., Nad Kaminkou 1345, 156 10 Prague 5, Czech Republic.*

The depleted uranium is an indispensable construction material, used in healthcare and arms industry. However, the depleted uranium is highly reactive and, therefore, susceptible for corrosion. Currently for the storage and application the depleted uranium is either alloyed with up to 20% molybdenum or encapsulated in metal containers. We develop the inorganic enamels, based on low melting phosphate glasses for creation of ceramic protection layer on the surface of the ingots and products from depleted uranium. In comparison with commercial TiO<sub>2</sub> based enamels, the phosphate glasses require significantly lower temperatures for the sintering, making them applicable for coating the uranium products.



**Fig. 1.** ZnO·PbO·P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> enamel.

The low melting glasses was prepared by annealing of the mixture of ZnO and PbO with (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>HPO<sub>4</sub> at 800°C, followed with grinding the obtained material down to micrometer size. The ZnO·PbO P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> glasses are amorphous, with T<sub>g</sub> in range 220-250°C. The layers from pure glasses and mixtures with graphite, aerosil and cloisite fillers were prepared by casting the water dispersions on metal surface and sintering at 425°C. The morphology and structure of layers was characterized before and after  $\gamma$ -irradiation (100kGy). Finally, the discs from depleted uranium were coated with selected enamel compositions and tested for corrosion stability.

*Financial support was provided by the Ministry of Industry and Trade of the Czech Republic (grant # FV10164).*

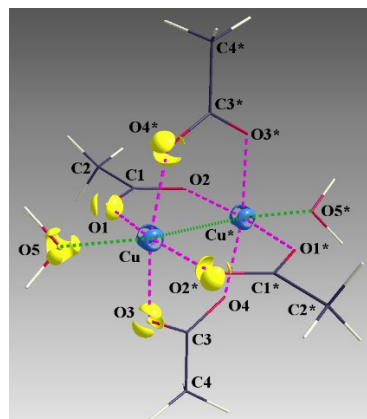
**4P06****EXPERIMENTAL ELECTRONIC STRUCTURE AND CHEMICAL BONDING**

Jozef Kožíšek<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, SK-81237 Bratislava, Slovak Republic, E-mail: jozef.kozisek@stuba.sk*

It seems that results of charge density studies using the accurate data could improve our understanding basic character of the chemical bond. The Kepert model as well as the VSEPR theory can be both confirmed and improved.

On the example of tetrakis( $\mu_2$ -acetato)-diaqua-di-copper(II) and tetrakis( $\mu_2$ -acetato)-diaqua-di-chromium(II) complexes [1] „classical coordination bond“ is defined. Equatorial-axial interactions are explained *via* Cu  $d_{x^2-y^2}$  orbital interaction with donor atom lone electron pair.



**Fig. 1.** 3D plot of the Laplacian of electron density around Cu at isosurface value of 1650 e/Å and around O1, O2\*, O3, O4\* and O5 at isosurface value of 90 e/Å.

In the Ti(IV) complex with peroxy ligand the question of Ti-O interaction is discussed. This interaction could be *via* lone electron pair of two oxygen atoms or *via* the multipole  $\pi$ -bond.

Interesting interaction was found in *bis*(clonixato)-*bis*(1H-imidazole)-copper(ii) complex, where Cu-H distance is 2.571 Å and the angle Cu-H-C is 160.03°. Hydrogen bond with Cu fully populated  $d_{z^2}$  orbital is expected.

In radical precursor (3-(2'-tetrahydropyranyloxy)-4-methylthiazole-2(3H)-thione) a noncovalent interaction was found between two negatively charged atoms N and O. Laplacian of this bond has a positive value and the shape of VSCC is not a typical  $\sigma$ -bond, but the intermediate between the covalent bond and noncovalent interaction.

The Cr(II)-Cr(II) interaction in dinuclear [(TMCDA)Na]<sub>3</sub>Cr<sub>2</sub>Me<sub>7</sub> (PAJJUI) with trigonal bi-pyramidal Cr centres<sup>2</sup> is a textbook example<sup>3</sup> of the quadruple bond. We would like to investigate if there is sufficient valence shell charge concentration if the chemical bond requires electron density.

*This work has been supported by the Ministry of Education, Science, Research, and Sport of the Slovak Republic within the Research and Development Operational Programme for the project "University Science Park of STU Bratislava", ITMS 26240220084, co-funded by the European Regional Development Fund and also by support of the Research and Development Agency under the contract No. APVV-15-0079 and Scientific Grant Agency of the Slovak Republic VEGA (Project No.1/0718/19).*

- [1] Herich, P; Bucinsky, L; Breza, M; Gall, M; Fronc, M; Petricek, V; Kozisek, J. Acta Cryst. 2018, 6, 681-92.  
 [2] Campbell, R. et al.; Contrasting the group 6 metal-metal bonding in sodium dichromate(II) and sodium dimolybdate(II) polymethyl complexes: synthetic, X-ray crystallographic and theoretical studies. Dalton Trans. 46, 5650-5659 (2017).  
 [3] Housecroft, C. E. and Sharpe, A. G. (2001). Inorganic Chemistry, Prentice Hall: New York. 832 pp. ISBN 0-582-31080-6.

#### 4P07

### POLYDENTÁTNE SCHIFFOVE ZÁSADY NA BÁZE 2-PYRIDÍNKARBOXALDEHYD N-OXIDU A ICH KOMPLEXY S PRECHODNÝMI KOVMÍ

Peter Baran<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Juniata College, 1700 Moore Street, Huntingdon, PA 16652, USA, baran@juniata.edu

Schiffove zásady su jednými z najrozšírenejších polydentátnych ligandov používaných v koordinačnej chémii. Ich kovové komplexy sa uplatňujú v organickej katalýze, študované sú pre medicínske aplikácie vďaka ich mnohorakým biologickým aktivitám a zaujímavé sú tiež pre ich magnetické vlastnosti vrátane štúdia molekulových magnetov. Väčšina používaných Schiffových zásad je pripravená kondenzáciou salicylaldehydu, alebo jeho derivátov s vhodnými amínmi. Štúdiom Schiffových zásad odvodených od 2-pyridínkarboxaldehyd N-oxidu sa pokúšame rozšíriť paletu týchto atraktívnych organických ligandov. Prezentované budú výsledky kondenzačných produktov 2-pyridínkarboxaldehyd N-oxidu s o-fenyléndiamínom a o-aminotiofenolom. Diskutované budú aj štruktúry a spektrochemická charakterizácia koordinačných zlúčenín od nich odvodených.

#### 4P08

### MAGNETIC BISTABILITY IN MOLECULAR SYSTEMS

Ivan Šalitros<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Bratislava SK-81237, Slovakia, ivan.salitros@stuba.sk

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

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

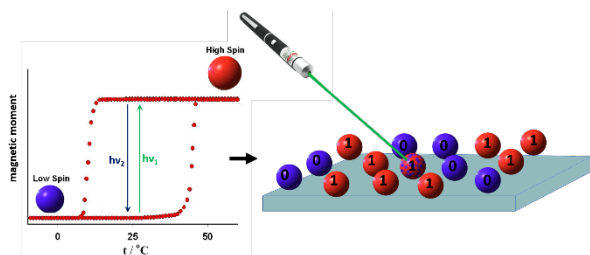


Fig. 1. Schematic view of data recording based on the photoactive SCO molecules[2,3].

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

[1] Šalitraš I., Madhu N. T., Boča R., Pavlik J., Ruben M.: *Monatsh. Chem.* 140, 695 (2009).

[2] Brachňaková B., Šalitraš I.: *Chem. Pap.* 72(4), 773 (2018)

[3] Šalitraš I., Pavlik J.: (2017) Light-induced excited spin state trapping. In: Wang Z. (eds) *Encyclopedia of physical organic chemistry*. Wiley, Online ISBN: 9781118468586.

#### 4P09

### INHIBIČNÝ EFEKT KOMPLEXOV STRIEBRA NA RAST VYBRANÝCH MIROORGANIZMOV AKO AJ RAKOVINOVÝCH BUNKOVÝCH LÍNIÍ

Zuzana Vargová<sup>1</sup>, Michaela Rendošová<sup>1</sup>, Gabriela Kuzderová<sup>1</sup>, Miroslav Almáši<sup>1</sup>, Danica Sabolová<sup>2</sup>, Mária Vilková<sup>3</sup>, Róbert Gyepes<sup>4</sup>, Daniela Hudcová<sup>5</sup>, Petra Olejníková<sup>5</sup>, Martin Kello<sup>6</sup>, Dagmar Mudroňová<sup>7</sup>

<sup>1</sup>Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovensko

<sup>2</sup>Katedra biochémie, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovensko

<sup>3</sup>Laboratórium NMR, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovensko

<sup>4</sup>Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta UK, Hlavova 2030, 128 00 Praha, Česko

<sup>5</sup>Katedra biochémie a mikrobiológie, STU, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovensko

<sup>6</sup>Katedra farmakológie, Lekárska fakulta UPJŠ, Trieda SNP 1, 040 01, Košice, Slovensko

<sup>7</sup>Katedra mikrobiológie a imunológie, UVLF, Komenského 73, 041 81 Košice, Slovensko

[zuzana.vargova@upjs.sk](mailto:zuzana.vargova@upjs.sk)

Už niekoľko storočí sa striebro ako aj jeho zlúčeniny využívajú v rôznych oblastiach medicíny vďaka ich významným antimikrobiálnym vlastnostiam ako sú napríklad liečba popálenín, rôznych zápalových ochorení kože a dokonca bol v posledných rokoch pozorovaný aj ich účinok voči niektorým rakovinovým bunkovým líniam [1]. Avšak mnohé v súčasnosti klinicky používané prípravky na báze striebra majú svoje limity (napr. tvorba nerozpustného chloridu strieborného alebo nízka stabilita za fyziologických podmienok). Na základe toho je potrebné zvoliť vhodné ligandy so stabilizačným efektom pri tvorbe komplexov a zároveň s minimálnymi toxickými účinkami na organizmus. V posledných rokoch sa testuje niekoľko skupín ligandov, ktoré sa klasifikujú do piatich tried: Ag(I)-NHC komplexy, Ag(I)-karboxylátové komplexy, Ag(I)-komplexy obsahujúce N-donorové ligandy, Ag(I)-komplexy obsahujúce P-donorové ligandy, Ag(I)-komplexy obsahujúce zmiešanú koordinačnú sféru [2,3].

S cieľom použiť vhodné ligandy sme pripravili a charakterizovali koordinačné zlúčeniny striebra a študovali sme ich stabilitu v roztoku. Zároveň sme určili ich antimikrobiálnu, antifungálnu a protikvasinkovú aktivitu voči vybraným patogénnym kmeňom ako aj protirakovinovú aktivitu voči vybraným malígnym bunkovým líniam *in vitro*. Okrem toho budú v príspevku diskutované aj spôsoby interakcie vybraných komplexov striebra s modelovou CT DNA ako aj korelácie štruktúry komplexov striebra, ich stabilitou v roztoku a biologickou aktivitou.

Autori srdečne ďakujú za finančnú podporu tejto práce Slovenským grantovým agentúram VEGA 1/0016/18, KEGA 008UPJŠ-4/2018, Univerzite Pavla Jozefa Šafárika (VVGs-PF-2018-799) a Agentúre pre podporu vedy a výskumu (No. APVV-15-0520).

[1] S. Silver et al., *Journal of Industrial Microbiology and Biotechnology* 33, 627 (2006).

[2] X. Liang et al., *European Journal of Medicinal Chemistry* 157, 62 (2018).

[3] M. Rendošová et al., *Journal of Inorganic Biochemistry* 186, 206 (2018).

**4P10****CYTOTOXICKÁ AKTIVITA KOMPLEXOV PD(II) S HALOGÉNDERIVÁTMI 8-HYDROXYCHINOLÍNU A DIMETYLAMÍNOM**

Andrea Lükóová<sup>1\*</sup>, Ivan Potočník<sup>1</sup>, Erika Samol'ová<sup>1</sup>, Juraj Kuchár<sup>1</sup>, Mária Vilková<sup>2</sup>, Vladislav Volarevič<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Ústav chemických vied, Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice, \*andrea.lukoova@student.upjs.sk

<sup>2</sup>Laboratórium NMR spektroskopie, Ústav Chemických vied, Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice

<sup>3</sup>Centrum molekulárnej medicíny a výskumu kmeňových buniek, Fakulta lekárskeho vied Univerzity v Kragujevac, 69 Svetozara Markovica, 34000 Kragujevac, Srbsko

V našich predchádzajúcich prácach sme opísali cytotoxicitu troch štvorcovo planárnych iónových komplexných zlúčenín  $\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2[\text{PdCl}_2(\text{XQ})]$  ( $\text{XQ} = \text{CQ}$  (5-chlór-7-jód-8-hydroxychinolín),  $\text{dClQ}$  (5,7-dichlór-8-hydroxychinolín),  $\text{dBrQ}$  (5,7-dibróm-8-hydroxychinolín)) [1] a následne sme zamenili dimetylamónny kation za draselný, resp. cézny kation, a tak pripravili a testovali ďalších šesť komplexných zlúčenín  $\text{K/Cs}[\text{PdCl}_2(\text{XQ})]$  [2]. Cieľom súčasnej práce bola príprava neutrálnych komplexov paládia rozpustných vo vode a DMSO a ich následné testovanie cytotoxickéj aktivity. Preto boli pripravené štyri komplexy zloženia  $[\text{PdCl}(\text{NH}(\text{CH}_3)_2)(\text{XQ})]$ , kde  $\text{XQ} = \text{CQ}$ ,  $\text{dClQ}$ ,  $\text{dBrQ}$  a  $\text{BrQ}$  (7-bróm-8-hydroxychinolín). Pripravené komplexy boli charakterizované infračervenou spektroskopiou, ktorá potvrdila prítomnosť ligandov  $\text{XQ}$  a dimetylamínu, ďalej elementárnou analýzou a  $^1\text{H}$  a  $^{13}\text{C}$  NMR spektroskopiou, ktorá potvrdila stabilitu komplexov v DMSO. Následná RTG monokryštalová štruktúrna analýza potvrdila, že na centrálny atóm Pd(II) je cez atóm dusíka naviazaná dimetylamónna skupina vzniknutá rozpadom dimetylformamidu, ktorý bol v syntézach použitý ako rozpúšťadlo. Ligandy  $\text{XQ}$  sa viažu bidentátne chelátovo atómami kyslíka a dusíka, pričom atómy dusíka z  $\text{XQ}$  a dimetylamónnej skupiny sú v *trans*-polohách. Štvrté koordinačné miesto na centrálnom atóme prislúcha chlorido ligandu v *cis*-pozícii k atómu dusíka ligandov  $\text{XQ}$ . Atómy Pd(II) sú teda koordinované štvorcovo planárne. Štruktúry sú stabilizované vodíkovými väzbami a  $\pi$ - $\pi$  interakciami.

Práca bola finančne podporená grantovou agentúrou VEGA projektom pod číslom 1/0148/19 a vnútorným grantovým systémom Prírodovedeckej fakulty Univerzity Pavla. Jozefa Šafárika v Košiciach, vedeným pod číslom: VVGS-PF-2018-777 a VVGS-PF-2019-1051. Na kryštalografické merania boli použité zariadenia laboratória ASTRA, zriadené v rámci operačného programu Praha Competitiveness - projekt CZ.2.16 / 3.1.00 / 24510.

[1] Vranec P., et al., *J. Inorg. Biochem.*, 131 37 (2014).

[2] Farkasová, V., et al., *J. Inorg. Biochem.*, 167 80 (2017).

**4P11****STRUCTURALLY DIVERSE OF POLYMERIC MANGANESE(III) - SALEN AND MANGANESE(III) - SALPN COMPLEXES WITH BRIDGING FORMATE LIGAND**

Ján Moncol<sup>1</sup>, Martin Schoeller<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Inorganic Chemistry, Institute of Inorganic Chemistry, Technology and Materials, Slovak University of Technology, SK-81237 Bratislava, Slovakia, E-mail: jan.moncol@stuba.sk

A series of formate-bridged manganese(III) complexes derived from Schiff based obtained by the condensation of 5-bromo-salicylaldehyde, 5-chloro-salicylaldehyde, 3,5-dibromo-salicylaldehyde or 3,5-dichloro-salicylaldehyde and 1,2-diamineethane or 1,3-diaminepropane have been synthesized and characterized using single-crystal X-ray crystallography in the cases of  $[\text{Mn}(\text{salen})(\text{HCO}_2)]_n$  (1),  $[\text{Mn}(5\text{-Brsalen})(\text{HCO}_2)]_n$  (2),  $[\text{Mn}(5\text{-Cl salen})(\text{HCO}_2)]_n$  (3),  $[\text{Mn}(3,5\text{-Br}_2\text{salen})(\text{HCO}_2)]_n$  (4),  $[\text{Mn}(3,5\text{-Cl}_2\text{salen})(\text{HCO}_2)]_n \cdot n\text{MeOH}$  (5),  $[\text{Mn}(5\text{-Brsalpn})(\text{HCO}_2)]_n$  (6),  $[\text{Mn}(5\text{-Cl salpn})(\text{HCO}_2)]_n$  (7),  $[\text{Mn}(3,5\text{-Br}_2\text{salpn})(\text{HCO}_2)]_n$  (8) and  $[\text{Mn}(3,5\text{-Cl}_2\text{salpn})(\text{HCO}_2)]_n$  (9). The crystal structures of  $[\text{Mn}(\text{salen})(\text{HCO}_2)]_n$  (1) in variety temperatures show two phase transitions.

This work was supported by Grant agencies of the Slovak Republic (VEGA 1/0639/18 and APVV-18-0016, APVV-16-0039).

## PREDNÁŠKY - SEKCIA 5: ORGANICKÁ CHÉMIA

### 5P01

#### ASYMMETRIC ORGANOCATALYSIS UNDER SOLVENT-FREE CONDITIONS

Radovan Šebesta

*Comenius University in Bratislava, Faculty of Natural Sciences, Department of Organic Chemistry, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, radovan.sebesta@uniba.sk*

Asymmetric organocatalysis became one of the pillars of asymmetric catalysis. We evaluate the feasibility of stereoselective organocatalytic reactions under solvent-free, ball-milling conditions. Several stereoselective organocatalytic reactions proceed highly efficiently, in terms of chemical yield, reaction time as well as enantioselectivity, under ball-milling conditions. Especially, transformations operating via enamine activation work well. The most efficient examples were Michael addition of enolizable aldehydes to nitroalkenes, and  $\alpha$ -aminooxylation and  $\alpha$ -hydrazination of carbonyl derivatives, which were catalyzed by proline or hydroxyproline derived catalysts.[1,2] Interestingly, also, non-covalent activation seems to be applicable under solvent-free conditions. Specifically, we asked whether the absence of solvent may be beneficial for enantioselectivity. In some cases, Michael additions catalyzed by chiral thioureas indeed worked better under ball-milling conditions.[3] We have also investigated asymmetric phase-transfer catalysis under solvent free conditions, but in this particular case, it was less effective than in solvent. Currently, we investigate squaramide catalyzed Mannich additions of enolizable heterocycles to oxindole imines followed by fluorination.

*This work was supported by the Slovak Grant Agency VEGA, grant nos. VEGA 1/0332/19.*

[1] Veverková, E.; Poláčková, V.; Liptáková, L.; Kázmerová, E.; Mečiarová, M.; Toma, Š.; Šebesta, R. *ChemCatChem*, 4, 1013-1018 (2012).

[2] Veverková, E.; Modrocká, V.; Šebesta, R. *Eur. J. Org. Chem.* 1191-1195 (2017).

[3] Hesticová, M.; Šebesta, R. *Tetrahedron*, 70, 901-905 (2014).

### 5P02

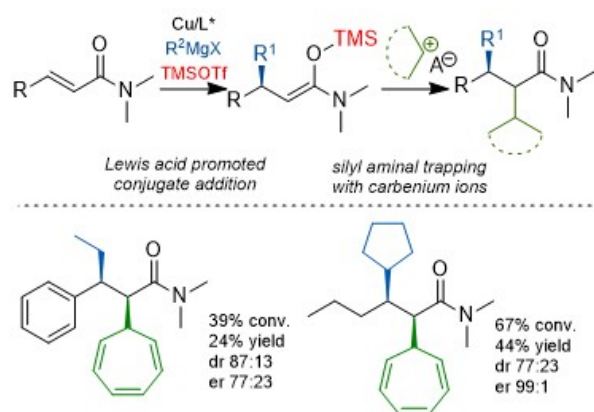
#### SYNTHESIS OF MULTI-FUNCTIONALIZED AMIDES USING TANDEM REACTIONS

Denisa Vargová,<sup>1,2</sup> Radovan Šebesta,<sup>1</sup> Syuzanna R. Harutyunyan<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Comenius University in Bratislava, Faculty of Natural Sciences, Department of Organic Chemistry, Ilkovičova 6, Mlynská Dolina, 842 15 Bratislava 4, denisa.vargova447@gmail.com;*

<sup>2</sup> *Stratingh Institute for Chemistry, University of Groningen, The Netherlands, Nijenborgh 4, 9747 AG Groningen*

Asymmetric conjugate 1,4-addition of Grignard reagents to Michael acceptors is a powerful and reliable methodology to create new C-C bonds with high enantioselectivity. [1] An effective Lewis acid catalysis was recently shown to promote 1,4-addition on less reactive  $\alpha,\beta$ -unsaturated amides. [2] Metal enolates formed by conjugate addition were often used for further functionalisations. [3] In this work, we set out to extend the scope of the trapping reaction to chiral enamides (Scheme 1). The corresponding products were obtained in moderate to good yields, depending on the reactivity and the steric demands of the cation. As it is a linear system, the diastereoselectivity is unfortunately low, with some exceptions. To our delight, we found that the methodology also works with heteroarene substrates, and the dr increases with increasing steric demands of the substrate. The relative configuration was determined by 2D NMR studies.



**Scheme 1.** General scheme of the tandem reaction with some examples.

Slovak Academic Research Agency is gratefully acknowledged for a research scholarship.

- [1] Jerphagnon, T.; Pizzuti, M. G.; Minnaard, A. J.; Feringa, B. L. *Chem. Soc. Rev.* **2009**, *38*, 1039-1075.  
 [2] Rodríguez-Fernández, M.; Yan, X.; Collados, J. F.; White, P. B.; Harutyunyan, S. R. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 14224-14231.  
 [3] D. Vargová, I. Némethová, K. Plevová, R. Šebesta, *ACS Catal.* **2019**, *9*, 3104-3143.

### 5P03

#### JEDNODUCHÉ FLUOROVANÉ AZIDOALKANY

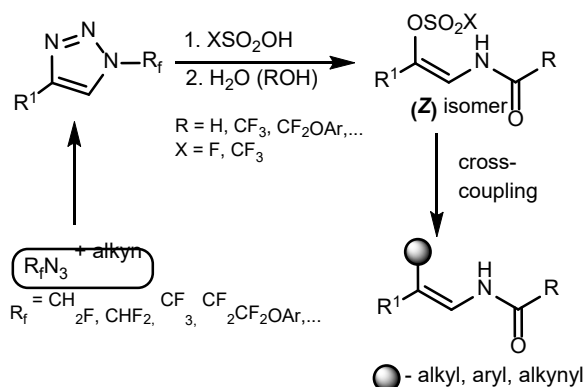
Svatava Voltrová<sup>1</sup>, Athanasios Markos<sup>1,2</sup>, Zsófia E. Blastik<sup>1</sup>, Petr Beier<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i, Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6, [voltrova@uochb.cas.cz](mailto:voltrova@uochb.cas.cz)

<sup>2</sup>Katedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta UK, Albertov 6, 128 43 Praha 2

Zavedení fluoralkylové skupiny do organických molekul představuje vzhledem k širokému využití cílových látek jedno z hlavních témat syntetické organofluorové chemie. Existuje řada metod pro zavedení fluoralkylu na atom uhlíku, kyslíku a síry. Naopak metody pro syntézu *N*-fluoralkylovaných sloučenin jsou velmi omezené a vývoj nových přístupů k jejich syntéze je vysoce žádaný. Nedostatek těchto sloučenin nás vedl k vývoji činidel schopných přenosu fluoralkylové skupiny na atom dusíku. Jako vhodná činidla jsme zvolili azidofluoralkany. Syntetický přístup k fluorovaným azidům závisí na elektrophilitě alkyly. Azido(perfluor)alkany se připravují generováním příslušného perfluoralkylového aniontu a jeho reakcí s elektrofilním azidem [1], difluormethyl derivát reakcí difluormethylkarbenu s azidem sodným [2] a azidofluormethan lze připravit nukleofilní substitucí příslušného halogenderivátu.

Získané azidy byly podrobeny [3+2] cykloadicím na *N*-fluoralkylované 1,2,3-triazoly [1,2]. *N*-Perfluoralkylované a *N*-difluormethylované triazoly potom představují nový typ sloučenin s vysokým syntetickým potenciálem, například v přípravě enamidů (Obr. 1) [3].



**Obr. 1.** Vybrané transformace připravených *N*-fluorovaných sloučenin.

Práce na projektu byla podpořena grantem MŠMT ČR (LTAUSA 18037).

- [1] Blastik Z. E., Voltrová S., Matoušek V., Jurásek B., Manley D., Klepetářová B., Beier P.: *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, *56*, 346-349.

[2] Voltrová S., Putovný I., Matoušek V., Klepetářová B., Beier P.: *Eur. J. Org. Chem.* **2018**, 37, 5087-5090.

[3] Markos A., Voltrová S., Motornov V., Tichý D., Klepetářová B., Beier P.: *Chem. Eur. J.* **2019**, 25, 7640-7644.

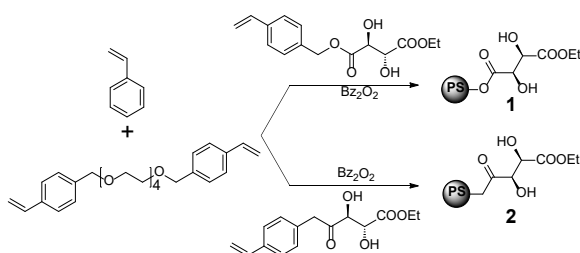
## 5P04

### RECYKLOVATELNÝ KATALYZÁTOR PRO SHARPLESSOVU EPOXIDACI ALLYLALKOHOLŮ

Miloš Sedlák<sup>1</sup>, Jan Bartáček<sup>1</sup>, Jiří Váňa<sup>1</sup>, Pavel Drabina<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česko; [Milos.Sedlak@upce.cz](mailto:Milos.Sedlak@upce.cz)

Mezi jednu z nejdéle známých a velmi často využívaných reakcí patří *Sharplessova* enantioselektivní epoxidace substituovaných allylalkoholů [1]. V přednášce jsou diskutovány nové heterogenní katalyzátory určené pro tuto epoxidaci. Katalyzátory byly založeny na síťovaných botnavých perlových kopolymerech styrenu s ethyl-(4-vinylbenzyl)-L-tartrátem (**1**), nebo s ethyl-(2*R*,3*R*)-2,3-dihydroxy-4-oxo-5-(4-vinylfenyl)pentanoátem (**2**) (Obr. 1) [2].



**Obr. 1.** Botnavé perlové kopolymery styrenu s ethyl-(4-vinylbenzyl)-L-tartrátem (**1**), nebo s ethyl-(2*R*,3*R*)-2,3-dihydroxy-4-oxo-5-(4-vinylfenyl)-pentanoátem (**2**) [2].

Připravené perlové kopolymery (**1**, **2**) byly charakterizovány pomocí optické mikroskopie FT-IR, popř. <sup>13</sup>C CP/MAS NMR spektroskopii. Tyto kopolymery byly v kombinaci s Ti(Oi-Pr)<sub>4</sub> testovány jako katalyzátory pro epoxidaci substituovaných allylalkoholů (– 25 °C, 24 h). V případě katalyzátorů založených na kopolymerech styrenu s rozdílným obsahem ethyl-(4-vinylbenzyl)-L-tartrátu (5 – 50%) (**1**) bylo při epoxidaci *E*-skořicového alkoholu dosaženo vysokých konverzí (až do 99%) a vysoké enantioselektivity (až do 99% ee). Kopolymery **1** však při recyklaci ztrácely enantioselektivitu v důsledku odštěpování L-tartrátu, které bylo způsobeno alkoholózou esterové vazby. Z uvedeného důvodu byl připraven katalyzátor založený na kopolymeru styrenu s ethyl-(2*R*, 3*R*)-2,3-dihydroxy-4-oxo-5-(4-vinylfenyl)pentanoátem (20%) (**2**) kde byl chirální ligand v polymeru vázán stabilní keto vazbou. Při použití kopolymeru **2** pro epoxidaci substituovaných skořicových alkoholů bylo dosaženo obdobně vysokých konverzí a enantioselektivity jako v případě katalyzátorů založených na kopolymerech **1**. Na rozdíl od předchozích kopolymerů **1** lze však kopolymer **2** úspěšně recyklovat (nejméně 4 ×). Při epoxidaci *E*-skořicového alkoholu byl v průběhu recyklací pozorován pokles konverze z 80 na 67% a hodnoty enantioselektivity oscillovaly v rozmezí 97 až 99% ee. V případě *E*-2-methylskořicového alkoholu bylo dosaženo kvantitativní konverze i ve čtvrtém cyklu (99%) s mírným poklesem enantioselektivity (z 99 na 87 % ee) [2]. Z uvedených výsledků vyplývá, že kopolymer **2** má vysoký aplikační potenciál pro praktické provedení *Sharplessovy* epoxidace substituovaných allylalkoholů, a to i případně v průtokových reaktorech.

*Autoři děkují za finanční podporu Grantové agentury ČR projekt GAČR 17-08499S.*

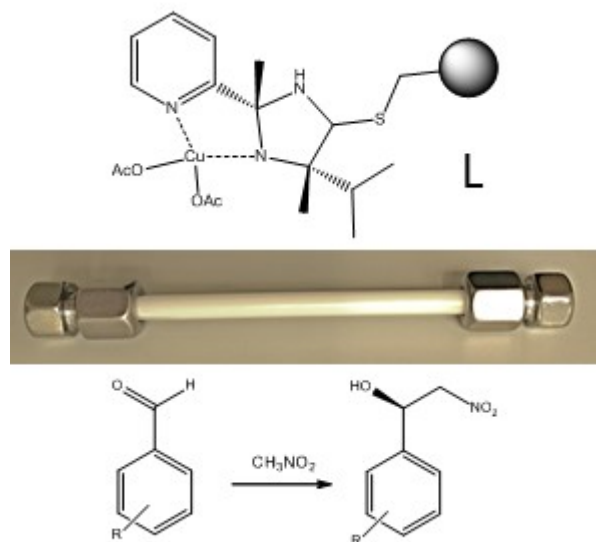
[1] Katsuki, T., Sharpless K. B.: *J. Am. Chem. Soc.* **102**, 5974 (1980).

[2] Bartáček, J., Drabina, P., Váňa, J., Sedlák, M.: *React. Funct. Polym.* **137**, 123 (2019).

**5P05****MONOLITICKÉ KOLONY, VHODNÉ JAKO KATALYZÁTORY ASYMETRICKÉ HENRYHO REAKCE V PRŮTOČNÝCH SYSTÉMECH**Jan Svoboda<sup>1</sup>, Martin Vrbický<sup>1</sup>, Gabriela Nováková<sup>1</sup>, Miloš Sedlák<sup>1</sup>, Pavel Drabina<sup>1</sup><sup>1</sup>Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573 532 10 Pardubice, [jan.svoboda@upce.cz](mailto:jan.svoboda@upce.cz)

Tato práce navazuje na předchozí výsledky, kdy se povedlo připravit heterogenní katalyzátor opakovaně použitelný ve vsádkovém reaktoru [1]. Nyní jsme navrhli, charakterizovali a optimalizovali přípravu nového monolitického sloupce, schopného kontinuálně katalyzovat asymetrickou Henryho reakci.

Katalytickým místem je chirální ligand **L** (Obrázek) koordinovaný octanem měďnatým, který je chemicky vázán na monolit z polystyrenu zesíťovaného divinylbenzenem. Katalyticky aktivní místo v monolitu musí být přístupné pro reaktanty. Z tohoto důvodu byla optimalizována syntéza vedoucí k monolitu s dostatečně velkou porozitou a dobrou katalytickou aktivitou. K přípravě finálního monolitu byla použita takzvaná post-syntetická strategie syntézy. Nejprve byl tepelně inicializovanou radikálovou polymerací směsi styrenu, divinylbenzenu, 4-vinylbenzylchloridu a dodekanolu (porogenu) připraven monolit obsahující aktivní chlormethylována místa. Po vymytí porogenu byl monolit modifikován reakcí s ligandem. Posledním krokem modifikace bylo vytvoření katalytického komplexu ligandu s octanem měďnatým. Všechny post-syntetické modifikace byly provedeny dávkováním příslušných kapalin Hamiltonovou injekční stříkačkou pomocí pumpy přímo do monolitické kolony. U připravené katalyticky aktivní kolony byly optimalizovány reakční podmínky a byly studovány asymetrické Henryho reakce řady aldehydů s nitromethanem (Obrázek).

**Obrázek.** Katalytický komplex, kolona a modelová reakce.

Bylo zjištěno, že připravený monolit je schopen kontinuálně katalyzovat asymetrickou Henryho reakci v průtočném systému s dobrou konverzí a enantioselektivitou až do 90% ee. Stabilita byla ověřena konstantní konverzí a enantioselektivitou v čase.

*Autoři děkují Grantové agentuře České republiky za finanční podporu (projekt číslo 17-08499S).*

[1] Gabriela Nováková, Pavel Drabina, Božena Frumarová, Miloš Sedlák: Adv. Synth. Catal. (2016).

**5P06****DEVELOPMENT OF ATROPISOMERIC ORGANOCATALYSTS FOR ASYMMETRIC HENRY REACTION**Jan Otevřel<sup>1</sup>, David Švestka<sup>1</sup>, Pavel Bobál<sup>1</sup><sup>1</sup>Department of Chemical Drugs, Faculty of Pharmacy, University of Veterinary and Pharmaceutical Sciences Brno, Palackého 1946/1, 612 42 Brno, Czech Republic, [otevrelj@vfu.cz](mailto:otevrelj@vfu.cz).

The Henry reaction represents a powerful method to synthesize bioactive compounds bearing the vicinal aminoalcohol unit. In the organocatalytic asymmetric Henry reaction, the chiral bifunctional catalysts have proved their effectiveness and selectivity. Regrettably, many of them also suffer from serious practical disadvantages such



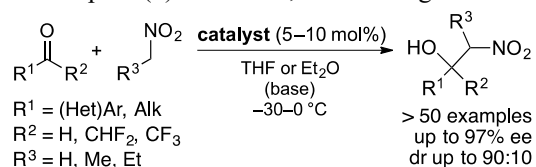
as narrow substrate scope, relatively high catalyst loading, long reaction times, necessity of the very low reaction temperatures, and modest stereoselective outcome, which provide us enough room for improvements.

Therefore, we have concentrated on the identification of the novel axially chiral backbones for the organocatalysts, which represent tunable  $C_2$ -symmetric frameworks that can help to address at least some of the aforementioned issues [1,2]. In order to find the most active and selective molecules, a large screening including 24 chiral scaffolds and 31 catalysts has been performed [3].

Under the thoroughly optimized reaction conditions, the excellent chemical yields, very good to excellent enantioselectivities, and remarkable diastereoselectivities were observed.

The preliminary kinetic and spectroscopic experiments were conducted in order to propose a catalytic cycle of the above transformation and gain better insight into the reaction mechanism.

The viability of the newly developed catalytic processes was proved in the larger scale total syntheses of enantiopure (*S*)-econazole, the late-stage intermediate of (*R*)-mirabegron, and  $CF_3$ -appended (*S*)-halostachine.



**Scheme 1.** The target asymmetric Henry reaction.

Financial support was provided by the projects 301/2019/FaF, 315/2019FaF (IGA UVPS Brno), and LM2015043 (MEYS CZ).

[1] Otevrel, J., Bobal P.: *Synthesis* 49, 593 (2017).

[2] Otevrel, J., Bobal, P.: *J. Org. Chem.* 82, 8342 (2017).

[3] Otevrel, J., Svestka, D., Bobal, P.: *Org. Biomol. Chem.* 17, 5244 (2019).

## 5P07

### VYUŽITÍ C–F VAZBY PRO ZNAČENÍ DEUTERIEM / TRITIEM

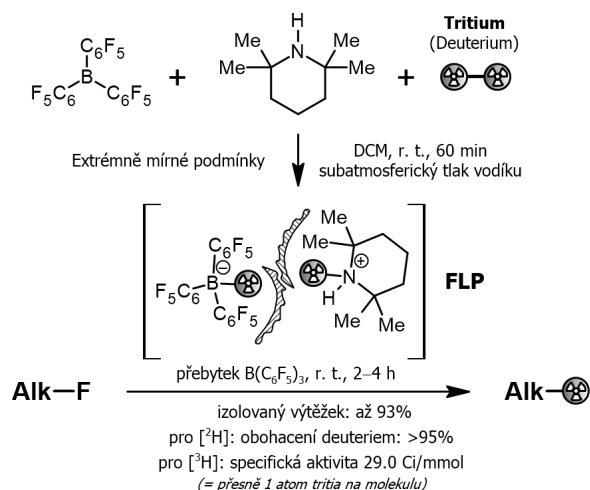
Břetislav Brož<sup>1</sup>, Aleš Marek<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Syntéza radioaktivně značených sloučenin, Ústav organické chemie a biochemie AV ČR v.v.i., Flemingovo náměstí 2/542, 16610 Praha 6, Bretislav.Broz@uochb.cas.cz*

Značení organické sloučeniny pomocí vhodného radioaktivního izotopu je nejrozšířenější metodou pro sledování jejího osudu na molekulární úrovni při farmakokinetických studiích. Jednoduchá vizualizace, kvantifikace a zejména nesmírná citlivost detekce radioaktivního záření poskytují výjimečně spolehlivý nástroj při provádění prvotních vazebných studií ligand–receptor, či tzv. ADME studií (*absorption, distribution, metabolism and excretion*) v pozdějších fázích testování biologicky zajímavých látek. Vazebné studie vyžadují dosažení co nejvyšší specifické aktivity (zastoupení izotopu ve sledované molekule).

Tritium (<sup>3</sup>H, T) je přírodním isotopem s velmi nízkou energií emitovaného  $\beta$ -záření ( $E_{\text{max}} = 18 \text{ keV}$ ). Vedle uhlíku <sup>14</sup>C je nejvšestranněji používaným izotopem. Zavedením do cílové molekuly se nijak neovlivní její struktura ani prostorové uspořádání a dosáhne se dostatečné specifické aktivity. Absolutní přednosti – z pohledu proveditelnosti, nákladů a bezpečnosti – je možnost značení molekuly až v posledním kroku syntetické sekvence. [1]

Naše laboratoř se dlouhodobě věnuje alternativním cestám pro zavádění tritia do organických molekul. Využitím chemie frustrovaných Lewisových párů (FLP) lze za velmi mírných podmínek a bez přechodných kovů aktivovat vazbu v molekule  $D_2 / T_2$  a vzniklý komplex využít ke značení různých typů sloučenin. [1,2] V tomto příspěvku bude diskutována nedávno publikovaná strategie syntézy regiospecificky značených molekul, využívající netradiční substráty s jinak inertní C–F vazbou – fluoralkany (Obr. 1).



**Obr. 1.** Syntéza selektivně značených alkanů z jejich fluorovaných prekurzorů

*Autoři děkují Akademii věd ČR za finanční podporu v rámci projektu RVO: 61388963.*

[1] Marek A., Pedersen M. H. F.: *Tetrahedron* 71, 6, 917 (2015).

[2] Doubková S., Marek A.: *J. Label Compd. Radiopharm.* 62, accepted (2019), DOI: 10.1002/jlcr.3774.

[3] Brož B., Marek A.: *J. Label Compd. Radiopharm.* 62, corrected proof (2019).

## 5P08

### ALKENES AS PRO-NUCLEOPHILES IN COPPER CATALYSED ADDITIONS TO ALDIMINES

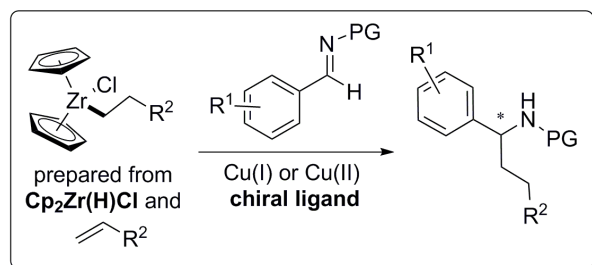
Ivana Némethová<sup>1</sup>, Denisa Vargová<sup>1</sup>, Brigita Mudráková<sup>1</sup>, Radovan Šebesta<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Comenius University in Bratislava, Faculty of Natural Sciences, Department of Organic Chemistry

In this project, we aimed to establish a new asymmetric methodology concerning 1,2-additions of organozirconium species to aldimines. These organometallics are generated in situ using alkenes and Schwartz reagent (Cp<sub>2</sub>Zr(H)Cl) and represent mild alternative in comparison to conventional organometallics as well as they have high functional group tolerance. On the other hand, due to their mild nature the transition metal catalysis is usually required [1]. We previously reported the 1,4-addition of organozirconium species to N-heterocyclic enones as well as the trapping of Zr-enolates by organic cations [2].

Various procedures of addition to imines using Grignard reagents or organoboron compounds were described, however they did not offer broad applicability as only simple (Me, Et, Ar) and special (allyl-, propargyl-) side chains could be incorporated [3]. From this point of view, the use of in-situ generated organozirconium compounds seemed very beneficial as various alkenes could be used as a source of pro-nucleophile.

We studied the enantioselective addition of organozirconium species to aromatic aldimines having different protecting groups. After broad ligand (over 30 chiral ligands) and reaction conditions screening we obtained desired products in medium yield, however high enantioselectivity. Further research in this field is still underway.



**Picture. 1.** The 1,2-addition using in situ generated organozirconium species to aldimines.

[1] a) Wipf P, Xu W., Smitrovich J.H., Lehman R., Venazi L.M.: *Tetrahedron* 50, 1935 (1994); b) Chinkov N., Chechik H., Majumdar S., Liard A., Marek I.: *Synthesis* 17, 2473 (2002).

[2] a) Némethová I., Bilka S., Šebesta R.: *J. Organomet. Chem.* 856, 100 (2018); b) Némethová I., Sorádová Z., Šebesta R.: *Synthesis* 49, 2461 (2017).

[3] a) Ortiz P., Collados J.F., Jumde R.P., Otten E., Harutyunyan S.R.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 56, 3041 (2017); b) Vieira E.M., Haeffner F., Snapper M.L., Hoveyda A.H.: *Angew. Chem. Int. Ed.*, 51 6618 (2012).

## 5P09

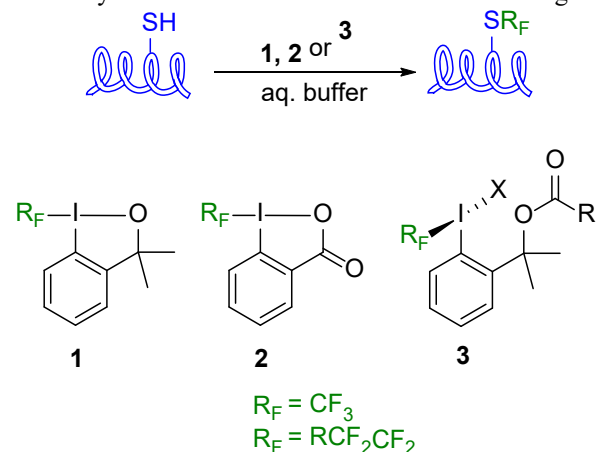
## LATE STAGE FLUOROALKYLATION OF THIOLS BY HYPERVALENT IODINE

## REAGENTS

Iveta Klimánková<sup>1</sup>, Martin Hubálek<sup>1</sup>, Václav Matoušek<sup>2</sup>, Petr Beier<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Flemingovo nám. 2, 166 10 Prague 6, Czech Republic, <sup>2</sup>CF Plus Chemicals s.r.o., Kamenice 771/34, 625 00 Brno, Czech Republic, iveta.kli@centrum.cz

Incorporation of fluorine in biomolecules has many potential applications, such as the study of their structure and conformational changes by <sup>19</sup>F NMR or modulation of their function and properties. One of the strategies for the installation of fluorine in proteins is post-translation selective functionalization of the selected group. Fluoroalkylated hypervalent iodine reagents **1** and **2** transfer the trifluoromethyl[1] or tetrafluoroalkyl groups[2] to various nucleophiles, especially reactions with thiols are high-yielding and thiol selective.[3] This exclusive reactivity led us to consider use these reagents for selective fluoroalkylation of cysteine residue.



**Figure 1.** Fluoroalkylations of small organic substrates and biomolecules using  $\lambda^3$ -iodanes.

The aim of my work was to optimize conditions for bioorthogonal modification of thiols with  $\lambda^3$ -iodanes. Model reactions with cysteine and small peptide were carried out and the influence of pH, amount of cosolvent, reaction time, concentration and type of reagent was investigated (Figure 1). The side products were identified and their formation was studied.

*This work was financially supported by the Czech Science Foundation (17-00598S) and the Academy of Sciences of the Czech Republic (RVO: 61388963).*

[1] Charpentier J., Früh N., Togni A.: *Chem. Rev.* 115, 650 (2015).

[2] Matoušek V., Václavík J., Hájek P., Charpentier J., Blastik Z. E., Pietrasiak E., Budínská A., Togni A., Beier, P.: *Chem. Eur. J.* 22, 416 (2016).

[3] Václavík J., Zschoche R., Klimánková I., Matoušek V., Beier P., Hilvert D., Togni A.: *Chem. Eur. J.* 23, 6490 (2017).

## 5P10

**ORTHO-FERROCENYLIMINOBORONIC ACID AS A MODEL OF A THERAPEUTIC AGENT FOR TWO-STEP DRUG-RELEASE**Karel Lacina<sup>1</sup>, Martin Konhefr<sup>1,2</sup>, Zdenka Fohlerová<sup>3</sup><sup>1</sup> Central European Institute of Technology, Masaryk University, Brno, Czech Rep.<sup>2</sup> Institute of Biochemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Brno, Czech Rep.<sup>3</sup> Central European Institute of Technology, Brno University of Technology, Brno, Czech Rep.

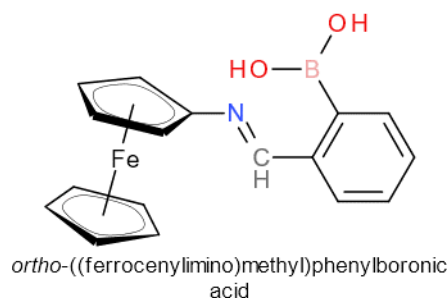
lacinak@chemi.muni.cz

On the cellular level, an oxidative stress is caused by the imbalance between generation and elimination of reactive oxygen species (ROS) - highly reactive molecules and free radicals derived from molecular oxygen (e.g. H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, superoxide radical). Increased oxidative stress has been associated with various pathological states and diseases. Thus, ROS-targeted release of therapeutic agent at the point of need (pathological site) seems to be very promising.

We proposed new molecule **ortho-Ferrocenyliminoboronic acid** (oFciBA)<sup>1</sup> as a prodrug which is being decomposed under oxidative conditions. It consists of ferrocene and phenylboronic acid linked through imine bridge.

We found out that oFciBA is being decomposed at low pH or in the case when conjugated ferrocene is oxidized.<sup>2,3</sup> Moreover, boronic acids are known to be oxidised and decomposed by ROS. These properties enable to oFciBA to act differently upon increase of oxidative stress at pathological process. Therefore, the controlled drug release depending on ROS conditions will be employed in this work.

We will demonstrate oFciBA as a potential therapeutic agent by introducing two drugs into the structure of oFciBA molecule. Drug 1 will be attached to the boronic acid residue via boronate-diol chemistry and drug 2 will be represented by aminoferrocene itself. The preliminary result from the measurement of cytotoxicity with NIH-3T3 cells showed decreased trend in the presence of oFciBA (viability of cells was decreased in the presence of oFciBA).



This research has been financially supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic under the project CEITEC 2020 (LQ1601) and by the Czech Science Foundation, grant nr. 19-16273Y.

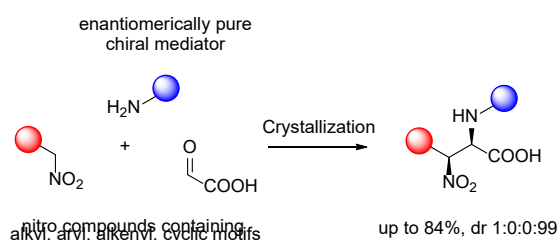
**References**

- 1 M. Konhefr, K. Lacina, M. S. Langmajerová, Z. Glatz, P. Skládal and C. Mazal, *Monatshefte Für Chem. - Chem. Mon.*, 2017, **148**, 1953–1958.
- 2 K. Lacina, M. Konhefr, J. Novotný, D. Potěšil, Z. Zdráhal and P. Skládal, *Tetrahedron Lett.*, 2014, **55**, 3235–3238.
- 3 M. Konhefr, K. Lacina, M. S. Langmajerová, Z. Glatz, P. Skládal and C. Mazal, *ChemistrySelect*, 2018, **3**, 9641–9647.

## 5P11

**STEREOSELECTIVE SYNTHESIS DRIVEN BY CRYSTALLIZATION**Pavol Jakubec<sup>1</sup>, Oľga Karľubíková<sup>1</sup>, Dušan Berkeš<sup>1</sup><sup>1</sup>Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, pavol.jakubec@stuba.sk

One of the primary goals and challenges of modern chemistry is the development of stereoselective transformations, enabling the production of functionalized optically active molecules with a high degree of structural diversity, all from simple and available starting molecules. Although the existing cutting-edge tools of stereoselective synthesis such as asymmetric synthesis have made in the past decades tremendous progress, the classical concept of racemic mixture resolution remains one of the most popular and reliable mode of production of enantiomerically pure derivatives. Several advanced variants, such as dynamic resolution, allow to achieve theoretically quantitative yield of enantiomerically pure compound. Exceptional position amongst such dynamic processes holds a preferential crystallization of one isomer from a solution containing simultaneously equilibrating isomers, a process defined by Eliel as *crystallization-induced asymmetric transformation (CIAT)*.<sup>1,2</sup> Here we present novel applications of the method in important reversible chemical reactions with the major emphasis on highly stereoselective nitro-Mannich reaction (Scheme 1). So far unexplored stereoselective nitro-Mannich reaction driven by crystallization was developed into an attractive synthetic platform with application in preparation of structurally diverse diamino acids, natural products and various useful building blocks.<sup>3</sup>



- single isomer isolated by simple filtration
- 2 stereogenic centres and 2 bonds formed
- one-pot, mild conditions, technical simplicity
- application in total synthesis, broad range of substrates

**Scheme 1.** Stereoselective nitro-Mannich reaction driven by crystallisation.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under Contract No. APVV-16-0258.

[1] Anderson, N. G. *Org. Proc. Res. Dev.* 9, 800 (2005).

[2] Brands, K. M., Davies, A. J.: *Chem. Rev.* 106, 2711 (2006).

[3] Marčeková, M; Gerža, P; Šoral, M.; Moncol, J.; Berkeš, D.; Kolarovič, A.; Jakubec, P. *Org. Lett.* 21, 4580, (2019).

## 5P12

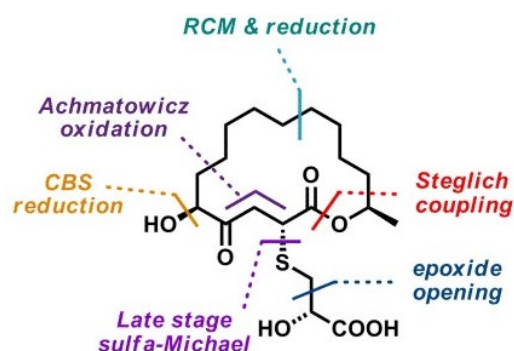
### TOTAL SYNTHESIS OF BERKELEYLACTONE A

Branislav Ferko<sup>1,2</sup>, Marián Zeman<sup>1</sup>, Michele Formica<sup>2</sup>, Sebastián Veselý<sup>1</sup>, Jana Doháňošová<sup>1</sup>, Ján Moncol<sup>1</sup>, Petra Olejníková<sup>1</sup>, Dušan Berkeš<sup>1</sup>, Pavol Jakubec<sup>1</sup>, Darren J. Dixon<sup>2</sup>, Ol'ga Caletková<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinskeho 9, 81237, Bratislava, [olga.caletkova@stuba.sk](mailto:olga.caletkova@stuba.sk)

<sup>2</sup>Department of Chemistry, University of Oxford, Chemistry Research Laboratory, Oxford, OX1 3TA UK

Berkeleylactone was first isolated from coculture of two extremophilic fungi isolated from Berkeley Pit Lake. It exhibits potent antimicrobial activity (MIC = 1–2 µg/mL) against four *MRSA* strains, as well as *Bacillus anthracis*, *Streptococcus pyogenes*, *Candida albicans*, and *Candida glabrata*. Mode of action studies have shown that, unlike other macrolide antibiotics, berkeleylactone A does not inhibit protein synthesis nor target the ribosome, which suggests a novel mode of action for its antibiotic activity [1].



**Fig. 1.** Berkeleylactone A.

The first total synthesis of this potent antibiotic is described in 10 steps with an overall yield of 9.5% [2]. A key step of our concise route is a late stage, highly diastereoselective, sulfa-Michael addition. The 16-membered macrocyclic lactone was formed via RCM and subsequent chemoselective reduction. The absolute stereochemical configuration was confirmed by single crystal X-ray analysis. Synthetic berkeleylactone A was tested against several *MRSA* strains and its potent antibacterial activity was verified.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under contract number No APVV-16-0258.

- [1] Stierle, A. A., Stierle, D. B., Decato, D., Priestley, N. D., Alverson, J. B., Hoody, J., McGrath, K., Klepacki, D.: *J. Nat. Prod.* 80, 1150 (2017).  
 [2] Ferko, B., Zeman, M., Formica, M., Veselý, S., Doháňošová, J., Moncol, J., Olejníková, P., Berkeš, D., Jakubec, P., Dixon, D. J., Caletková, O.: *J. Org. Chem.* 84, 7159 (2019).

**5P13****SYNTHESIS OF NOVEL BOLA-TYPE AMPHIPHILIC PEPTIDE DENDRIMERS AS NANOCARRIERS FOR DELIVERY OF SIRNA OR DRUGS**Maciej Cieślak<sup>1,2</sup>, Magdalena Stolarska<sup>1</sup>, Zofia Urbanczyk-Lipkowska<sup>1</sup><sup>1</sup> Institute of Organic Chemistry, PAS, 01-224 Warsaw, Poland, mcieslak@icho.edu.pl;<sup>2</sup> Student's Section of Polish Chemical Society, 00-227 Warsaw, Poland

Treatment of many diseases including cancer represents major therapeutic challenge in modern medicine. In recent years search for nanomolecular drug delivery systems has become a vivid research area. Dimeric bola-type molecules have aroused great attention as potential nanocarriers for drugs or genetic material. Moreover, it was discovered that such unique structure improves cargo/carrier complex stability and transfection efficiency [1].

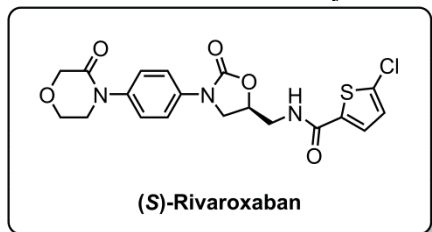
Basing on our previous research we designed novel bola-type dimers containing amphiphilic heads constructed from branched peptides (Lys, Orn - scaffolds) connected by chemically stable or biodegradable spacers [2]. Reliable methodology for the synthesis and purification of amphiphilic cationic dendrons, and bola-type dimers as well further functionalization to obtain high affinity for cell membranes and the ability to form supramolecular complexes with drug or siRNA molecules was optimized.

In conclusion, we have developed a methodology for the synthesis of amphiphilic cationic dendrons based on poly-lysine or poly-ornithine scaffolds, functionalized with various organic residues to obtain high affinity for cell membranes and the ability to form supramolecular complexes with drug or siRNA molecules. Dendrons were combined with flexible linkers to create dimeric amphiphilic "bola" structures. After purification and analysis of dimers, the HPLC complexation experiments with known anticancer drugs were performed.

*Financial support from the National Science Centre, grant No 2015/19/B/ST5/03547 is acknowledged.*

[1] Yong-Guang Gao et al., *Org. Biomol. Chem.*, 16, 7833 (2018).[2] Janiszewska J, Posadas I, Jativa P, Bugaj-Zarebska M, Urbanczyk-Lipkowska Z, Ceña V., *PLoS ONE*, 11, (2016).**5P14****NOVÁ METODA PŘÍPRAVY ANTIKOAGULANCIA RIVAROXABANU**Pavel Drabina<sup>1</sup>, Viola Feixová<sup>1</sup>, Miloš Sedlák<sup>1</sup><sup>1</sup>Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika, pavel.drabina@upce.cz

(S)-Rivaroxaban (Obr. 1) představuje moderní antikoagulancium, působící jako přímý inhibitor Faktoru Xa, což následně vede k inhibici přeměny prothrombinu na thrombin v koagulační kaskádě. (S)-Rivaroxaban byl v roce 2011 schválen FDA a EMEA a je v současnosti prodáván pod obchodní značkou Xarelto<sup>®</sup> jak v Evropě, tak i USA.

**Obr. 1.** Struktura (S)-Rivaroxabanu.

Rivaroxaban se vyrábí ve formě S-enantiomeru, neboť pouze ten vykazuje vysokou inhibiční aktivitu vůči Faktoru Xa [1]. Byly pospány různé syntetické metody pro přípravu (S)-Rivaroxabanu, přičemž všechny využívají při konstrukci stereogenního centra vhodný enantiomerně čistý chirální building-block [2]. Mnohé z těchto postupů však mají různé nevýhody, např. použití toxických činidel, vznik nežádoucích vedlejších produktů, nízké výtěžky, atd. Snaha o vyvinutí nového syntetického protokolu řešícího tyto problémy je proto stále aktuální. Tento fakt nás

vedl k vypracovaniu vhodnej alternatívy syntézy liečiva (*S*)-Rivaroxabanu, a to založené na aplikácii enantioselektívnej katalýzy [3].

Námi vyvinutá syntéza (*S*)-Rivaroxabanu zahŕňa šesť reakčných krokov (s celkovým výťažkom 38 %), využívajúcich levné východiskové látky a činidlá. Kľúčový syntetický krok predstavuje asymetrická Henryho reakcia, pri ktorej je do molekuly zavedené asymetrické centrum. V prípade aplikácie enantioselektívneho katalyzátora na bázi meďnatého komplexu 2-(pyridin-2-yl)imidazolidin-4-onového ligandu, bol (*S*)-Rivaroxaban pripravený s vysokou enantiomernou čistotou 87 % ee [3]. Tento syntetický postup lze proto považovat za sľubnú alternatívu k dosud známym metódam prípravy (*S*)-Rivaroxabanu.

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

- [1] Roehrig S., Straub A., Pohlmann J., Lampe T., Pernerstorfer J., Schlemmer K.-H., Reinemer P., Perzborn E.: *J. Med. Chem.* 48, 5900 (2005).  
 [2] Fattah T. A., Saeed A.: *Tetrahedron: Asymmetry* 28, 485 (2017).  
 [3] Drabina P., Feixová V., Sedlák M.: *Tetrahedron Lett.* 60, 99 (2019).

## 5P15

### TUFTSINOVÉ NOSIČE A JEJICH KONJUGÁTY S ANTITUBERKULOTIKY ODVOZENÝMI OD SALICYLOVÉ KYSELINY: SYNTÉZA A HODNOCENÍ

Martin Krátký<sup>1</sup>, Zsuzsa Baranyai<sup>2</sup>, Lilla Horváth<sup>2</sup>, Szilvia Bősze<sup>2</sup>, Jarmila Vinšová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Akademiya Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, [martin.kratky@faf.cuni.cz](mailto:martin.kratky@faf.cuni.cz)

<sup>2</sup>MTA-ELTE Research Group of Peptide Chemistry, Pázmány Péter Sétány 1/A, Budapešť, Maďarsko

Tuberkulóza je infekční onemocnění vyvolané *Mycobacterium tuberculosis*, jehož léčba stále není globálně vyřešena, mj. kvůli koincidenci s HIV a nárůstu rezistence. Výzkum antituberkulotik patří k prioritám WHO. Kromě syntézy nových molekul lze využít i drug delivery systémy. V této studii jsme zvolili netoxické biodegradabilní oligopeptidy na bázi tuftsinu, které působí imunostimulačně, „cílí“ do makrofágů, zlepšují buněčný uptake a hydrosolubilitu a snižují toxicitu navázaných antimykobakteriálních molekul [1].

Tuftsinové nosiče ([TKPKG]<sub>n</sub>) byly syntetizovány na pevné fázi (Fmoc/tBu strategie), dále byly modifikovány na N-konci a/nebo postranních aminoskupinách lysinu, např. zavedením acylů mastných kyselin (zvýšení lipofility), fluorescenční značky, spaceru a vhodné skupiny pro navázání malých molekul. Jako malé antimykobakteriální molekuly k ověření vlastností nosičů byly zvoleny deriváty salicylové kyseliny: naše salicylanilidy [1,2] a analoga *p*-aminosalicylové kyseliny. Tyto sloučeniny byly chemicky modifikovány tak, aby obsahovaly vhodný substituent pro konjugaci s nosičem a zároveň aby ochránili nežádoucími reakcemi jiných funkčních skupin. Následně byly spojeny s peptidem, a to pomocí různých chemických vazeb (amidová na pevné fázi, oximová v roztoku).

Po purifikaci a charakterizaci jsme hodnotili biologické vlastnosti. Konjugáty si zachovaly účinnost vůči extracelulárně rostoucím mykobakteriím, oproti malým molekulám jsou podstatně účinnější na intracelulární bakterie (model infikovaných makrofágů), také lépe pronikají do makrofágů a jsou méně toxické.

*Tato práce vznikla za podpory projektu GAČR 17-27514Y, EFSA-CDN (reg. č.: CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000841) spolufinancovaného z EFRR a FIKP 1783-3/2018/FEKUTSTRAT.*

- [1] Baranyai Z., Krátký M., Vosátka R., Szabó N., Senoner Z., Dávid S., Vinšová J., Bősze, S.: *Eur. J. Med. Chem.* 133, 152 (2017).  
 [2] Krátký M., Vinšová J.: *Bioorg. Med. Chem.* 24, 1322 (2016).

## 5P16

### DIZAJN, SYNTÉZA, STABILITA A AKTIVITA NOVÝCH INHIBÍTOROV TRANZITNÉHO STAVU ĽUDSKÝCH GLYKOZYLTRANSFERÁZ A MYKOBAKTERIÁLNYCH GALAKTOFURANOZYLTRANSFERÁZ

Jana Jakubčinová, Stanislav Kozmon, Marek Baráth

Slovenská akadémia vied, Chemický ústav, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovensko, [marek.barath@savba.sk](mailto:marek.barath@savba.sk)

Glykozylácia je jednou z najvýznamnejších modifikácií proteínov. Jej priebeh ako aj zmeny v glykozylácii sa stali predmetom rôznych štúdií vedeckých a farmaceutických výskumov.

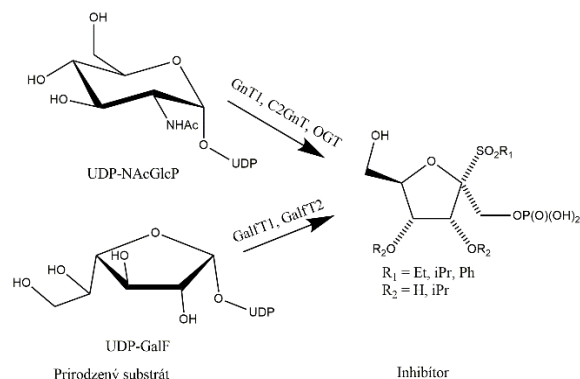
V súčasnosti sa predpokladá, že približne 70–80 % ľudských proteínov je glykozylovaných, pričom sa zúčastňujú mnohých dôležitých fyziologických procesov. Nie je preto prekvapujúce, že zmeny v glykozylácii môžu viesť k

vážnym zdravotným komplikáciám, akými sú nielen nádorové ochorenia, ale aj diabetes či Alzheimerova choroba [1].

Bunková stena *mykobaktérii* je vysoko lipofilná a predstavuje významnú bariéru pre transport aktívnych molekúl. Jej hlavnú zložku tvorí arabinogalaktan produkovaný galaktofuranosyltransferázami. Inhibíciou týchto enzýmov by sa dosiahla vyššia účinnosť antituberkulotík a znížilo riziko vzniku rezistencie [2].

V predkladanom príspevku popisujeme dizajn, syntézu a biologickú aktivitu rôzne substituovaných furanosylsulfónov, ako možných inhibítorov tranzitného stavu ľudských glykozylntransferáz a mykobakteriálnych galaktofuranosyltransferáz.

Základným skeletom je sulfonylovaná furanóza s príslušným aglykonom mimikujúcim prístupujúci akceptor v tranzitnom stave (Obr. 1). Donornú časť tvorí samotná furanóza s konfiguráciou *D-frukto*, *D-tagato* alebo *D-psiko*. Odstupujúci UDP z prirodzeného substrátu nahrádza voľný fosfát v mimitiku. Vybrané zlúčeniny boli testované na cytotoxickú aktivitu (MTT) ako aj inhibičnú aktivitu príslušných enzýmov.



**Obr. 1.** Prirodzený substrát a navrhnuté mimitikum ako spoločný inhibítor pre ľudské glykozylntransferázy a mykobakteriálne galaktofuranosyltransferázy.

*Práca vznikla s finančnou podporou projektu VEGA 2/0024/16.*

[1] Gabius H. J.: *BioSystems*. 164, 102 (2018).

[2] Krátky M., Vinšová J.: *Chemické Listy*. 104, 998 (2010).

## 5P17

### NOVÉ DONOR-AKCEPTOROVÉ ZLÚČENINY PRE SVETLOEMITUJÚCE DIÓDY

Róbert Balogh, Anita Eckstein Andicsová, Martin Danko

Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 84541 Bratislava 45, robert.balogh@savba.sk

Konjugované zlúčeniny s vlastnosťami podobnými polovodičom sú v posledných dvoch desaťročiach predmetom intenzívneho skúmania [1]. Zistilo sa, že donor-akceptorové malé molekuly s oxadiazolovými stavebnými jednotkami s kombináciou rôznych elektron-donorných substituentov majú vhodné využiteľné elektrické vlastnosti, ako vrstvy pre prenos elektrónov v organických svetloemitujúcich diódach (OLED) [2]. Ďalej, výhodou konjugovaných zlúčenín oproti doteraz používaným materiálom je dobrá svetelná a termická stabilita, nižšia cena, ľahšia príprava, vysoká efektívnosť a dlhá životnosť [3]. Napriek značnému počtu publikovaných prác je dostatok priestoru na prípravu materiálov s lepšími elektrickými a chemickými parametrami použiteľnými v OLED.



**Obrázok 1.** Nové donor-akceptorové deriváty s oxadiazolovými linkermi.

Cieľom našej práce bolo pripraviť štyri donor-akceptorové D-A-D zlúčeniny s rôznymi donorovými skupinami a s oxadiazolovými jednotkami, ako akceptormi. Deriváty boli pripravené pomocou Huisgenovej cykloadície z príslušného tetrazolu a z dichloridu kyseliny tiazolo[5,4-*d*]tiazolu. Štruktúra pripravených molekúl bola potvrdená pomocou NMR, IČ a HRMS a spektrálne vlastnosti boli ďalej študované pomocou UV-VIS a emisnej



spektroskopie v roztokoch a vo forme filmov. Na základe spektrálnych údajov, boli vypočítané kvantové výťažky príslušných zlúčenín. Vlastnosti získaných molekúl budú ďalej študované v modelových zariadeniach.

Táto práca vznikla za finančnej podpory grantov: VEGA 2/0158/17; 2/0161/17 a APVV-15-0545; APVV-17-0352.

- [1] C. Wang, H. Dong, W. Hu, Y. Liu, and D. Zhu, "Semiconducting  $\pi$ -Conjugated Systems in Field-Effect Transistors: A Material Odyssey of Organic Electronics," *Chem. Rev.*, no. 112, pp. 2208–2267, 2012.
- [2] S. B. Mane, C. F. Cheng, A. A. Sutanto, A. Datta, A. Dutta, and C. H. Hung, "D-A- $\pi$ -A organic dyes for dye-sensitized solar cells: Effect of  $\pi$ -bridge length between two acceptors on photovoltaic properties," *Tetrahedron*, vol. 71, no. 42, pp. 7977–7984, 2015.
- [3] Y. Tao, C. Yang, and J. Qin, "Organic host materials for phosphorescent organic light-emitting diodes," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 40, no. 5, pp. 2943–2970, 2011.

## 5P18

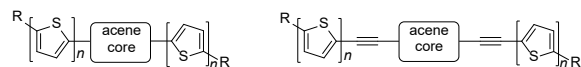
### STRUCTURE-PROPERTIES RELATIONSHIP OF OLIGOTHIENYL ACENES IN ORGANIC ELECTRONICS

Martin Putala\*

*Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, martin.putala@uniba.sk*

Organic  $\pi$ -conjugated molecules offer an attractive alternative because their fabrication processes are much less complex than conventional inorganic technology. They afford high operating speed, large device densities, low cost and a large area flexible circuit, and therefore they can be used as "universal" materials in field-effect transistors (OFET), light-emitting diodes (OLED) and organic photovoltaics (OPVs).

One of the most studied compound classes is oligothiophene-based material group [1,2]. Herein, structure-properties relationship of oligothieryl acene derivatives will be presented [3-6]. Apparently, a proper combination of molecular structure prerequisites and film-forming properties of semiconducting molecular material is essential for good OFET/OLED performance.



- [1] Zhang L., Colella N.S., Cherniawski B.P., Mannsfeld S.C.B., Briseno A.L., *ACS Appl. Mater. Interfaces* 6, 5327 (2014).
- [2] Roncali J., Leriche P., Blanchard P., *Adv. Mater.* 26, 3821 (2014).
- [3] Filo J., Mišicák R., Cigáň M., Weis, M., Jakobovič, J., Gmucová, K., Pavúk, M., Dobročka, E., Putala, M. *Synth. Met.* 202, 73 (2015).
- [4] Filo J., Putala M., Gmucová K., Jakobovič J., Weis M., *Synth. Met.* 211, 84 (2016).
- [5] Mišicák R., Striteský S., Vala M., Weiter M., Cigáň M., Gmucová K., Végső K., Weis M., Kožíšek J., Pavúk M., Putala M., *Synth. Met.* 217, 156 (2016).
- [6] Mišicák R., Novota M., Weis M., Cigáň M., Šiffalovič P., Nádaždy P., Kožíšek J., Kožíšková J., Pavúk M., Putala M., *Synth. Met.* 233, 1 (2017).

## PREDNÁŠKY - SEKCIA 6: POLYMÉRY

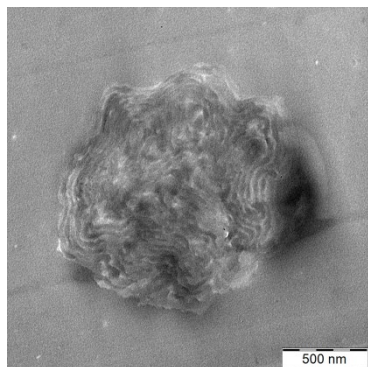
### 6P01

#### VLIV MODIFIKACÍ GRAFEN OXIDU NA VZNIK KOMPLEXNÍCH STRUKTUR V TERMOSETECH

Ivan Kelnar, Ludmila Kaprálková

Ústav makromolekulární chemie AVČR, v.v.i., Heyrovského n. 2, 16206 Praha 6, kelnar@imc.cas.cz

V současnosti byly dosaženy nejlepší vlastnosti polymerních nanokompozitů při aplikaci uhlíkových nanodestiček. To souvisí jak s excelentními mechanickými parametry a měrným povrchem, tak s velkým potenciálem pro modifikace, především v případě grafen oxidu (GO). Efektivní polymerní modifikace GO byly popsány zejména u termoplastů a jejich směsí. V případě termosetů bylo využití polymerních modifikací dosud studováno minimálně, důvodem je zřejmě dosažení poměrně vyvážených mechanických vlastností i bez modifikací resp. s využitím pouze nízkomolekulárních sloučenin. Tato práce byla motivována tvorbou komplexních morfologií v případě nanosilikátů interkalovaných polymerů v systému epoxid/polymerní modifikátor a rovněž schopností polymerů roubovaného GO tvořit účinné biomimetické struktury. V systému epoxid/polymer je ukázán vliv typu, délky, obsahu a geometrie naroubování polymerního řetězce na GO na tvorbu komplexních struktur v průběhu reakcí indukované fázové separace. Významný vliv má rovněž struktura a molární hmotnost polymerního modifikátoru. Příkladem je samouspořádání do lamelárních útvarů (analogických perleti), struktur typu blokových kopolymerů a směsných inkluzí. Zcela originální výsledky byly získány v případě GO se současně naroubovanými hydrofilními a hydrofobními řetězci, ovlivňujícími strukturu a parametry mezifází, ve všech případech je prezentován rovněž vztah struktura/vlastnosti.



Obr. 1. Struktura komplexních inkluzí.

Práce vznikla s podporou Grantové agentury České republiky (Grant No 19-06065S)

### 6P02

#### FORCE-DISPLACEMENT RELATIONS AT COMPRESSION OF DNA MACROMOLECULES

Tomáš Bleha, Peter Cifra

Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, 84541 Bratislava, Slovakia, cifra@savba.sk

The elasticity of dsDNA molecules is investigated by Monte Carlo simulations based on a coarse-grained model of DNA. The force-displacement ( $f-r$ ) curves are computed under the constraints of the constant force (Gibbs) or the constant length (Helmholtz) ensemble. The particular attention was paid to the compressional (negative) and weak tensile forces. It was confirmed that simulations using the vector Gibbs ensemble fail to represent the compression behavior of polymers. Simulations using the scalar Gibbs protocol resulted in a qualitatively correct compressional response of DNA provided the quadratic averages of displacements were employed. Furthermore, a well-known shortcoming of the popular Marko-Siggia relation for DNA elasticity at weak tensile forces is elucidated. Conversely, the function  $f-r$  from the simulation at the constant length constraint, as well as the new closed-form expressions, provide a realistic depiction of the DNA elasticity over the wide range of negative and positive forces. Merely a qualitative resemblance of the compression functions  $f-r$  predicted by the employed approaches supports the notion that the elastic response of DNA molecules may be greatly affected by the specifics of the experimental set-ups and the kind of averaging of the measured variable.

*This work was supported by grants SRDA-15-0323 and VEGA 2/0055/16.*

[1] T. Bleha and P. Cifra, *The Journal of Chemical Physics* 149 (5), 054903 (2018).

[2] T. Bleha and P. Cifra, *The Journal of Chemical Physics*, submitted

### 6P03

#### KOMPATIBILIZACE POLYMERNÍCH SMĚSÍ BLOKOVÝMI KOPOLYMERY

Josef Jůza<sup>1</sup>, Ivan Fortelný<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského náměstí 1888/2, 162 06 Praha 6, juza@imc.cas.cz*

Lepší fázové struktury a zlepšení mechanických vlastností polymerních směsí se dosahuje kromě jiného kompatibilizací; jedním z jejich používaných způsobů je přidavek blokového kopolymery s jednotlivými bloky shodnými nebo kompatibilními s příslušnými objemovými fázemi. V nedávné době jsme doporučovali [1] kompatibilizační působení popsané rovnicemi odvozenými na základě modelů Leiblera [2] a Noolandiho [3].

Modely zahrnují základní tři případy. Prvním je „suchý kartáč“ (dry brush) s kopolymerními bloky srovnatelnými či kratšími oproti délkám řetězců homopolymerů, kde se předpokládají natažené řetězce kopolymerů a homopolymer neprostupující kopolymerní vrstvu. Druhý je „moký kartáč“ (wet brush), kde jsou kopolymerní bloky delší než řetězce homopolymeru, jsou rovněž natažené, silně se překrývají, ale homopolymer může jejich vrstvou prostupovat. Třetí případ je relativně malé množství kopolymery (jinými slovy, relativně velká mezifázová plocha), kde se předpokládají volné řetězce.

Ukázalo se, že značná část polymerních soustav s kratšími kopolymerními bloky nevyhovuje všem podmínkám platnosti rovnic pro suchý kartáč ani pro nízký obsah kopolymery. Nejúčinněji by dle výsledků výpočtu měly kompatibilizovat kopolymery s bloky srovnatelné délky s řetězci homopolymeru. Při delších řetězcích sice roste jejich obsah na povrchu, ale mezifázové napětí se snižuje již méně; při kratších řetězcích je větší podíl kopolymery zůstávajícího v objemové fázi.

*Projekt TE01020118 byl a projekt TN01000008 je řešen s finanční podporou TA ČR.*

[1] Fortelný I., Jůza J.: *Polymer*. 150, 380 (2018). doi: 10.1016/j.polymer.2018.07.041

[2] Leibler L.: *Makromol. Chem., Macromol. Symp.* 16, 1 (1988). doi:10.1002/masy.19880160103

[3] Noolandi J.: *Makromol. Chem. Rapid Commun.* 12, 517 (1991). doi: 10.1002/marc.1991.030120810

### 6P04

#### POLYCARBONATE-BASED POLYURETHANE NANOCOMPOSITE FILMS

Milena Špírková, Jiří Hodan, Sabina Krejčíková, Lud'ka Machová

*Institute of Macromolecular Chemistry CAS, Heyrovského nám. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic, spirkova@imc.cas.cz*

Nanocomposite films were prepared by simple, environment-friendly synthesis: Waterborne polyurethane dispersion (WPUD) was (i) mixed with the nanofiller dispersed in water or (ii) the nanofiller was homogeneously distributed directly in WPUD. Both processes were followed by slow water removal at laboratory temperature followed by heating at 50 °C and finally in vacuum. Used nanofillers (e.g., colloidal silica, clay, hydroxyapatite, nanocellulose, starch, graphene oxide - up to 5 wt% in the nanocomposite) differ in the shape (spherical, lamellar, needle-shaped...) and the origin (organic, inorganic).

Films were characterized by the set of microscopy, spectroscopy and thermomechanical analyses. Functional properties of polyurethane (PU) films depend on the WPUD constitution. If PU dispersions are formed from solely linear chains, tensile properties are limited, but PU nanocomposite materials are fully recyclable. If WPUDs are constituted from branched/crosslinked PU chains, tensile and other functional properties are improved in comparison to recyclable PU materials.

The susceptibility to the degradation was tested in phosphate-buffered saline (PBS) and (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> + CoCl<sub>2</sub>) solutions at 37 °C. The novel PU nanocomposites could be applicable upon demands as stable or degradable biomaterials, e.g., as stent coatings.

*This work was financially supported by the Czech Science Foundation under project number 18-03932S.*

**6P05****SAMOUSPOŘÁDANÉ POLYMERNÍ SYSTÉMY CITLIVÉ NA VNĚJŠÍ PODNĚTY****Martin Hrubý<sup>1</sup>**<sup>1</sup>*Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika, mhruby@centrum.cz*

Samouspořádání molekul do komplexních supramolekulárních celků s kvalitativně novými vlastnostmi je v chemických základech života a je i podstatou schopnosti živých organismů reagovat na vnější prostředí. Klasickými příklady takových nadmolekulárních struktur jsou cytoplazmatická membrána tvořená fosfolipidy, nukleové kyseliny nebo multienzymové komplexy tvořené několika enzymy katalyzujícími následné reakce na jednom substrátu. Pochopením těchto mechanismů na fyzikální úrovni umožňuje cílenou chemickou syntézu analogických systémů na bázi polymerů šitých na míru nejen biomedicínským aplikacím.

Specifický případ nastává, pokud hydrofóbní část, respektive část molekuly zodpovědná za samouspořádání, významně či skokově působením vnějšího stimulu (změnou teploty, pH apod.) mění svoje fyzikálně chemické vlastnosti, jako je rozpustnost ve vodě. Pak je samouspořádání takového systému říditelné tímto vnějším stimulem a mluvíme o systémech citlivých na vnější podněty. Je to určitá, byť jednodušší varianta jedné z vlastností definujících život – dráždivosti.

V příspěvku budou diskutovány vybrané příklady samouspořádaných polymerních systémů studovaných v naší skupině citlivých ke změně pH, teploty, koncentraci železitých respektive draselných iontů s vlastnostmi výhodnými pro aplikace v medicíně. Z hlediska aplikačního jsou tyto příklady směřovány zejména na <sup>19</sup>F magnetickou rezonanci, radio- a radioimunoterapii nádorových onemocnění a inhibici tvorby amyloidních plaků.

*Autoři děkují za finanční podporu Grantové agentury České republiky (granty č. 19-01438S a 19-01602S) a Ministerstvu průmyslu a obchodu České republiky (grant č. FV10164).*

**6P06****CHELATUJÍCÍ POLYMERY PRO LÉČBU HEMOCHROMATÓZY****Ondřej Groborz<sup>1</sup>, Lenka Poláková<sup>1</sup>, Pavel Švec<sup>1,2</sup>, Kristýna Kolouchová<sup>1,2</sup>, Jiří Trousil<sup>1,3</sup>, Pavla Francová<sup>4</sup>, Jan Kučka<sup>1</sup>, Jan Krijt<sup>5</sup>, Petr Páral<sup>4</sup>, Luděk Šefc<sup>4</sup>, Martin Hrubý<sup>1\*</sup>**<sup>1</sup>*Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 1888/2, 162 06, Praha 6,*<sup>2</sup>*Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Hlavova 8, 128 00, Praha 2*<sup>3</sup>*Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Hlavova 8, 128 00, Praha 2*<sup>5</sup>*Centrum pokročilého preklinického zobrazování, Salmovská 3, 120 00 Praha 2*<sup>6</sup>*Ústav patofyziologie, 1. Lékařská fakulta Univerzity Karlovy, U Nemocnice, 128 53 Praha 2*

Hemochromatóza je skupina dědičných onemocnění, jež je charakterizována toxickým nahromaděním železa v orgánech. To může vést k orgánové toxicitě a nevratnému poškození. V současné době existuje pouze málo schválených léčebných postupů, z nichž všechny mají závažné nežádoucí účinky.

V této práci navrhujeme nové paradigma léčby: nerozpustné a tedy biologicky nevstřebatelné polymery by vytvářely stabilní komplexy s železnatými či železitými ionty v gastrointestinálním traktu, čímž by snížily biologickou dostupnost železa. Nerozpustnost těchto polymerů brání jejich vstřebání a tím zamezuje vzniku systémové i orgánové toxicity. Bylo připraveno několik polymerů s kovalentně vázanou selektivní chelatační skupinou. Na základě dat získaných *in vitro* a *in vivo* byly vybrány ty chelatuující skupiny, které byly dostatečně účinné pro případné klinické aplikace. Polymery vykazují zanedbatelnou vstřebatelnost, zanedbatelnou toxicitu, mají velmi vhodnou kinetiku *in vitro* chelatace železnatých i železitých iontů a mají prokazatelný terapeutický účinek na *in vivo* modelu. Proto by mohly být použity jako terapeutikum nové generace pro léčbu hemochromatózy a/nebo nemocí s podobnou patofyziologií.

*Autoři děkují za finanční podporu Grantové Agentury České republiky (grant # 19-01438S).*

**6P07****POLYMERNÍ DIAGNOSTICKÉ A THERANOSTICKÉ KONTRASTNÍ LÁTKY PRO <sup>19</sup>F MRI**

Kristýna Kolouchová<sup>1,2</sup>, Ondřej Sedláček<sup>1,3</sup>, David Babuka<sup>1</sup>, Ondřej Groborz<sup>1</sup>, Pavel Švec<sup>1,2</sup>, Daniel Jiráček<sup>4</sup> Martin Hrubý<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika, e-mail: kolouchova26@gmail.com

<sup>2</sup>Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 8, 128 00 Praha 2, Česká Republika

<sup>3</sup>Supramolecular Chemistry Group, Department of Organic and Macromolecular Chemistry, Ghent University, Krijgslaan 281-S4, 9000 Ghent, Belgie

<sup>4</sup>Institut klinické a experimentální medicíny, Vídeňská 9, 140 21 Praha 4, Česká Republika

Polymery s dolní kritickou teplotou roztoku (LCST) zůstávají molekulárně rozpuštěné při laboratorní teplotě a po zahřátí tvoří samospořádané částice nebo makroskopicky precipitují. Částice či precipitovaná depa mohou být použity pro diagnostiku, cílenou dopravu a řízené uvolňování bioaktivního nákladu nebo kombinace obou (teranostika).

Naše koncepce je založena na kopolymerech obsahujících *N*-(2,2-difluorethyl) akrylamidovou monomerní jednotku, tvořících po zahřátí svých vodných roztoků na tělesnou teplotu částice nebo precipitujících ve tkáni za tvorby depa/implantátu. Díky vysokému obsahu fluoru v polymeru jsou tyto polymery zobrazitelné <sup>19</sup>F MRI, slibnou neinvazivní zobrazovací metodou pro diagnostiku.<sup>1</sup> Částice jsou ideální pro pasivní akumulaci v tkáni pevných nádorů nebo v místě zánětů<sup>2</sup>, a proto mohou sloužit jako kontrastní látky pro diagnostiku těchto onemocnění. Po modifikaci těchto polymerních částic je možné získat nové vlastnosti, jako je pH- či redox-responsivita, čímž vytvoříme schopnost rozpadu částic v nižším pH či oxidativním prostředí, typickým pro nádorovou a zánětlivou tkáň. Polymerní implantáty fungují na stejném principu, uvolňování léčiva z důvodu lepší rozpustnosti implantátu v nižším pH či oxidativním prostředí, a tedy pomalém uvolňování léčiva in situ. Polymery se injikují v roztoku přímo do cílové tkáně, kde precipitují na depa/implantát.

Autoři děkují za finanční podporu Grantové Agentuře University Karlovy (grant č. 60211) a Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (grant INTER-COST č. LTC19032).

[1] Kolouchova, K.; Sedlacek, O.; Jirak, D.; Babuka, D.; Blahut, J.; Kotek, J.; Vit, M.; Trousil, J.; Konefal, R.; Janouskova, O.; Podhorska, B.; Slouf, M.; Hruby, M. *Biomacromolecules* **2018**, *19*, 3515.

[2] Nishida, N.; Yano, H.; Nishida, T.; Kamura, T.; Kojiro, M. *Vasc. Health Risk Manag.* **2006**, *2*, 213.

**6P08****INFLUENCING REACTIVE OXYGEN SPECIES CONTENT IN TUMOR CELLS BY SELF-ASSEMBLED FLUORINATED SELENOCYSTINE NANOPARTICLES**

Miroslav Vetrík<sup>1,2</sup>, Libor Kobera<sup>1</sup>, Rafal Konefal<sup>1</sup>, Volodymyr Lobaz<sup>1</sup>, Martin Hruby<sup>1</sup>, Guillem Pratz<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Macromolecular Chemistry CAS v.v.i, Heyrovsky sq. 2, Prague 6, Czech Republic

<sup>2</sup>Stanford University, Stanford School of Medicine, Stanford, California 94305, USA

Radiation treatment (RT) together with surgery intervention and chemotherapy is one of the most applied cancer therapies nowadays. Greater radioresistance of cancer cells over normal cells caused by hypoxia is one of the major limiting factor in RT. Therefore, each dose of RT has to be calculated very precisely. In this work radiation sensitization of cancer cells using self-assembled fluorinated dialkyl diselenide nanoparticles is examined. Fluorinated chain gives molecule its self-assembly properties and their fluorinated core is able to „dissolve“ gases as oxygen and carbon dioxide [1]. Oxygen imbalance during radiation can influence overall oxygen level in cells' environment. Amphiphilic character of the nanoparticles is achieved by incorporation of selenocystine that can be cleaved under the presence of ROS. Moreover, selenocystine as amphiphilic linker shows radioprotective properties for healthy cells. This conclusion is supported by clonogenic assays using RT of cancer cells. These nanoparticles can be utilized in the RT as radioprotectants potentially protecting healthy tissues from radiation while allowing delivering higher radiation doses to cancer cells.

This project was founded by Czech Academy of Science (#MSMJ200501801).

[1] M P Krafft: *Adv. Drug Deliv. Rev.*, 47 (2001).

**6P09****VLIV STRUKTURY OXYAMINOVÉHO LINKERU NA ZESÍTĚNÍ HYALURONANU**Petra Šedová<sup>1</sup>, Lenka Kovářová<sup>1</sup>, Radovan Buffa<sup>1</sup>, Jiří Bednařík<sup>1</sup><sup>1</sup>Contipro, Dolní Dobrouč 401, 56102 Dolní Dobrouč  
sedova@contipro.com

Hyaluronan je lineární polysacharid tvořený opakující se disacharidovou jednotkou [(1→4)-β-D-GlcA-(1→3)-β-D-GlcNAc-] hraje významnou signální roli během dynamických buněčných procesů, při morfogenezi, zánětech, rakovině či hojení ran<sup>1</sup>. Tento biokompatibilní polymer je modifikován za účelem přípravy hydrogelů využitelných v regenerativní medicíně či tkáňovém inženýrství. Pro možné zesítení hyaluronanu, byl tento polymer oxidován na polyaldehyd<sup>2</sup> a připraveny hydrazidové linkery<sup>3</sup> a bis(oxyamino)alkany.

Syntéza oxyaminů byla založena na nukleofilní substituci dibromderivátů *N*-hydroxyftalimidem (2,1 eq) (Gabrielova syntéza) v prostředí THF/DMSO katalyzovaná bází (2,5 eq DIPEA) při 75 °C, 4-20h a následném odchránění aminoskupiny hydrazinolýzou (5-10 eq N<sub>2</sub>H<sub>4</sub>.H<sub>2</sub>O) při teplotě 70°C. Struktura ftalimidových derivátů i oxyaminových linkerů byla potvrzena pomocí <sup>1</sup>H, HSQC NMR spektroskopie. S rostoucí délkou řetězce klesá rozpustnost těchto linkerů ve fyziologickém prostředí (vodný pufr).

Hydrogely byly připravené reakcí polyaldehydu hyaluronanu<sup>2</sup> (HA-OX) s bis(oxyamino) alkany s různou délkou alkylového řetězce (2,3,6,8 a 10 uhlíků) za vzniku iminu, který byl potvrzen pomocí <sup>1</sup>H NMR spektroskopie, kdy mizí signály hydratovaného aldehydu (5,27 pm) a objevuje se nový signál iminu (7,5-7,6 ppm). U hydrogelů byl sledován čas gelace a jejich mechanické vlastnosti.

1. Dosio F., Arpicco S., Stella B., Fattal E.: *Adv. Drug Deliv. Rev.* 97, 204 (2016).
2. Šedová P., Buffa R., Kettou S., Huerta-Angeles G., Hermannová M., Leierová V., Šmejkalová D., Moravcová M., Velebný V.: *Carbohydr. Res.* 371, 8 (2012).
3. Šedová P., Buffa R., Šilhár P., Kovářová L., Vágnerová H. et al. *Carbohydr. Polym.* 216, 63 (2019).

**6P10****ASPEKTY TESTOVÁNÍ POLYMERNÍCH SYSTÉMŮ *IN VIVO*, VE SPOLUPRÁCI S 1. LF UK (CAPI)**Jan Kučka<sup>1</sup>IÚstav makromolekulární chemie Akademie věd České republiky v.v.i., Heyrovského nám. 2, Praha,  
Jkucka@centrum.cz

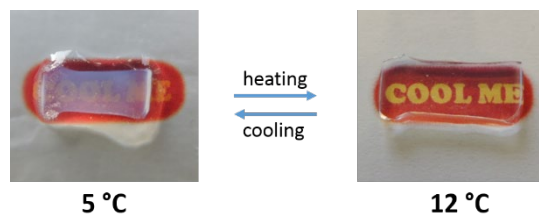
Biologické testování nově připravených polymerních a nanočásticových systémů pro biomedicínu je nedílnou součástí jejich charakterizace. Nové techniky zobrazování *in vivo* (SPECT/CT, PET/CT, MRI, UZ atd.) jsou nyní prakticky dostupné při dodržení vybraných podmínek. V příspěvku jsou uvedeny biologické, legislativní a ekonomické aspekty experimentů na zvířatech. Poznatky vycházejí z tříleté spolupráce obou ústavů zajišťované autorem osobně.

*Autor děkuje za finanční podporu Grantové agentury České republiky (granty č. 19-01438S a 18-07983S).*

**6P11****MODULATION OF THERMO- AND ION RESPONSIVENESS, WATER STATE, MECHANICAL PROPERTIES AND CELL ADHESION OF SULFOBETAINE AND CARBOXYBETAINE COPOLYMERS AND HYDROGELS**Martin Danko<sup>1</sup>, Zuzana Kroneková<sup>1</sup>, Miroslav Mrlík<sup>2</sup>, Jozef Osička<sup>2</sup>, Peter Kasák<sup>3</sup><sup>1</sup>Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, 845 41 Bratislava, Dúbravská cesta 9, Slovak Republic<sup>2</sup>Centre of Polymer Systems, University Institute, Tomáš Baťa University in Zlín, Třída T. Bati 5678, 760 01 Zlín, Czech Republic<sup>3</sup>Center for Advanced Materials, Qatar University, P.O.Box 2713, Doha, Qatar

Materials that can respond to external stimuli are of particular interest in bioengineering, nanotechnology, and medicine [1]. In this work we prepared copolymers bearing sulfobetaine and carboxybetaine methacrylic-based monomers using free-radical polymerization [2]. The ratio of the monomers in the copolymers influences upper critical solution temperature (UCST) in water. External stimuli as pH and presence of simple NaCl electrolyte modulate this temperature behavior. In addition, hydrogels were prepared using ethylene glycol dimethacrylate as crosslinker. These hydrogels showed tunable water state and mechanical properties. Total non-freezable water state decreases with amount of carboxybetaine segment in hydrogel feed. Compression moduli were in range 0.7-1.6 kPa, highest for highest carboxybetaine content indicating closely packed ionic pairings of carboxybetaine

segment. Responses on external stimuli such as temperature and ion strength were investigated and potential application as modulated thermal detection is proposed (Picture). Presence of carboxylate group allows attachment of oligo-peptide with RDG-motif to hydrogel samples. Hydrogel samples with attached RGD cell adhesion promotor exhibit controlled cell adhesion. Combination of different zwitterionic monomers opens simple and efficient pathway for preparation of materials with tunable properties as multi-response systems with kept zwitterionic character.



Thermo responsiveness of P(SBE<sub>99</sub>-co-CBA<sub>1</sub>) hydrogel.

*MD thanks to Grant Agency VEGA through project 2/0158/17 and Slovak Research and Development Agency through project APVV-15-0528. This work was made possible by Qatar University grant #QUUG-CAM 2017-1.*

[1] Cao, Z. Q. et al: *Chem. Rec.* 16, 1398–1435 (2016).

[2] Danko, M. et al: *Langmuir* 35, 1391-1403 (2019).

## PREDNÁŠKY - SEKCIA 7: JADROVÁ CHÉMIA

### 7P01

#### NOVÁ POTENCIÁLNI FLUORIDOVÁ MATRICE PRO STANOVENÍ <sup>236</sup>U PROSTŘEDNICTVÍM URYCHLOVAČOVÉ HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE

Tomáš Prášek<sup>1\*</sup>, Mojmír Němec<sup>1</sup>, Peter Steier<sup>2</sup>, Maki Honda<sup>2</sup>, Karin Hain<sup>2</sup>, Xiaohe Zhang<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Katedra jaderné chemie, České vysoké učení technické v Praze, Česká republika

<sup>2</sup>VERA Laboratory, Institute of Isotopic and Nuclear Physics, University of Vienna, Austria

\*E-mail: prasetom@fffi.cvut.cz

Radionuklid <sup>236</sup>U je alfa zářiem s poločasem rozpadu  $2,32 \cdot 10^7$  let. Vzniká převážně záchytem neutronu na jádru <sup>235</sup>U dle reakce <sup>235</sup>U(n,  $\gamma$ )<sup>236</sup>U, díky čemuž je ideálním stopovačem lidské jaderné činnosti, využívaným zejména pro účely monitorování emisí antropogenních radionuklidů do životního prostředí. Jelikož se koncentrace <sup>236</sup>U v přírodních materiálech pohybují obvykle na ultra-stopových úrovních, jsou pro příslušné analýzy používány vysoce citlivé hmotnostně spektrometrické metody ICP-MS a AMS, kde druhá zmíněná umožňuje dosažení významně lepších detekčních limitů. Současné metody měření <sup>236</sup>U pomocí AMS jsou založeny na oxidických terčových maticích, nicméně v posledních letech byly jako vhodná alternativa zkoumány matrice založené na fluoridech, poskytující vyšší iontové proudy a zároveň významně redukující interference isobarických molekulárních iontů. Ačkoliv pro tyto matrice, zejména fluorid uranický, byly publikovány slibné výsledky z hlediska chování v cesiovém iontovém zdroji AMS [1], čelí jejich aplikace v rutinních analýzách dosud několika problémům. Nejvýznamnější jsou v tomto ohledu čistota připravované terčové matrice a návaznost vlastního postupu na předcházející kroky úpravy výchozího přírodního vzorku. Vzhledem k těmto důvodům byl vyvinut postup přípravy fluoridové terčové matrice, lépe splňující požadavky na stanovení <sup>236</sup>U v přírodních vzorcích. Aplikovatelnost metody byla ověřena na sérii terčových vzorků, které byly analyzovány v AMS laboratoři VERA, University of Vienna.

*Tento výzkum je součástí projektu RAMSES (CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000728)*

[1] Xianggao Wang, Kejun Dong, Ming He, et al.: *Nucl. Tech.* 182, 235-241 (2013)

### 7P02

#### DIFÚZE CHLORIDU NA NÍZKOALKALICKÝCH CEMENTOVÝCH MATERIÁLECH: VLIV POVRCHOVÝCH A STRUKTURNÍCH VLASTNOSTÍ

Tomáš Rosendorf<sup>1,2</sup>, Petr Večerník<sup>1</sup>, Radek Červinka<sup>1</sup>, Dušan Vopálka<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ÚJV Řež, a. s., Hlavní 130, Husinec, 250 68 Řež, tomas.rosendorf@gmail.com

<sup>2</sup>FJFI ČVUT v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha 1

Nízkoalkalické cementové materiály jsou předpokládány jako konstrukční prvky hlubinného úložiště, tj. obložení a zátky ukládacích chodeb, které mohou přímo ovlivňovat funkčnost bentonitové inženýrské bariéry. Tyto materiály jsou studovány pro bezpečnostní hodnocení hlubinného úložiště z pohledu chemismu, interakcí s bariérami, či retardačního potenciálu radiokontaminantů [1]. Pro predikci a modelování migračního chování radionuklidů v cementových materiálech jsou stanovovány difúzní parametry.

Byly provedeny série průnikových difúzních experimentů chloridu (značeným <sup>36</sup>Cl), elektroodporová měření, stanovení rtuťové porozimetrie a měření povrchového zeta-potenciálu na nízkoalkalických směsích ovlivněných geochemií podzemní granitické vody a dlouhodobým teplotním namáháním (10 vs. 95 °C). Z výsledků lze pozorovat difúzní odpor chloridu v porovnání s provedenými difúzními experimenty s tritiovou vodou, jež mohou být vysvětleny záporným zeta-potenciálem povrchu ( $\zeta = -41 \pm 10$  mV) a nízkým (< 10 %) zastoupením kapilárních pórů ( $100 < d > 10$  nm).

*The research leading to these results has received funding from the European Union's Horizon 2020 Research and Training Programme of the European Atomic Energy Community (EURATOM) (H2020-NFRP2014/2015) under grant agreement n° 662147 (CEBAMA).*

[1] Ochs, M., Mallants, D., Wang, L.: *Radionuclide and Metal Sorption on Cement and Concrete* (2015).



**7P03****PŘÍPRAVA MODELOVÉ KOROZNÍ VRSTVY PRIMÁRNÍ SMYČKY REAKTORU VVER****Martin Kašpar<sup>1</sup>, Martin Strejc<sup>1</sup>**<sup>1</sup>ÚJV Řež, a. s., Hlavní 130, 250 68, Husinec-Řež, martin.kaspar@ujv.cz

Na území České republiky se nacházejí čtyři reaktory VVER 440 v Jaderné elektrárně Dukovany (EDU) a dva reaktory VVER 1000 v Jaderné elektrárně Temelín (ETE). EDU byla spuštěna v 80. letech minulého století. Dva bloky ETE byly uvedeny do provozu na přelomu 20. a 21. století. Předpokládaná životnost reaktoru VVER 440 je 50 let. Odstavení EDU je proto plánováno v roce 2035. S blížícím se termínem ukončení provozu začínají probíhat přípravné práce, které zahrnují projekt Recyklovatelné dekontaminační médium pro vyřazování jaderných zařízení z provozu. Cílem tohoto projektu je vývoj recyklovatelného dekontaminačního činidla, kde regenerace účinné složky média v průběhu procesu umožní snížit objem produkovaného radioaktivního odpadu. Z důvodu obtížné dostupnosti reálných vzorků korozních vrstev primární smyčky byly v rámci projektu připraveny dva postupy pro přípravu jednotlivých složek korozní vrstvy pro testování účinnosti dekontaminačního média. První byla vyvinuta metoda pěstování korozní vrstvy na vzorku oceli odpovídající složením výstelce primárního okruhu. Druhou byla metoda přípravy korozní vrstvy z prekurzorů, které byly sintrovány ve vysokoteplotní peci.

*Projekt Recyklovatelné dekontaminační médium pro vyřazování jaderných zařízení z provozu je podporován z programu Trio, který je financován Ministerstvem průmyslu a obchodu České republiky, (reg. č. FV10023)*

# PREDNÁŠKY - SEKCIA 8: VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE

8P01

## 150 ROKOV OD OBJAVU PERIODICKÉHO ZÁKONA

Viktor Milata

*Oddelenie organickej chémie, Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie, FCHPT STU, 812 37 Bratislava, Radlinského 9 viktor.milata@stuba.sk*

Rok 2019 je vzácnou príležitosťou pripomenúť si 100. výročie založenia svetovej chemickej autority – IUPAC: Medzinárodnej únie pre čistú a aplikovanú chémiu ([www.iupac.org](http://www.iupac.org)) ale aj 85. výročie úmrtia Márie Curie-Sklodowskej, jedinej nositeľky dvoch Nobelových cien v dvoch vedných odboroch.

Chemici v tomto roku spomínajú aj na Dmitrija Ivanoviča Mendelejeva, ktorý 6. marca 1869, teda pred 150 rokmi publikoval prácu o vlastnostiach prvkov a ich zlúčenín, ktorý bol nazvaný periodický zákon (prvkov) a jeho grafickou podobou je periodická tabuľka prvkov. Preto bol rok 2019 vyhlásený UNESCO-m za *Medzinárodný rok periodickej tabuľky – International Year of the Periodic Table IYPT2019* [1,2].

V prednáške budú prezentované niektoré zvláštnosti a zaujímavosti o prvkoch a ich zlúčeninách a o periodických tabuľkách s cieľom pripomenúť si tento základný chemický objav a vyvolať diskusiu okolo neho.

The image shows the IUPAC Periodic Table of the Elements. It is a standard 7-period, 18-column table. The title is 'IUPAC Periodic Table of the Elements'. The table includes element symbols, atomic numbers, and names. The lanthanide and actinide series are shown as separate rows below the main table. The International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) logo is visible at the bottom left of the table.

**Obrázok 1.** Súčasná kompletná verzia periodickej tabuľky prvkov (<https://iupac.org/what-we-do/periodic-table-of-elements/>).

*Príspevok bol finančne podporený Vedeckou grantovou agentúrou MŠVVaŠ SR a SAV VEGA pod č. 2/0035/19 a Kultúrnou edukačnou grantovou agentúrou MŠVVaŠ SR KEGA pod č. 034STU-4/2017.*

[1] Drábik M.: Storočnica IUPAC a Medzinárodný rok Periodickej tabuľky prvkov, *ChemZi* 14(2), 60 (2018).

[2] <http://www.unesco.org/new/en/brasilia/about-this-office/prizes-and-celebrations/2019-international-year-of-the-periodic-table-of-chemical-elements/>

8P02

## KHANOVA METODA – MOŽNOSTI VYUŽITÍ METODY „PŘEVŘÁCENÉ TRÍDY“ VE VÝUCE CHEMIE

Jana Prášilová

*Katedra chemie, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, [Prasilova.Jana@seznam.cz](mailto:Prasilova.Jana@seznam.cz)*

Když Salman Khan vytvářel výuková videa s výkladem matematiky pro své sestřenice, zcela jistě netušil, kolika dalším žákům jeho tutoriály pomohou ve vzdělávání. Nezisková organizace Khan Academy [1] byla založena v roce 2006. Prvním kompletně zpracovaným předmětem byla matematika, v současné době zde můžeme nalézt výuková videa z oblasti ekonomie, přírodních i humanitních věd. Český komunitní neziskový projekt funguje pod názvem Khanova škola [2].

V semináři „Vybrané problémy z didaktiky chemie“ (PřF OU) a „Současné aktuální problémy výuky chemie“ (PřF UPOL) jsme se zabývali aktivizačními výukovými metodami [1], součástí semináře bylo i seznámení s Khanovou metodou (metodou převrácené třídy, flipped classroom). Dle zadaných pravidel si studenti sami vyzkoušeli připravit krátké výukové video na jimi zvolené téma z výuky chemie. Chcete-li se dozvědět o Khanově metodě více, přijměte prosím, pozvání na přednášku, která je zařazena do sekce Vyučování a historie chemie.

*Děkuji svým studentům, kteří se nebojí zkoušet inovativní výukové metody.*

[1] <https://www.khanacademy.org/>

[2] <https://cs.khanacademy.org/>

[3] Prášilová, J. Using of Activation Methods in a Chemistry Teaching at University. In: *Projektové vyučování v přírodovědných předmětech XIV* 2016-11-03. Praha : Univerzita Karlova, Pedagogická fakulta, 2017. s. 123-130. ISBN 978-80-7290-929-2.

### 8P03

#### COOPERATION IN EDUCATION AND TRAINING IN NUCLEAR- AND RADIOCHEMISTRY IN EUROPE

M. Šácha<sup>1</sup>, J. John<sup>1</sup>, M. Němec<sup>1</sup>, P. Distler<sup>1</sup>, C. Walther<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Department of Nuclear Chemistry, Czech Technical University in Prague, 115 19 Prague, Czech Republic, [martin.sacha@fffi.cvut.cz](mailto:martin.sacha@fffi.cvut.cz)*

<sup>2</sup>*Institut für Radioökologie und Strahlenschutz, Leibniz Universität Hannover, 30419 Hannover, Deutschland, [walther@irs.uni-hannover.de](mailto:walther@irs.uni-hannover.de)*

The motivation, history and current status of coordination of education and training in nuclear- and radiochemistry in Europe will be reviewed. The achievements of the Euratom project “A Modular European Education and Training Concept In education in Nuclear CHEmistry (MEET-CINCH)” will be described in detail and the results will be presented. They are particularly the Massive Open On-line Courses (MOOC) – an attempt to attract young talents to the field of nuclear- and radiochemistry and a Vocational Education and Training (VET) e-shop – a platform for sharing courses to the professionals, students and general public.

The long term strategy for nuclear- and radiochemistry education in Europe will be presented. Its main aim is to create conditions for coordination of the current fragmented and diverse activities in both the education and training field at all levels of academic and professional career. In the education field, the aim is to introduce novel education techniques such as Flipped Classroom and online courses to the nuclear chemistry teaching and training. As a tool for achievement of these aims and guaranteeing the sustainability of the project results, the Nuclear and Radiochemistry Network (NRC Network) and EFTS (Euratom Fission Training Scheme) was recently formed.

### 8P04

#### PROJEKT SKVALITNENIA VÝUČBY ANORGANICKEJ CHÉMIE NA FAKULTE CHEMICKEJ A POTRAVINÁRSKEJ TECHNOLOGIE

Peter Segľa, Vladimír Jorík, Ján Pavlík, Jozef Švorec, Miroslav Tatarko

*Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, Oddelenie anorganickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie; 812 37 Bratislava, [peter.segla@stuba.sk](mailto:peter.segla@stuba.sk)*

Cieľom projektu je podstatné skvalitnenie a modernizácia edukačného procesu predmetov anorganickej chémie, ktoré by vyhovovali potrebám výučby anorganickej chémie na univerzitách v bakalárskom, inžinierskom a doktorandskom štúdiu. Výsledkom projektu sú tri kvalitné farebné vysokoškolské učebnice [1-3], ktoré okrem študentov slúžia aj širšiemu okruhu čitateľov, učiteľom chémie na stredných školách, vysokoškolským pedagógom a výskumným pracovníkom z príbuzných odborov, ale aj odborníkom z praxe. Potreba prechodu od namemorovaných vedomostí k schopnosti aplikovať základné poznatky, ako aj zvyšujúci sa podiel študentov so slabými vedomosťami z chémie zo strednej školy, vedie autorov k snahe, aby každá kapitola v učebnici obsahovala veľký počet riešených príkladov, ktoré budú vhodným spôsobom zakomponované v texte príslušnej kapitoly. V súlade so svetovým trendom vydávania multimediálnych učebníc ako aj so skutočnosťou, že anorganická chémia je experimentálna veda, je ďalším cieľom projektu vhodne prepracovať a doplniť tieto učebnice o lepšie prepojenie na laboratorné cvičenie ako aj o využitie zvuku, grafiky, animácie, interaktivity a videí s chemickými pokusmi. Pri výučbe anorganickej chémie na fakulte je študentmi značne využívaná verejne dostupná (viac ako 16 000 návštev za rok) internetová stránka predmetov anorganickej chémie <https://kega.tatarko.eu/>. Cieľom nasledujúceho projektu bude ďalšie skvalitnenie uvedenej stránky, ktorá bude vhodným spôsobom prepojená s multimediálnymi učebnicami.

*Práca vznikla s podporou projektu KEGA 017STU-4-2017.*

[1] P. Segľa, V. Jorík, J. Švorec, M. Tatarko: *Anorganická chémia – Vodík a prvky 16. až 18. skupiny*. Slovenská chemická knižnica v Bratislave 2015, 1. vydanie, 332 strán, ISBN 978-80-89597-30-7.

[2] P. Segľa, V. Jorík, J. Švorec, M. Tatarko: *Anorganická chémia – Prvky 13. až 15. skupiny*. Slovenská chemická knižnica v Bratislave 2017, 1. vydanie, 342 strán, ISBN 978-80-89597-63-5.

[3] P. Segľa, V. Jorík, J. Švorec, M. Tatarko: *Anorganická chémia – Základy anorganickej chémie*. Slovenská chemická knižnica v Bratislave 2019.

**8P05****REFLEXE BADATELSKÝCH AKTIVIT**Kateřina Trčkova*Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, [katerina.trckova@osu.cz](mailto:katerina.trckova@osu.cz)*

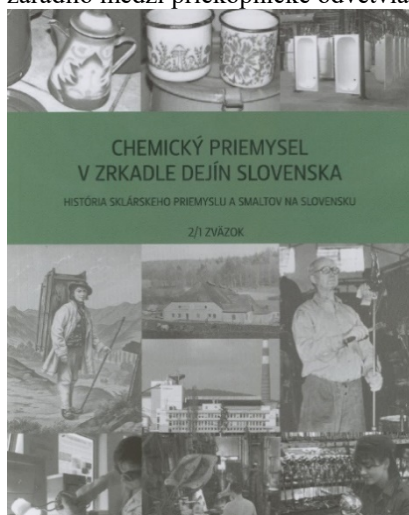
V příspěvku jsou prezentovány možné příčiny problémů spojených s řešením prakticky zaměřených badatelských úloh žáky, realizovaných v rámci projektu SGS (Studentská grantová soutěž). Analýzou a hodnocením pracovních listů, dotazníkovým šetřením žáků a učitelů, vyplněním posuzovacích karet žáky a hodnotitelem bylo zjištěno, že žáci řeší méně úspěšně úlohy vyžadující složité myšlenkové operace a větší nároky na manuální zručnost při sestavování aparatury. Do studie se zapojilo 33 dvojic žáků, z toho 9 dvojic 8. ročníku základní školy a 24 dvojic odpovídajícího ročníku gymnázií. V rámci jednoho badatelského dne byly ověřovány tři badatelské úlohy. Na začátku bádání proběhla praktická demonstrace spojená s instruktáží o způsobu řešení úloh. Rozbor problémové situace bylo doporučováno provádět metodou brainstormingu do myšlenkové mapy. V úloze založené na dělení směsi tuto metodu využívá 24 % dvojic žáků a v úloze založené na analytických důkazech 45 % dvojic žáků. Bylo zjištěno, že 69,7 % týmů má největší problém s řešením úlohy na dělení směsi. Důvodem neúspěšného řešení může být absence problémových a praktických úloh ve výuce. S největší obtížností žáci analyzují problémovou situaci a zapisují výsledky pozorování. Nedostatky mohou být způsobeny stále převládajícím transmisivním způsobem výuky.

*Tento text vznikl za podpory Projektu SGS01/PřF/2019-2020, Inovativní metody ve výuce chemie.*

**8P06****HISTÓRIA SKLÁRSKEHO PRIEMYSLU NA SLOVENSKU**Ľudovít Hallon<sup>1</sup>, Štefan Škultéty<sup>2</sup>, Michal Uher<sup>3</sup>, Viktor Milata<sup>3</sup>, Miroslav Sabol<sup>1</sup><sup>1</sup>*Historický ústav SAV, P. O. Box 198, Klemensova 19, 814 99 Bratislava, [ludovit.hallon@savba.sk](mailto:ludovit.hallon@savba.sk)*<sup>2</sup>*Zväz sklárskeho priemyslu Slovenskej republiky, Bratislavská 9, 911 05 Trenčín, [skultety@zvsp.sk](mailto:skultety@zvsp.sk)*<sup>3</sup>*Oddelenie organickej chémie FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, [viktor.milata@stuba.sk](mailto:viktor.milata@stuba.sk)*

Silikátový priemysel je jedným z najstarších priemyselných odvetví. Sklo a keramika patria medzi najstaršie výplody ľudského umu. Vznikli z potreby uspokojiť každodenné potreby človeka. Ich výroba prekonala dlhé obdobie vývoja a stupne dokonalosti od individuálnej cez remeselnícku zručnosť až k mamutím veľkopodnikom súčasnej doby.

Výrobky sklárni na území Slovenska nadobudli vyššiu úroveň v prvej polovici 19. storočia, keď sa práve sklárstvo zaradilo medzi priekopnícke odvetvia továrenského charakteru výroby.



**Obrázok 1.** Titulná strana publikácie.

V prednáške budú uvedené prvé zmienky o skle, slovenských sklárňach a ako vyzerá slovenský sklársky priemysel v súčasnosti. Ďalej spomenieme výchovu sklárskych odborníkov a sklárske inštitúcie ako aj ich činnosť.

*Príspevok bol finančne podporený Vedeckou grantovou agentúrou MŠVVaŠ SR a SAV VEGA pod č. 2/0042/16 a Kultúrnou edukačnou grantovou agentúrou MŠVVaŠ SR KEGA pod č. 034STU-4/2017.*

[1] Hallon Ľ., Pach L., Škultéty Š., Uher M., Milata V.: *Chemický priemysel v zrkadle dejín Slovenska*. Zv. 2/1, vydalo Vydavateľstvo SPEKTRUM STU, Bratislava 2018, 94 s.

**8P07****NATURE – 150 ROKOV**Ján Čaplovič*Bratislava*

Približne dva mesiace po našom zjazde oslávi prestížny prírodovedecký časopis Nature 150. výročie od svojho vzniku. Príspevok je krátkym pohľadom do jeho histórie spojenej s rodinou Macmillanovcov a ich nakladateľstvom. Podrobnejšie sa venuje vzťahu k Československu najmä v období pred 2. svetovou vojnou a politickým postojom, ktoré časopis vtedy vyjadroval.

**8P08****OD IZOTOPŮ K PROTEOMICE – STOLETÍ HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE**Pavel Zachař, David Sýkora*Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6, zacharp@vscht.cz*

Hmotnostní spektrometrie je v současnosti velmi rozšířená instrumentální metoda, která objevuje stále nové oblasti uplatnění. Její počátky však sahají hluboko do minulosti, do počátku 20. století a principy, ze kterých vychází, se formovaly již ve druhé polovině 19. století. Anodové (kanálové) paprsky vznikající při výbojích ve zředěných plynech a zjištění, že se jedná o kladně nabitě částice, jejichž dráha se při pohybu v magnetickém poli zakřivuje, to byly skutečnosti, které vedly ke vzniku prvních, velmi jednoduchých přístrojů (Thomson 1910, Dempster 1918, Aston 1919). Pomocí těchto přístrojů – jako jedinou dostupnou metodou – byla prokázána existence přirozených izotopů u většiny známých prvků, což přispělo k vysvětlení několika nesrovnalostí v periodické tabulce prvků, kde podle „atomových vah“ by prvkům příslušelo jiné umístění, než podle jejich chemických vlastností (Te – I, Co – Ni, Ar – K). Další úpravy přístrojů a studium principů hmotnostní spektrometrie umožnily postupně identifikaci molekul organických látek a ve spojení se separačními technikami (GC, LC) umožnily identifikaci jednotlivých složek složitých organických směsí. Každá nová konstrukce iontového zdroje nebo analyzátoru vždy znamenala uplatnění hmotnostní spektrometrie v dalších oblastech. Dnes jsou běžné analýzy složitých rostlinných extraktů, stopových kontaminantů v potravinách, lécích a složkách životního prostředí. V současnosti se uplatňují nové přístroje v proteomice, forenzní analýze, v kosmických výzkumech a v mnoha dalších oblastech. V přednášce nebude opomenut ani podíl československých vědců na rozvoji hmotnostní spektrometrie.

## PREDNÁŠKY - SEKCIA 9: ŽIVOTNÉ PROSTREDIE, POTRAVINÁRSTVO A BIOTECHNOLÓGIE

### 9P01

#### AKO SA ODSTRAŇUJÚ FARMACEUTIKÁ NA ČISTIARŇACH ODPADOVÝCH VÔD

Igor Bodík<sup>1</sup>, Petra Szabová<sup>1</sup>, Michaela Plekancová<sup>1</sup>, Tomáš Mackuľak<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Oddelenie environmentálneho inžinierstva FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, igor.bodik@stuba.sk*

Problematika rôznych druhov farmaceutík je v súčasnosti živo diskutovaná nielen v odbornej, ale aj v laickej verejnosti. Na Slovensku ročne spotrebujeme asi 120 miliónov balení liekov, čo predstavuje asi 22 balení na osobu a rok. Ak si to prepočítame na čisté účinné látky, tak sú to tony chemikálií, ktoré spotrebujeme, aby sme „chránili“ svoje zdravie. Už sa veľmi nezamýšľame nad tým, že veľkú časť týchto liečiv vylučujeme do kanalizácie a významne tým zaťažujeme životné prostredie. Len napr. kanalizáciou mesta Košice pretečú ročne asi 2 tony farmaceutík. Princíp biologického čistenia odpadových vôd však neumožňuje dokonalé odstránenie farmaceutík z odpadových vôd. Kým niektoré liečivá ČOV odstráni takmer úplne (napr. valsartan, atorvastatin, morfin), existuje celý rad liečiv, ktoré prejdú procesom čistenia bez významnej redukcie (napr. tramadol, sulfapyridín, sulfametoxazol, karbamazepín, venlafaxín a i.). Ide o pomerne zanedbateľné koncentrácie (jednotky až stovky nanogramov na liter), avšak berúc do úvahy obrovské prietoky odpadových vôd (tisíce m<sup>3</sup>/deň), potom látkové množstvá liečiv môžu hrať významnú úlohu. Časť týchto liečiv teda odchádza z ČOV a vteká do povrchových vôd, kde ďalej prebieha proces ich rozkladu (sorpcia, biodegradácia, fotodegradácia a pod.), resp. interakcií s okolitým prostredím.

*Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy Zmluvy č.APVV-17-0119".*

### 9P02

#### CHEMICAL ANALYSIS OF PLASTIC WASTE IN AND ALONG THE DANUBE RIVER

Matej Mičušík<sup>1</sup>, Jaroslav Kuliček<sup>1</sup>, Angela Kleinová<sup>1</sup>, Michal Procházka<sup>1</sup>, Silvia Podhradská<sup>1</sup>, Gudrun Obersteiner<sup>2</sup>, Mária Omastová

<sup>1</sup>*Polymer institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovakia; maria.omastova@savba.sk*

<sup>2</sup>*BOKU – University of Natural Resources and Life Sciences, Vienna, Muthgasse 107/III, 1190 Vienna, Austria*

Plastics materials are among the most diverse materials ever and are part of almost all sectors of our daily life. The great success of plastics as a source for all purposes at the same time creates problems regarding plastic waste and its disposal – also in and along the Danube river. To have more precise knowledge about the type of plastic waste in Danube river cross-border project PlasticFreeDanube focuses on extending the knowledge about sources and transport behaviour of macro plastic (> 5 mm) in the Danube River and its environmental impacts.

All materials interact with the environment through their surfaces. The composition of material surface depended from many factors as corrosion rates, catalytic activity, adhesive properties, wettability, contact potential, and failure mechanisms. X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR) are methods suitable for the determination of materials and surface changes on materials.

Plastic waste samples contained metal oxides (XPS: Fe2p signal at ca 711 eV) on the surface and higher amount of oxygen compared to the original material (e.g. showed on Bounty stick collected as waste and bought freshly in the market). All of the plastic wastes were successfully identified by the combination of FTIR and XPS analysis. Results from optical microscope clearly show the scratches on the surface, which can lead to the formation of microplastics.

*This work was financially supported by the Interreg Slovakia-Austria project PlasticFreeDanube, contract No. Z SKATV023.*

**9P03****ČIŠTĚNÍ PROCESNÍCH A ODPADNÍCH VOD Z VÝROBY VISKOZNÍCH VLÁKEN**Libor Dušek<sup>1</sup>, Petr Herink<sup>1</sup><sup>1</sup>*Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95,532 10 Pardubice, ČR, [libor.dusek@upce.cz](mailto:libor.dusek@upce.cz)*

Cílem práce bylo optimalizovat spotřebu procesní vody a zajistit snížení koncentrace  $Zn^{2+}$  v proudě použité prací vody, kde jejich koncentrace překračují hodnotu 100 mg/l. a parametrů TOC a CHSK v práci a odpadní vodě vznikající při výrobě viskozních vláken. Studie jednoznačně prokázala, že parametr CHSK lze z počáteční hodnoty až 21 g/l do 12h snížit až o cca 95% kombinací srážení, filtrace a chemické oxidace pomocí optimalizovaného procesu Fentonovy oxidace nebo ozonolýzou. Byl hledán optimální způsob filtrace (filtrační písek, mikrofiltrační membrána...) a u aplikace Fentonovy oxidace pak optimalizován poměr  $Fe^{2+}$ :  $H_2O_2$  a doba oxidace s ohledem na zamýšlenou koncovou hodnotu CHSK a pH reakce. Současně byla ověřena možnost záměny regeneračního média pro koncové iontoměničové kolony a její vliv na užitnou kapacitu ionexu Lewatit Mono Plus S108 pro záchyt  $Zn^{2+}$  ionů.

**9P04****TESTOVANIE ELEKTRODOVÝCH MATERIÁLOV PRE ODFARBENIE ODPADNÝCH VÔD**Gabriela Kuchtová<sup>1</sup>, Libor Dušek<sup>1</sup><sup>1</sup>*Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95,532 10 Pardubice, ČR, [gabriela.kuchtova@student.upce.cz](mailto:gabriela.kuchtova@student.upce.cz), [libor.dusek@upce.cz](mailto:libor.dusek@upce.cz)*

Cieľom tejto práce bolo posúdenie vhodnosti elektródových materiálov pre odfarbovanie modelových odpadných vôd obsahujúcich syntetické farby na textil. Jednalo sa o látky kyslého charakteru patriace medzi aminoantrachinónové i azo farbivá. Tieto látky prispievajú k organickému znečisteniu vôd, pretože ich vysoká stabilita, potrebná k zachovaniu stálosti zafarbenia, predstavuje problém pri degradácii. Navyše pri farbiacom procese textilných vlákien bývajú pridávané soli ako NaCl či  $Na_2SO_4$ . Z tohto dôvodu sa nám javilo vhodné použiť nepriamo anodickú oxidáciu patriacu medzi pokročilé oxidačné procesy. Z testovaných elektród poskytovali najlepšie výsledky bórom dopovaná diamantová elektróda a platinová elektróda. Ich použiteľnosť bola podrobnejšie skúmaná na farbive Acid Blue 80 pri rôznych podmienkach ako rozdielne pH, prúdová hustota, koncentrácia soli a pod. V neposlednom rade bola zhodnotená nielen dekolORIZÁCIA, ale aj možnosť degradácie farbív.

**9P05****ODSTRAŇOVÁNÍ LÉČIVA DIKLOFENAK Z VOD ADSORPCÍ NA SORBENTU BIOCHAR: Vliv IMPREGNACE SORBENTU POMOCÍ IONTOVÝCH KAPALIN**Barbora Kamenická, Tomáš Weidlich*Skupina chemických technologií, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Pardubice, Česká republika, [barbora.kamenicka@student.upce.cz](mailto:barbora.kamenicka@student.upce.cz)*

Léčivům, jako kontaminantům vod, je v současné době věnována větší pozornost vzhledem k jejich potenciálním dopadům na životní prostředí. I když jsou ve vodách přítomny při poměrně nízkých koncentracích, nepříznivé účinky na vodní organismy mohou mít fatální následky. Mezi takové léčiva patří i Diklofenak, který je často detekován v odpadních vodách, povrchových vodách a dokonce i pitné vodě. V posledních desetiletích se ukázalo, že adsorpce je účinnou čistící metodou pro odstraňování různých organických kontaminantů, jako jsou léčiva včetně Diklofenaku. Jako konvenční adsorbent se nejčastěji používá aktivní uhlí, avšak vzhledem k jeho ceně byla v posledních pár letech testována řada jiných levnějších alternativních sorbentů – například biochar (biouhlí). V této práci byla studována adsorpce léčiva Diklofenak na uhlíkatý sorbent biochar a na iontovými kapalinami (kvartérními amoniiovými solemi) impregnovaný biochar. Byly sestrojeny adsorpční izotermy, ze kterých vyplývá, že impregnace biocharu iontovými kapalinami vede k navýšení sorpční kapacity tohoto sorbentu a tudíž ke snížení nákladů na efektivní odstraňování Diklofenaku, popřípadě dalších biocidních látek z vod.

*Poděkování za finanční podporu v rámci projektu TA ČR č.TH02030200: Efektivní odstraňování aromatických halogenderivátů (AOX) z lokálních průmyslových zdrojů.*

[1] Lonappan L.: Bioresour. Technol. 249, 286 (2018).

[2] Lonappan L.: Waste Manage. 49, 537 (2016).

[3] Kamenická B., Bartášková A., Švancara I., Weidlich T.: *Monatsh. Chem.* 1, 9 (2019).

## 9P06

### OD POLAROGRAFIE S OBNOVOVANOU RTUŤOVOU ELEKTRODOU K ELEKTROCHEMII S KOMPRESNĚ-EXPANZNÍMI/STACIONÁRNÍMI REŽIMY S ŘÍZENOU VELIKOSTÍ

Ladislav Novotný

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

Toto sdělení poskytuje informaci o jedné z problematik související s dlouholetou prací a originálními výsledky čs. původu (namnoze spojenými s autorem příspěvku [1]), o které se obsah příspěvku opírá. Tyto výsledky výzkumu a vývoje jsou zachyceny v desítkách patentů, publikací, v příslušných dizertacích, konferenčních a jiných sděleních i v dosud nepublikovaných materiálech.

Během uplynulé doby už od 1975 odstartovalo a pokračovalo zásadní rozšiřování parametrů a vlastností elektrodoových systémů i návazných metod. Několik příkladů pro ilustraci: 1) Nové tvarované kapilární/plastické elektrody (1975/76 ad.) přinášející vysokou reprodukovatelnost, stabilitu, chemickou odolnost, redukci šumu, účinnou (adsorpční – od 1978) akumulaci mícháním, zejména v kombinaci s kompresně-expanzním obnovením. 2) Řešení nových pulzních i spojitých ovládacích systémů (od 1978 dosud) s novými elektrodoovými režimy HMDE, SMDE, hemisférickými, „multi-purpose“ resp. „multi-mode“, miniaturizovanými (mini- až mikro-) krokově i spojitě se měnicími, kompresně-expanzními/stacionárními (od 1981-85 dosud) s řízenou velikostí elektrod – „controlled size (CS)“ aj. Umožňuje to přínosy v oblastech elektrokapilarity, kompresního nahromadění, analýzy, diagnostiky/chování (bio)molekul a filmů bez nebo za hromadění, reorientace, kondenzace či shrnutí filmu, komprese amalgám, účinků změn proudových hustot atd. Návrhy naznačily užití pružných i elastických elektrodoových materiálů. Diskutované možnosti působily a působí inspirativně i mimo materiálovou oblast, s níž byly dosud spojeny, a přinášejí atraktivní možnosti uplatnění.

*Tato práce vznikla za podpory grantu projektu Univerzity Pardubice č. SD373001/82/30352 (2016). Věnováno 60. výročí udělení Nobelovy ceny prof. J. Heyrovskému.*

[1] Novotný L.: *DrSc. Disertační práce*. AV ČR, Praha 1998.

## 9P07

### TESTOVÁNÍ POTENCIÁLU STŘÍBRNÉ AMALGÁMOVÉ ELEKTRODY JAKO INDIKÁTORU ZMĚN ZNEČIŠTĚNÍ

Aneta Karásková, Ladislav Novotný

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

Mezi důležité operace při úpravách vod patří i aplikace provozně využitelných měřících technik. Patrně nejrozšířenější z nich je konduktometrie. Na jejím základě se hodnotí celková kvalita vody. Předpokládá se, že i drobné rozpuštěné nečistoty nebo nežádoucí látky se výrazně projeví na hodnotách specifické vodivosti roztoku. Citlivost této indikace je velmi vysoká v případě, že se jedná o rozpuštěné ionty. U stop látek neiontového charakteru tomu tak však být nemusí.

V letech 2014-2018 byla proto pro tyto účely Novotným navržena a námi dále rozvíjena [1-3] metoda založená na nezávislém principu potenciometrického hodnocení změn kvality čištěné vody. Ve zde referované verzi se využívá potenciometrie na speciálních stříbrných amalgámových pevných elektrodách AgAE v zapojení s mimořádnou rezistentní ochranou čidla.

Za přítomnosti určeného množství rozpuštěného stříbra ve sledovaném vzorku znečištěné vody dochází ke změnám jeho aktivity. Projevovat se přitom mohou jak iontové (zejm. záporně nabitě) složky, tak i např. látky organického původu, které jsou jinak v nízkých koncentracích postižitelné pouze pokročilými laboratorními technikami. Přítomnost těchto látek se pak projevuje na potenciometrickém signálu AgAE. Umožňuje to např. porovnávat vzorky znečištěných vod, sledovat správně zvolenou posloupnost technologických operací, vynášet související diagramy apod. Volbou koncentrace zmíněného analytu lze ovlivňovat např. přesnost a opakovatelnost vyvozovaných poznatků a závěrů.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR SGSFChT\_2019\_001 a projektu Univerzity Pardubice č. SD373001/82/30352 (2016).*

[1] Novotný L.: ÚPV Praha, UV 2014-30527, 2014.

[2] Novotný L., Kabutej A., Petráňková R., Langášek P.: *WASTE FORUM 2*, 209 (2018).



[3] Novotný L., Kočanová V., Kabutey A., Karásková A., Dušek L., Petráňková R., Mikulášek P.: *WASTE FORUM* 2, 117 (2018).

## 9P08

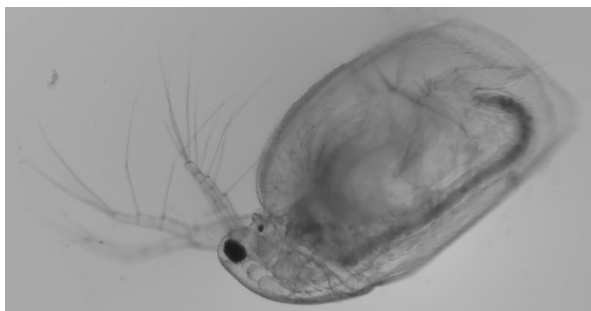
### POUŽITIE KÔROVCOV Z ČELADE DAPHNIIDAE V AKÚTNOM EKOTOXIKOLOGICKOM TESTE

Miloš Lukáč<sup>1</sup>, Martin Pisárčik<sup>1</sup>, Renáta Horáková<sup>1</sup>, Ferdinand Devínsky<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Katedra chemickej teórie liečiv, Farmaceutická fakulta, Univerzita Komenského, Kalinčiakova 8, 832 32 Bratislava, [lukac@fpharm.uniba.sk](mailto:lukac@fpharm.uniba.sk)

<sup>2</sup>Farmaceutická fakulta, Univerzita Komenského, Odbojárov 10, 832 32 Bratislava

V poslednom období je čoraz viac upriamená pozornosť na výskyt liečiv vo vodnom životnom prostredí. Vplyv týchto xenobiotík na životné prostredie sa hodnotí prostredníctvom ekotoxikologických testov na rôznych druhoch organizmov ako sú: riasy, zooplanktón, iné bezstavovce či ryby. *Daphnia magna* je jedným z najčastejšie používaných modelov [1]. V rámci tejto práce sme porovnávali citlivosť a použiteľnosť vybraných zástupcov čeľade Daphniidae v akútnych imobilizačných testoch. Čeľaď zahŕňa 5 rodov: *Daphnia*, *Ceriodaphnia*, *Simocephalus* (Obr. 1), *Scapholeberis*, *Megafenestra* [2]. Z každého rodu sme vybrali reprezentatívnych zástupcov, ktorých možno bežne nájsť v okolitom životnom prostredí. Ekotoxikologické testy sme uskutočnili podľa OECD smernice pre testovanie chemikálií, akútneho imobilizačného testu pre *Daphnia* sp. [3]. Test bol uskutočnený na jedincoch nie starších ako 24h, v testovacom roztoku ISO, pri 21°C a 16h periódou osvetlenia a 8h periódou tmy. Jedince počas celej doby testu neboli kŕmené. Po teste boli hodnotené parameter: pH prostredia a obsah rozpusteného kyslíka vo vode (Winklerova metóda). Hodnoty EC<sub>50</sub>-24 h akútnej toxicity dvojchrómanu draselného, ako štandardu, boli v rozmedzí 0,39 – 2,07 mg·dm<sup>-3</sup>. Pri stanoveniach ekotoxicity liečiv sme hodnotili antiflogistiká, používané v liečbe ochorení pohybového ústrojenstva a bioaktívne zlúčeniny zo skupiny triterpénov.



Obr. 1. Juvenilný jedinec *Simocephalus congener*.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. APVV-17-0373 a grantami VEGA 1/0298/16, VEGA 1/0054/19.

- [1] de Oliveira L.L., Antunes S.C., Gonçalves F, Rocha O., Nunes B.: *J. Drug. Chem. Toxicol.* 39, 13 (2016).  
 [2] Hudec I.: Fauna Slovenska III. Anomopoda, Ctenopoda, Haplopoda, Onychopoda (Crustacea: Branchiopoda) VEDA, Bratislava (2010).  
 [3] OECD Guidelines for the Testing of Chemicals. Guideline 202: *Daphnia* sp., Acute Immobilisation Test, adopted 13 April 2004

## 9P09

### BIOAKTÍVNE LÁTKY Z ODPADOV POTRAVINÁRSKÝCH VÝROB

Stanislav Sekretár<sup>1</sup>, Zuzana Burčová<sup>1</sup>, František Kreps<sup>1</sup>, Štefan Schmidt<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Oddelenie potravinárskej technológie, Ústav potravinárstva a výživy, FCHPT STU Radlinského 9, 812 37 Bratislava, [stanislav.sekretar@stuba.sk](mailto:stanislav.sekretar@stuba.sk)

Odpady z potravinárskych výrobní obsahujú cenné bioaktívne látky, ktoré sa dajú ešte zužitkovať [1-3]. S využitím moderných extrakčných, frakcionačných a rafinačných metód možno z odpadnej potravinárskej biomasy získať zložky s rôznym aplikačným využitím. V prvom stupni sa izolujú žiadané zložky z odpadov tak, aby vo výslednom produkte bolo čo najmenej balastných látok. V druhom stupni sa získaný produkt ďalej frakcionuje a separujú sa jeho účinné zložky. V treťom stupni sa výsledný produkt štandardizuje a charakterizuje. Tento prístup je významný z ekologického i z ekonomického hľadiska. Najčastejšie sa takto získavajú:

- antioxidanty - polyfenolické látky (tokoferoly, flavonoidy) z rôznych potravinárskych odpadov,
- farbivá (karotenoidy, astaxantín, antokyaníny) - z ovocia, zeleniny, morských produktov,
- povrchovo aktívne látky (bielkoviny, saponíny, fosfolipidy, acylglyceroly) - zo srvátky, z vaječného žltka, z rastlinných olejov,
- vonné a chuťové látky - z kvetov, rastlín, ovocia a zeleniny, z vínnych kalov,
- potravinárske prídavné látky - vitamíny, steroly, vláknina, pektín, bielkovinový hydrolyzát, cukry,
- biologicky účinné látky - pre farmáciu, kozmetiku, agrochemické a iné využitie,
- špeciálne chemikálie - diagnostické chemikálie a štandardy prírodných látok, chemikálie a opticky aktívne chemikálie pre syntézu resp. iné technické využitie.

Možnou formou využitia odpadov je aj spracovanie odpadných rastlinných olejov na biopalivo.

Práca vznikla s podporou projektov: APVV-16-0088, APVV-14-0393, VEGA 1/0012/19, VEGA 1/0353/16.

- [1] Merillon, J. M., Ramawat, K. G. (Eds.). *Bioactive Molecules in Food*. Springer, 2353 p. (2019), ISBN 978-3-319-78029-0.
- [2] Anal, A. (Ed.). *Food Processing By-products and Their Utilization*. Wiley Blackwell, 583 p. (2018), ISBN 978-1-118-43293-8.
- [3] Vuong, Q. V. *Utilisation of Bioactive Compounds from Agricultural and Food Production Waste*. CRC Press, 415 p. (2017), ISBN 978-1-498-74131-6.

## 9P10

### REGIOSELEKTÍVNE ACYLÁCIE KYSELINY KOJOVEJ

Klaudia Karkeszová<sup>1</sup>, Mária Mastihubová<sup>2</sup>, Vladimír Mastihuba<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav chemického a enviromentálneho inžinierstva FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava,

<sup>2</sup>Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, vladimir.mastihuba@savba.sk

Kyselina kojová (5-hydroxy-2-hydroxymetyl-4H-pyrán-4-ón) je fungálny metabolit, ktorý nachádza široké využitie v potravinárskom a kozmetickom priemysle a používa sa tiež ako antibakteriálne činidlo a ako antioxidant. Pre zlepšenie jej lipofilných vlastností boli vykonané reakcie katalyzované lipázami za tvorby esterov kyseliny kojovej. V literatúre sa často objavuje nesprávna interpretácia štruktúry monoacylovaných produktov kyseliny kojovej získaných z enzýmových reakcií. Preto sme študovali acylácie kyseliny kojovej sériou lipáz. Naše výsledky ukázali, že enzýmy schopné acetylovať kyselinu kojovú uskutočňovali túto reakciu na primárnej hydroxylovej skupine, pričom fenolický hydroxyl nebol prednostne acetylovaný, na rozdiel od niektorých literárnych údajov. Prasačia pankreatická lipáza (PPL) sa správala identicky ako ostatné skúmané enzýmy pri priamych acyláciách kyseliny kojovej aj pri hydrolýze jej diesterov, avšak pri alkoholózach diesterov kyseliny kojovej sa odlišovala svojou regiošpecificitou. Katalyzovala chemoselektívnu deacyláciu na primárnom uhlíku C-7 a tým umožnila prípravu 5-acylovaných derivátov kyseliny kojovej. 7-Acetát,- 5-acetát,-7-monopalmitát a 5-monopalmitát kyseliny kojovej boli pripravené aj preparatívne acylačnými a deacylačnými reakciami katalyzovanými PPL s príslušnými výťažkami: 57,3%, 38,2%, 31,7%, 31,4%. Analogicky bola študovaná aj regioselektívna príprava monoacetátov tyrozolu. V tomto prípade sa však PPL správala odlišne a tak alkoholózou diacetylovaného tyrozolu aj priamou acetyláciou tyrozolu bol pripravený ten istý derivát 4-(2-acetoxyetyl)-fenol vo výťažku 60,5% resp. 82,2%.

Táto práca vznikla vďaka podpore agentúry VEGA grantom č. 2/0126/19

## 9P11

### PHOTOACOUSTICS BASED ON ICG AS A TOOL FOR NON-INVASIVE MONITORING OF BURIED FREE FLAPS IN VASCULARIZED LYMPH NODE TRANSFER

Filip Jonas<sup>1,2</sup>, Ondrej Mestak<sup>1</sup>, Karla Palma-Alejandro<sup>3</sup>, Petr Kesa<sup>3</sup>, Ludek Sefc<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Department of Plastic Surgery of 1st Faculty of Medicine, Charles University in Prague, Czechia

<sup>2</sup>Division of Plastic Surgery, Department of Surgery, 2nd Faculty of Medicine, Charles University in Prague, Czechia

<sup>3</sup>The Centre for Advanced Preclinical Imaging, Charles University in Prague, Czechia

<sup>4</sup>Department of Plastic Surgery of 3rd Faculty of Medicine, Charles University in Prague, Czechia  
kdpa27@gmail.com

Vascularized lymph node transfer (VLNT) is a well-established microsurgical treatment of advanced stages of lymphedema. To date, the monitoring of the VLNT, usually implies high a cost and invasive imaging modalities such as MRI, indocyanine green (ICG) lymphography, CT, etc. To overcome these limitations, we propose the use of Photoacoustic (PA) to non-invasively monitoring based on the fluoresce properties of the ICG. The buried

lymph node flaps were harvested from the inguinal region in 10 healthy Lewis rats weighing 200-320g (age range 30-90 days). ICG was applied in the right distal inferior limb avoiding to inject directly in the flap. An evaluation of the change in photoacoustic signal enhancement of the lymph node flap before and after injection of 0.6 mmol/L ICG was performed and from the spectral evaluation the PA signal of ICG was detected mostly at 805 nm. After 10 minutes of the ICG injection inside the flap, the accumulation of ICG inside has increased showing the location of the flap. This novel imaging modality in combination with the ICG fluorescence properties results in a powerful tool for the monitoring of buried lymph node flaps. Furthermore, this allows a complex time saving all-in-one examination in combination with 3D-color-doppler.

*The study was supported by the Grant AZV 17-29084A, by Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Large RI Project LM2015062 Czech-BioImaging), and by European Regional Development Fund (Project No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_013/0001775).*

## 9P12

### HYDROSTIMULAČNÁ MODIFIKÁCIA OSIVA „AQUAHOLDER® SEED“ POMOCOU SUPERABSORBČNÉHO POLYMÉRU

Marian Valentin<sup>1</sup>, Viktor Gelinger<sup>1</sup>, Lukáš Petra<sup>1</sup>

<sup>1</sup>PEWAS spol. s r. o., Vansovej 2/4838, 811 03 Bratislava, mvalentin@pewas.sk

Koncepcia hydrostimulačnej modifikácie osiva Aquaholder® Seed je založená na využití vysokej absorpčnej schopnosti superabsorbčného polyméru (kopolyméru) absorbovať vodu. Podstatou je nanosenie tenkej homogénnej vrstvy produktu Aquaholder® Seed obsahujúceho superabsorbent, ako účinnú látku, na osivo. Po vysiatí osiva do pôdy, je účelom tejto vrstvy viazať na seba molekuly vody a vytvoriť tak vrstvu hydrogélu (obr. 1), z ktorej je osivo schopné následne čerpať vodu. Toto riešenie je zvlášť určené do suchších oblastí, resp. do pôd so zníženou retenčnou schopnosťou pre vodu. V takýchto podmienkach slúži vrstva hydrogélu ako zásobáreň vody, ktorá by inak nebola pre osivo dostupná (kvôli nižšej frekvencii zrážok, resp. stečeniu vody do nižších vrstiev, ktoré nie sú v dosahu osiva). Cieľom aplikácie produktu na osivo je zvýšenie odolnosti rastliny voči nedostatku vody vo fázach klíčenia a vzhádzania, zvýšenie početnosti preživších rastlín a pozitívny vplyv na tvorbu koreňovej sústavy a biomasy.



Obr. 1. Vytvorenie hydrogélovej vrstvy na osive kukurice, po zaliatí modifikovaného osiva vodou.

## 9P13

### DEGRADÁCIA TOKOFEROLOV A VZNIK OXIDAČNÝCH PRODUKTOV TOKOFEROLOV V TEPELNE NAMÁHANÝCH RASTLINNÝCH OLEJOCH

Zuzana Burčová<sup>1</sup>, František Kreps<sup>1</sup>, Mária Greifová<sup>1</sup>, Štefan Schmidt<sup>1</sup>, Stanislav Sekretár<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Oddelenie potravinárskej technológie, zuzana.burcova@stuba.sk

Práca sa venuje degradácii tokoferolov (T) a vzniku oxidačných produktov tokoferolov, tokoferylchinónov (TQ), počas hlboko vedeného vyprážania (HV), povrchovo vedeného vyprážania (PV) a mikrovlnného ohrevu slnečnicového (SO) a repkového oleja (RO). Z výsledkov experimentov vyplýva, že vznik  $\alpha$ - a  $\gamma$ -TQ je ovplyvnený oxidačnými reakciami mastných kyselín prebiehajúcich v oleji počas kulinárskej úpravy potravín [1]. Zistili sme, že čím olej obsahuje viac nenasýtených mastných kyselín, tým rýchlejšie vznikajú TQ [2]. Z toho dôvodu sme v slnečnicovom oleji stanovili vyššie hodnoty  $\alpha$ -TQ v porovnaní s repkovým olejom. Zásadný vplyv na vznik TQ malo množstvo použitého oleja na vyprážanie. Počas povrchovo vedeného vyprážania/ohrevu olejov sme stanovili

až 2 krát vyššie hodnoty  $\alpha$ -TQ ako v olejoch ohrievaných za podmienok hlboko vedeného vyprážania. Prídavok hranoliek do ohrievaných olejov dvojnásobne zvýšil obsah TQ v oboch olejoch.

Po 10 minútach mikrovlnného ohrevu SO sa degradovalo približne 70 %  $\alpha$ -tokoferolu a pri ohreve repkového oleja okolo 64 %  $\alpha$ -tokoferolu, zatiaľ čo degradácia  $\gamma$ -T v RO po 10 minútach bola len 18 %. Takéto zníženie obsahu tokoferolov sme pozorovali až po 60 minútach ohrevu olejov za podmienok povrchovo vedeného vyprážania. Z toho vyplýva, že  $\gamma$ -T je stabilnejším tokoferolom ako  $\alpha$ -T [2].

*Táto práca vznikla s podporou projektov: APVV-16-0088, APVV-17-212 and VEGA 1/0353/16, VEGA 1-0012-19, Grant STU pre podporu mladých vedeckých pracovníkov 1675 a 1608.*

- [1] KREPS, F. - KYSELKA, J. - BURČOVÁ, Z.- SCHMIDT, Š. - FILIP, V. - DUBAJ, T. - GAJDOŠ, P. - ČERTÍK, M. Synthesis and analysis of tocopheryl quinone and tocopherol esters with fatty acids in heated sunflower oil. *EUR J LIPID SCI TECH.* Vol. 118, iss. 5 (2016), s. 788-802. DOI: 10.1002/jhet.2511.
- [2] KREPS, F. - BURČOVÁ, Z.- SCHMIDT, Š. Degradation of fatty acids and tocopherols to form tocopheryl quinone as risk factor during microwave heating, pan-frying and deep-fat frying. *EUR J LIPID SCI TECH.* Vol. 119, iss. 5. 1600309 p. 1 – 11. DOI: 10.1002/ejlt.201600309.

## 9P14

### ESTERY TOKOFEROLOV S MASTNÝMI KYSELINAMI

František Kreps<sup>1</sup>, Zuzana Burčová<sup>1</sup>, Štefan Schmidt<sup>1</sup>, Stanislav Sekretár<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 15 Bratislava, frantisek.kreps@stuba.sk

V práci sme sa zamerali na vznik esterov tokoferolov s mastnými kyselinami počas laboratórnej dezodorizácie. Pred publikovaním vlastných prác [1, 2, 3] existovali publikácie, ktoré iba hypoteticky dokazovali ich vznik. Oveľa viac pozornosti sa v súčasnosti venuje vzniku tokoferyl chinónov a iným oxidačným produktom tokoferolov. Estery tokoferolov sú preto doposiaľ málo preskúmanými produktami reakcie tokoferolov s mastnými kyselinami. Prítomnosť týchto látok bola potvrdená v niektorých rastlinách, listoch Marupá (*S. amara*), Brazílskych orechoch (*B. excelsa*). V kvetoch, listoch a stonkách lekien *Nuphar luteum* a *Nymphaea alba*. Pomocou modelových experimentov sme dokázali, že počas laboratórnej dezodorizácie, ale aj počas kulinárskej úpravy olejov, vznikajú estery tokoferolov s mastnými kyselinami. Ich obsah v dezodorizovanom oleji je priamo úmerne závislý od obsahu tokoferolov, voľných mastných kyselín a času dezodorizácie. Zistili sme, že každý komerčne dostupný dezodorizovaný olej (rafinovaný) obsahuje 3 – 12 mg/kg esterov tokoferolov. Pre ľudský organizmus predstavujú zdroj tokoferolov, antioxidantov, ktorých hydroxylová skupina bola pred oxidáciou chránená mastnou kyselinou. Po hydrolyze toho esteru v žalúdku sa tokoferol stáva opäť antioxidantom, ktorý sa môže zabudovať do bunkových membrán.

*Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. APVV-16-0088, APVV-15-0052 a APVV 14-0393. Táto práca bola tiež podporená Slovenskou vedeckou grantovou agentúrou VEGA pre projekty 1/0012/19 a 1/0353/16.*

- [1] Kreps, F., Kyselka, J., Burčová, Z., Schmidt, Š., Filip, V., Dubaj, T., Gajdoš, P., Čertík, M.: *Eur. J. Lipid. Sci. Technol.* 118, 5 (2016).
- [2] Kreps, F., Burčová, Z., Schmidt, Š.: *Eur. J. Lipid. Sci. Technol.* 119, 5 (2017).
- [3] Kreps, F., Kyselka, J., Burčová, Z., Schmidt, Š., Rajchl, A., Filip, V., Ház, A., Jablonský, M., Sládková, A., Šurina, I.: *Eur. J. Lipid. Sci. Technol.* 119, 3 (2017).

## 9P15

### PALMOVÝ OLEJ – ÁNO ALEBO NIE?

Štefan Schmidt<sup>1</sup>, Zuzana Burčová<sup>1</sup>, František Kreps<sup>1</sup>, Stanislav Sekretár<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Oddelenie potravinárskej technológie, Ústav potravinárstva a výživy, FCHPT STU Radlinského 9, 812 37 Bratislava, stefan.schmidt@stuba.sk

Palmový olej sa vyrába z plodov africkej palmy olejnej (*Elaeis guineensis*), ktorá sa rozšírila do juhovýchodnej Ázii v 18. storočí. Dnes je najpoužívanejším olejom na svete, predstavuje viac ako tretinu celosvetovej produkcie triacylglycerolových olejov a tukov. Hlavnými producentmi sú Malajzia a Indonézia, odberateľmi sú najmä rôzne ázijské krajiny, predovšetkým India a Čína. Európa spotrebuje približne 11 % celosvetovej produkcie palmového oleja. Pretože palmový olej je všestranný, možno ho nájsť v nespočetných výrobkoch, jedlého i technického (napr. biopalivo) charakteru [1, 2].

Palmový olej má veľa dobrých vlastností. Po prvé, palmy olejné sú neuveriteľne produktívne. Z jedného hektára pôdy možno každý rok získať až štyri tony palmového oleja. Pre porovnanie, na rovnakej ploche sa vyprodukuje

iba 0,7 ton kokosového, repkového alebo slnečnicového oleja a iba 0,4 ton sójového oleja. Po druhé, palmový olej je na svetovom trhu pomerne lacný. Po tretie, zloženie mastných kyselín a triacylglycerolov je výnimočne jednoduché, čo umožňuje procesmi modifikácie tukov produkovať výrobky s vysokou variabilitou použitia. Zároveň je to jediná cesta, ako nemať v potravinárskych výrobkoch zdraviu škodlivé *trans* mastné kyseliny.

Produkcija palmového oleja však nesie so sebou aj nevýhody. Palmový olej obsahuje 50 % nasýtených mastných kyselín, ktoré iba o trochu menej zvyšujú riziko vzniku srdcovocievnych ochorení ako *trans*-MK. Hoci je tento obsah nižší ako u väčšiny živočíšnych tukov, 50 % nasýtených MK je viac, ako takmer pri všetkých ostatných rastlinných olejoch. S produkciou palmového oleja je spätý aj vznik cudzorodých látok vznikajúcich počas technologického spracovania. Ide o tzv. MCPD (3- a 2-monochlórpropándioly) a estery glycidolu s mastnými kyselinami. 3-MCPD je karcinogénny, podozrivý z genotoxicity a vyvoláva mužskú neplodnosť. Pre 2-MCPD nie je zatiaľ dostatok údajov, avšak z esterov glycidolu a MK vzniká glycidol, podozrivý z karcinogenity a tiež mutagenity. Veľká produkcia palmového oleja je zodpovedná za odstraňovanie rozsiahlych dažďových pralesov, ničenie ekosystémov a biodiverzity. Ohrozené sú najmä veľké cicavce: tigre, slony, nosorožce a orangutany. V prednáške budú uvedené všetky aspekty pre a proti súvisiace s produkciou biomasy z palmy olejnej.

*Práca vznikla s podporou projektov: APVV-16-0088, APVV-14-0393, VEGA 1/0012/19, VEGA 1/0353/16.*

[1] Schmidt, Š. (1992) *Frakcionácia palmového oleja*. Průmysl Potravin, roč. 43, č. 5, s. 210-214.

[2] Lai, O-M., Tan, C-P., Akoh, C. C. (Eds.). *Palm Oil: Production, Processing, Characterization, and Uses*. AOCS Press, 852 p. (2012), ISBN 978-0-9818936-9-3.

## PREDNÁŠKY - SEKCIA 10: CHEMPROGRESS - CHEMICKÉ TECHNOLOGIE

### 10P01

#### PROGRES V ELEKTROLYTICKEJ VÝROBE HLINÍKA

Vladimír Danielik

*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie SUT in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, vladimir.danielik@stuba.sk*

Od konca 19. storočia sa hliník vyrába elektrolýzou oxidu hlinitého, ktorý je rozpustený v tavenine na základe hexafluorohlinitanu sodného pri teplotách okolo 950 °C. Elektrický prúd sa pri nespotrebuje len na elektrolýzu, ale aj na roztavenie elektrolytu a udržiavanie jeho teploty. Preto je zrejmé, že už malé zníženie operačnej teploty elektrolýzy by spôsobilo značné ekonomické úspory. Zníženie teploty by však malo dosah aj na iné operačné parametre. Napr. v súčasnosti sa grafit pri elektrolýze používa z toho dôvodu, že nemáme k dispozícii iné materiály, ktoré by boli dlhodobo stále pri takých vysokých teplotách vo vysokoagresívnom prostredí fluoridov. Znížením teploty by sa otvorila možnosť používať iné materiály, ktoré by boli šetrnejšie k životnému prostrediu a v súčasnosti aj veľmi sledovanej klimatickej zmene. Pri používaní grafitu sa uvoľňuje cca 1,5 t CO<sub>2</sub> na jednu tonu vyrobeného hliníka a v prípade technologickej poruchy, tzv. anódového efektu aj CF<sub>4</sub> a C<sub>2</sub>F<sub>6</sub>, ktorých GWP je 7390 a 12200. V súčasnosti je spotreba energie cca 14 kWh na 1 tonu vyrobeného hliníka, pričom teoretický limit je 6,3 kWh. Znížením teploty by sme túto nízku energetickú účinnosť mohli znížiť. Táto práca sa venuje možnostiam zmeny elektrolytickej výroby hliníka

*Táto práca vznikla vďaka podpore MŠVVaŠ SR v rámci projektu VEGA 1/0792/17, a tiež vďaka realizácii projektu Centrum pre Materiály, vrstvy a systémy pre Aplikácie a Chemické procesy v extrémnych podmienkach – Etapa II, číslo: 26240120021, na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja.*

### 10P02

#### MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ JAKO NÁSTROJ K POCHOPENÍ DYNAMIKY PROUDĚNÍ V PLYNOVĚ DIFÚZNÍ VRSTVĚ PALIVOVÉHO ČLÁNKU

Monika Drakselová<sup>1</sup>, Roman Kodým<sup>1</sup>, Karel Bouzek<sup>1</sup>

*<sup>1</sup>Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, bouzekk@vscht.cz*

Palivové články s protonově vodivou membránou (PEM) dosáhly významné technické vyspělosti a jsou v současné době předmětem postupného zavádění do praxe. To však nic nemění na nutnosti jejich dalšího vývoje a optimalizace. To je cílem i této práce, která se primárně zaměřuje na otázku rovnoměrnosti distribuce reaktantů po povrchu elektrod palivového článku. Příčinou je jednak zvýšení stupně využití reaktantů, ale zejména zamezení vzniku oblastí s jejich nedostatečným přísunem vystaveným riziku rychlé degradace. To se týká zejména palivových článků s nízkými navážkami katalyzátorů.

Odpovídající optimalizace kombinace distributorů toku a plynově-difúzních elektrod zaručující co nejrovnoměrnější rozložení však předpokládá hlubší pochopení dějů probíhajících v tomto systému na lokální úrovni. Neefektivnějším způsobem získání takové informace je pak kombinace matematického modelování distribuce veličin na lokální úrovni (ideálně pod proudovou zátěží) v kombinaci s experimentálně stanovenými globálními charakteristikami systému. Cílem této prezentace je dokumentovat na příkladu jednoduchého serpentinového uspořádání distributoru toku a plynově-difúzní vrstvy Freudenberg H23 komplexnost a zároveň význam celého výše nastíněného problému.

*Tato práce vznikla za podpory projektu „Palivové články s nízkým obsahem platinových kovů“, reg.č.: CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_025/0007414, financovaného z EFRR.*

**10P03****MEMBRÁNOVÁ ALKALICKÁ ELEKTROLÝZA VODY: STANOVENÍ PROVOZNÍCH CHARAKTERISTIK TŘÍČLÁNKOVÉHO SVAZKU**Karel Denk<sup>1</sup>, Jaromír Hnát<sup>1</sup>, Jan Žitka<sup>2</sup>, Martin Paidar<sup>1</sup>, Karel Bouzek<sup>1</sup><sup>1</sup>Ústav anorganické technologie VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika; [denkk@vscht.cz](mailto:denkk@vscht.cz)<sup>2</sup>Ústav makromolekulární chemie AV ČR v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika

Membránová alkalická elektrolýza vody je v kombinaci s energií z obnovitelných zdrojů považována za ekologický zdroj velmi čistého vodíku. Mezi její výhody patří použití neplatinových kovů a s tím související nízká cena konstrukce zařízení. Náhrada porézní diafragmy za anion-selektivní membránu s vyšší iontovou vodivostí a lepšími separačními vlastnostmi umožňuje dosažení vyšších proudových hustot, vyšších účinností při nízké zátěži i vyšší čistoty plynů.

Tato práce je zaměřena na charakterizaci tříčlankového svazku o výkonu 100 W s anion-selektivními membránami a elektrodami z niklové pěny v bipolárním zapojení. Membrány tvořil blokový kopolymer poly(styren-ethylen-butylen-styren) a jejich funkční skupiny 1,4-diazabicyclo[2.2.2]oktan. Elektrolyt byl roztok hydroxidu draselného o různých koncentracích (1, 5, 10 a 15 hm.%) a teplotách (25 a 40 °C). Vyšší koncentrace a teploty nejsou vhodné z důvodu stability membrány.

S rostoucí koncentrací elektrolytu se zlepšuje výkon svazku z důvodu vyšší vodivosti, zvyšuje se čistota plynů díky nižší rozpustnosti plynů a snižuje se proudová účinnost kvůli vyšší vodivosti distribučních kanálků. Nicméně, anion-selektivní membrány dovolují použití méně koncentrovaného elektrolytu než s diafragmou za současného zachování požadovaných charakteristik. Elektrolyzátor umožňuje dosahovat více než 95% proudové účinnosti a vysokých čistot plynů i při výkonu 20 W. Vysoká variabilita výkonu elektrolyzátoru je klíčový předpoklad pro kombinaci s obnovitelnými zdroji.

*Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 21-SVV/2019).*

**10P04****PŘÍPRAVA A OPTIMALIZACE ANION SELEKTIVNÍ MEMBRÁNY MODIFIKOVANÉ KATALYTICKOU VRSTVOU PRO ALKALICKOU ELEKTROLÝZU VODY**Michaela Plevová<sup>1</sup>, J. Hnát<sup>1</sup>, J. Žitka<sup>2</sup>, M. Paidar<sup>1</sup>, K. Bouzek<sup>1</sup><sup>1</sup> Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav anorganické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR, [plevovam@vscht.cz](mailto:plevovam@vscht.cz), +420 220 444 009<sup>2</sup>Ústav makromolekulární chemie Akademie věd ČR v.v.i., Heyrovského nám. 2, 16206 Praha

V současné době představuje vodík nosič energie, který může být vyroben elektrolýzou vody využívající přebytečnou elektrickou energii pocházející z obnovitelných zdrojů. Nejrozšířenější technologií pro rozklad vody je alkalická elektrolýza vody (AEV), jejíž výhodou je použití neplatinových kovů a tedy menší investiční náklady. Naopak nevýhodou je použití anorganické diafragmy, která vyžaduje použití kapalného elektrolytu KOH o koncentraci až 30 hm. %. Řešením tohoto problému je nahrazení diafragmy anion selektivní polymerní membránou, jejíž aplikace navíc umožňuje nanosení katalyzátorů přímo na povrch membrány (tzv. CCM – Catalyst coated membrane), což vede k lepšímu kontaktu mezi katalyzátorem a membránou a vyššímu využití katalyzátoru.

V této práci je studován vliv různého složení katalytické vrstvy (poměr katalyzátor/pojivo) na výkon AEV. CCM jsou připraveny metodou sprejování za použití neplatinových katalyzátorů s navážkou katalyzátorů 2,5 mg cm<sup>-2</sup> a tloušťkou vrstev 30 μm. Membrána je vyrobena z blokového kopolymeru funkcionalizovaného 1,4-diazabicyklo[2.2.2]oktanovou funkční skupinou. Zátěžové křivky AEV jsou stanoveny při teplotě 40 °C a různých koncentracích KOH v laboratorním testovacím zařízení. Detailní charakteristika cely je prováděna elektrochemickou impedanční spektroskopií a morfologie vrstev sledována pomocí skenovací elektronové mikroskopie.

Získané výsledky naznačují, že CCM s optimalizovanou katalytickou vrstvou lze považovat za perspektivní separátor elektrodových prostorů v AEV.

Poděkování:

*Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 21-SVV/2019).*

**10P05****VLIV POUŽITÉ MEMBRÁNY NA VÝKON PALIVOVÉHO ČLÁNKU TYPU PEM****Jakub Malíš<sup>1</sup>, Veronika Marková<sup>1</sup>, Martin Páidar<sup>1</sup>, Karel Bouzek<sup>1</sup>**<sup>1</sup>*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, jakub.malis@vscht.cz*

V současné době již tři výrobci komerčně nabízí automobily využívající jako palivo vodík. Palivové články představují zajímavou technologii, která umožňuje konverzi chemické energie paliva na elektrickou energii s vysokou účinností, bez produkce látek škodlivých lidskému zdraví a životnímu prostředí. Výraznější rozšíření do každodenní praxe však brání nedostatečná síť pro distribuci paliva a vysoká pořizovací cena. Palivové články totiž využívají několik speciálních komponent, jako jsou například perfluorované sulfonované membrány, či elektrody s katalyzátory na bázi platinových kovů. To zvyšuje cenu palivového článku a v některých případech představuje limitující faktor pro jejich zavádění do praxe.

Vysoká účinnost palivového článku, je zároveň snižována nežádoucími jevy, jako jsou aktivační a koncentrační polarizace. Značnou část ohmického odporu palivového článku vedoucího k napěťovým ztrátám na pracujícím článku pak představuje odpor membrány. Jeho hodnotu lze snížit použitím membrán s vyšší koncentrací funkčních skupin, nebo minimalizací jejich tloušťky.

V rámci této práce byly studovány optimální podmínky sestavení palivového článku obsahujícího membrány o odlišných parametrech a od různých výrobců. Byl studován vliv tloušťky membrány, teploty jejího skelného přechodu a ekvivalentní hmotnosti ionomeru použitého pro výrobu membrány. Jednotlivé palivové články byly charakterizovány z hlediska jejich celkového ohmického odporu a maximálních dosažených výkonů.

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

**10P06****ODTSRAŇOVANIE FARMACEUTÍK Z ODPADOVÝCH VÔD****Daniela Pavúková<sup>1</sup>, Lucia Fašková<sup>1</sup>, Eva Králiková<sup>1</sup>, Ján Híveš<sup>1</sup>**<sup>1</sup>*Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Oddelenie anorganickej technológie, Radlinského 9, 81237 Bratislava, Slovensko, daniela.pavukova@stuba.sk*

Farmaceutiká hrajú významnú rolu pri liečbe a prevencii chorôb ľudí a zvierat. Sú to látky, ktoré majú vysokú biologickú aktivitu a sú účinné aj v malých koncentráciách. Napriek tomu, že vedľajšie efekty liečiv pri ich užívaní sú starostlivo skúmané, ich potenciálnemu vplyvu na životné prostredie sa pozornosť začala venovať len nedávno. Prítomnosť zvyškov a metabolitov farmaceutík bola dokázaná nie len v podzemnej a povrchovej vode, ale aj v pôde [1], kde navyše môže dochádzať k ich akumulácii. Koncentrácie takýchto polutantov sa pohybujú od ng/L až po µg/L. Aj v týchto koncentráciách však môžu predstavovať riziko. Táto práca sa zaoberá degradáciou farmaceutík (karbamazepín, diklofenak, iopromid a papaverín hydrochlorid) použitím ekologického oxidovadla železanu, adsorpcie na aktívnom uhlí a ich kombinácie. Cieľom bolo stanoviť podmienky, pri ktorých sa dosiahne najvyššia účinnosť degradácie skúmaných farmaceutík vo vodných roztokoch a porovnať degradačné účinnosti dosiahnuté pri adsorpcii, pri pridaní železanov a pri kombinácii oboch metód. Najvyššia dosiahnutá účinnosť pri adsorpcii bola 99,3 % pri degradácii karbamazepínu. Pri použití železanov sa dosahovali nižšie účinnosti a najvyššia predstavovala 91,2 % opäť pri karbamazepíne. Pri kombinácii oboch metód sa dosahovali oveľa vyššie účinnosti aj pri použití nižších množstiev aktívneho uhlia.

*Autori ďakujú za finančnú podporu Agentúre pre vedu výskum na základe zmluvy č. APVV-17-0183 a Ministerstvu školstva, vedy, výskumu a športu SR v rámci projektu VEGA 1/0343/19. Poďakovanie patrí aj Slovenskej technickej univerzite za podporu v rámci Grantovej schémy na podporu excelentných tímov mladých výskumníkov (ElCapFe).*

[1] Feng, L., Rodrigo, M.A.: Chem. Eng. J. 228 (2013)



**10P07****ELEKTROCHEMICKÉ ZPRACOVÁNÍ VOD S VYSOKOU KONCENTRACÍ ORGANICKÝCH POLUTANTŮ**Adam Giurg, Karel Denk, Maksim Gridchin, Martin Prokop, Martin Paidar*Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika, giurga@vscht.cz*

S rostoucím počtem instalací membránových separací je nezbytné zabývat se zpracování jejich koncentrátů. Tyto koncentráty často obsahují také vysokou koncentraci organických polutantů, které nelze odbourat biologickými procesy. Další vody s podobným složením jsou oplachové a vypírkové vody. Aby bylo možné tyto vody vpustit do biologických čistíren odpadních vod, musí být nejprve odstraněny těžce odbouratelné toxické organické látky. Jednou z možností je použití elektrochemických pokročilých oxidačních procesů, které používají jako anodu borem dopovanou diamantovou (BDD) elektrodu. Tato elektroda má velmi široké potenciálové okno, díky čemuž lze používat vysoký oxidační potenciál, který dokáže zoxidovat a fragmentovat i stabilní organické sloučeniny. V této práci bylo studováno odbourávání organických látek na BDD elektrodě. Použité roztoky byly modelové roztoky oranž II a p-kresol a dvě průmyslové vody z vypírek pyrolýzních plynů. Zpracování vod bylo realizováno galvanostaticky s různými proudovými hustotami. Podle intenzity procesu byly zvoleny doby zpracování vod, tak aby bylo odstraněno dostatečné množství organických polutantů. Z modelových roztoků bylo odstraněno 90 až 100 % organických polutantů. Organické polutanty z pyrolýzních vypírek byly odstraněny pouze ze 75 až 90 %, protože tyto vody obsahují velké množství různých organických látek s různými vlastnostmi, díky čemuž by absolutní odstranění polutantů bylo ekonomicky nevýhodné.

*Projekt (TJ02000116/Elektrochemické zpracování odpadních koncentrátů z membránových separací) je řešen s finanční podporou TA ČR.*

**10P08****ODSTRAŇOVANIE TOLUÉNU Z ODPADOVÝCH VÔD: POROVNANIE TROCH METÓD**Lucia Fašková<sup>1</sup>, Daniela Pavúková<sup>1</sup>, Peter Zelenka<sup>1</sup>, Ján Híveš<sup>1</sup><sup>1</sup>*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, lucia.faskova@stuba.sk*

Toluén je v chemickom priemysle veľmi často používanou látkou. Odhaduje sa, že v roku 2023 sa vyprodukuje celosvetovo až 34,112 miliónov ton. Používa sa najmä ako surovina pre výrobu iných chemikálií, avšak pridáva sa aj do palív. Podľa NEIS vypustili stacionárne zdroje znečistenia na území SR v roku 2017 len do ovzdušia až 47 ton toluénu [1]. Toluén sa však nachádza aj v odpadových vodách, prípadne bodových zdrojoch znečistenia alebo environmentálnych záťažoch a je toxický pre vodné živočíchy, čím nastáva problém s jeho odstraňovaním z odpadových vôd.

Vybrali sme tri metódy odstraňovania – ultrafialové (UV) žiarenie, železany a aktívne uhlie. Pripravili sme modelové vzorky toluénu s koncentraciou 0,1 ml/l. Na ne sme aplikovali ultrafialové žiarenia s vlnovou dĺžkou 254 nm po dobu až 55 minút, rôzne navážky železnanu draselného (1 mg/l až 10 mg/l) a aktívneho uhlia (20 mg/l až 300 mg/l). Zistili sme, že najlepšiu účinnosť odstránenia dosiahol železan, a to 71,2 % pri 10 mg/l. Najmenej sa podarilo odstrániť pomocou UV žiarenia, a sice 35,4 %, avšak len po 10 minútach ožarovania.

*Autori ďakujú za finančnú podporu Agentúre pre vedu výskum na základe zmluvy č. APVV-17-0183 a Ministerstvu školstva, vedy, výskumu a športu SR v rámci projektu VEGA 1/0343/19. Podakovanie patrí aj Slovenskej technickej univerzite za podporu v rámci Grantovej schémy na podporu excelentných tímov mladých výskumníkov (ElCapFe).*

[1] NEIS, dostupné online: [http://neisrep.shmu.sk/main\\_gui.php](http://neisrep.shmu.sk/main_gui.php) (2019)

**10P09****EFFECT OF FERRATES ON MICROBIOLOGICAL POLLUTION OF WATER**Ján Híveš, Emília Kubiňáková, Lucia Fašková, Daniela Pavúková*Institute of Inorganic Chemistry, Technology and Materials, Faculty of Chemical and Food Technology STU in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic, jan.hives@stuba.sk*

The interaction of strong oxidizing agents – ferrates (VI) with bacteria from natural water sources was investigated. Moreover, the summarization of the cyanobacteria pollution in natural water sources in recent years, impact on environment and possible water treatment technologies for removing of cyanobacteria and its toxic compounds was studied. Effect of ferrates (VI) was studied experimentally: on cyanobacteria species *Anabaena flosaquae*; on real samples of surface water from natural water source Šaštín-Gazárka with occurrence of

cyanobacteria, and on cyanotoxin microcystin-LR which is the most common toxin produced by cyanobacteria. Used ferrates (VI) were prepared electrochemically with purity of at least 70 wt.%. Based on the results, the significant degradation rate of cyanobacteria cell was proved at low ferrate (VI) concentration (5 mg.dm<sup>-3</sup>). Ferrate (VI) also partially degrades the structure of microcystin-LR producing non-toxic by-products. Ferrates (VI) seem to be perspective and ecological solution for problems with cyanobacteria outbreak in natural water sources.

*The authors gratefully acknowledge the financial support provided by the Slovak Research and Development Agency under the contract nos. APVV-17-0183 and by the Ministry of Education, Science, Research and Sport of the Slovak Republic for project VEGA 1/0343/19. The authors would also like to thank the Slovak University of Technology Grant Scheme for Support of Excellent Teams of Young Researchers for financial assistance (ElCapFe).*

## 10P10

### STUDIUM PŘEPRACOVÁNÍ HEPTAHYDRÁTU SÍRANU ŽELEZNATÉHO

Kateřina Bednářová<sup>1</sup>, Jan Videnský<sup>1</sup>, Martin Zlámal<sup>1</sup>, Ivona Sedlářová<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, Praha 6, 166 28, Katerina.Bednarova@vscht.cz

Práce je zaměřena na studium přepracování heptahydrátu síranu železnatého, který ve velkém množství vzniká jako vedlejší produkt při výrobě TiO<sub>2</sub> sulfátovým způsobem. Přestože v současné době existuje několik způsobů, jak se tato látka zpracovává, i nadále se hledají další možné způsoby jejího přepracování. Jednou z možností je přeměna síranu železnatého na dobře využitelný síran hořečnatý a pevné oxo-hydroxidy železa. V tomto příspěvku jsou shrnuty výsledky úvodní studie reakcí síranu železnatého s oxidem hořečnatým [1] nebo s hydroxidem hořečnatým. Experimenty byly provedeny v izotermním vsádkovém reaktoru s odběrem vzorků v požadovaných časových intervalech. Byl sledován vliv reakčních podmínek (teplota, koncentrace vstupních látek, míra hydratace MgO) na průběh a rychlost heterogenní nekatalyzované konverzní reakce v systému s čistým FeSO<sub>4</sub>·7H<sub>2</sub>O. Stupeň konverze MgO, resp. Mg(OH)<sub>2</sub>, byl stanoven analýzou kapalné fáze pomocí ICP metody. Výchozí látky i produkty byly analyzovány několika metodami (XRF, XRD, SEM, optická mikroskopie). Z dosažených výsledků vyplývá, že průběh celého procesu s oxidem hořečnatým je výrazně ovlivněn průběhem jeho hydratace. Reakce s čistým hydroxidem hořečnatým probíhá za stejných reakčních podmínek pomaleji. Za předpokladu použití hořečnaté suroviny s vhodnými vlastnostmi se zdá být využití studované reakce perspektivní.

*Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.21-SVV/2019).*

[1] Bednářová, K., *Studium možnosti využití konverzní reakce k přepracování heptahydrátu síranu železnatého: diplomová práce*. VŠCHT Praha, 2018.

## 10P11

### BASIC INORGANIC COMPOUNDS AS COMPONENTS FOR DEACIDIFICATION AND PRESERVATION OF CELLULOSIC MATERIALS

Jana Jurišová, Milan Králik, Vladimír Danielik, Katarína Vizárová, Michal Jablonský, Radovan Tiňo

*Faculty of Chemical and Food Technology STU in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia  
jana.jurisova@stuba.sk, milan.kralik@stuba.sk, vladimir.danielik@stuba.sk, katarina.vizarova@stuba.sk,  
michal.jablonsky@stuba.sk, radovan.tino@stuba.sk*

Until the beginning of the 19th century the paper was manually made from plant fibres applying animal-based sizing agents. In 1805, Moritz introduced sizing of paper with rosin and alum (KAl(SO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>, later Al<sub>2</sub>(SO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>) and in 1844 paper pulp plants began to use wood cellulose [1]. Due to components from pulp preparation (sulphate and sulphite processes) and acidic ingredients originated from aluminium sulphate (pH 4.0-4.5), aging of the paper was significantly accelerated. Since 1990, more efficient paper making procedures started and lifetime, as well as the overall quality (stability of colour, mechanical strength, etc.) was increased. In spite of wide knowledge about aging and degradation [1, 2, 3], deeper understanding of chemical processes, restoration of aged papers and their preservation, as well as increase in lifetime of new fibrous cellulosic products are still hot challenges. Deacidification/stabilization efficiency of basic inorganic materials such as CaCO<sub>3</sub>, MgCO<sub>3</sub>, Mg(OH)<sub>2</sub> directly added, or generated from MgO, or from organometallics [3] needs a more comprehensive research. Our just started project MUFUSCEM is devoted to outline topics and a special focus is on the potential application of inorganic materials that are successfully used as fillers/stabilizers in synthetic polymers.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under contract no. APVV-18-0155 (Synthesis, compatibilization and transport of components of multifunctional systems suitable for the stabilization of cellulosic materials - MUFUSCEM).*

- [1] Blüher A. & Vogelsanger B. (2001). CHIMIA Int. J. Chem., 55(11), 981 (2001).  
 [2] Hubbe M. A., Smith R. D., Zou X., Katuscak S., Potthast A., & Ahn K. BioResources, 12(2), 4410 (2017).  
 [3] Baty J. W., Maitland C. L., Minter W., Hubbe M. A., & Jordan-Mowery S. K. BioResources, 5(3), 1955 (2010).

## 10P12

### MOŽNOSTI VYUŽITÍ REDUKCE V TECHNOLOGII ODSTRAŇOVÁNÍ KYSELÝCH BARVIV Z KONTAMINOVANÝCH VOD

Tomáš Weidlich<sup>1</sup>, Barbora Kamenická<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Skupina chemických technologií, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice, tomas.weidlich@upce.cz

Typickým představitelem v ČR vyráběných halogenovaných aromatických sloučenin rozpustných ve vodě jsou kyselá barviva. Jsou tak označována proto, že ve své struktuře mají vázanu jednu nebo více  $-SO_3H$  (respektive  $-SO_3Na^+$ ) skupin, které zajišťují rozpustnost těchto barviv ve vodě. Jejich výroba je obvykle prováděna ve vodě, přičemž izolace produktu je tradičně založena na tzv. vysolování, tedy na syčení vodného roztoku reakční směsi chloridem sodným. Kyselá barviva se z vodného roztoku při vysolování vylučuje jako ve vodném roztoku nejméně rozpustná sloučenina, je oddělena filtrací a po vysušení finalizováno pro export. Při izolaci barviva produkované filtráty obsahují nasycený vodný roztok barviva ve vodném roztoku NaCl. Ve vodných filtrátech obsažené zbytky rozpustných kyselých barviv, jejich intermediátů, vedlejších produktů, případně nedoreagovaných výchozích látek odcházejí do odpadních vod. Tyto ztráty s sebou přinášejí přinejmenším dva dopady. Ztráta produktu především snižuje zisk výrobce barviv, navíc je výrobce povinen hradit poplatky za znečištění vypouštěných odpadních vod kontaminovaných anorganickými solemi, organickými látkami (vyjádřeno souhrnným parametrem  $CHSK_{Cr}$  a  $BSK_5$ ), případně sloučeninami zvyšujícími parametr AOX.

Dostupnou metodou použitelnou pro odstraňování zbytků kyselých barviv zůstávajících ve vodných filtrátech po separaci vysolením a filtrací je použití iontové výměny, např. s použitím iontových kapalin [1-2]. Pro opakované použití iontové kapaliny se nabízí postup redukčního odbourání kyselého barviva, přičemž vznikají nízkomolekulární a biologicky odbouratelné produkty [2-3].

*Poděkování Technologické agentuře ČR za finanční podporu projektu TH02030200 „Efektivní odstraňování aromatických halogenderivátů (AOX) z lokálních průmyslových zdrojů“.*

- [1] Weidlich T., Martinkova J.: CZ20120359 A3 (2013).  
 [2] ŠIMEK, M., MIKULÁŠEK P., KALENDA P., WEIDLICH T. *Chemical Papers*. 2016 70(4), 470-476.  
 [3] Kamenická B.: *Diplomová práce* (2018).

## 10P13

### ELECTROCHEMICAL PREPARATION OF AL-ZR ALLOYS

Emília Kubiňáková, Ján Híveš, Kristína Debnárová

*Institute of Inorganic Chemistry, Technology and Materials, Faculty of Chemical and Food Technology STU in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic, emilia.kubinakova@stuba.sk*

This paper is focused on the electrochemical preparation of Aluminium-Zirconium alloys, optimization of parameters affecting their synthesis, and characterization of prepared material. The synthesis of alloys was preceded by electrochemical characterization of the studied NaF-AlF<sub>3</sub> melts with a molar ratio of 1.8. The influence of addition of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (2 wt. %) and ZrO<sub>2</sub> (3 wt. %) was determined by measuring of the open circuit potential and cyclic voltammetry. The results confirmed that zirconium is deposited on the working electrode in preference compared to aluminium. The preparation of Al-Zr alloys from cryolite melts was realized by the own diffusion of zirconium into aluminium (without current) and electrochemically. The optimization of various parameters (duration time, additions of ZrO<sub>2</sub>, current densities or melt composition) was realized. The prepared alloys were subsequently studied by several analytical methods. The results of the analyses show that the zirconium is present in each of the prepared alloys. The concentration of zirconium increases in the direction from the top to the bottom of aluminium metal. The highest influence of zirconium penetration into the aluminium has the different addition of ZrO<sub>2</sub>.

*The authors gratefully acknowledge the financial support provided by the Ministry of Education, Science, Research and Sport of the Slovak Republic for project VEGA 1/0792/17 and also by the Centre for materials,*

*layers and systems for applications and chemical processes under extreme conditions-Stage II, ITMS No.: 26240120021 supported by the Research & Development Operational Program funded by the ERDF.*

#### 10P14

### CHARAKTERIZACE VLIVU STRUKTURY STABILIZOVANÉHO ZrO<sub>2</sub> NA IONTOVOU VODIVOST: POROVNÁNÍ MONOKRYSTALICKÉHO A POLYKRISTALICKÉHO ZrO<sub>2</sub>.

Michal Carda<sup>1</sup>, Veronika Rečková<sup>1</sup>, Martin Paidar<sup>1</sup>, Karel Bouzek<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6, 166 28, Česká republika, cardam@vscht.cz

Stabilizované ZrO<sub>2</sub> je v průběhu posledních let velmi intenzivně studované jako elektrolyt pro vysokoteplotní články s keramickými oxidy (SOCs). Přestože stabilizace ZrO<sub>2</sub> pomocí Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (YSZ) neposkytuje nejvyšší iontovou vodivost při teplotách 600 – 900 °C, tak YSZ patří vzhledem k dostupnosti a ceně mezi nejpoužívanější materiál pro SOCy elektrolyty. Navzdory širokému uplatnění YSZ není v dostupné literatuře dostatečně popsána charakterizace jeho monokrystalů a porovnání jejich iontové vodivosti s polykrystalickým YSZ.

V materiálu YSZ dochází k transportu kyslíkových iontů pomocí tzv. kyslíkových vakancí vlivem přidaného dopantu (Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>). Je známo, že iontová vodivost v polykrystalickém YSZ závisí na mikrostruktuře a jednotlivých hranách zrn. Přestože pro matematické modelování dějů v elektrolytu by bylo výhodné využívat experimentální data z monokrystalického YSZ, tak iontová vodivost skrz objem krystalu není příliš popsána. Proto je tato práce zaměřena na charakterizaci a stanovení iontové vodivosti skrz různé monokrystalického YSZ s ohledem na různé krystalické roviny.

Byla připravena série vzorků s monokrystalickým YSZ <100>, <110> a <111>, která byla porovnána s výsledky z polykrystalického YSZ. Měření iontové vodivosti pomocí metody elektrochemické impedanční spektroskopie probíhala na vzduchu při teplotách 600 – 900 °C. Výsledky měření naznačují, že polykrystalické YSZ poskytuje vyšší hodnotu iontové vodivosti, protože je transport realizován primárně po hranách zrn.

*Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT No 21-SVV/2019) a z Grantové agentury České republiky (GA ČR), z projektu pod evidenčním číslem No: 19-142-44-J*

#### 10P15

### STUDIUM KINETICKÝCH PARAMETRŮ A DEGRADAČNÍCH DĚJŮ VE VYSOKOTEPLNÍCH ČLÁNCÍCH S KERAMICKÝMI OXIDY

Daniel Budáč

VŠCHT Praha, Ústav anorganické technologie

Vysokoteplotní regenerační články z pevných oxidů (RSOC) jsou dnes velmi intenzivně zkoumány, protože představují velmi slibnou technologii konverze energie pro skladování elektrické energie z obnovitelných zdrojů. Vlivem vysoké provozní teploty (700 – 900 °C) vykazují RSOC řadu výhod oproti konkurenčním technologiím. Mezi výhody patří zejména možnost provozu RSOC v režimu elektrolytického nebo palivového článku v jednom zařízení. Na druhou stranu, vysoká provozní teplota vede k vysokým nárokům na použité materiály a urychlení degradačních dějů. Pochopení mechanismů reakcí probíhajících na elektrodách je proto zásadní pro navržení vhodných postupů pro minimalizaci degradace. Tato práce se zaměřuje na popsání dějů ovlivňujících kinetiku na rozhraní kyslíková elektroda – elektrolyt v redukčním i oxidačním směru. Byly připraveny symetrické RSOC cely z komerčních materiálů LSM-YSZ|YSZ|LSM-YSZ (LSM = La<sub>0,8</sub>Sr<sub>0,2</sub>MnO<sub>3</sub>, YSZ = ZrO<sub>2</sub> · 8 mol. % Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) pracující v režimu kyslíkové pumpy. Připravené cely byly testovány metodou elektrochemické impedanční spektroskopie v tříelektrodovém uspořádání. Vlastnosti elektrod byly dále zkoumány pomocí spektroskopických metod (SEM, XRD). Na základě naměřených impedančních spekter byl sledován vliv podmínek měření na rychlost určující děje reakcí v redukčním a oxidačním směru. Získané výsledky naznačují, že kinetiku oxidace a redukce limitují rozdílné reakční kroky, produkce kyslíku je řízena desorpčí, zatímco pro redukci je řídicím krokem přenos náboje.

## PREDNÁŠKY – SÚŤAŽ SHIMADZU

### Sh01

#### NEOČAKÁVANÝ VZNIK PYRAZOLOAZEPÍNŮV Z 5-AMINOPYRAZOLOV PRI CLAUSON-KAASOVEJ REAKCII

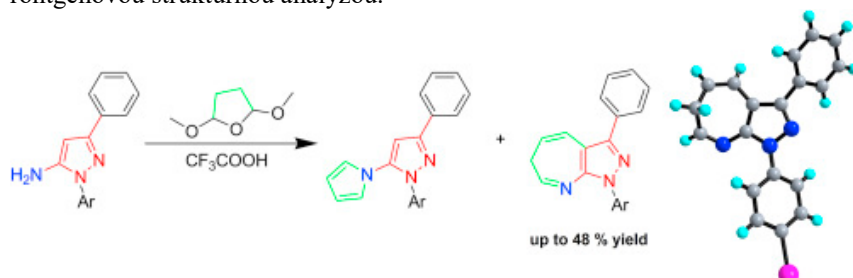
Dušan Bortňák<sup>a</sup>, Daniel Végh<sup>a</sup>, Jakub Šofranko<sup>a</sup>, Michal Šoral<sup>b</sup>, Viktor Milata<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Oddelenie organickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko,

<sup>b</sup> Centrálna laboratóriá, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko

Heterocykly sú mimoriadne dôležitou a jedinečnou skupinou zlúčenín: tvoria viac ako polovicu všetkých známych organických zlúčenín a majú široké spektrum fyzikálno-chemických a biologických vlastností. Heterocykly sú v prírode rozšírené a zohrávajú dôležitú úlohu v metabolizme, napr. pyrazolové aromatické jadro sa nachádza v mnohých prírodných produktoch vrátane vitamínov, hormónov, antibiotík a alkaloidov, ako aj farmaceutických, agrochemických a mnohých iných látkach. Pyrazoloazepínový skelet možno považovať raritnú subštruktúru ktorá pozostáva s kondenzovaného 7- člankového kruhu k pyrazolovému jadru. Tieto pyrazoloazepíny boli spočiatku identifikované ako vedľajšie produkty pri reakcii 2,5-dimetyltetrahydrofuránu s 5-aminopyrazolmi (Clauson-Kaasova reakcia), ako hlavný produkt bol pozorovaný vznik pyrazolopyrolov. Postupnou optimalizáciou reakčných podmienok podarilo izolovať príslušné pyrazoloazepíny v dobrých výtázkoch ako majoritné látky, zatiaľ čo pyrazolopyroly boli izolované v nižších výtázkoch.

Štruktúry finálnych produktov boli charakterizované <sup>1</sup>H NMR, <sup>13</sup>C NMR, <sup>19</sup>F NMR, HSQC, HMBC, <sup>19</sup>F-<sup>13</sup>C-HSQC, <sup>19</sup>F-<sup>13</sup>C-HMBC, INADEQUATE, COSY, <sup>19</sup>F-dekaplovanou-<sup>13</sup>C NMR, UV, IČ, HRMS spektrami a röntgenovou štruktúrnou analýzou.



**Schéma 1.** Reakcia 5-aminopyrazolov s 2,5-dimetyltetrahydrofuránom

Táto práca bola finančne podporená agentúrou pre vedu a výskum v rámci projektovej úlohy č. APVV-17-0513.

### Sh02

#### ŠTÚDIUM VLASTNOSTÍ A APLIKÁCIÍ NOVÉHO METALOPORFYRÍNOVÉHO PÓROVITÉHO POLYMÉRU

Nikolas Király<sup>1</sup>, Andrej Hovan<sup>2</sup>, Anna Berkutová<sup>3</sup>, Adriana Zeleňáková<sup>3</sup>, Erik Čižmár<sup>3</sup>, Vladimír Zeleňák<sup>1</sup>, Miroslav Almáši<sup>1</sup>, Gregor Banó<sup>2</sup>, Robert Gyepes<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesová 11, 041 54 Košice. [nikolas.kiraly@student.upjs.sk](mailto:nikolas.kiraly@student.upjs.sk)

<sup>2</sup>Katedra biofyziky, Ústav fyzikálnych vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Jesenná 5, 041 54 Košice.

<sup>3</sup>Katedra fyziky kondenzovaných látok, Ústav fyzikálnych vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Jesenná 5, 041 54 Košice.

<sup>4</sup>Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta Karlová Univerzita, Hlavova 2030, 128 43 Praha, Česká republika

V posledných troch desaťročiach patria materiály typu MOFs (Metal-Organic Frameworks) k intenzívne študovanej skupine materiálov, a to z dôvodu ich mnohých potenciálnych aplikácií [1]. Štruktúra týchto zlúčenín je polymérna a tvorená z atómov kovov alebo kovových klastrov, ako anorganických uzlov, ktoré sú následne premostené prostredníctvom organických ligandov, ako spájačov. Zaujímavú podskupinu tvoria tzv. MPFs (Metallo-Porphyrinic Frameworks), ktorých organická časť je tvorená derivátmi molekúl porfyrínu. Sú to usporiadané systémy s robustným polymérnym skeletom, vysokou termickou stabilitou a pórovitosťou, ktoré sa využívajú pri aplikáciách ako uskladnenie a separácia plynov, heterogénna katalýza, fotokatalýza a fotodynamická terapia [2].

Prezentovaná práca je zameraná na pórovitý koordinačný polymér  $\{[\text{Pr}_4(\text{TPPS})_3] \cdot n\text{H}_2\text{O}\}_n$  ( $\text{H}_2\text{TPPS} = 4,4',4'',4'''$ - (Porfyrín-5,10,15,20-tetrayl)tetrakisbenzénsulfónová kyselina), ktorý bol pripravený hydrotermálnou syntézou a charakterizovaný pomocou širokej škály analytických techník: infračervená spektroskopia, UV/VIS spektroskopia, termogravimetrické merania, monokryštalová štruktúrna analýza (SXR), meraním magnetickej susceptibility, EPR merania a iné. Komplex bol podrobený adsorpčným meraniam rôznych plynov, ktoré preukázali že zlúčeninu možno použiť ako efektívny adsorbent pri separácii  $\text{CO}_2$  od  $\text{N}_2$ . Navyše merania magnetickej susceptibility a EPR preukázali, že zlúčenina vykazuje jav „spin-cross over“ zmenou teploty. MOF bol taktiež testovaný vo fotodynamickéj terapii ako fotosenzibilizátor pri vyvíjaní singletového kyslíka ( $^1\text{O}_2$ ) pomocou *in-situ* kinetických meraní fosforescencie. Detailné informácie o dosiahnutých výsledkoch budú odprezentované formou prednášky.

Práca bola finančne podporená grantovou agentúrou VEGA projektom pod číslom 1/0745/17 a agentúrou pre vedu a výskum pod kontraktami APVV-15-0520 a APVV-18-0197.

[1] R. J. Kuppler, et al., *Coord. Chem. Rev.* 2009, 253(23-24), 3042-3066.

[2] W.Y. Gao, et al., *Soc. Rev.* 2014, 43(16), 5841-5866.

### Sh03

#### HYPOGLYCIN A: SKRYTÁ HROZBA PRO KONĚ ANALÝZA HYPOGLYCINU A V PRODUKTECH JAVORU KLENU METODOU DVOUDIMEZIONÁLNÍ PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE S HMOTNOSTNÍ DETEKČÍ

Petr Doležal<sup>1</sup>, Jana Doležalová<sup>1</sup>, Tereza Morávková<sup>1</sup>, Roman Stupka<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Katedra chovu hospodářských zvířat, FAPPZ, Česká zemědělská univerzita v Praze, Kamýcká 129, 165 00 Praha 6 – Suchbátka, [dolezal1@af.czu.cz](mailto:dolezal1@af.czu.cz)

Atypická myopatie (AM) je akutní svalové onemocnění způsobované S-hypoglycinem A (HGA), který se vyskytuje v rostlinném materiálu javoru kleny (*Acer pseudoplatanus* L.) a javoru jasanolistém (*Acer negundo* L.) [1]. Úmrtnost koně je poměrně vysoká, až 85 %, což je alarmující číslo. Navíc bylo zjištěno, že počet otrávených koní za poslední roky rapidně vzrůstá [2]!

V rámci realizovaného projektu bylo shromážděno celkem 106 vzorků javoru kleny (nažky, listy a semenáčky) z různých lokalit Česka, kde byl a kde (zatím) nebyl zaznamenán výskyt AM. Vzorky byly analyzovány na přístroji multidimenzionální plynová chromatografie ve spojení s hmotnostním a plamenově ionizačním detektorem (MDGC-MS/FID) od firmy Shimadzu (Kyoto, Japonsko). Kvantitativní MS analýza byla realizována pomocí metody vnitřního standardu (DL-norvalinu), přičemž analyt byl předem derivatizován methyl-chloroformiátem.

Bylo zjištěno, že nejvyšší množství HGA bylo pozorováno v podzimních nažkách ( $3,40 \pm 0,1 \mu\text{g}/\text{mg}$ ) v oblasti s výskytem AM, přičemž průměrný obsah byl  $0,99 \mu\text{g}/\text{mg}$ . Průměrná koncentrace v semenáčcích byla  $0,31 \mu\text{g}/\text{mg}$  a v listech  $0,37 \mu\text{g}/\text{mg}$ . Dále bylo pozorováno, že množství HGA ve zkoumaných částech javoru se mění v průběhu roku a je přibližně srovnatelné s obsahem HGA z jiných testovaných oblastí Evropy (oblasti s výskytem AM  $1,37 \pm 0,8 \mu\text{g}/\text{mg}$ ; bez výskytu AM  $1,1 \pm 0,3 \mu\text{g}/\text{mg}$  [1]).



**Obr. 1.** Množství 32 ks nažek javoru kleny, které může stačit na akutní intoxikaci koně hypoglycinem A [3].

[1] Westermann C. M., van Leeuwen R., van Raamsdonk L.W.D., et al.: *J Vet Intern Med* 30, 880 (2016)

[2] <http://www.equichannel.cz/atypicka-myopatie-koni-hrozba-skryta-v-barvach-podzimu> (staženo 10.5.2019)

[3] Bochnia M, Ziegler J, Sander J, et al.: *PLoS ONE*. 10,1 (2015)

**Sh04****FRAGMENTAČNÍ MECHANISMY ECHINOKANDINŮ**

Jiří Houšť<sup>1,2,\*</sup>, Dominika Luptáková<sup>1</sup>, Anton Škríba<sup>1</sup>, Jiří Novák<sup>1</sup>, Vladimír Havlíček<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Mikrobiologický ústav AVČR, Videňská 1083, 142 20 Praha, [jiri.houst@biomed.cas.cz](mailto:jiri.houst@biomed.cas.cz)

<sup>2</sup> Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 1192, 771 47 Olomouc

Echinokandiny jsou antimykotická léčiva používaná k léčbě invazivních kandidóz a aspergilóz. Jsou to semisyntetické látky složené z cyklohexapeptidového kruhu a specifického lipofilního řetězce. Echinokandiny nekompetitivně inhibují 1,3-β-D-glukan syntázu zodpovědnou za biosyntézu hlavní stavební složky houbové buněčné stěny, β-glukanů. Nedostatek β-glukanů vede k rozpadu houbové buňky [1, 2].

V této práci je ukázáno fragmentační chování echinokandinů. Hmotnostní a fragmentační spektra byla získána na 12T FTICR MS SolariX za použití ESI+ a MALDI+. Před CID docházelo u všech echinokandinů k neutrálním ztrátám jak molekul vod, tak SO<sub>3</sub> skupiny (micafungin) nebo ethylendiaminu (casporfungin). Během CID byl nalezen společný mechanismus fragmentace – k otevření cyklohexapeptidového kruhu docházelo v isopeptidové vazbě mezi modifikovaným prolinem a N-acetylovaným ornithinem. Toto fragmentační chování je dokázáno přítomností *b<sub>i</sub>* iontových sérií v daných spektrech. Kromě společného mechanismu fragmentace byl v případě casporfunginu a micafunginu pozorován efekt *proline hypercleavage* podpořený taktéž detekcí *b<sub>i</sub>* iontů. Po izolaci a CID sodných aduktů těchto látek byla pozorována ztráta postranních řetězců některých aminokyselin. Mechanismus této ztráty je v souladu s literárním zdrojem [3].

Echinokandiny ukázaly typické neutrální ztráty odpovídající molekulám vod, amoniaku, ethylendiaminu a SO<sub>3</sub> skupiny. Výsledkem fragmentace těchto látek byla detekce jak *b<sub>i</sub>* iontových sérií, tak i postranních řetězců aminokyselin po izolaci jejich sodných aduktů.

*Autoři děkují za podporu Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (NPU LO1509) a Grantové agentuře České republiky (19-10907S).*

[1] Carmona E.M. *et al.*: *Clin. Chest. Med.* 38, 393 (2017).

[2] Pappas P.G. *et al.*: *Clin. Infect. Dis.* 62, 1 (2016).

[3] Wang H. *et al.*: *J. Mass. Spectrom.* 50, 488 (2015).

**Sh05****ELEKTROCHEMICKÁ DETEKČIA TUMOR-ASOCIOVANEJ PROTI LÁTKY 2C4 POMOCOU GLYKÁNOVÉHO BIOSENZORA**

Filip Květon<sup>1\*</sup>, Ján Tkáč<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Chemický ústav, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovensko

<sup>2</sup> Glycanostics, s.r.o., Dúbravská cesta 9, Bratislava 845 38, Slovenská republika

\* [chmfilo@savba.sk](mailto:chmfilo@savba.sk)

Využívanie glykokojugátov má v diagnostike nezastupiteľnú úlohu. Štúdium aberantnej glykozylácie môže viesť k riešeniu viacerých dlhodobých problémov vo výskume rakoviny [1]. Prítomnosť aberantného glykátu - Tn antigénu bola stanovená vo viac ako 80% prípadov rozličných rakovín. Expresia antigénu je spriahnutá s metastatickým rozvojom a zlou prognózou. S ohľadom na jeho skorú produkciu v transformovaných bunkách, môžeme o Tn antigéne uvažovať ako o potenciálnom biomarkeri a eventuálnom analytickom nástroji [2].

V práci sme sa venovali rozvoju metódy používanej v minulosti. Spravili sme upgrade a prenos procesu zo zlata na uhlíkom modifikované povrchy. Nevýhodou zlata je jeho náročný proces regenerácie a následne opätovná predúprava. Obdobne, ako pri predchádzajúcej práci, bola sledovaná 3D konfigurácia biosenzora (upravený molekulami HSA).

Prvým krokom po prenesení protokolu na uhlík bola optimalizácia aktivácie. Za najvýhodnejšiu hodnotu chronoampérometrickej aktivácie boli stanovené hodnoty: aktivačný potenciál 1,5 V pôsobiaci počas 60 s. Výsledky naznačujú zanedbateľnú citlivosť detekcie pre lektín ConA (negatívna kontrola; 0,094±0,001% M<sup>-1</sup>) a výrazne vyššiu citlivosť pre lektín DBA (pozitívna kontrola; 2,82±0,34% M<sup>-1</sup>) a zvýšenú citlivosť pre 2C4 (analyt; 1,37±0,14% M<sup>-1</sup>), detekčný limit bol stanovený v aM koncentráciách. Na zistenie fyzikálno-chemických vlastností boli použité rozsiahle charakterizačné techniky: Ramanova spektroskopia, SEM, EDX a SIMS analýzy. Prechod na uhlíkové materiály nám pomohol v zefektívnení pracovného postupu, znížení vstupných nákladov, a v neposlednom rade, v značnom skrátení času potrebného na prípravu experimentu.

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

[1] Richichi B., Thomas B., Fiore M., Bosco R., Qureshi H., Nativi C., Renaudet O., BenMohamed L.: *Angew Chem Int Ed Engl* 53, 44 (2014).

[2] Kveton F., Blsakova A., Hushegyi A., Damborsky P., Blixt O., Jansson B., Tkac J.: *Langmuir* 33, 11 (2017).

## Sh06

### SEKTROMETRIA SEKUNDÁRNYCH IÓNOV AKO METÓDA ANALÝZY A IDENTIFIKÁCIE MIMOZEMSKÝCH VZORIEK

Justína Nováková<sup>1</sup>, Monika Jerigová<sup>1,2</sup>, Dušan Velič<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava

<sup>2</sup>Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava

Spektrometria sekundárnych iónov (ToF-SIMS – Time of Flight Secondary Ion Mass Spectrometry) je analytická metóda aplikovateľná v mnohých vedeckých odvetviach aj vďaka vysokému rozlíšeniu, pričom je možné dosiahnuť hmotnostné rozlíšenie až  $\Delta m/m \sim 10\,000$  a laterálne rozlíšenie až  $\sim 100$  nm.

Princíp tejto metódy je založený na bombardovaní povrchu vzorky primárnymi iónmi Bi<sup>+</sup>, čo na jej povrchu spôsobí kolíznú kaskádu, pričom Bi ióny odovzdávajú energiu atómom vzorky do hĺbky niekoľko nm. Takto emitované sekundárne ióny s kladným alebo záporným nábojom sú potom vťahované cez extraktor udelením konštantnej kinetickej energie do kolóny doby letu (ToF), na konci ktorej je na základe rýchlosti preletu kolónou vytvorené hmotnostné spektrum.

Práve vysoké rozlíšenie umožňuje analýzu izotopového zloženia vzorky, ktoré je potrebné pri identifikácii a analýze mimozemských materiálov. V tejto práci sa zaoberáme chemickou analýzou meteoritu Košice (fragmenty 77/1, 77/2), ktorý dopadol v okolí Košíc 28. februára 2010. Viaceré úlomky tohto meteoritu boli podrobené niekoľkým analýzám, ktorých výsledkom je podrobný popis petrologického [1] a chemického zloženia [2], ako aj veku, či prípadného pôvodu tohto meteoritu [3].

Na základe hmotnostných spektier sme získali chemické zloženie a porovnali ho s predchádzajúcimi metódami, a zároveň sme identifikovali izotopy chemických prvkov význačných pri klasifikovaní meteoritov.

[1] Ozdín, D. (2015). Mineralogy, petrography, geochemistry, and classification of the Košice meteorite. *Meteoritics & Planetary Science*, 50: pages 864-879.

[2] Hornáčková, M., Plavčan, J. (2014). Calibration-free laser induced breakdown spectroscopy as an alternative method for found meteorite fragments analysis. *The European Physical Journal, Applied Physics*, 66 (1).

[3] Povinec, P., Masarik, J. (2015). Cosmogenic nuclides in the Košice meteorite: Experimental investigations and Monte Carlo simulations. *Meteoritics & Planetary Science*, 50: pages 880-892.

## Sh07

### POROUS GRAPHITIC CARBON BASED HPLC-MS/MS – AN INNOVATIVE APPROACH IN HIGHLY EFFECTIVE THERAPEUTIC DRUG MONITORING OF THIOPURINES FOR INFLAMMATORY BOWEL DISEASE THERAPY OPTIMIZATION

Daniel Pecher<sup>1,2</sup>, Svetlana Dokupilová<sup>1,2</sup>, Zuzana Zelinková<sup>3</sup>, Jana Lučeničová<sup>4</sup>, Maikel Peppelenbosch<sup>5</sup>, Peter Mikuš<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Department of Pharmaceutical Analysis and Nuclear Pharmacy, Faculty of Pharmacy, Comenius University in Bratislava, Odbojárov 10, SK-832 32 Bratislava, Slovak Republic, [pecher1@uniba.sk](mailto:pecher1@uniba.sk)

<sup>2</sup>Toxicological and Antidoping Center, Faculty of Pharmacy, Comenius University in Bratislava, Odbojárov 10, SK-832 32 Bratislava, Slovak Republic

<sup>3</sup>Department of Gastroenterology, St Michael's Hospital, Satinského 1, SK-811 08 Bratislava, Slovak Republic

<sup>4</sup>Department of Biochemistry & Hematology, St Michael's Hospital, Satinského 1, SK-811 08 Bratislava, Slovak Republic

<sup>5</sup>Gastrolab, Erasmus Medical Center, Wytemaweg 80, 3015 CN Rotterdam, The Netherlands

Thiopurines (TPs) are immunosuppressive drugs commonly administered in the treatment of inflammatory bowel diseases (IBD). TPs are biotransformed by a complex set of metabolic pathways before the active metabolites – thiopurine nucleotides (TPN) – are obtained. Therapeutic drug monitoring of TPN is a useful tool for the optimization of TP therapy. Currently, the most effective analytical approach for such monitoring is based on ion-exchange chromatography hyphenated with mass spectrometry (IEC-MS) [1].

In this work, a new approach, based on HPLC-MS method employing a porous graphitic carbon column (PGC-MS) was developed. The new PGC-MS approach brought a significant enhancement of key performance parameters, e.g. selectivity (at least partial chromatographic separation of all 12 TPN plus MS/MS resolution); sensitivity (up to 9-times higher peak heights); and sample throughput (reduction of analysis time by 25%). Hence,



PGC-MS currently represents the most effective solution for the therapeutic drug monitoring of TPN, suitable to replace IEC-MS.

The developed method was fully validated according to the requirements of the FDA guidelines and applied on 10 IBD patients samples (red blood cells). The developed PGC-MS approach offers a unique ability of the fast, sensitive, accurate, and precise monitoring of the full thiopurine metabolome, urgently demanded by routine gastroenterological laboratories.

*This work was supported by the projects VEGA 1/0463/18 and APVV-15-0585 and carried out in the Toxicological and Antidoping Center at the Faculty of Pharmacy Comenius University in Bratislava.*

[1] Hofmann U.: *Anal. Chem.* 84, 3 (2012).

## Sh08

### FORENZNÍ IDENTIFIKACE STŘELCE – LA-ICP-MS ZOBRAZOVÁNÍ POVÝSTŘELOVÝCH ZPLODIN

Tomáš Pluháček<sup>1,2</sup>, Martin Švidrnoch<sup>3</sup>, Vítězslav Maier<sup>4</sup>, Vladimír Havlíček<sup>1,2</sup>, Karel Lemr<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc

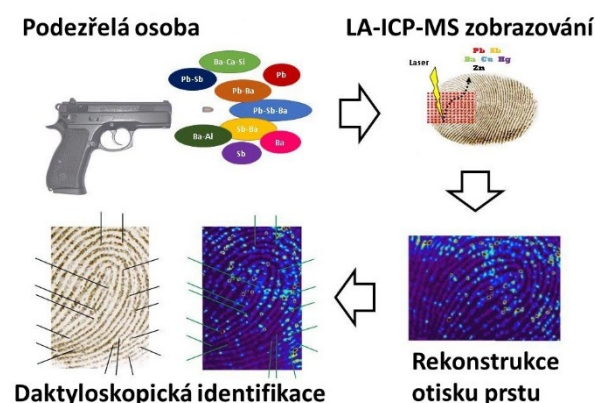
<sup>2</sup>Mikrobiologický ústav AV ČR, v.v.i., Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4

<sup>3</sup>Ústav soudního lékařství, Fakultní nemocnice Ostrava, 17. listopadu 1790/5, 708 52 Ostrava

<sup>4</sup>Ústav soudního lékařství a medicínského práva, Fakultní nemocnice Olomouc, Hněvotínská 3, 779 00 Olomouc  
[tomas.pluhacek@upol.cz](mailto:tomas.pluhacek@upol.cz)

Detekce a charakterizace ulpělých povýstřelových zplodin (PZ) patří k základním kriminalistickým úkonům pro určení, zda podezřelá osoba použila střelnou zbraň při trestném činu. Povýstřelové zplodiny jsou charakterizovány jako kulovité částice s velikostí 0,5 – 5,0 µm a chemickým složením odpovídajícím střelné zbrani, projektilu a nábojnici. Bohužel žádná z doposud používaných metod není schopna korelovat informace o chemickém složení latentních otisků (biometrické informace) a *corpus delicti* [1].

Z tohoto důvodu byla vyvinuta LA-ICP-MS metoda umožňující zobrazování prostorové distribuce PZ na latentním otisku prstu společně s jeho rekonstrukcí pro účely personální identifikace (Obr. 1). Metoda byla verifikována s využitím sady latentních otisků (kontrola, manipulace s nábojem, po jednom a pěti výstřelech) a otisků prstů zviditelněných daktyloskopickým práškem. LA-ICP-MS zobrazování bylo využito jednak k detekci a charakterizaci jednotlivých částic PZ na povrchu latentního otisku prstu, ale především k identifikaci „střelce“ na základě porovnání 2D map prostorové distribuce Cu, Zn, Sb, Ba, Hg, Pb se zviditelněnými kontrolními (referenčními) otisky. Zviditelnění otisku nevede k ovlivnění kvality získaných 2D map, LA-ICP-MS detekce a charakterizace PZ může být úspěšně provedena i na fragmentech otisků. LA-ICP-MS zobrazování má značný potenciál stát se citlivější a spolehlivější alternativou ke standardním forenzním metodám identifikace a charakterizace povýstřelových zplodin.



**Obr. 1.** Schéma detailního studia PZ ulpělých na otiscích prstu pro personální identifikaci podezřelé osoby.

*Tento výzkum byl financován z Národního programu udržitelnosti (projekt NPU LO 1305) Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.*

1. Wei Q. H., Zhang M. Q., Ogorevc B., Zhang X. J.: *Analyst* 141, 6172 (2016).

2. Pluháček T., Švidrnoch M., Maier V., Havlíček V., Lemr K.: *Anal. Chim. Acta* 1030, 25 (2018).

**Sh09****SALIVA AS A POTENTIAL DIAGNOSTIC FLUID FOR DETERMINATION OF IMMUNE SYSTEM ACTIVATION MARKERS, CREATININE AND URIC ACID**Andrea Vernerová<sup>1,2</sup>, Lenka Kujovská Krčmová<sup>1,2</sup><sup>1</sup>*Department of Analytical Chemistry, Faculty of Pharmacy in Hradec Králové, Charles University, Czech Republic, e-mail: verneran@faf.cuni.cz*<sup>2</sup>*Department of Clinical Biochemistry and Diagnostics, University Hospital Hradec Králové, Czech Republic, e-mail: verneran@faf.cuni.cz*

Saliva has a lot of functions such as lubrication and protection, taste and digestion, buffering action, maintaining tooth integrity. The main advantages of saliva as a diagnostic biological material are simple, safe and non-invasive collection comparing with blood [1].

Neopterin, kynurenine, tryptophan are useful and important markers for monitoring the activation of the immune system that accompanies number of diseases such as infection, autoimmune and various malignant diseases. Uric acid (UA), the major urinary nitrogen compound, is the product of purine metabolism in the human body and important antioxidant in saliva [2, 3].

The new chromatographic method performed on HPLC system LC 20 Prominence (Shimadzu, Japan) using monolithic stationary phase for determination of these analytes has been developed and will be presented. Neopterin and tryptophan were detected by fluorescence detector RF-10A<sub>XL</sub> (Shimadzu, Japan) and creatinine, kynurenine, and UA by diode array detector SPD-M20A (Shimadzu, Japan). Only filtration as a simple and suitable sample preparation procedure for human saliva was used.

This new HPLC-FLD, DAD method in combination with simple and fast sample preparation procedure will be applied in clinical research for patients with cancer, periodontal and other serious diseases.

*The study was supported by Project SVV 260 412 and by University Hospital in Hradec Králové, 00179906, Ministry of Health of the Czech Republic, grant nr. NV18-03-00130. All right reserved.*

[1] NGAMCHUEA K., CHAISIWAMONGKHOL K., BATCHELOR-MCAULEY Ch., G. COMPTON R.: *The Analyst.*, 143(1), 81-99 (2018).

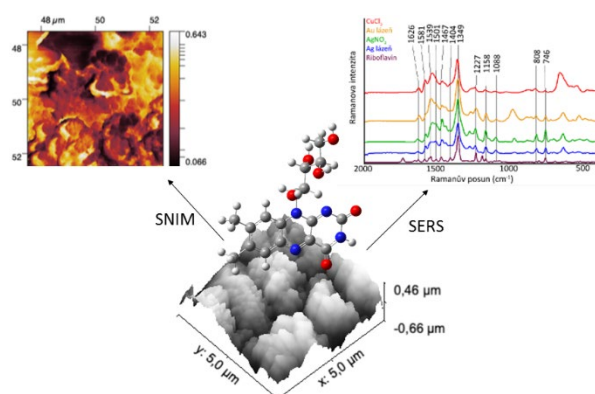
[2] KUJOVSKA KRCMOVA L., CERVINKOVA B., SOLICHOVA D., SOBOTKA L., HANSMANOVA L., MELICHAR B., SOLICH P.: *Bioanalysis*, 7(21), 2751-2762 (2015).

[3] LIU XY., LUO Y., ZHOU CY., PENG A., LIU JY.: *Bioanalysis.*, 9(22), 1751-1760 (2017).

**Sh10****VÝVOJ METODIKY PŘÍPRAVY NOVÝCH PLASMONICKÝCH KOMPOZITNÍCH SUBSTRÁTŮ PRO POKROČILÉ TECHNIKY VIBRAČNÍ (MIKRO)SPEKTROSKOPIE**Oleksandr Volochanskyi<sup>1</sup>, Marie Švecová<sup>1,2</sup>, Vadym Prokopec<sup>1</sup><sup>1</sup>*Ústav analytické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 128 66, Praha*<sup>2</sup>*Ústav fyzikální chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 128 66, Praha volochao@vscht.cz*

V současné době existuje požadavek na vývoj nových postupů pro přípravu zesilujících substrátů vhodných pro pokročilé metody vibrační spektroskopie jako jsou povrchem zesílená Ramanova spektroskopie (SERS) a skenovací infračervená mikroskopie blízkého pole (SNIM). SERS spektroskopie umožňuje efektivní zesílení Ramanova rozptylu molekul adsorbovaných na nanostrukturovaný povrch prostřednictvím zesílení lokálního elektrického pole nosiče [1]. Zatímco SNIM úspěšně využívá těchto fyzikálních vlastností k zesílení infračervené absorpce vzorku, a navíc umožňuje mapovat povrch s rozlišením v řádu nanometrů [2]. Předkládaná práce se zabývá zkoumáním možnosti využití bezproudové depozice kovů galvanickým vylučováním pro přípravu účinných zesilujících substrátů.

Byla připravena řada Au, Ag, Cu povlaků s různou délkou časového intervalu přípravy v různých depozičních roztocích. Morfologie povrchu byla zkoumána pomocí skenovací elektronové mikroskopie. Krystalografické složení vyloučených fází bylo studováno pomocí rentgenové difrakce. Připravené substráty byly testovány pomocí SERS spektroskopie s excitační vlnovou délkou 1064 nm a pomocí SNIM při čtyřech vybraných vlnočtech z MIR oblasti. Zjištěná závislost byla použita pro nalezení kombinace depozičního roztoku a doby přípravy substrátu ve vztahu k ploše vybraných vibračních pásů riboflavinu ( $10^{-4}$  mol/l). Získaná spektra byla podrobená analýze hlavních komponent. Při optimální době přípravy substrátu byla měřena koncentrační série riboflavinu ( $10^{-4}$ – $10^{-9}$  mol/l). Na tato spektra byla aplikována analýza částečných nejmenších čtverců.



- [1] Aroca R.: *Surface-enhanced vibrational spectroscopy*. J. Wiley & Sons, Ltd, Hoboken 2006.
- [2] Dendisová M., Jenišťová A., Parchaňská-Kokaislová, A., Matějka P., Prokopec V., Švecová M.: *Anal. Chim. Acta 1031*, 1-14 (2018).

## SEMINÁR K NOVEJ DEFINÍCII MÓLU

### NOVÉ DEFINÍCIE ZÁKLADNÝCH JEDNOTIEK SI A ICH VÝZNAM PRE MERANIA

Ján Garaj

*Eurachem Slovakia, FCHPT STU*

Dňa 16. 11.2018 sa konalo rozšírené zasadnutie Medzinárodného výboru pre miery a váhy. (BIPM) vo Versailles. Rokovania sa zúčastnilo 59 riadných a 47 pridružených členov BIPM. Na programe rokovania bol návrh zmien štyroch základných jednotiek: kilogramu, Kelvinu, Ampéru a mólu.

Dôvodom pre zmeny bola snaha o stabilizáciu celého systému základných jednotiek, odstránenie alebo aspoň zníženie frekvencie ich zmien a zvýšenie ich presnosti. Kilogram bol reprezentovaný platin-irídiovým valcom. Na tento medzinárodný etalón bolo nadviazaných 40 národných etalónov. Napriek prísne dodržiavaným podmienkam pri úschove medzinárodného kilogramu, pozorovali sa zmeny v jeho hmotnosti.

Na rokovaní BIPM boli predložené dva návrhy riešenia. Prvý vychádzal z Hallovho a Josepshonovho efektu. Druhý kremikovej monoizotopovej kremikovej gule s čím menším počtom štruktúrnych a kryštálových defektov. V prvom prípade lineárny vodič elektrického prúdu, ktorým prechádza elektrický prúd sa nachádza v magnetickom poli. Na taký vodič pôsobí elektrické napätie, ktorého veľkosť sa mení v závislosti od intenzity prúdu. Experiment sa realizuje tzv. Wattovými váhami, v ktorých na teleso pôsobí okrem elektrickej sily sila gravitačná. V rovnováhe hmotnosť telesa závisí od Planckovej konštanty.

V druhom návrhu sa využívajú výsledky štruktúrnej analýzy. Kremík má kubickú štruktúru. V základnej bunke, ktorej jediným štruktúrnym parametrom je mriežková konštanta, ktorej tretia mocnina vyjadruje objem základnej bunky kremíka. V základnej bunke sa nachádza osem atómov kremíka. Z týchto údajov v z objemu kremikovej gule možno vypočítať počet atómov kremíka v guli a pomocou Avogadrovej konštanty aj hmotnosť atómu kremíka. Účastníci rokovania BIPM sa – vzhľadom na väčšiu presnosť wattových váh priklonili k prvej variante určenia kilogramu.

Výsledkom rokovania bol prijatý záver, aby všetky štyri základné jednotky SI sústavy boli definované pomocou prírodných konštánt. Pre kilogram je to Planckova konštanta, v prípade teploty namiesto trojitého bodu vody bol Kelvin definovaný Boltzmanovou konštantou  $k_B$ , Ampér bol definovaný elementárnym nábojom ( $e = 1,602\ 136\ 634 \cdot 10^{-19}$  coulombu). Mól stratil závislosť na hmotnosti a jeho základom je Avogadrova konštanta  $N_A$ . Pre úplnosť, aj ďalšie tri základné jednotky SI vychádzajú z prírodných konštánt.

Pozitíva zmien možno vyjadriť konštatovaním, konštanty a rovnako aj základné jednotky SI sú nemenné. Odpadajú zmeny na redefiníciách, zvýšila sa presnosť základných jednotiek SI. Napokon, definície nie sú v doterajšej miere závislé na technickom a technologickom pokroku.

Problémy súvisia s termínom platnosti úprav, ktorý bol určený na 20.5.2019. Uvedenie nových zmien do života vyžaduje čas, nemalé prostriedky a pripravenosť SMU zmeny uviesť do života.

### NOVÁ DEFINÍCIA ZÁKLADNEJ JEDNOTKY MÓL V POLITIKE IUPAC

Ján Labuda

*Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav analytickej chémie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, jan.labuda@stuba.sk*

Látka – základný predmet záujmu chemikov pri syntéze či izolácii, štúdiu či charakterizácii, chemickom meraní či analytickom stanovení, je od roku 1967 spojená so základnou veličinou látkové množstvo (symbol  $n$ ). Od svoju 1972 je v medzinárodnom metrickom systéme jednotiek SI zaradená príslušná základná jednotka mól so symbolom mol. Podobne ako iné základné jednotky, bol mól predmetom redefinície, ktorá vstúpila do platnosti 20. mája 2019.

Diskusia o redefinícii mól sa datuje od r. 2005 a dosiahnutie konsenzu trvalo asi dekádu rokov. Rozhodujúcim bolo, či základnou črtou má byť molárna hmotnosť uhlíka-12 alebo Avogadrova konštanta. V roku 2011 rozhodla the General Conference on Weights and Measures (CGPM). International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) prispel k tejto činnosti koordináciou redefinície mólu. Spoluprácu rôznych cieľových skupín Consultative Committee for Amount of Substance: Metrology in Chemistry and Biology (CCQM), Consultative Committee for Units (CCU) a IUPAC ovplyvnila komunikácia nespočetných odborníkov. V rámci osobitného projektu sa zapojili jednotlivé divízie ako aj národné prístupujúce organizácie IUPAC (NAO). Podrobné správy prinášajú viaceré publikácie [1, 2].

*A Mole Is a Unit*

*A mole is an animal that burrows in the ground,  
Or a spot on your chin that you gotta shave around.  
But there's another kind of mole of interest to me,  
That's the kind of mole they use in chemistry.*

**Chorus:** *A mole is a unit, or have you heard,  
Containing six times ten to the twenty-third,  
That's a six with twenty-three zeros at the end,  
Much too big a number to comprehend.*

...  
©1988 Michael Offutt

*Táto práca vznikla za podpory EURACHEM – Slovakia a Slovenskej chemickej spoločnosti.*

- [1] Roberto Marquardt R., Juris Meija J., Mester Z., Towns M., Weir R., Davis R., Stohner J.: *Pure Appl. Chem.* 89, 951 (2017).  
[2] Roberto Marquardt R., Juris Meija J., Mester Z., Towns M., Weir R., Davis R., Stohner J.: *Pure Appl. Chem.* 90, 175 (2018).

## NOVÁ DEFINÍCIA JEDNOTKY MÓL A JEJ APLIKÁCIA DO CHEMICKÝCH MERANÍ

Dušan Kordík

*EURACHEM Slovakia, SCHSPCh pri FCHPCH STU*

V chemickej metrológii existujú štyri veličiny, ktoré sa používajú na vyjadrenie množstva látky v nejakej sústave. Jedná sa o *látkové množstvo*  $n$ , *hmotnosť*  $m$ , *objem*  $V$ , a *počet častíc*  $N$ . Zasadnutie 26. CGPM v novembri 2018 ustanovilo nové definície základných jednotiek SI pre jednotky veličín hmotnosti (kg), elektrického prúdu (A), teploty (K) a látkového množstva (mol). Realizácie nových definícií uvedených veličín prostredníctvom primárnych metód je najdôležitejšou úlohou vedeckej metrológie. Nové definície, založené na prírodných konštantách (napr. jednotka hmotnosti na Planckovej konstante a látkové množstvo na Avogadrovej konstante) umožňujú výber primárnych metód, ktoré poskytnú hodnoty s najvyššou mierou správnosti pri daných ekonomických možnostiach krajiny, v ktorej sa jednotky veličín realizujú.

Nová definícia základnej jednotky SI látkového množstva, ktorá je platná od 20. mája 2019 má nasledovné znenie [1]:

*Mól, je SI jednotkou látkového množstva, symbol mol. Jeden mol obsahuje presne  $6,022\ 140\ 76 \cdot 10^{23}$  elementárnych entít. Toto číslo je fixná numerická hodnota Avogadrovej konštanty  $N_A$ , je vyjadrená v jednotke  $\text{mol}^{-1}$  a nazýva sa Avogadrovo číslo.*

*Látkové množstvo sústavy, symbol  $n$ , je mierou počtu špecifikovaných elementárnych entít. Elementárnou entitou môže byť atóm, molekula, ión, elektrón nejaká iná častica alebo skupina častíc.*

Nová definícia jednotky mol nahradila starú definíciu prijatú v roku 1971, ktorá obsahovala súvzťažnosť medzi „*látkovým množstvom sústavy, ktorá obsahuje taký počet elementárnych častíc ako je prítomné v 0,012 kilogramu  $^{12}\text{C}$* “. Ako vážny dôsledok novej definície jednotky mol je nulová neistota Avogadrovej konštanty a Avogadroho čísla  $N_A$ .

Prenos jednotky látkového množstva *mol* a jednotky hmotnosti *kilogram* k praktickým meradlám sa v aplikovanej metrológii realizuje pomocou materiálnych artefaktov - referenčných materiálov pri jednotke látkového množstva a prostredníctvom závaží pri jednotke hmotnosti. Prostriedkom prenosu hodnoty jednotky je kalibrácia, prostredníctvom ktorej sa hodnoty primárnych etalónov hmotnosti a látkového množstva priradujú indikovaným hodnotám meradiel hmotnosti a látkového množstva. Matematicky sa proces kalibrácie popisuje kalibračnou funkciou, ktorá sa používa na priradenie správnej hodnoty meranej hmotnosti alebo látkového množstva z indikovanej hodnoty meradla. Tento proces sa metrologicky nazýva *nádväznosť* hodnoty merania (angl. traceability) an hodnotu referenčného etalónu meranej veličiny. Proces kalibrácie je spojený s relačným vzťahom referenčných hodnôt etalónov a indikovaných hodnôt meradiel a ich štandardných neistôt, ktoré tvoria ucelený metrologický problém.

- [1] Resolution of the 26th CGPM on the revision of the International System of Units (SI); BIPM, November 2018.

## POSTERY - SEKCIA 1: ANALYTICKÁ CHÉMIA

### 1Po01

#### COLORECTAL CANCER GLYCOPROFILING AND POTENTIAL BIOMARKERS

Juvissan Aguedo<sup>1</sup>, Jan Tkac<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dubravská cesta 9, 845 38 Bratislava, juvissanqf@gmail.com, jan.tkac@savba.sk*

Colorectal Cancer (CRC) represents the fourth most common cause of cancer mortality as reported by the World Health Organization [1]. Changes in the glycosylation pattern have been known to be associated with the CRC progression [2]. Therefore, there is a need to investigate new glyco-biomarkers in order to improve the CRC diagnostics and earlier detection [3].

In our study we are aiming to identify potential glyco-biomarkers in CRC serum samples. The glycoprofiling methods to study glycosylation in CRC involve enzyme linked lectin-based immunoassays (ELISA) with various lectins focused on the detection of aberrant bisected, branched, fucosylated and sialylated glycoforms. Another strategy for the characterization of glycoforms present in serum samples of patients with CRC will be application of nanomaterial-based enrichment. Finally, we will validate our finding using matrix-assisted laser desorption/ionization (MALDI) time-of-flight (TOF) mass spectrometry (MS). Once we have founded potential CRC diagnostic glyco-biomarkers, they will be used prominently in the development of lectin-based biosensors.

*The authors would like to acknowledge for the financial support from the Innovative Training Network (no. 813120), from the Ministry of Health of the Slovak Republic under the project registration number 2018/23-SAV-1.*

- [1] Shinozaki E., Tanabe K., Akiyoshi T., Tsuchida T., Miyazaki Y., Kojima N., Igarashi M., Ueno M., Suenaga M., Mizunuma N., Yamaguchi K., Nakayama K., Iijima S., Yamaguchi T.: *BMC Cancer*. 18, 406 (2018).  
 [2] de Freitas Junior J.C., Morgado-Díaz J.A.: *Oncotarget*. 7, 19395-19413 (2016).  
 [3] Badr H.A., Alsadek D.M., Darwish A.A., Elsayed A.I., Bekmanov B.O., Khussainova E.M., Zhang X., Cho W.C., Djansugurova L.B., Li C.Z.: *Expert Rev Proteomics*. 11, 227-236 (2014).

### 1Po02

#### PRÍPRAVA NANOŠTRUKTÚROVANÝCH GLYKÁNOVÝCH POVRCHOV

Anna Blšáková<sup>1</sup>, Ján Tkáč<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Chemický ústav, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovensko, anna.blsakova@gmail.com*

Glykány patria medzi esenciálne biomolekuly bunky a plnia rozmanité biologické funkcie. Zmeny v glykozylácii úzko súvisia s progresom rakovinového ochorenia. Imunitný systém reaguje na tieto zmeny veľmi rýchlo a včasne, ešte pred prvými príznakmi ochorenia, ktoré vedú k zmenám vo fungovaní celého organizmu. Jednou z najznámejších porúch glykozylácie je porucha v skladaní enzýmu T-syntázy, spôsobená disfunkciou molekulárneho chaperónu *COSMC*. Expresia aberantného antigénu, GalNAc (Tn antigénu) a jeho derivátov je dokázaná u mnohých druhov rakoviny (prostata, žalúdok, hrubé črevo, pľúca, pažerák...). Vytvorené protilátky voči tomuto antigénu je možné využiť ako diagnostický nástroj na včasné odhalenie rakoviny, čo predlžuje a zvyšuje kvalitu života pacienta [1,2].

Úpravou uhlíkového povrchu pripravujeme nanoštruktúrované glykánové biosenzory. Pomocou elektrochemických a optických metód sa v práci venujeme štúdiu glykán – proteínových interakcií a optimalizácii podmienok pri vytvorení glykánového biosenzora citlivého na anti-Tn protilátku (2C4) a príslušnému lektínu (DBA). Cieľom našej práce je príprava špecifického a čo najcitlivejšieho diagnostického zariadenia, s využitím čo najmenšieho objemu vzorky.

*Výskum vedúci k dosiahnutým výsledkom bol financovaný vďaka podpore a grantu - APVV-17-0300.*

- [1] Cadena, A.P., T.R. Cushman, and J.W. Welsh, Glycosylation and Antitumor Immunity. *Int Rev Cell Mol Biol*, 2019. 343: p. 111-127  
 [2] Ju, T., et al., *Human tumor antigens Tn and sialyl Tn arise from mutations in Cosmc*. *Cancer Res*, 2008. 68(6): p. 1636-46

**1Po03****VIBRAČNĚ-SPEKTROSKOPICKÉ STUDIUM INTERAKCE FLUORIDOVÉHO SENZORU NA *N,N'*-DISUBSTITUOVANÉ MOČOVINOVÉ BÁZI POMOCÍ MAGNETICKÝCH NANOČÁSTIC S PLASMONICKOU STRUKTUROU JAKO ANALYTICKÉ SONDY**Bui Duong Thuy\*<sup>1,2</sup>, Lenka Marková<sup>2</sup>, Pavel Řezanka<sup>2</sup>, Ondřej Kaman<sup>1</sup><sup>1</sup>Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i., Cukrovarnická 10/112, 162 00 Praha 6<sup>2</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5166 28 Praha 6\*E-mail: [bui@fzu.cz](mailto:bui@fzu.cz)

V této práci byla studována tvorba komplexu mezi molekulárním senzorem 1-(4-merkaptofenyl)-3-(4-nitrofenyl)močovinou a halogenidovými anionty jako analyty v prostředí acetonitrilu. Senzor, který byl připraven reakcí 4-aminothiofenolu se 4-fenylisokyanátem, byl charakterizován pomocí hmotnostní spektrometrie (APCI ionizace v negativním módu). Pro analýzu komplexu byl kromě UV/VIS spektroskopie použit také povrchem zesílený Ramanův rozptyl (SERS) s využitím nanočásticového systému založeného na plasmonické struktuře zlatých nanoslupek na silikou obalených magnetických nanočásticích Mn-Zn feritu, jehož příprava i charakterizace byla popsána v předchozí studii [1]. Bylo zjištěno, že uvedený senzor je v rámci halogenidů poměrně selektivní a vysoce citlivý na fluoridové anionty a v kombinaci se SERS dovoluje stanovení v koncentračním rozsahu od  $10^{-3}$  do minimálně  $10^{-6}$  mol L<sup>-1</sup>. Pro studium spektrální odezvy senzoru byly vybrány zejména pásy senzoru o vlnočtech 1077, 1178 a 1579 cm<sup>-1</sup>, jejichž intenzity byly analyzovány v závislosti na koncentraci analytu. Součástí studie je i ukázka využití magnetické separace (magnetic solid-phase extraction) k analýze vysoce zředěných roztoků fluoridových aniontů.

*Tato práce byla financována prostřednictvím účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 21-SVV/2019) a Grantovou Agenturou České Republiky prostřednictvím projektu 18-3323S.*

[1] Koktan, J.; Královec, K.; Havelek, R.; Kuličková, J.; Řezanka, P.; Kaman, O., Magnetic oxide particles with gold nanoshells: Synthesis, properties and cytotoxic effects. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* 2017, 520, 922-932.

**1Po04****BEING IN EVERY CORNER OF THE RESEARCH BOX**

Justína Čuchorová, Peter Podolec

Axxence Slovakia s.r.o., Mickiewiczova 9, 811 07 Bratislava, Slovak republic, e-mail:

[justina.cuchorova@axxence.sk](mailto:justina.cuchorova@axxence.sk)

Obtaining samples with the supposed content of  $\alpha$ -ionone, the optimisation of analytical method for its separation was necessary. Furthermore, as  $\alpha$ -ionone exists in two enantiomeric forms, determination of the enantiomeric form contained in these samples was required. Based on previously published results regarding the analyses of enantiomeric ratios of natural  $\alpha$ -ionone from raspberries, (*R*)- $\alpha$ -ionone constitutes more than 97 %. On the other hand, synthetic raspberry aroma contains both enantiomers in nearly equal amounts.

Firstly, proper choice of chiral column type was necessary to efficiently separate enantiomers. After extensive screening, Cyclosil-B proved to be the most appropriate. However, despite finding an optimal GC column, the order of enantiomers was still not known.

None of the enantiomerically pure forms of  $\alpha$ -ionone is commercially available. Therefore, inspired by the experience of RNDr. Pavel Farkaš, CSc, we attempted to obtain pure (*R*)-enantiomer from raspberries. The volatiles were isolated from raspberries homogenate by vacuum hydrodistillation and  $\alpha$ -ionone was identified in natural extract by comparison with GC-MS spectrum from library NIST 14. Subsequently, chiral analysis of raspberry extract was performed on GC-FID and the order of enantiomers was determined. Utilising developed analytical procedure, the presence of major (*R*)-isomer was confirmed in natural products.

*„This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-15-0466 ”*

**1Po05****SILVER AMALGAM PARTICLES: SUITABLE ELECTRODE MATERIAL FOR SPECTRO-ELECTROCHEMISTRY AND PLASMONICS**

Aleš Danhel<sup>1\*</sup>, Pavlína Havranová<sup>1</sup>, Michal Horák<sup>2,3</sup>, Lukáš Kejík<sup>1,2,3</sup>, Filip Ligmajer<sup>2,3</sup>, Peter Šebest<sup>1</sup>, Miroslav Fojta<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institute of Biophysics, Czech Academy of Sciences, Královopolská 135, CZ-612 65 Brno

<sup>2</sup> Institute of Physical Engineering, Brno University of Technology, Technická 2, CZ-616 69 Brno

<sup>3</sup> Central European Institute of Technology, Brno University of Technology, Purkyňova 123, CZ-612 00 Brno

\*E-mail: danhel@ibp.cz

Silver amalgam particles (AgAP) potentially offer wide range of electroanalytical applications from voltammetry, spectro-electrochemistry, *in-situ* fluorescent or Raman electrochemistry, plasmonics to photo-electrochemistry. AgAPs may be advantageously prepared by electrodeposition on any conductive substrate by double pulse chronoamperometry or by chemical co-reduction from the solution of Ag<sup>+</sup> and Hg<sup>2+</sup> ions using suitable reducing agents. Resulting particle composition (content of metal mercury and silver), a size, density and a shape could be partly controlled according to particular requirements of applications.

In this work, successful electrodeposition of AgAP on transparent indium-tin oxide, pyrolytic graphite [1], highly oriented pyrolytic graphite and thin gold film electrodes [2] will be discussed together with their further application in spectro-electrochemical detection of nitro-aromatic substances and biopolymers, such as nucleic acids and proteins. Moreover, recent results concerning plasmonic behavior of AgAP will be also presented.

Suitable combinations of electrochemical and optical methods utilizing AgAPs on various substrates open novel possibilities for research of nucleic acids and proteins on charges surfaces.

*This work has been supported by a Grant Agency of the Czech Republic (project 17-23634Y) and by the SYMBIT project reg. no. CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000477 financed from the ERDF. A part of this work was carried out with the support of CEITEC Nano Research Infrastructure (ID LM2015041, MEYS CR, 2016–2019), CEITEC Brno University of Technology.*

[1] Sebest P., Fojt L., Ostatná V., Fojta M., Danhel A. In: Electrodeposited Silver Amalgam Particles on Pyrolytic Graphite in (Spectro)Electrochemical Detection of 4-nitrophenol, DNA and GFP, *Anal. Chem.* (2019) (Submitted).

[2] Havranova P., Ligmajer F., Danhel A. In: Electrodeposition of Silver Amalgam on Vapordeposited Golden Plate Electrodes Towards Electroanalysis of 4-nitrophenol and Os(bipy) labeled DNA, *Electroanalysis* (2019) (Accepted).

[3] Ligmajer F., Horak M., Sikola T., Fojta M., Danhel A. In: Silver Amalgam Nanoparticles and Microparticles: A Novel Plasmonic Platform for Spectroelectrochemistry, *J. Phys. Chem. Part C* (2019) (Accepted).

**1Po06****BIOSENSOR BASED ON THE IMPEDIMETRIC DETECTION OF PROTEIN RESIDUES OF INFLUENZA VIRUS**

Miroslav Gál<sup>1</sup>, Aneta Anna Dunajová<sup>2</sup>, Kornélia Tomčíková<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Slovak University of Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Department of Inorganic Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, miroslav.gal@stuba.sk

<sup>2</sup> Church High School of st. Cyril and Methodius, Švermova 10, 069 01 Snina, Slovakia

Early diagnostics of infection requires an efficient and fast diagnostic test, showing high sensitivity, simplicity and economic viability. The goal of this work is to create an ultra-sensitive and highly selective impedimetric biosensor base on the interaction with monoclonal antibodies, using screen printed GC electrodes. Electrochemical impedance spectroscopy was used to characterize biosensors and describe their basic properties. Three electrode system with K<sub>3</sub>Fe(CN)<sub>6</sub> as an electrochemical probe were used. The quality of biosensors was checked by the relative charge transfer resistance differences  $\Delta R_{ct}$  compare to the bare electrode. The sensor was tested not only in the ideal buffered solution but also in defibrinated horse blood [1-3].

Limit of detection (LOD) and the sensitivity of the sensor (slope of the linear dependence of  $\Delta R_{ct}$  on logarithm of the virus proteins concentration) with and without of human serum albumin (HAS) in buffered solution and horse blood were determined. The lowest sensitivity was observed in the case of the sensor without HSA. LOD was the best in the case of the sensor without HAS in the buffered solution. In the horse blood sample LOD was almost 1 000 times worse than in previous case, however still good enough to be comparable with ELISA test.

*This research was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-17-0149 and Scientific grant agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic and of Slovak Academy of Sciences VEGA 1/0343/19.*



- [1] Tomčíková, K., Detekcia vírusu chrípky pomocou impedimetrického biosenzora. Diploma Thesis. Slovak University of Technology in Bratislava, Bratislava 2017.  
 [2] Hushegyi A., Bertók T., Tkáč J.: *Chem. Listy*. 108, 451 (2014).  
 [3] Varečková E., Mucha V., Kostolanský F.: *Acta virologica*. 57, 247 (2013).

**1Po07****STANOVENÍ BISFENOLŮ V ENERGETICKÝCH NÁPOJÍCH POMOCÍ PLYNOVÉ CHROMATOGRRAFIE S HMOTNOSTNÍ DETEKČÍ**

Martin Jaček<sup>1</sup>, Petr Tůma<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Ústav hygieny, Oddělení analytických metod, 3. lékařská fakulta, Univerzita Karlova, Ruská 87, 100 00 Praha 10, Česká republika  
 martin.jacek@lf3.cuni.cz*

Bisfenoly se používají jako modifikátory či stabilizátory vlastností plastů. Nejznámější z nich je bisfenol A používaný v polykarbonátech či epoxidových pryskyřicích. Jeho celosvětová roční produkce se pohybuje v řádu milionů tun. Bisfenol A je obsažen v potravinářských obalových materiálech, jako jsou plastové fólie, plastové láhve či vnitřní ochranná vrstva plechovek. Jeho uvolňování do potravin stoupá s rostoucí teplotou, klesajícím pH či s opakovaným používáním těchto materiálů v důsledku postupné degradace plastu. Jeho nejvyšší koncentrace je v termopapírech účtenek. Bisfenol A a zřejmě i ostatní bisfenoly jsou díky schopnosti vázat se na receptor pro estrogen řazeny mezi tzv. endokrinní disruptory. Z jejich dalších účinků je zmiňován vliv na obezitu, insulinovou rezistenci, možný vznik neurodegenerativních onemocnění, genetické mutace a vznik nádorového bujení. Mechanismus vzniku těchto účinků je spojován se zvýšeným oxidačním stresem a s přímým ovlivněním receptorů vedoucích k produkci prozánětlivých mediátorů [1,2].

Cílem naší práce bylo zavést metodu pro stanovení bisfenolů v energetických nápojích za použití plynového chromatografu s hmotnostním detektorem. Vzorky byly připravovány pomocí SPE techniky a získané bisfenoly byly derivatizovány reakcí s anhydridem kyseliny octové na příslušné diacetyly [3]. V sedmi analyzovaných nápojích byly nalezeny hladiny bisfenolu F v rozmezí 0,01 – 1,34 ng/ml a bisfenolu A v rozmezí 0,07 – 0,45 ng/ml.

*Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky GA18-04902S a programu PROGRES Q36 Univerzity Karlovy.*

- [1] Michałowicz, J., *Environ. Toxicol. Pharmacol.* 37, 738 (2014).  
 [2] Jalal N., Surendranath A. R., Pathak J. L., Yu S., Chung C. Y., *Toxicol. Rep.* 5, 76 (2018).  
 [3] Wang Q., Zhu L., Chen M., Ma X. Wang X., Xia J. *Chemosphere* 169, 709 (2017).

**1Po08****VYUŽITIE NANOSORBENTOV NA EXTRAKCIU A KONCENTROVANIE TOXICKÝCH PRVKOV VO VODNÝCH VZORKÁCH**

Katarína Kriegerová<sup>1</sup>, Simona Procházková<sup>1</sup>, Radoslav Halko<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra analytickej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, kriegerova2@uniba.sk*

V súčasnosti pri stále rozširujúcej industrializácii sa vyžaduje analýza vzoriek, ktoré súvisia so životným prostredím. Jedným z cieľov týchto analýz je stanovenie polutantov, ako napríklad toxických prvkov na stopových a ultrastopových koncentračných úrovniach v uvedených vzorkách. Na stanovenie toxických prvkov sa využívajú viaceré analytické metódy, medzi ktoré patria aj rôzne metódy atómovej spektrometrie.

Keďže stanovované prvky sa nachádzajú väčšinou na stopových a ultrastopových koncentračných úrovniach, ich stanoveniu predchádzajú úpravné kroky, ktoré zabezpečujú separáciu analytov, odstránenie matrice a/alebo ich koncentrovanie. Medzi jednu z úpravných techník, ktorej úlohou je eliminácia interferujúcich zložiek a účinné koncentrovanie analytov, patrí extrakcia tuhou fázou (SPE). SPE sa vyznačuje jednoduchosťou prevedenia, rýchlosťou separácie fáz, vysokými výťažnosťami extrakcie, atď [1]. Kľúčovým faktorom v SPE na dosiahnutie vysokých výťažností extrakcie je voľba vhodnej tuhej fázy (sorbentu). Ideálny sorbent by sa mal vyznačovať špecifickou interakciou s požadovanými zložkami, ale aj vysokou adsorpčnou kapacitou pre všetky analyty [2]. Trendom v modernom výskume, je SPE v spojení s novými nanomateriálmi, ktoré nachádzajú uplatnenie ako účinné nanosorbenty s vysokou afinitou, selektivitou a kapacitou [1]. Nanosorbenty sa vyznačujú vysokou chemickou aktivitou a adsorpčnou kapacitou, tepelnou stabilitou a jednoduchosťou ich funkcionalizácie. V posledných rokoch dosiahlo využitie nanomateriálov ako sorbentov v extrakčných technikách prudký nárast v širokej škále rôznych aplikácií [3].

*Táto práca vznikla za finančnej podpory grantovej agentúry APVV projekt SK-KR-18-0009 a grantovej agentúry MŠ SR VEGA grant č. 1/0678/19.*

- [1] Khajeh M., Laurent, S., Dastafkan K.: *Chem. Rev.* 113, 7728 (2013).  
 [2] Ahmadi M., Elmongy H., Madrakian T., Abdel-Rehim M.: *Anal. Chim. Acta.* 958, 1 (2017).  
 [3] Gonzalez-Salamo J., Socas-Rodriguez B., Hernandez-Borges J., Rodriguez-Delgado M. A.: *TrAC, Trends Anal. Chem.* 85, 203 (2016).

### 1Po09

#### THERAPEUTIC DRUG MONITORING OF THE MOST USED IMMUNOSUPPRESSIVE DRUGS IN WHOLE BLOOD USING HPLC-MS/MS

Dušan Krnáč<sup>1</sup>, Katarína Reiffová<sup>2</sup>

<sup>1</sup> ELBLAB GmbH Zentrum für LaborMedizin Meißen Riesa Radebeul, Weinbergstraße 8, 01589 Riesa, Germany, dusan.krnac@gmail.com

<sup>2</sup> Department of Analytical Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, SK-041 54 Košice, Slovak Republic

Cyclosporine, Tacrolimus, Sirolimus, and Everolimus are the most used immunosuppressive drugs and are applied in kidney, heart, lung, pancreas, intestinal tract, skin, and liver transplantations. They are critical-dose drugs. They have a narrow therapeutic index and show the desired therapeutic effect with acceptable tolerability only within a narrow range of blood concentrations [1]. At low blood levels, there is a risk of organ rejection. At high blood levels, serious side effects can emerge.

The correlation between drug concentrations and clinical outcomes is an important factor supporting the use of therapeutic drug monitoring (TDM) of immunosuppressive drugs [2].

The new HPLC-MS/MS method for simultaneous determination of Cyclosporine A, Tacrolimus, Sirolimus and Everolimus has been developed and validated. Chromatographic analysis was performed using a Shimadzu EXION AC-System coupled with a triple quadrupole mass spectrometer AB Sciex 5500 QTrap (Sciex, Darmstadt, Germany). Chromatographic separation was achieved on the chromatographic column Kinetex, 2,6 µm Phenyl-Hexyl; 2,1 x 50 mm (Phenomenex, Aschaffenburg, Germany). Gradient elution was used A: 20 mmol.L<sup>-1</sup> ammonium formate in water + 0.1 % formic acid and B: 20 mmol.L<sup>-1</sup> ammonium formate in methanol + 0.1 % formic acid with flow rate 1.0 mL.min<sup>-1</sup> and the column temperature of 50°C.

- [1] Johnston A., Holt D.W.: *Br. J. Clin. Pharmacol.* 47 339 (1999).  
 [2] Lindholm A., Kahan B.D.: *Clin. Pharmacol. Ther.* 54 205 (1993).  
 [3] Holt D.W., Marsden J.T.: Johnston A., *Transplant Proc.* 18 101 (1986).

### 1Po10

#### MIKROEXTRAKCIA JEDNOU KVAPKOU NA IZOLÁCIU REZÍDUI PESTICÍDOV Z MLIEKA

Nikola Kubasová<sup>1</sup>, Adriana Brisudová<sup>1</sup>, Svetlana Hrouzková<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav analytickej chémie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, svetlana.hrouzkova@stuba.sk

Mikroextrakcie jednou kvapkou (SDME, Single Drop Microextraction) je technika založená na distribúcii analytu medzi mikrovapkou extrakčného rozpúšťadla (niekoľko mikrolitrov) na špičke ihly striekačky a roztokom obsahujúcim analyt. Keď je špička ihly vo vhodnej polohe (vo vzorke alebo v priestore nad vzorkou) je mikrovapka vytlačená z ihly. Po uplynutí času extrakcie je kvapka vtihnutá do striekačky naspäť a následne aplikovaná do separačného systému (najčastejšie chromatografický) [1]. Táto technika sa dostáva do popredia vďaka jednoduchosti uskutočnenia extrakcie, rýchlosti a nízkym nákladom. SDME sa považuje za techniku so šetrným prístupom k životnému prostrediu, čo sa prejavuje najmä znížením spotreby toxických organických rozpúšťadiel.

Vedecká práca bola zameraná na vývoj novej analytickej metódy na stanovenie vybraných rezíduí pesticídov vo vzorkách mliečnych výrobkov. V prvej fáze sa realizovalo štúdium experimentálnych parametrov a vplyv potrebných na prevedie SDME s čo najvyššou účinnosťou. Sledovali sa nasledovné parametre: výber extrakčného rozpúšťadla, objem extrakčného rozpúšťadla, čas extrakcie, rýchlosť miešania, objem vzorky mlieka a prídavok NaCl. Ako extrakčné rozpúšťadlá sa používali toluén a chlórbenzén, ktoré vykazovali najlepšiu stabilitu mikrovapky na hrote ihly mikrostriekačky vo vzorke mlieka. Metóda sa aplikovala na analýzu vzorky mlieka, na separáciu a detekciu pesticídov sa použila plynová chromatografia v spojení s hmotnostnou spektrometriou.

*Autori d'akujú za podporu nadačného fondu AXA Nadačný fond v Nadácii Pontis za podporu v rámci programu Mladý inovátor.*

[1] Zichová S., Brisudová A., Hrouzková S.: *Acta Chim. Slov.* 11, 60 (2018).

### 1Po11

#### ŠTÚDIUM VYBRANÝCH PARAMETROV METÓDY LC-MS/MS NA DETEKCIU FENYLALANÍNU A TYROZÍNU

Martina Micháliková<sup>1</sup>, Martina Machková<sup>1,2</sup>, Svetlana Hrouzková<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav analytickej chémie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika, svetlana.hrouzkova@stuba.sk*

<sup>2</sup>*Skriningové centrum novorodencov SR, Detská fakultná nemocnica s poliklinikou Banská Bystrica, Námestie L. Svobodu 4, 974 09 Banská Bystrica, Slovenská republika*

Fenylketonúria (PKU) patrí medzi dedičné metabolické poruchy. V rámci metabolizmu sa pozornosť v súvislosti s PKU sústreďuje na premenu aminokyseliny fenylalanín (PHE) na tyrozín (TYR). Z dôvodu poruchy génov kódujúcich enzým fenylalanín hydroxyláza, pri PKU dochádza k poruche látkovej premeny PHE na TYR, dôsledkom čoho je patologicky zvýšená koncentrácia PHE a naopak znížená koncentrácia TYR v krvi. PKU je možné odhaliť analýzou suchej kvapky krvi novorodenca. Včasný záchyt poruchy skriningom umožní včasne zahájiť liečbu novorodenca, čím je možné významne zvýšiť kvalitu jeho života. V súčasnosti sa na skriningové analýzy vybraných aminokyselín (ako je PHE, TYR a ďalšie) využíva analytická metóda kvapalinovej chromatografie spojená s tandemovou hmotnostnou spektrometriou (LC-MS/MS).

V rámci experimentov sa zo vzorky suchej kvapky krvi vyštelil terčik, následne sa realizovala extrakcia a derivatizácia analytov. Na detekciu aminokyselín TYR a PHE sa použil hmotnostný spektrometer s trojitým kvadrupólovým analyzátorom. Cieľom práce bola optimalizácia pracovných podmienok analytickej metódy. Vybrali sa vhodné ióny na snímanie vybraných aminokyselín v hmotnostnej spektrometrii, optimalizovala sa hodnota napätia fragmentora a vhodnej kolíznej energie. Následne sa realizovala analýza reálnych vzoriek krvi pacientov s PKU a výsledky sa porovnali s výsledkami skriningovej metódy.

*Autori d'akujú za podporu nadačného fondu AXA Nadačný fond v Nadácii Pontis za podporu v rámci programu Mladý inovátor.*

### 1Po12

#### OCURRENCE OF UV STABILIZERS IN SEWAGE, SEAWATER AND MARINE SEDIMENTS FROM GRAN CANARIA (CANARY ISLANDS, SPAIN)

S. Montesdeoca-Esponda<sup>1</sup>, C. Álvarez-Raya<sup>1</sup>, M.E. Torres-Padrón<sup>1</sup>, Z. Sosa-Ferrera<sup>1</sup>, J.J. Santana-Rodríguez<sup>1</sup>

*Instituto Universitario de Estudios Ambientales y Recursos Naturales (i-UNAT), Universidad de Las Palmas de Gran Canaria, 35017, Las Palmas de Gran Canaria, Spain  
sarah.montesdeoca@ulpgc.es*

Occurrence of emerging compounds like pharmaceuticals and personal care products (PPCPs) represents a global concern regarding environmental pollution. Among PPCPs, benzotriazole ultraviolet stabilizers (BUVSs) is a family of compounds widely used in sunscreens and cosmetics to protect us against UV radiation. They can reach the marine environment through the sewage or directly via swimming or aquatic sports. Their presence in wastewater and marine ecosystems must be studied because they could be bioaccumulative, pseudo-persistent and toxic [1].

Different samples from Gran Canaria (Canary Islands, Spain) were monitored for two years: input and output samples from five wastewater treatment plants (WWTPs) and seawater and sediment samples from three marine areas influenced by sewage outfalls discharges from WWTPs, to quantify six BUVS compounds (UV-P, UV-326, UV-327, UV-328, UV-329 and UV-360). Previously optimised methods based on on-line solid-phase extraction [2] and microwave-assisted extraction [3] coupled with UHPLC-MS/MS were applied in liquid and solid samples, respectively. The target compounds were found in the 40% of sewage samples, 5% of coastal seawater and 17% of sediment samples, being more frequently detected in the most touristic sampling location of the island. However, the estimation of the hazard quotients revealed no risk at the measured concentrations levels.

[1] Zhang Z., Ren N., Li Y.F., Kunisue T., Gao D., Kannan, K.: *Environ. Sci. & Technol.* 45, 3909 (2011).

[2] Montesdeoca-Esponda S., Sosa-Ferrera Z., Santana-Rodríguez J.J.: *Anal. Bioanal. Chem.* 403, 867 (2012).

[3] Montesdeoca-Esponda S., Sosa-Ferrera Z., Santana-Rodríguez J.J.: *J. Sep. Sci.* 36, 781 (2013).

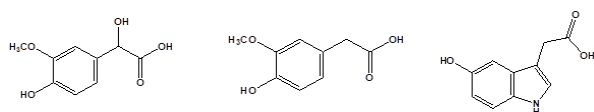
**1Po13****VYUŽITÍ AMPÉROMETRICKÝCH TECHNIK PŘI STANOVENÍ TUMOROVÝCH MARKERŮ: HOMO VANILOVÉ KYSELINY, VANILMANDLOVÉ KYSELINY A 5-HYDROXY-3-INDOLOCTOVÉ KYSELINY**

Anna Němečková-Makrlíková<sup>1,2</sup>, Vojtěch Hrdlička<sup>1,2</sup>, Jiří Barek<sup>2</sup>, Vlastimil Vyskočil<sup>2</sup>, Tomáš Navrátil<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, navratil@jh-inst.cas.cz

<sup>2</sup>Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2

Zvýšené či naopak snížené hladiny homovanilové kyseliny (HVA), vanilmandlové kyseliny (VMA) (konečných produktů metabolismu neurotransmiteru katecholaminu) a 5-hydroxy-3-indoloctové kyseliny (HIAA) (konečného produktu metabolismu neurotransmiteru serotoninu) v moči či v krevní plasmě mohou indikovat některá závažná onemocnění. Zvýšené hladiny lze zaznamenat např. u nádorů typu neuroblastomu, feochromocytomu a karcinoidu, snížené např. u schizofrenie, Parkinsonovy nemoci, autismu, Touretteova syndromu, posttraumatické stresové poruchy.



**Obř. 1.** Vanilmandlová kyselina (A), homovanilová kyselina (B) a 5-hydroxy-3-indoloctová kyselina (C).

Naše pozornost byla zaměřena především na vývoj metod elektrochemické detekce a stanovení těchto analytů. V příspěvku budou prezentovány výsledky několika směrů výzkumu: Stanovení analytů na tištěných uhlíkových elektrodách (SPCEs) za použití diferenční pulzní voltametrie vsádkovým způsobem (meze detekce (LODs) se pohybovaly v řádu desetin  $\mu\text{mol/L}$ ) [1]; pomocí průtokové injekční analýzy s ampérometrickou detekcí na SPCE (LODs v řádu setin  $\mu\text{mol/L}$ ) [2] a na borem dopovaných diamantových elektrodách (BDDEs) (LODs v řádu desetin  $\mu\text{mol/L}$ ), obojí ve wall-jet uspořádání; a pomocí HPLC za použití elektrody ze skelného uhlíku, resp. UV-detekce (LODs v řádu  $\mu\text{mol/L}$ ). Pozornost byla věnována jak stanovení jednotlivých analytů, tak i jejich směsi v modelových roztocích i v moči.

Dále jsme se zaměřili na separaci, akumulaci uvedených analytů pomocí tzv. dutých vláken nasycených vhodným rozpouštědlem (např. butyl benzoátem) a následně stanovení na BDDEs (dosažené LODs HVA a VMA v řádu  $\mu\text{mol/L}$ ) [3].

*Tato výzkum byl financován z prostředků grantového projektu GA ČR 17-03868S*

[1] Makrlíkova A., Ktena E., Economou A., Fischer J., Navrátil T., Barek J., Vyskočil V.: *Electroanalysis* 29, 146 (2017).

[2] Němečková-Makrlíkova A., Matysik F.-M., Navrátil T., Barek J., Vyskočil V.: *Electroanalysis* 31, 303 (2019).

[3] Hrdlička V., Navrátil T., Barek J.: *J. Electroanal. Chem.* 835, 130 (2019).

**1Po14****ANALÝZA GLYKÁNOV FIBRINOGENU, TRANSFERÍNU, ALFA-2-MAKROGLOBULÍNU A SÉR PACIENTOV S PERITONEÁLNOU DIALÝZOU POMOCOU LEKTÍNOVEJ MICROARRAY METÓDY**

Lucia Pažitná<sup>1</sup>, Zuzana Hřasová<sup>2</sup>, Goran Miljuš<sup>3</sup>, Dragana Robajac<sup>3</sup>, Miloš Šunderić<sup>3</sup>, Ana Penezić<sup>3</sup>, Nikola Gligorić<sup>3</sup>, Marko Baralić<sup>4</sup>, Olgica Nedić<sup>3</sup>, Jaroslav Katrlík<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovensko, pazitna.lucia@gmail.com

<sup>2</sup>Univerzita SV. Cyrila a Metoda, Oddelenie biotechnológie, Nám. J. Herdu 2, 917 01 Trnava, Slovensko

<sup>3</sup>Institute for the Application of Nuclear Energy (INEP), University of Belgrade, Banatska 31b, 11000 Belgrade, Serbia

<sup>4</sup>Clinic of Nephrology, Clinical Center of Serbia, Pasterova 2, 11000 Belgrade, Serbia

Glykány zohrávajú kľúčové metabolické, štruktúrne či fyziologické úlohy, vďaka ktorým je zabezpečený správny chod organizmu. Zmeny v glykánovom profile môžu byť spôsobené rôznymi faktormi, ako ochorenia, životný štýl, starnutie a iné. Tieto zmeny a ich detekcia sú použiteľné ako markery rôznych ochorení ako aj pre ich včasnú diagnostiku. Peritoneálna dialýza (PD) je proces odstránenia škodlivých látok z telových tekutín pomocou peritoneálnej membrány [1]. Komplikácie spojené s PD sa môžu prejavovať aj v zmene glykánového profilu

určitých proteínov [2]. V práci sme sa zamerali na analýzu glykánového profilu sér pacientov podstupujúcich PD a na analýzu vybraných glykoproteínov izolovaných z týchto sér, ktoré boli porovnávané so vzorkami zdravých kontrol. Pre tento účel sme použili proteínovú microarray metódu využívajúcu lektíny [3]. Vzorky boli nanášané na microarray substráty pomocou bezkontaktného spottera vo forme škvŕn (spotov) s objemom 1,5 nL. Takto pripravené vzorky boli inkubované s biotinylovanými lektínmi s rôznou špecificitou a následne značené fluorescenčnou značkou konjugovanou so streptavidínom. Zmeny v glykánovom profile môžu byť potenciálnymi biomarkermi využiteľnými pri skorej diagnostike PD pridružených sa komplikácií ako aj v ďalšom výskume. Nami vyvinutá a použitá metóda sa javí ako efektívna najmä pri rýchlej detekcii glykozylačných zmien u veľkého množstva vzoriek.

*Táto práca vznikla s podporou projektov APVV SK-SRB-2016-0023, APVV-17-0239; VEGA 2/0137/18, COST CA16113, COST CA18132.*

[1] Fischbach M., Warady B.A.: *Pediatric Nephrology* 9, 24 (2008).

[2] Ferrantelli E., Farhat K., Ederveen A.L.H., Reiding K.R., Beelen R.H., Ittersum F.J., Wuhler M., Dotz V.: *Sci. Rep.* 8, 979 (2018)

[3] Zámorová M., Holazová A., Miljuš G., Robajac D., Šunderić M., Malenković V., Đukanović B., Gemeiner P., Katrlík J., Nedić O.: *Anal. Methods*, 9, 2660 (2017).

### 1Po15

#### VYUŽITIE TECHNIKY DÁVKOVANIA JEMNEJ SUSPENZIE NA STANOVENIE KOVOV V ENVIRONMENTÁLNYCH A BIOLOGICKÝCH VZORKÁCH

Simona Procházková<sup>1</sup>, Katarína Kriegerová<sup>1</sup>, Radoslav Halko<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra analytickej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, [simona.prochazkova@uniba.sk](mailto:simona.prochazkova@uniba.sk)

V rámci chemickej analýzy sa stále väčšia pozornosť venuje vývoju tzv. „zelených“ analytických techník a metodík, ktoré v čo najväčšej možnej miere redukovujú alebo eliminujú ich negatívne vplyvy na životné prostredie a ľudské zdravie. V súčasnosti uvedené princípy spĺňa viacero úpravných analytických techník, a jednou z nich je aj technika dávkovania jemnej suspenzie (SS, Slurry Sampling), ktorá je založená na tvorbe suspenzie, t. j. na úprave tuhej vzorky na malé častice dispergované v kvapalnej fáze a jej následnom dávkovaní do vhodného analytického systému [1]. Technika SS predstavuje vhodný a atraktívny nástroj na úpravu a analýzu rôznych typov tuhých matric v spojení s viacerými technikami atómovej spektrometrie, hlavne z dôvodu zjednodušenia a zrýchlenia analýzy, zlepšenia presnosti a citlivosti stanovenia ako aj širokej aplikovateľnosti. Pre spomínanú techniku sú charakteristické minimálne nároky na úpravu vzorky a oproti iným technikám má niektoré špecifické výhody, ako napríklad zníženie rizika kontaminácie vzoriek po rozklade; eliminovanie problémov stanovenia stopových obsahov prvkov po veľkom zriedení; zníženie finančných nákladov nutných na rozklad vzorky a časová nenáročnosť analýz. Avšak na druhej strane pre dosiahnutie spoľahlivých výsledkov je však potrebné dôkladne zvážiť postup prípravy jemnej suspenzie a zabezpečiť jej účinnú homogenizáciu a stabilitu [2]. Práca sa zaoberá stanovením kovov v environmentálnych a biologických vzorkách využitím techniky SS najmä v kombinácii s atómovou absorpčnou spektrometriou s elektrotermickou atomizáciou (ETAAS), ako koncovou detekčnou metódou.

*Táto práca vznikla za finančnej podpory grantovej agentúry APVV projekt SK-KR-18-0009 a grantových agentúr MŠ SR VEGA grant č. 1/0678/19 a KEGA grant č. 069UK-4/19.*

[1] Ferreira S. L. C., Miró M., Da Silva E. G. P., Matos G. D., Dos Reis P. S., Brandao G. C., Dos Santos W. N. L., Duarte A. T., Vale M. G. R., Araujo R. G. O.: *Appl. Spectrosc. Rev.* 45, (2010).

[2] Butcher J. D.: *Appl. Spectrosc. Rev.* 52, 755 (2017).

### 1Po16

#### PACKED-COLUMN CAPILLARY ELECTROCHROMATOGRAPHY USING MULTIMODAL STATIONARY PHASE

Pavel Řezanka<sup>1</sup>, Ameneh Tatar<sup>1</sup>

<sup>1</sup>University of Chemistry and Technology in Prague, Technická 5, Prague 6, 166 28, [Pavel.Rezanka@vscht.cz](mailto:Pavel.Rezanka@vscht.cz)

In this work, several packed-column capillaries for capillary electrochromatography were prepared using different multimodal stationary phases. These stationary phases were prepared by Ugi four-component reaction [1] that demonstrates an attractive tool for stationary phase synthesis or modification, since products of this synthesis

exhibit structural motifs that allow the formation of multimodal stationary phase containing functionalized amides, and can be synthesized from easily available compounds.

The preparation procedure was based on the reaction of silica-gel functionalized by amino groups with different acids, aldehydes and isonitriles that react together *via* Ugi four-component reaction. Such prepared modified silica gels were used for the preparation of the packed-column capillaries.

Prepared capillaries were characterized in the term of the electroosmotic flow, number of the theoretical plates and the separation capability.

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

[1] Ugi I., Heck S.: *Comb. Chem. High Throughput Screen* 4, 1 (2001).

### 1Po17

#### SIMULTANEOUS VOLTAMMETRIC DETERMINATION OF URIC ACID AND CAFFEINE AT A BARE THICK FILM BORON-DOPED DIAMOND ELECTRODE

Alžbeta Benková<sup>1</sup>, Olha Sarakhman<sup>1</sup>, Ľubomír Švorc<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, Bratislava, SK-812 37, Slovak Republic, olha.sarakhman@stuba.sk*

Simultaneous determination of various analytes put forwards the advantages of being economical and less time consuming as more than one analyte can be detected easily on the sensor at the same time [1]. According to general knowledge, purine bases and their derivatives are involved in many metabolic processes as cofactors, playing key roles in biological fundamental process and functioning of living systems. Hence, the objective of the proposed contribution is (i) to introduce the new and sufficiently sensitive voltammetric strategy for mutual quantification of purine derivative - caffeine and a product of the metabolic breakdown of purine nucleotides - uric acid, (ii) to show possibilities for selective determination of one compound in the presence of the second one. In order to achieve these requirements, modern generation of prospective electrode material – thick film boron-doped diamond electrode (BDDE) was used without any chemical modifications [2, 3]. Besides, the portability of the minipotentiostat, the advantage of the presented method could also lie in its application in a real time monitoring in a required location. The influence of a spectrum of factors (supporting electrolyte, scan rate, operating parameters), assessment of analytical features and applicability to real sample analysis were demonstrated.

*This research was supported by the Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA No. 1/0489/16) and STU Grant Scheme for Support of Young Researchers.*

[1] Jadon N., Jain R., Sharma S., Singh K.: *Talanta* 161, 894 (2016).

[2] Sarakhman O., Pysarevska S., Dubenska L., Stanković D., Otrísal P., Planková A., Kianičková K., Švorc Ľ.: *J. Electrochem. Soc.* 166, B219 (2019).

[3] Švorc Ľ., Haššo M., Sarakhman O., Kianičková K., Stanković D., Otrísal P.: *Microchem. J.* 142, 297 (2018).

### 1Po18

#### STANOVENÍ CHOLESTEROLU A 7-DEHYDROCHOLESTEROLU V MLÉKU

Tomáš Sulovský<sup>1</sup>, Petr Barták<sup>1</sup>, Jana Nádvorníková<sup>1</sup>, Jana Skopalová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, jana.skopalova@upol.cz*

Pro potřeby rychlé kontrolní analýzy byla navržena metoda pro stanovení mastných kyselin a steroidních látek v mléku plynovou chromatografií s hmotnostně spektrometrickou detekcí. Metoda [1, 2] je založena na uvolnění lipofilních látek z homogenizovaného vzorku mléka působením methanolu a kyseliny chlorovodíkové a jejich extrakci hexanem. Izolovaná lipidová frakce byla podrobena alkalické methanolýze pro převedení esterově vázaných mastných kyselin na odpovídající methylestery. Methylestery a nezmýdelnitelné lipidy včetně cholesterolu a 7-dehydrocholesterolu byly izolovány a podrobeny silanizaci hexamethyldisilazanem. Takto zpracovaný vzorek byl použit jak pro stanovení mastných kyselin, tak pro stanovení cholesterolu a 7-dehydrocholesterolu. Pro stanovení mastných kyselin bylo navrženo dávkování vzorku s děličem toku, pro stanovení minoritních steroidních složek bylo využito dávkování s dávkovacím pulsem. Takto bylo možno vedle sebe stanovit látky v širokém koncentračním rozmezí od desítek mg/ml (mastné kyseliny) do desetin až setin µg/ml (7-dehydrocholesterol).

*Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (projekt 19-11268S) a Univerzity Palackého v Olomouci (projekt IGA\_PrF\_2019\_028).*

- [1] Bertolín J.R., Joy M., Rufino-Moya P.J., Lobón S., Blanco M.: *Food Chem.* 257, 182 (2018).  
 [2] Grace M.L., Bernhard R.A.: *J. Dairy Sci.* 67, 1648 (1984).

**1Po19**

**NANO-ETCHED FS CAPILLARY FOR CONCENTRATION, SEPARATION AND DETECTION OF *ASPERGILLUS* CONIDIA WITH OFF-LINE MATRIX-ASSISTED LASER DESORPTION/IONIZATION TIME-OF-FLIGHT MASS SPECTROMETRY CHARACTERIZATION**

J. Šalplachta<sup>1</sup>, M. Horká<sup>1</sup>, P. Karásek<sup>1</sup>, F. Růžicka<sup>2</sup>, M. Roth<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Analytical Chemistry of the CAS, v. v. i., Veveří 97, 602 00 Brno, Czech Republic, salplachta@iach.cz*

<sup>2</sup>*Department of Microbiology, Faculty of Medicine, Masaryk University, Kamenice 53/5, 625 00 Brno, Czech Republic*

*Aspergillus* species are the most common and widely distributed fungi. They produce airborne spores which, when inhaled, can lead to the infection in immunocompromised patients. Infections caused by *Aspergillus* spp. are associated with high mortality if the disease is not treated. Therefore, timely and reliable identification of an etiological agent is crucial for successful therapy. Currently, diagnosis of *Aspergillus* infections relies on combination of radiological data, microbiological methods, and histopathologic examination. However, these diagnostic methods are not specific and sensitive enough and are time-consuming.

The aim of this study was to develop a method for on-line concentration of *Aspergillus* spp. conidia after their dynamic adhesion onto the roughened part of fused silica capillary (prepared by etching of the inner capillary surface with supercritical water), using combination of transient isotachopheresis and micellar electrokinetic chromatography and subsequent off-line identification of the separated conidia using matrix-assisted laser desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry. Conidia of four *Aspergillus* spp., *A. niger*, *A. fumigatus*, *A. flavus*, and *A. parasiticus*, were selected for this work. Since the lung is primary site of the infection, bronchoalveolar lavage fluid was chosen as an optimal specimen for diagnosis of *Aspergillus* infection.

*This work was supported by the Ministry of Health of the Czech Republic (Grant No. 16-29916A), Ministry of the Interior of the Czech Republic (Grant VI20172020069) and by the Czech Academy of Sciences (Institutional Support RVO:68081715).*

**1Po20**

**VYUŽITÍ DEPOZICE STŘÍBRNÉHO AMALGAMU NA POVRCHU PYROLITICKÉ GRAFITOVÉ ELEKTRODY V ANALÝZE PROTEINŮ**

Peter Šebest<sup>1</sup>, Veronika Ostatná<sup>1</sup>, Miroslav Fojta<sup>1</sup>, Aleš Daňhel

<sup>1</sup>*Biofyzikální ústav, Akademie věd České republiky, v.v.i., Královopolská 135, 612 65 Brno, Česká republika  
 e-mail: besta@ibp.cz*

Rtuť představuje jedinečný elektroodový materiál s vlastnostmi jako je vodivost, ideálně hladký povrch, vysoké přepětí vodíku. Díky těmto vlastnostem našla rtuťová elektroda uplatnění v elektroanalýze širokého spektra látek (proteiny, enzymy, nukleové kyseliny, chemické karcinogeny...) [1,2]. Nízká mechanická stabilita brání jejímu využití jako nanobiosenzoru. Stříbrný amalgám [3] představuje vhodný alternativní elektroodový materiál ke rtuťi s elektrochemickými vlastnostmi velmi podobnými rtuťové elektrodě.

Elektroda z pyrolitického grafitu byla použita jako vodivý povrch pro elektrochemickou depozici amalgamových částic. Proces elektrodepozice byl optimalizován, testován na modelové nitrosloučenině a použit v analýze DNA a proteinů za pomoci rozpouštěcí chronopotenciometrie s konstantním proudem.

Kontrolované vylučování stříbrných amalgamových částic na povrch pyrolitického grafitu z elektrolytu obsahujícího ionty Ag<sup>+</sup> a Hg<sup>2+</sup> se zdá být vhodnou metodou k přípravě nanostrukturovaných materiálů k elektrochemické detekci biomolekul v katodické potenciálové oblasti.

*Tato práce vznikla za finanční podpory Grantové agentury České republiky (projekt 17-23634Y) a projektu SYMBIT registrační číslo CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000477 financován z ERDF.*

- [1] M. Fojta, F. Jelen, L. Havran, E. Palecek, Electrochemical stripping techniques in analysis of nucleic acids and their constituents, *Curr. Anal. Chem.*, 4 (2008) 250-262.  
 [2] E. Palecek, M. Trefulka, Electrocatalytic detection of polysaccharides at picomolar concentrations, *Analyst*, 136 (2011) 321-326.

[3] A. Danhel, J. Berek, Solid amalgam electrodes in organic electrochemistry, *Curr. Org. Chem.*, 15 (2011).

### 1Po21

## VYUŽITÍ DTNA PRO STANOVENÍ AKTIVITY ACETYLCHOLINESTERÁZY V KRVI

Šárka Štěpánková<sup>1</sup>, Katarína Vorčáková<sup>1</sup>, Karolína Sejkorová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Katedra biologických a biochemických věd, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice*

Acetylcholinesteráza (AChE) je enzym, který hydrolyzuje neurotransmitter acetylcholin. Zvýšená aktivita tohoto enzymu může způsobovat poruchy v přenosu signálu v cholinergním nervovém systému a je pravděpodobně jednou z příčin rozvoje Alzheimerovy choroby [1].

Pro stanovení aktivity AChE se obvykle používá spektrofotometrická Ellmanova metoda, která využívá 5,5'-dithio-bis-2-nitrobenzoovou kyselinu (DTNB). Nevýhoda této metody při stanovení aktivity AChE v krvi spočívá v tom, že absorpční maximum barevného produktu Ellmanovy reakce se překrývá se Soretovým pásem hemoglobinu [2] a vzorek je tedy potřeba více ředit. Použití jiného chromogenu umožňujícího detekci např. v UV oblasti může zvýšit citlivost stanovení.

Cílem této práce bylo nalezení vhodných reakčních podmínek pro spektrofotometrické stanovení aktivity acetylcholinesterázy v krvi. Byly testovány různé koncentrace substrátu a množství erytrocytů. Jako chromogen byla použita 6,6'-dithiodinikotinová kyselina (DTNA), absorbance reakčního produktu byla měřena při vlnové délce 340 nm [3] a nedocházelo tedy k interferenci s hemoglobinem. Získané výsledky byly porovnány s výsledky získanými při použití DTNB jako chromogenu.

Bylo prokázáno, že použití DTNA je vhodné pro stanovení aktivity AChE v krvi a že na rozdíl od DTNB je možné použít i koncentrovanější vzorek.

[1] Soreq H., Seidman S.: *Nat Rev Neurosci.*, 2, 294 (2001).

[2] Worek F., Mast U., Kiderlen D., Diepold C., Walther P.E.: *Clin Chim Acta*, 288, 73 (1999).

[3] Jiménez-Díaz M., Martínez-Monge V.: *Rev. Biomédica*, 11, 131 (2000).



## POSTERY - SEKCIA 2: FYZIKÁLNA CHÉMIA

### 2Po01

#### ANTIOXIDANT ACTIVITY OF KERATIN HYDROLYSATES IN POLYETHYLENE GLYCOL STUDIED BY NONISOTHERMAL DSC

Zuzana Cibulková<sup>1</sup>, Anna Vykydalová<sup>1</sup>, Peter Šimon<sup>1</sup>, Tibor Dubaj<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Bratislava, Slovakia, [zuzana.cibulkova@stuba.sk](mailto:zuzana.cibulkova@stuba.sk)*

The influence of several keratin hydrolysates on thermooxidative stability of polyethylene glycol (PEG) matrix has been studied by differential scanning calorimetry (DSC) under non-isothermal conditions. Thermooxidation of materials is a process exhibiting an induction period (IP), i.e. the stage where seemingly no chemical reaction takes place. At the end of IP the oxidation of the material begins and is connected with a sudden change of its properties. Therefore is the length of IP frequently taken as a measure of material stability [1]. In [1,2] an integral isoconversional method for obtaining the kinetic parameters of induction periods from the onset oxidation temperatures of nonisothermal DSC runs with linear increase of temperature is proposed. The kinetic parameters enable to calculate the lengths of IPs for any temperature. In order to characterize the antioxidant effect of individual keratin hydrolysates, protection factors were calculated as a ratio of the induction periods of stabilized and non-stabilized PEG. From the values of the protection factors antioxidant effectiveness were calculated to compare the antioxidant effects of individual keratin hydrolysates. The determination of these two criteria allows reliably quantify the antioxidant effect of any additive in any matrix.

*Financial support from the Slovak Research and Development Agency (APVV-15-0124) is gratefully acknowledged.*

[1] Šimon P, Kolman E.: *J Therm Anal Calorim.* 64, 813 (2001).

[2] Šimon P.: *J Therm Anal Calorim.* 84, 263 (2006).

### 2Po02

#### BENCHMARKING THE ISOCONVERSIONAL METHODS: HOW GOOD IS GOOD ENOUGH?

Tibor Dubaj<sup>1</sup>, Peter Šimon<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Bratislava, Slovakia, [tibor.dubaj@stuba.sk](mailto:tibor.dubaj@stuba.sk)*

The isoconversional methods were introduced and extensively developed about 60 years ago. They are routinely used for kinetic analysis of thermally stimulated processes. All the methods employ the general rate equation as the starting point; however, the newer methods tend to be more laborious, mainly due the advance in computing abilities.

It is interesting that determination of kinetic parameters is perceived as the goal of kinetic analysis and the choice of evaluation method is often subject to broad discussions. In this work, we demonstrate that, among the integral methods, there is barely any improvement beyond the simple linear Kissinger–Akahira–Sunose method; the differences between the advanced methods are within the experimental noise. Similar results were obtained in the case of incremental methods where even the simplest conceivable method performed surprisingly good.

Thus, in real-life applications one should not be worried about the application of any of these methods as the differences between them are insignificant. On the other hand, attention should be paid to interpretation of the kinetic parameters and their application in modelling of isothermal conversion curves which have practical significance in prediction of crystallization time, oxidation induction time, material lifetime, etc.

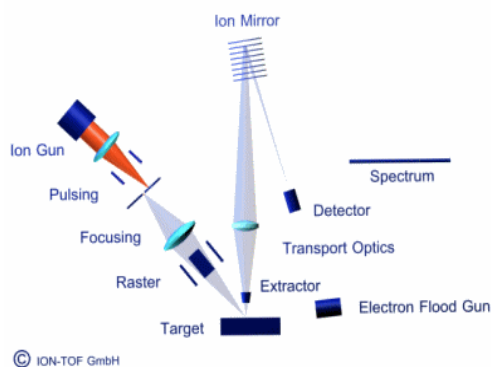
*Financial support from the Slovak Research and Development Agency (APVV-15-0124) is gratefully acknowledged.*

**2Po03****PHOTOSWITCHING BEHAVIOUR OF HETEROCYCLIC IMINES: THEORETICAL, NMR AND EPR STUDY**Michal Hricovíni<sup>1</sup>, James Asher<sup>2</sup>, Olga L. Malkina<sup>2</sup>, Miloš Hricovíni<sup>1</sup><sup>1</sup> *Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovakia, milos.hricovini@savba.sk*<sup>2</sup> *Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovakia*

There are many light-induced processes associated with Schiff bases and their biologically-active derivatives [1]. Photochemical processes in a quinazolinone-based Schiff base have been studied by means of EPR and NMR spectroscopy and DFT calculations [2]. The EPR data have proven that radical intermediates are generated by UV/vis irradiation in DMSO under atmospheric conditions. Use of spin-trapping techniques, interpreted using simulation of the EPR spectra, resulted in the presence of multiple spin adducts in the system. The analysis of 1D and 2D NMR spectra confirmed the formation of the *syn*-isomer due to rotation around the N–N bond in the –N–N=CH– array. The isomerization process took about 10 min and thermodynamic equilibrium was re-established within a few minutes. DFT calculations allowed detailed analysis of the molecular structure, the energy profiles, and the excited states. The theoretical results were afterwards compared with the data obtained on a small model system containing the same –N–N=CH array. The computed data indicated that the isomerization processes proceeded *via* the S1 excited states.

[1] Vuković, L., Burmeister, C. F., Král, P., Groenhof, G. J. *Phys. Chem. Lett.* 4, 1005 (2013).[2] Hricovíni, M., Hricovíni, M. *Tetrahedron* 73, 252 (2017).**2Po04****HMOTNOSTNÁ SPEKTROMETRIA SEKUNDÁRNYCH IÓNOV: POROVNANIE METEORITU A VULKANITU**Karína Kulpová<sup>1</sup>, Justína Nováková<sup>1</sup>, Dušan Velič<sup>1,2</sup>, Monika Jerigová<sup>1,2</sup><sup>1</sup> *Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičová 6, 842 15, Slovenská republika; k.kulpova@azet.sk*<sup>2</sup> *Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava*

Cieľom práce bola chemická a izotopická charakterizácia vzorky meteoritu v porovnaní s vulkanickou horninou pomocou hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov (SIMS). Princípom SIMS je iónové odprašovanie povrchu vzorky primárnymi iónmi. Primárny ión prenáša svoju kinetickú energiu na častice, s ktorými sa zrazí, čím dochádza k vzniku kolíznej kaskády, ktorej výsledkom je emisia sekundárnych iónov. Vzorky boli v hmotnostnom spektrometri sekundárnych iónov bombardované bizmutovými primárnymi iónmi Bi<sup>+</sup> s prúdom 1 pA. Z dôvodu nevodivosti vzoriek bolo nutné kompenzovať náboj pomocou elektrónového neutralizačného dela. Skúmanými objektmi boli mimozemské vzorky; vnútro meteoritu Košice, jeho fúzna vrstva a vulkanická hornina zo sopky Mauna Loa. V nameraných spektrách v pozitívnej aj v negatívnej polarite bolo identifikované chemické zloženie jednotlivých vzoriek a následne zostrojené tabuľky intenzít pre vybrané fragmenty a izotopy prvkov. Zistili sa izotopové rozdiely pre <sup>28</sup>Si, <sup>29</sup>Si a <sup>30</sup>Si medzi vulkanickým kameňom pozemského pôvodu a Košickým meteoritom. Na základe získaných poznatkov je možné potvrdiť, že hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov je vhodná metóda na analýzu meteoritických vzoriek.

**Obr. 1.** Schéma TOF-SIMS.[1] Aranyosiová M.: *ChemZi* 2 (2), 52 (2006).[2] Frank L., Král J.: *Metody analýzy povrchů, Iontové sondové a speciální metody*, 147-151 (2002).

[3] McSween H., Huss G.: *Cosmochemistry*, 1-100 (2010).

## 2Po05

### EPR STUDY OF POLYMER PROTECTIVE COATINGS FOR DEPLETED URANIUM COMPONENTS

Miroslava Lukešová<sup>1</sup>, Volodymyr Lobaz<sup>1</sup>, Jiří Pánek<sup>1</sup>, Zdeňka Sedláková<sup>1</sup>, Peter Černocho<sup>1</sup>, Miroslava Dušková<sup>1</sup>, Martin Hrubý<sup>1</sup>, Tomáš Chmela<sup>2</sup>, Pavel Krupička<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Macromolecular Chemistry AS CR, Heyrovského nám. 1888/2, 162 06 Prague 6, Czech Republic, panek@imc.cas.cz*

<sup>2</sup>*UJP PRAHA a.s., Nad Kamínkou 1345, 156 10 Prague 5, Czech Republic.*

Depleted uranium is still an indispensable material in numerous areas, from healthcare to arms industry; however its range of applications is limited by its high reactivity and susceptibility to corrosion. The current state of the art for the anticorrosion protection of depleted uranium stands on expensive procedures such as alloying with up to 20% of molybdenum or encapsulation in aluminum or steel containers. This project aims the reduction of the production costs and simplification of the technology for production and processing of depleted uranium based materials. Within current study we developed coatings for anticorrosion protection of depleted uranium stored for further reprocessing or already used in various radiation shielding applications.

For lower radiation doses, up to 100 kGy, the coatings are based on polymer materials, either from poly(2-butyl-2-oxazoline), poly(2-phenyl-2-oxazoline), series of polyesters, or as two-component curable systems: polyurethanes based on isophorone diisocyanate with Krasol<sup>®</sup> or polycarbonate. The coatings were reinforced with inorganic fillers (e.g. modified graphene) to prevent the diffusion of water vapor and oxygen and stabilized with hindered amines, BHT or Tinuvin 123 for radical scavenging.

*The authors Thank to the Ministry of Industry and Trade of the Czech Republic (grant # FV10164) for financial support.*

## 2Po06

### VZNIK TERAHERTZOVÉHO ŽIARENIA V OPTICKY NELINEÁRNYCH VLÁKNACH Z CYKLICKÝCH OLEFÍNOCH

Eva Noskovičová<sup>1,2</sup>, Dušan Lorenc<sup>1,2</sup>, Dušan Velič<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>*Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 814 04 Bratislava, velic@ilc.sk*

<sup>2</sup>*Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava*

Nelineárne optické javy sú v súčasnosti dôležitým prvkom mnohých aplikácií. Jednou z možností využitia nelineárnych optických javov je príprava terahertzového žiarenia pomocou štvorvlnového zmiešavania vo vlákne. [1] V práci bolo navrhnuté vhodné vlákno z plastu ZEONEX na báze cyklického olefinu [2,3] pre štvorvlnové zmiešavanie. Cyklickým olefinom s označením TOPAS, ZEONEX a ZEONOR bola spektroskopicky zistená dobrá priepustnosť vo viditeľnej, blízkej infračervenej a terahertzovej spektrálnej oblasti. V terahertzovej oblasti bol nameraný aj index lomu s hodnotou približne 1.55. Tiež bolo zistené, že cyklické olefiny predstavujú dobré nelineárne prostredie pretože im bola stanovená pomerne vysoká hodnota nelineárneho indexu lomu približne na  $2 \times 10^{-20} \text{ m}^2/\text{W}$  pri vlnovej dĺžke 800 nm, pomocou metódy Z-scan. V nami navrhnutom vlákne z cyklického olefinu ZEONEX pravdepodobne nastane štvorvlnové zmiešavanie prostredníctvom dvoch rôznych mechanizmov, pri použití vstupných vlnových dĺžok 780 nm a 1560 nm. Jedným podporujúcim vznik terahertzového žiarenia a druhým potlačajúcim.

[1] Reimann K.: *Rep. Prog. Phys.* 70, 1597 (2007).

[2] Ung B., Mazhorova A., Dupuis A., Rozé M., Skorobogaty M.: *Opt. Express.* 19, B848 (2011).

[3] Beckers M., Schlüter T., Vad T., Gries T., Bunge C. A.: *Polym. Int.* 64, 25-36 (2015).

## 2Po07

### ADSORPCE MĚDNATÝCH IONTŮ NA OXIDOVANÝCH UHLÍKATÝCH MATERIÁLECH

Alžběta Parchaňská<sup>1</sup>, Gabriela Hotová<sup>1</sup>, Václav Slovák<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, Česká republika Alzbeta.Parchanska@osu.cz*

Znečištění povrchové i podzemní vody ionty těžkých kovů (Pb<sup>2+</sup>, Cd<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup>) představuje závažný problém kvůli toxicitě těchto iontů pro mnohé živé organismy a kvůli tendenci těchto iontů k akumulaci v životním prostředí. Pro odstranění těchto iontů z vody byly vyvinuty techniky založené na různých fyzikálně-chemických resp.

biologických procesech [1]. Jedním z fyzikálně-chemických procesů je adsorpce. Techniky založené na adsorpci mají oproti ostatním výhodu v možnosti odstranit i ionty přítomné v nízkých koncentracích. Často používaným adsorbentem je aktivní uhlí, které však nemá dostatečnou adsorpční schopnost.

Zvýšení adsorpční schopnosti lze dosáhnout částečnou oxidací uhlíkatých adsorbentů, při níž jsou na povrch adsorbentů zavedeny kyslíkaté funkční skupiny (karboxylové skupiny, resp. jejich funkční deriváty).

Cílem práce bylo porovnat adsorpční schopnost uhlíkatých adsorbentů s různým stupněm oxidace pro adsorpci měďnatých iontů ( $\text{Cu}^{2+}$ ) z vodného roztoku. Bylo zjištěno, že oxidované uhlíkaté adsorbenty vykazují stejnou adsorpční schopnost, která nezávisí na míře oxidace. Charakterizace funkčních skupin na povrchu uhlíkatých adsorbentů a související popis mechanismu sorpce  $\text{Cu}^{2+}$  byly provedeny na základě infračervených spekter naměřených před a po sorpci  $\text{Cu}^{2+}$ . Přítomnost karboxylových skupin, zjištěna v předchozích studiích pomocí teplotně programované desorpce [2], byla potvrzena, stejně jako hypotéza o jejich interakci s  $\text{Cu}^{2+}$ .

*Děkuji prof. Dr. RNDr. Pavlu Matějкови za pomoc při interpretaci infračervených spekter.*

[1] F. Fu, Q. Wang: *J. Environ. Manage.* 92, 407 (2011).

[2] G. Hotová, V. Slovák, O. S. G. P. Soares, J. L. Figueredo, M. F. R. Pereira: *Carbon* 134, 255 (2018)

## 2Po08

### NEKATALYZOVANÝ BROMIČNANOVÝ OSCILÁTOR S ANILÍNOM AKO SUBSTRÁTOM

Marek Pribus<sup>1</sup>, Jaroslav Blaško<sup>2</sup>, Juraj Filo<sup>2</sup>, Ivan Valent<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, marek.pribus@gmail.com*

<sup>2</sup>*Chemický ústav univerzity Komenského, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava*

Oxidácia anilínu patrí medzi komplexné procesy, ktorých chémia je mimoriadne bohatá. V závislosti od oxidačného činidla pôsobiaceho na anilín a reakčných podmienok, môže jeho oxidácia viesť k vzniku veľkého množstva rôznych produktov. Veľmi zaujímavým príkladom oxidácie anilínu je jeho reakcia s bromičnanovými aniónmi prebiehajúca v kyslom prostredí. Ak sa vhodne zvolia počiatkové koncentrácie reaktantov a teplota, pri ktorej reakcia prebieha, môžeme v systéme pozorovať chemické oscilácie. Anilín patrí spolu s fenolom k prvým objaveným substrátom vhodných pre nekatalyzovaný bromičnanový oscilátor [1, 2].

Samotná oxidácia anilínu je často komplikovaná konkurenčnými reakciami nezreagovaného anilínu s jeho oxidačnými produktmi, ako sú napríklad chinóny a iminochinóny. Mechanizmus oxidácie a kondenzačných, prípadne polymerizačných reakcií anilínu nie je dodnes celkom objasnený. Súčasný výskum týchto reakcií je motivovaný najmä vývojom farbív a vodivých polymérov na báze anilínu.

V práci sme sa zamerali na separáciu a identifikáciu medziproduktov a produktov oscilačnej reakcie anilínu s bromičnanovými aniónmi prebiehajúcu v kyslom prostredí. Na oddelenie jednotlivých zložiek reakčnej zmesi sme použili plynovú chromatografiu s hmotnostným spektrometrom ako detektorom. Doplnkovou metódou použitou na identifikáciu látok bola spektroskopia nukleárnej magnetickej rezonancie.

Na základe získaných experimentálnych výsledkov sa pokúsime navrhnúť mechanizmus tejto komplexnej chemickej reakcie.

*Táto práca vznikla za podpory grantu Univerzity Komenského UK/10/2018.*

[1] Orbán M., Körös E.: *J. Phys. Chem.*, 82, 14 (1978).

[2] Orbán M., Körös E.: *React. Kinet. Catal. Lett.*, 8, 2 (1978).

## 2Po09

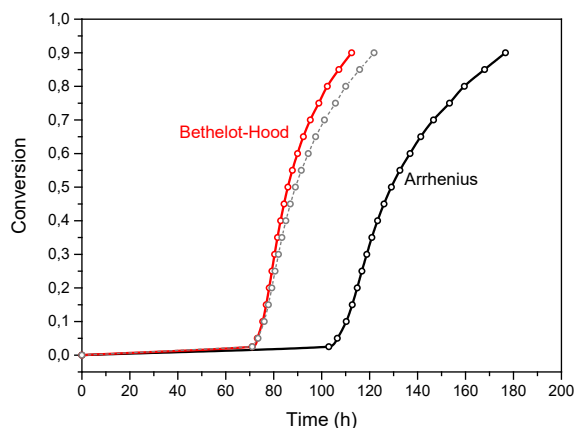
### PREDICTIONS OF THERMAL AND THERMOOXIDATIVE STABILITIES OF MATERIALS

Peter Šimon<sup>1</sup>, Tibor Dubaj<sup>1</sup>, Zuzana Cibulková<sup>1</sup>, Anna Vykydalová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, peter.simon@stuba.sk*

Thermoanalytical methods, such as DSC, DTA, TG and chemiluminescence are highly suitable for the determination of thermal and thermooxidative stability of materials [1]. The stability can be assessed from the length of induction period (IP) which is a stage where seemingly no reaction is observed by the technique applied. At the end (or close to the end) of IP, sudden change of material properties takes place, mostly deterioration, so that the IP is often considered a measure of material stability [1].

The rate of degradation processes under application conditions is usually too slow to be measured. To estimate the stability of materials, a sample is mostly subjected to an accelerated test under standardized conditions where heating is the most common means of accelerating the oxidation. The principal goal of stability studies is to extrapolate the kinetic data, obtained from accelerated stability tests, to the application conditions. The prediction of long-term durability by extrapolation of high-temperature accelerated tests is a very difficult task since many fundamental scientific problems in this field remain unsolved. The extrapolation to lower temperatures is almost exclusively carried out using the Arrhenius temperature function; however, indications are accumulating that the material degradation does not obey the Arrhenius kinetics [2]. As seen from Fig.1, an estimation corresponding much better with reality provides the Berthelot-Hood extrapolation.



**Obr. 1.** Berthelot-Hood and Arrhenian extrapolation of the ambuphylline decomposition to 25 °C.

*Financial support from the Slovak Research and Development Agency (APVV-15-0124) and from the Structural Funds of EU, OP R&D by implementation of the project “University Science Park of STU Bratislava” (ITMS 26240220084) is greatly acknowledged.*

[1] P. Šimon, J. Therm. Anal. Calorim., 84 (2006) 263

[2] P. Šimon, D. Hynek, M. Malíková, Z. Cibulková, J. Therm. Anal. Calorim., 93 (2008) 817

## 2Po10

### VISKOELASTICKÉ A TRIBOLOGICKÉ VLASTNOSTI NOVÉHO MATERIÁLU NA BÁZI HYALURONANU PRO VISKOSUPPLEMENTACI SYNOVIÁLNÍ TEKUTINY

Evgeniy Toropitsyn<sup>1,2</sup>, Martin Pravda<sup>1</sup>, David Rebenda<sup>3</sup>, Vladimír Velebný<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Contipro a.s., Dolní Dobrouč 401, 56102 Dolní Dobrouč, Evgeniy.Toropitsyn@contipro.com

<sup>2</sup>1. lékařská fakulta Univerzity Karlovy, Kateřinská 1660/32, 121 08 Praha 2

<sup>3</sup>Fakulta strojního inženýrství Vysoké učení technické v Brně, Technická 2896/2, 616 69 Brno

Osteoartróza je nejčastější příčinou postižení u starších osob. Celosvětově se odhaduje, že 9,6% mužů a 18,0% žen starších 60 let trpí osteoartrózou. [1]. Toto onemocnění je spojeno s poklesem molekulové hmotnosti a koncentrace hyaluronanu v synoviální tekutině, která hraje důležitou funkci v lubrikaci povrchu kloubů (tribologické vlastnosti) a tlumení nárazu (viskoelastické vlastnosti) [2, 3]. Intraartikulární aplikací materiálů na bázi exogenního hyaluronanu lze docílit obnovení viskoelastických a tribologických vlastností synoviální tekutiny. Nový materiál pro viskosupplementaci synoviální tekutiny byl připraven smícháním roztoků kyseliny hyaluronové, chondroitin sulfátu a hydrogelu na bázi enzymaticky zesítěného tyraminovaného derivátu hyaluronanu. Měření viskoelastických vlastností bylo provedeno pomocí reometru v režimu oscilace, kdy byla sledována závislost elastického a viskózního modulu na frekvenci. Měření tribologických vlastností probíhalo formou recipročního testu na tribometru v konfiguraci pin-on-plate, kdy výsledkem analýzy byly hodnoty součinitele tření mezi stacionární destičkou a pohybujičím se kolíkem.

Naměřené výsledky viskoelastických vlastností ukazují na přímou závislost mezi elastickým modulem a molekulovou hmotností hyaluronanu, přičemž tato závislost nebyla pozorována při stanovení koeficientu tření. Nový materiál pro viskosupplementaci synoviální tekutiny vykazuje vysoký elastický modul, srovnatelný s roztokem hyaluronanu o koncentraci 20 mg/ml a molekulové hmotnosti 2 MDa a zároveň nízký koeficient tření po smíchání s modelovou synoviální tekutinou.

*Tímto bych chtěl vyjádřit poděkování Davidu Rebendovi z Ústavu konstruování VUT za provedení experimentů stanovení tribologických vlastností materiálů a skupině Tkáňového inženýrství společnosti Contipro a.s.*

- [1] Wittenauer, R.; Smith, L.; Aden, K., Background Paper 6.12 Osteoarthritis. In *Priority Medicines for Europe and the World "A Public Health Approach to Innovation"*, WHO: 2013.
- [2] Hui, A. Y.; McCarty, W. J.; Masuda, K.; Firestein, G. S.; Sah, R. L., A systems biology approach to synovial joint lubrication in health, injury, and disease. *Wiley interdisciplinary reviews. Systems biology and medicine* 2012, 4 (1), 15-37.
- [3] Balazs, E., The physical properties of synovial fluid and the specific role of hyaluronic acid. *Disorders of the Knee* 1974, 63 - 75.

**2Po11**

**STRUCTURE AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF NOVEL MIXED COPPER (II) COMPLEXES WITH NON-STEROIDAL ANTI-INFLAMMATORY DRUGS TOLFENAMIC, MEFENAMIC AND FLUFENAMIC ACIDS AND PHENANTHROLINE**

Miriama Simunkova<sup>a</sup>, Peter Lauro<sup>b</sup>, Klaudia Jomova<sup>b</sup>, Lenka Hudecova<sup>b</sup>, Martin Danko<sup>c</sup>, Simona Rajcaniova<sup>d</sup>, Zuzana Kozovska<sup>d</sup>, Lucia Kucerova<sup>d</sup>, Jan Moncol<sup>e</sup>, Lubomir Svorc<sup>f</sup>, Marian Valko<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava, Slovakia

<sup>b</sup> Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Constantine the Philosopher University, 949 74 Nitra, Slovakia

<sup>c</sup> Polymer Institute SAS, Dubravská cesta 9, 845 05 Bratislava, Slovakia

<sup>d</sup> Laboratory of Molecular Oncology, Cancer Research Institute of Biomedical Research Centre SAS, Dubravská cesta 9, 845 05 Bratislava, Slovakia

<sup>e</sup> Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava, Slovakia

<sup>f</sup> Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava, Slovakia

Copper (II) complexes containing non-steroidal anti-inflammatory drugs (NSAID) have been the subject of many research papers and reviews. In the present work, we report the synthesis, spectroscopic study and biological activity of novel mixed copper(II) complexes with NSAIDs: tolfenamic (toIf), mefenamic (mef) and flufenamic (fluf) acids and phenanthroline (phen), [Cu(toIf-O,O')<sub>2</sub>(phen)] (**1**), [Cu(mef-O,O')<sub>2</sub>(phen)] (**2**), [Cu(fluf-O,O')<sub>2</sub>(phen)] (**3**). X-ray analysis revealed that complexes **1-3** are monomeric and crystallize in a monoclinic space group. All complexes are six-coordinate, and form a distorted octahedral geometry around the copper atom. EPR measurements in the solid state and in DMSO solution are in agreement with the X-ray study. Biological studies revealed, that the most promising compound, from the viewpoint of its NSAID biological activity is complex **3**, due to the presence of the three fluorine atoms, which participate in weak hydrogen-bonds with H-atoms at the DNA surface.

**2Po12**

**SPEKTROSKOPIA ORGANICKO-ANORGANICKÝCH PEROVSKITOVÝCH ŠTRUKTÚR PRE FOTOVOLTICKÉ ČLÁNKY**

Tatiana Vojteková<sup>1</sup>, Eva Noskovičová<sup>1</sup>, Dušan Lorenc<sup>1,2</sup>, Dušan Velič<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičová 6, 842 15, Slovenská republika; tatiana.vojtekova@gmail.com

<sup>2</sup>Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava

Cieľom práce je pripraviť perovskitovú štruktúru z prekursorov a následne pomocou infračervenej (FT-IR), viditeľnej (UV-VIS) a terahertzovej (THz-TDS) spektroskopie pozorovať štruktúru a vlastnosti nasyntetizovanej látky. Organické, halogénové perovskity sa skladajú z organického kationu CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub><sup>+</sup>, anorganického kationu Pb<sub>2</sub><sup>+</sup>, Sn<sub>2</sub><sup>+</sup> a halogenidového aniónu I<sup>-</sup>, Cl<sup>-</sup>, Br<sup>-</sup>. Najznámejší typ je CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>. Príprava perovskitov sa uskutočňuje jedнокrokovou metódou v inertnej dusíkovej atmosfére. Pre potvrdenie perovskitovej štruktúry sú určené charakteristické vibračné módy pomocou FT-IR. V UV-VIS spektre je preukázaná absorpcia svetla v blízkej UV oblasti perovskitovým filmom s maximom absorpcie pri 375 nm. Priepustnosť perovskitu v terahertzovej oblasti je meraná terahertzovou spektroskopiou v časovej doméne. Na generáciu THz žiarenia je použitá plazma, ktorá sa vytvára v ohnisku fokusovaného laserového lúča. Žiarenie výstupného lúča lasera (800nm) interaguje s jeho žiarením generovaným v nelineárnom kryštáli, s tzv. druhou harmonickou frekvenciou s vlnovou dĺžkou 400 nm pri ich fázovom posune, pričom dochádza k vzniku terahertzového žiarenia. V THz-TDS spektrách je detekovaná vysoká absorpcia terahertzového žiarenia vzorkou perovskitu, čo poskytuje informáciu o dielektrických vlastnostiach a o zmene indexu lomu perovskitu voči referencii.

- [1] Mitzi, D. B., Feild C. A., Harrison W. T. A. et al. (1994) *Nature* 369, p. 467  
 [2] Li C., Lu X., Ding W. et al. (2008) *Acta Crystallogr. B* 64, p. 702  
 [3] Yin W. J., Yang J. H., Kang J. et al. (2015) *J. Mater Chem. A* 3, p. 8926

**2Po13****THERMOOXIDATIVE STABILITY OF POLYETHYLENE CABLE INSULATION STUDIED BY DSC**

Anna Vykydalová<sup>1</sup>, Zuzana Cibulková<sup>1</sup>, Tibor Dubaj<sup>1</sup>, Peter Šimon<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37, Bratislava, anna.vykydalova@stuba.sk*

External conditions have bad influence on polymers chemical structure. These changes in the structure are undesirable. Thermooxidation represents one of them and it can be described by two steps. The first is induction period (IP) and the second is oxidation itself (begins at the end of IP). The end of IP is characterized by a rapid oxygen uptake accompanied by sudden changes in polymer properties. Therefore, the length of IP can be considered as a measure of a material stability [1].

The goal of this work was to study thermooxidative stability of coaxial cable insulation used in nuclear power plants. We studied two types of samples: unaged and aged by heat, radiation and their combination. Non-isothermal DSC measurements were applied to study the thermooxidative stability of material. Isoconversional kinetic analysis employing non-Arrhenian temperature function was carried out [1]. IPs and residual stabilities were calculated from the values of kinetic parameters. Then, the predictive model for the cable lifetime was developed based on the thermal and radiation stress tests. The model assumes a first-order exponential decay of the residual stability with degradation dose. The model allows to predict the degree of insulation damage in large range of environmental conditions.

*Financial support from the Slovak Research and Development Agency (APVV-15-0124) is acknowledged.*

- [1] Šimon P., Kolman E., *J Therm Anal Calorim.*, 64, 813–20 (2001).

**2Po14****SYNTHETIC METAL COMPLEXES AS DOUBLE-EDGED SWORD TOWARDS CANCER: ROS MODULATION AND DNA INTERCALATION**

Miriama Šimunková<sup>1</sup>, Peter Lauro<sup>2</sup>, Marián Valko<sup>1</sup>, Klaudia Jomová<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Department of Physical Chemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 81237 Bratislava, Slovak Republic. miriama.simunkova@stuba.sk*

<sup>2</sup>*Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Constantine the Philosopher University, 949 74 Nitra, Slovakia*

Social diseases such as cancer are multifactorial in their origin but one common denominator that connects most of these diseases is oxidative stress (OS). Cancer is known for uncontrolled proliferation and is characterized by enhanced resistance to cell death, but many studies have shown that tumor cells are adapted to high levels of ROS/OS. Modulation of OS by increased production of ROS appears to be a possible therapeutic target in the treatment of social diseases. Metal based therapies for cancer provide an interesting therapeutic alternative [1].

Combination of controlled formation of ROS with suppression of antioxidant capacity is a one of possible therapeutic approaches in the treatment of cancer. Keeping in mind, we designed and synthesized Cu(II) complexes with three different non-steroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs) and 1,10-phenanthroline (phen). Prepared complexes were subject of structural analysis by means of X-ray crystallography and electron paramagnetic resonance (EPR) spectroscopy. Biological evaluation of Cu(II) complexes was performed by biochemical techniques in which DNA damage (by intercalation mechanism) was studied. UV/Vis and EPR spectroscopy were performed with the aim to investigate Cu redox-cycling, in which harmful free radicals such as hydroxyl radical may be formed and cause further damage of the DNA in cancer cells. Results suggest that Cu(II)-phen-NSAID complexes promote DNA damage as a result of redox-cycling properties as well as intercalation since radical-mechanism of DNA damage was demonstrated [2]. Additionally, test of cytotoxic activity showed degree of selectivity against three cancer cell lines compared to reference.

*This contribution was financially supported by the Science and Technology Assistance Agency under the contract Nos. APVV 15-0079. We would like to thank Biomedical Center of SAS for providing anti-cancer test.*

- [1] Poprac P et al.: *Trends Pharmacol Sci.* 38, 7 (2017).  
 [2] Simunkova M. et al: *J. Inorg Biochem.* 194, (2019).

**2Po15**

**PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF ELECTRODES MANUFACTURED BY 3D PRINTING**

Viliam Kolivoška<sup>1</sup>, Táňa Sebechlebská<sup>1,2</sup>, Eva Vaněčková<sup>1</sup>, Violetta Shestivska<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the CAS, v. v. i. Dolejskova 3, 18223, Prague, Czech Republic, viliam.kolivoska@jh-inst.cas.cz*

<sup>2</sup>*Department of Physical and Theoretical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Mlynská Dolina, Ilkovičova 6, 84215 Bratislava 4, Slovakia*

3D printing allows manufacture of objects with desired shape and physical properties including optical transparency, mechanical stiffness and electric conductivity. In this work, we demonstrate that fused deposition modeling 3D printing may be used to prepare electrodes from composites based on polylactic acid matrix and conductive phase such as copper, carbon black and carbon nanotubes. We inspect 3D printed electrodes in aqueous electrolytes containing electroactive probes by impedance spectroscopy and cyclic voltammetry. We demonstrate that 3D printed electrodes show nearly ideal response of electroactive probes, approaching that obtained at classical metallic electrodes.

*Financial Support from Czech Science Foundation (project number 18-09848S) is gratefully acknowledged.*



## POSTERY - SEKCIA 3: NANOMATERIÁLOVÁ CHÉMIA

### 3Po01

#### HYBRIDNÍ NANOMATERIÁLY NA BÁZI KOV-PVA KOMPOZITU

Vilém Bartůněk<sup>1</sup>, Michal Kohout<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Ústav anorganické chemie, Fakulta chemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6 - Dejvice, 166 28, Česká republika*

<sup>2</sup>*Ústav organické chemie, Fakulta chemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6 - Dejvice, 166 28, Česká republika*

Kovové nanomateriály majú radu vlastností vhodných pro praktické použití v chemii i v ďalších odvetvách. Mohou byť využité pri heterogénnej katalýze i pro napríklad antimikrobiálnu aplikáciu. Jedným z problémů jejich užití je jejich imobilizace, protože uvolňování jemných frakcí může být z nejrůznějších důvodů nežádoucí. V této práci jsme se zaměřili na přípravu a výzkum vlastností kompozitních a hybridních materiálů skládajících se z nanočástic mincovných kovů a matrice z porézního polyvinylalkoholu. Materiál byl připravovaný v různých formách jako znovutavitelná a tvarovatelná umělá hmota s modifikovanými vlastnostmi, takže výsledný produkt je nerozpustný ve vodě i většinu dalších běžných rozpouštědel.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR, číslo grantu GA18-14497S.*

### 3Po02

#### SLEDOVANIE VPLYVU LEPTANTOV NA ELEKTROCHEMICKÉ SPRÁVANIE VZORIEK MXÉNU $Ti_3C_2T_x$

Veronika Gajdošová<sup>1</sup>, Lenka Lorencová<sup>1</sup>, Mária Omastová<sup>2</sup>, Michal Procházka<sup>2</sup>, Simona Procházková<sup>3</sup>, Monika Jerigová<sup>4,5</sup>, Dušan Velič<sup>4,5</sup>, Ján Tkáč<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Chemický ústav, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, Bratislava 845 38, Slovenská republika, [gajdosova30@gmail.com](mailto:gajdosova30@gmail.com), [chemlelo@savba.sk](mailto:chemlelo@savba.sk), [jan.tkac@savba.sk](mailto:jan.tkac@savba.sk)*

<sup>2</sup>*Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, Bratislava 845 38, Slovenská republika, [upolmaom@savba.sk](mailto:upolmaom@savba.sk), [upolmipr@savba.sk](mailto:upolmipr@savba.sk)*

<sup>3</sup>*Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Mlynská dolina, Bratislava 842 15, Slovenská republika, [simona.prochazkova@uniba.sk](mailto:simona.prochazkova@uniba.sk)*

<sup>4</sup>*Katedra teoretickej a fyzikálnej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava*

<sup>5</sup>*Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava, [jerigova@ilc.sk](mailto:jerigova@ilc.sk), [duvellabs@gmail.com](mailto:duvellabs@gmail.com)*

MXén predstavuje nový nanomateriál objavený v roku 2011 pozostávajúci z prechodných kovov karbidov/nitridov alebo karbonitridov [1]. Pripravuje sa selektívnym leptaním prvku  $A$  z  $M_{n+1}AX_n$  ( $n = 1, 2, 3$ ) fázy [2]. Podmienky leptania sú kľúčovými faktormi dosiahnutia vysokého výťažku a úplnej konverzie  $MAX$  fázy na MXén. Z toho dôvodu sme sa zamerali na štúdium elektrochemického správania dvoch vzoriek  $Ti_3C_2T_x$  MXénov leptaných odlišným spôsobom, t.j. vzorka leptaná s HF a vzorka leptaná jemnejším spôsobom s LiF + HCl.

Metódou cyklickej voltampérometrie (CV) sme pozorovali pri vzorke MXénu leptanej s LiF + HCl výraznejší oxidačný pík pri hodnote potenciálu +0,4 V. Tento fakt koreluje so zistením, že intenzity píkov pre fragment titánu  $Ti^+$  i fragment fluóru  $F^-$  sú o dva rády vyššie u vzorky leptanej s LiF + HCl oproti vzorke leptanej s HF, čo sme potvrdili SIMS (hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov) analýzou. Elektrokatalytickú aktivitu pri redukcii  $H_2O_2$  a reakciu redukcie kyslíka sme skúmali CV. U vzorky  $Ti_3C_2T_x$  MXénu pripraveného leptaním s LiF + HCl sme pozorovali vyššiu katalytickú aktivitu ako u vzorky MXénu leptanej HF.

Našou štúdiou sme si potvrdili, že vzorky MXénov sú elektrokatalyticky aktívne s potenciálom pre následnú prípravu biosenzorov, pričom takýto typ povrchu má perspektívne využitie v glykopofilácii.

*Radi by sme poďakovali za finančnú podporu z realizácie projektu APVV-17-0300.*

[1] Naguib M., Kurtoglu M., Presser V., Lu J., Niu J., Heon M., Hultman L., Gogotsi Y.: *Adv. Mater.* 23, 4248-4253 (2011).

[2] Lorencova L., Bertok T., Dosekova E., Holazova A., Paprcikova D., Vikartovska A., Sasinkova V., Filip J., Kasak P., Jerigova M., Velic D., Mahmoud K.A., Tkac J.: *Electrochim. Acta* 235, 471-479 (2017).

**3Po03****TLAČENÉ UHLÍKOVÉ ELEKTRODY PRE BIOSENZORIKU A HYBRIDNÚ FOTOVOLTIKU**

Michal Hatala<sup>1</sup>, Pavol Gemeiner<sup>1</sup>, Michaela Pavličková<sup>1</sup>, Lucia Parráková<sup>1</sup>, Lenka Lorencová<sup>2</sup>, Aleš Ház<sup>3</sup>, Ján Tkáč<sup>2</sup>, Milan Mikula<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Oddelenie polygrafie a aplikovanej fotochémiie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Radlinského 9/1111, 812 15 Bratislava

<sup>2</sup>Chemický ústav SAV, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava

<sup>3</sup>Oddelenie dreva, celulózy a papiera, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Radlinského 9/1111, 812 15 Bratislava

Pojmom tlačená elektronika možno súhrnne označiť nanášanie vrstiev funkčných materiálov a ich presné adresovanie pomocou tlače v kombinácii s rôznymi ovrstvovacími technikami pre potreby zhotovenia elektronických prvkov. Medzi najrozšírenejšie tlačové technológie patrí sieťotlač a to najmä z dôvodu jej obrovskej variability nie len z hľadiska potlačovaných substrátov, ale aj nanášaných materiálov. Popri skupine materiálov, charakteristických vysoko organizovanou vnútornou štruktúrou na atomárnej úrovni (uhlíkové nanorúrky, fullerény, či grafén) patria medzi výskume zaujímavé stále aj konvenčnejšie uhlíkové materiály ako sú grafit, či sadze.

Cieľom tejto práce bola príprava vysokoviskózných disperzií s obsahom uhlíka (grafit, sadze), zhotovenie vodivých elektród pomocou sieťotlače ich následná implementácia do systému farbivom senzibilizovaných solárnych článkov (DSSC) a tlačených uhlíkových elektrochemických senzorov. Preskúmaný bol vplyv použitého typu uhlíka na výstupné fotovoltické parametre zhotovených solárnych článkov a elektrochemické vlastnosti pripravených uhlíkových senzorov. V prípade tlačenej sintrovanej uhlíkovej protielektródy v systéme DSSC bola najvyššia dosiahnutá hodnota konverznej účinnosti zhotoveného článku 3,05 %, pričom uhlíková protielektróda dosiahla hodnotu odporu proti prenosu náboja  $R_{ct}$  8,1  $\Omega \cdot \text{cm}^2$ . Zhotovený uhlíkový elektrochemický senzor umožňoval kvantitatívnu analýzu dopamínu, s lineárnou odozvou v rozsahu koncentrácií 10 nM – 10  $\mu\text{M}$ , pričom detekčný limit bol 5,17 nM a senzitivita 380 nA.nM<sup>-1</sup>.

*Tento príspevok vznikol za finančnej podpory projektu VEGA 1/0488/19.*

**3Po04****DIZAJN 2D ŠTRUKTÚR DOPOVANÝCH NANOČASTICAMI KOBALTU PRE APLIKÁCIE V ENERGETIKE**

M. Hečková<sup>1,2</sup>, M. Strečková<sup>1</sup>, R. Oriňaková<sup>3</sup>, A. Gubooa<sup>3</sup>, J. Hovancová<sup>3</sup>, Z. Danková<sup>4</sup>, V. Girman<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav materiálového výskumu, SAV, Watsonova 47, 040 01 Košice, Slovenská republika

<sup>2</sup>Ústav fyzikálnych vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavol Jozefa Šafárika, Park Angelinum 9, 040 01 Košice, Slovenská republika

<sup>3</sup>Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavol Jozefa Šafárika, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovenská republika

<sup>4</sup>Ústav geotechniky, SAV, Watsonova 45, 040 01 Košice, Slovenská republika  
mheckova@saske.sk

V posledných rokoch sa kladie veľký dôraz na znižovanie emisií a obnoviteľné zdroje energie. Vodík je hojný prvok vyskytujúci sa v rôznych zlúčeninách. Elektrolýza vody predstavuje jednu z najekologickejších možností produkcie vodíka. Uhlíkové vlákna pripravené elektrospinningom z voľnej hladiny predstavujú výhodný materiál vďaka ich veľkému pomeru povrchu voči objemu [1]. Zlepšiť elektrokatalytické vlastnosti a zväčšiť aktívnu plochu vlákien je možné pomocou vytvorenia pórovitej štruktúry. Jedným zo spôsobov vzniku pórov je použitie dvoch polymérov s rozdielnymi tepelnými vlastnosťami. Ďalším spôsobom je pridávanie surfaktantov. Vhodné polyméry pre prípravu pórovitých vlákien sú PAN a PVP najlepšie v pomere 1:1 a vhodným surfaktantom je aniónový surfaktant SDS. Pre dosiahnutie optimálnych pórov je vhodné pri spekaní prekurzorových vlákien použiť Ar atmosféru a teplotu 1200°C a následne H<sub>2</sub> atmosféru pri teplote 780°C. Takto pripravené vlákna obsahujú okrúhle póry na povrchu, ale aj vo vnútri vlákien. Pre výrazné zvýšenie elektrokatalytickej aktivity uhlíkových vlákien je ich obohatenie o prechodné kovy. Vhodným kovom na dopovanie uhlíkových vlákien je kobalt, ktorý v prítomnosti kyseliny fosforečnej vytvára fosfidy kobaltu. Práve fosfidy kobaltu podporujú v redukčnej atmosfére samovoľný rast grafénových nanorúrok na povrchu vlákien, čo vo veľkej miere zvyšuje elektrokatalytickú aktivitu pri HER.

*Práca bola finančne podporená vedeckou grantovou agentúrou VEGA, Vedecká grantová agentúra Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu Slovenskej republiky a Slovenskej akadémie vied. No. VEGA 2/0079/17 a Agentúrou na podporu výskumu a vývoja APVV, pod označením No. SK-CN-2017-0004, MagEIMat.*

- [1] M. Streckova, E. Mudra, R. Orinakova, L. Markusova-Buckova, M. Sebek, A. Kovalcikova, T. Sopcak, V. Girman, Z. Dankova, M. Micusik, J. Dusza, - *Nickel and nickel phosphide nanoparticles embedded in electrospun carbon fibers as favourable electrocatalysts for hydrogen evolution*, *Chemical Engineering Journal* 303 (2016) 167–181

**3Po05****DVOU-KROKOVÁ SYNTÉZA NANOČÁSTIC STRÍBRA**

Lucie Hochvaldová<sup>1</sup>, Libor Kvítek<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Univerzita Palackého, Přírodovědecká fakulta, 17. listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc, lucie.hochvaldova@upol.cz*

S rozvojem nanotechnologií se nanočástice stříbra díky jejich širokému využití staly těmi nejžádanějšími nanočásticemi na trhu. Jelikož jsou vlastnosti nanočástic a jejich následné použití ve velké míře závislé na jejich velikosti, velká část výzkumu se v oblasti nanomateriálů orientuje právě směrem k cílené přípravě nanočástic s předem definovanými rozměry. Nejčastější metodou přípravy kovových nanočástic je redukce příslušné rozpustné soli. V takovémto případě však dochází k tvorbě nové fáze v původně homogenním systému, a to jako takové zásadně závisí na tzv. přesycení, které nelze tak jednoduše kontrolovat. Další možností přípravy je využití dvou-krokového redukčního systému, jež je založen na heterogenní nukleaci, která se vyznačuje mnohem menší energetickou bariérou, což mimo jiné vede k upřednostňování růstu zárodečných nanočástic, a ne k tvorbě částic nových. V rámci této studie byly redukcí diamín-stříbrného komplexu silným redukčním činidlem připraveny nanočástice stříbra o průměrné velikosti 3 nm. Tyto nanočástice pak byly v následujícím kroku zvětšovány přidávkem dalšího množství kovové soli, k jejíž redukci již stačilo slabé redukční činidlo. Výsledná velikost částic byla ovlivňována například rychlostí přidávku reakčních komponent, množstvím zárodečných částic nebo přidávkem dusičnanu stříbrného, jež zde sloužil jako zdroj stříbra. U připravených nanočástic byla nakonec otestována katalytická aktivita a její závislost na velikosti použitých částic.

*Autoři děkují za finanční podporu vnitřního grantu UP Olomouc projekt IGA\_PrF\_2017\_025.*

**3Po06****PRÍPRAVA BLOKAČNÝCH VRSTIEV Z NANO-OXIDOV A ICH VYUŽITIE V PEROVSKITOVÝCH SOLÁRNYCH ČLÁNKOCH SO ZADNOU UHLÍKOVOU ELEKTRODOU**

Matej Hvojník<sup>1</sup>, Anna Mária Popovičová<sup>1</sup>, Michaela Pavličková<sup>1</sup>, Michal Hatala<sup>1</sup>, Pavol Gemeiner<sup>1</sup>, Milan Mikula<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, matej.hvojník@gmail.com*

Hybridné perovskitové solárne články sa považujú za najsľubnejšiu generáciu fotovoltických zariadení vďaka nízkej výrobnéj cene, vysokej účinnosti, ekologickosti a možnosti prípravy tlačovými technikami.

Táto práca bola zameraná na prípravu a optimalizáciu elektrón transportných a diery blokujúcich (blokačných) vrstiev na báze nano-oxidov TiO<sub>2</sub>, SnO<sub>2</sub> a ZnO, tlačovými a ovrstvovacími technikami a ich aplikáciu v mezoporéznych solárnych článkoch so zadnou uhlíkovou elektródou (cPSC). Blokačné vrstvy zohrávajú dôležité funkcie v cPSC. Hlavnými úlohami sú extrakcia a transport elektrónov z perovskitovej vrstvy na príslušnú elektródu, zabraňujú priamemu kontaktu medzi perovskitom a elektródou, vnútorným skratom a poklesu účinnosti solárneho článku. Preto je dôležité tieto vrstvy optimalizovať z hľadiska hrúbky, homogenity a elektrickej vodivosti. Náš cPSC pozostáva z oxidovej blokačnej vrstvy, mezoporéznej TiO<sub>2</sub> vrstvy, výstužnej ZrO<sub>2</sub> vrstvy a uhlíkovej zadnej elektródy cez ktorú sa infiltruje prekursor perovskitu.

Jednotlivé funkčné vrstvy cPSC boli charakterizované optickou a atómovou silovou mikroskopiou, meraním vodivosti a účinnosť článku bola stanovená zo záťažovej V-A charakteristiky pri štandardnom dennom osvetlení. Pripravené blokačné vrstvy boli homogénne a kompaktné bez prasklín a viditeľných defektov. Najlepšiu účinnosť (7,8 %) dosiahli články, ktoré využívali zmesné blokačné vrstvy na báze TiO<sub>2</sub>, pripravené sól-gél procesom s prekursorov TiAcAc a TiCl<sub>4</sub>.

- [1] POPOVIČOVÁ A. M. Oxidové nanovrstvy pre perovskitové solárne články. Diplomová práca, Bratislava, FCHPT STU, 2019

- [2] HATALA, M. – GEMEINER, P. – HVOJNIK, M. – MIKULA, M. The effect of the ink composition on the performance of carbon-based conductive screen printing inks. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 2019. 30. s. 1034 – 1044.

- [3] MIKULA, M. – BEKOVÁ, Z. – HVOJNÍK, M. – HATALA, M. – MIKOLÁŠEK, M. – MÜLLEROVÁ, J. – JERGEL, M. – GEMEINER, P. Differently sintered TiO<sub>x</sub> hole blocking layers for solution processed solar cells. *Applied Surface Science*, 2018. 461. s. 54 – 60.

### 3Po07

#### BIOLOGICAL EFFECTS OF NANOSTRUCTURED METALS

Markéta Kaimlová, Jakub Siegel, Václav Švorčík<sup>1</sup>

*Department of Solid State Engineering, University of Chemistry and Technology Prague, Technická 5, 166 28 Prague, jakub.siegel@vscht.cz*

Polymers are considered to be suitable matrices for preparation of composite materials due to their long-term stability and excellent workability. On the contrary, inorganic nanostructures possess mechanical, optical, catalytic, electrical or magnetic properties significantly different from those of bulk material. By combining the dominating properties of organic polymers and inorganic nanostructures, one can obtain nanocomposites with new or improved properties, such as antibacterial effects useful in medicine. Biocompatible polymers with impregnated noble metal nanowires (NWs) are one of these materials universally usable in medicine [1].

We irradiated biocompatible polyethylene naphthalate (PEN) by KrF excimer laser under various conditions (angle of incidence of laser beam, laser fluence) with the aim to create ripples with required properties. Then the optimal samples were coated with AgNW arrays by vacuum evaporation. The surface properties (e.g., surface roughness, periodicity and height of the nanostructures) of the AgNWs/PEN composites were characterized by appropriate diagnostic methods. Thereafter, the samples were tested by drop plate method with Gram-negative bacterium of *E. coli* and Gram-positive *S. epidermidis* to investigate the influence of the surface morphology on resulting antibacterial effects [2].

*Authors are thankful to GACR for the financial support of this research under the project No. 17-10907S.*

- [1] M. Polívková, M. Valová, S. Rimpelová, P. Slepíčka, V. Švorčík, J. Siegel, *eXPRESS Polym. Lett.* 12, 1039 (2018).  
 [2] M. Kaimlová, I. Nemogová, K. Kolářová, P. Slepíčka, V. Švorčík, J. Siegel, *Appl. Surf. Sci.* 473, 516 (2019).

### 3Po08

#### SIMPLE ELECTROCHEMICAL NANOSCALE FABRICATION OF PT AND RU ON PT@PD CORE-SHELL NANOCUBES AND UTILIZATION AS ANODE MATERIAL FOR DIRECT METHANOL FUEL CELLS

Ammar Bin Yousaf, Syed Javaid Zaidi, Peter Kasak\*

*Center for Advanced Materials, Qatar University, Doha 2713, Qatar  
 \*peter.kasak@qu.edu.qa (P. Kasak)*

The electro-oxidation of methanol has great technological interest because of application to direct methanol fuel cells (DMFCs), as high-efficiency, low-emission future power sources. Significant efforts is directed towards highly active catalysts for the electro-oxidation of methanol in DMFCs. Trimetallic nanocomposite materials was prepared by electrochemical fabrication of Pt and Ru on PdPt core-shell nanocubes. Electrochemical fabrication has done by using electrochemical chronoamperometric (CA) method for PtRu co-deposition at constant potential of ca. 0.30V vs RHE. H<sub>2</sub>PtCl<sub>6</sub> and Ru(NO)(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> are used as Pt and Ru precursor with 0.1M HClO<sub>4</sub> as electrolyte for the fabrication of Pt and Ru nanoshell. The electrocatalytic activity as anode material for direct methanol fuel cells have measured by methanol oxidation reaction (MOR) activity in acidic medium. A significant improvement in the MOR activity is observed by increasing the atomic ratio of Pt in PtRu co-deposition, while presence of Ru has no influence on chemisorptions of methanol but is significantly influenced the onset potential for MOR. Among all prepared catalysts, Pt<sub>3</sub>Ru<sub>1</sub>@PdPt-NCs and Pt<sub>2</sub>Ru<sub>1</sub>@PdPt-NCs have shown greater MOR activity than the commercial Pt/C (20%wt).

The results can be attributed to the collective effect of PtRu nanoparticles and the enhanced electron transfer of core-shell PdPt-NCs in tri-metallic nanocomposite material. We have also focused and reduced the cost of catalyst by ultra low loading of Pt than the commercial catalyst by electrochemical fabrication method.

*This work was made possible by NPRP grant # 9 – 219-2-105 from the Qatar National Research Fund (A Member of The Qatar Foundation). The finding achieved herein is solely the responsibility of the authors.*

**3Po09****STUDIUM KATALYTICKÉ HYDROGENACE CO<sub>2</sub>**Martina Kubíková<sup>1</sup>, Libor Kvítek<sup>1</sup><sup>1</sup>*Univerzita Palackého, Přírodovědecká fakulta, 17. listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc, martina.kubikova01@upol.cz*

Globální oteplování, způsobované skleníkovými plyny, představuje závažný ekologický problém na Zemi. Nejzastoupenějším skleníkovým plynem je oxid uhličitý, jehož koncentrace v ovzduší stále významně narůstá. [1] Jednou z možností, jak tomuto trendu zabránit, zmírnit dopad skleníkového efektu a zlepšit tak klimatické podmínky na Zemi, je zpětná konverze CO<sub>2</sub> na jiné sloučeniny. [2] Pro tento účel jsou vhodné katalytické materiály na bázi železa, které vedou konverzi CO<sub>2</sub> na methanol, methan a nebo na další jednoduché uhlovodíky. [3]

Prezentovaná studie je zaměřena na studium katalytické hydrogenace CO<sub>2</sub> v plynné fázi na katalyzátorech na bázi oxidů železa, které byly připraveny rozkladem šťavelanu železnatého na vzduchu při vysokých teplotách. Reakce probíhala při nízkém tlaku 1 bar a teplotě 325 °C v mikroreaktoru Effi spojeném s plynovým chromatografem pro detekci reakčních produktů. Všechny připravené katalyzátory, na rozdíl od komerčního Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, vedly konverzi CO<sub>2</sub> ke vzniku CH<sub>4</sub>. Vedlejšími produkty byly CO a H<sub>2</sub>O. Vysokoteplotní XRD ukázala rozdílné chování katalyzátorů v redukční atmosféře H<sub>2</sub>, čemuž odpovídala i jejich rozdílná katalytická aktivita. Tato katalytická aktivita je prokazatelně (na základě výsledků XRD) spojena s přítomností Fe<sub>3</sub>C fáze v připravených katalyzátorech.

*Autoři děkují za finanční podporu vnitřního grantu UP Olomouc projekt IGA\_PrF\_2019\_033.*

- [1] M. Áresta, A. Dibenedetto, Utilisation of CO<sub>2</sub> as a chemical feedstock, Dalton Trans., 2007, 28, 2975.  
 [2] A. Rafiee, R. Khalilpour, D. Milani, M. Panahi, Trends in CO<sub>2</sub> conversion and utilization: A review from process systems perspective, J. Environ. Chem. Eng., 2018, 6, 5771.  
 [3] C.-S.T. Chih-Hung Huang, T. Chung-Sung, A review: CO<sub>2</sub> utilization, Aerosol Air Qual. Res., 2014, 14, 480.

**3Po10****POROVNÁNÍ KATALYTICKÉ AKTIVITY NANOČÁSTIC PLATINOVÝCH KOVŮ**Libor Kvítek<sup>1</sup>, Tomáš Stryšovský<sup>1</sup>, Karolína Simkovičová<sup>1</sup>, Robert Pucek<sup>1</sup>, Lucie Hochvaldová<sup>1</sup>, Aleš Panáček<sup>1</sup><sup>1</sup>*RCPTM a Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, 17. listopadu 12, 77146 Olomouc, libor.kvitek@upol.cz*

Platinové kovy jsou známy jako excelentní katalyzátory pro řadu chemických reakcí důležitých pro průmyslové aplikace. Jejich nanočásticová forma představuje další možnost jak zvýšit využitelnost katalyzátorů v praxi jak zvýšením katalytické aktivity v souvislosti se zvýšením specifického povrchu, tak současně se snížením množství drahých kovů pro efektivní katalýzu. Vysoká kladná hodnota standardního redox potenciálu pro tyto kovy umožňuje využití řady redukčních činidel pro přípravu jejich nanočástic na mokré cestě. Jedno z nejsilnějších redukčních činidel – tetrahydridoboritan sodný - umožňuje přípravu nanočástic těchto kovů o rozměrech jednotek nanometrů [1].

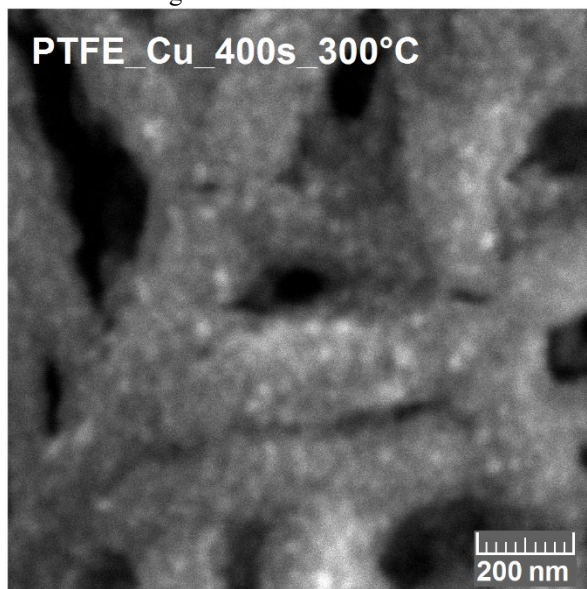
Prezentovaná studie je zaměřena na porovnání katalytické aktivity nanometrových nanočástic platinových kovů v jedné z nejpoužívanějších modelových reakcí – redukce nitrofenolu tetrahydridoboritanem sodným. Nanočástice byly připravovány ve vodném prostředí redukcí soli příslušného kovu tetrahydridoboritanem sodným za stabilizace citrátovým aniontem. Testovány byly nanočástice Pt, Pd, Ir, Ru, Rh a Os. Z nich se jako nejefektivnější katalyzátor ve studované reakci ukázaly nanočástice Rh. Ve většině případů byla v rámci kinetických experimentů pozorována pomalá počáteční perioda reakce, související velmi pravděpodobně s aktivací povrchu katalyzátoru, umožňující efektivní adsorpci reaktantu, nutnou pro průběh reakce.

*Autoři děkují za finanční podporu vnitřního grantu UP Olomouc, projekt IGA\_PrF\_2019\_033.*

- [1] Zhang, Y.; Cao, Y.; Chen, D.; Cui, P.; Yang, J., *Electrochimica Acta* 269, 38 (2018).

**3Po11****CU LAYERS SPUTTERED ON PTFE: EFFECT OF ANNEALING ON SURFACE PROPERTIES AND ANTIBACTERIAL ACTIVITY**V. Lacmanova<sup>1</sup>, H. Y. Nguyenova<sup>1</sup>, B. Vokata<sup>2</sup>, V. Svorcik<sup>1</sup>, A. Reznickova<sup>1</sup><sup>1</sup>*Department of Solid State Engineering, University of Chemical Technology, Technická 5, 166 28 Prague, Czech Republic, lacmanov@vscht.cz*<sup>2</sup>*Department of Biochemistry and Microbiology, University of Chemistry and Technology, Technická 5, 166 28 Prague 6, Czech Republic*

This study presents specific properties of Cu layers on polytetrafluoroethylene (PTFE) and their antibacterial effect against two bacterial strains, Gram-negative *Escherichia coli* and Gram-positive *Staphylococcus aureus*. Thin Cu layers were prepared by sputtering on PTFE and subsequently annealed at 300 °C. Chemical and physical characteristics of Cu layers on PTFE were evaluated before and after annealing employing various analyses. As-sputtered Cu layers exhibited characteristics of metallic copper that were observed as a soar in conductance and surface plasmon resonance band in UV-Vis spectra. Annealing induced the oxidation and rearrangement through Cu layers creating crystalline island structures of CuO. Owing to annealing, PTFE itself was partly exposed and samples exhibited stable hydrophobic character. The nature of antibacterial responses was investigated in relation with the amount of copper and annealing of Cu layers. Bactericidal effect increased with sputtering time and decreased due to annealing. Annealed samples exhibited higher adhesion of Cu layers to PTFE that contributed to a lower bactericidal activity. PTFE sputtered for 400 s demonstrated the highest antibacterial effect against both bacterial strains. Cu layers on flexible substrates are very promising for electronics such as solar cells and artificial skin or as biological sensors and bacterial biofilm inhibitors [1-3].



Obr. 1. SEM image of annealed Cu layers sputtered for 400 s on PTFE.

*This work was supported by GACR projects 17-00939S and specific university research (MSMT 21-SVV/2019).*

- [1] Kim, J.; Lee, M.; Shim, H. J.; et al. Stretchable silicon nanoribbon electronics for skin prosthesis. *Nat. Commun.* 5, 5747 (2014).
- [2] Xu, W.; Lu, T. J.; Wang, F. Effects of interfacial properties on the ductility of polymer-supported metal films for flexible electronics. *Int. J. Solids Struct.* 47, 1830–1837( 2010).
- [3] Mclean, R. J. C.; Hussain, A. A.; Sayer, M.; Vincent, P. J. Antibacterial activity of multilayer silver copper surface-films on catheter material. *Can. J. Microbiol.* 39, 895–899 (1993).

**3Po12****STABILNÝ  $Ti_3C_2T_x$  (MXÉN)/PT NANOKOMPOZIT PRE APLIKÁCIE V SENZOROCH**

Lenka Lorencová<sup>1</sup>, Tomáš Bertók<sup>1</sup>, Jaroslav Filip<sup>2</sup>, Monika Jerigová<sup>3, 4</sup>, Dušan Velič<sup>3, 4</sup>, Peter Kasák<sup>5</sup>, Ján Tkáč<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Chemický ústav Slovenskej akadémie vied, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, lenka.lorencova@savba.sk, tomas.bertok@savba.sk, jan.tkac@savba.sk

<sup>2</sup>Ústav inžinierstva ochrany životného prostredia, Univerzita Tomáša Baťu v Zlíne, Vavrečkova 275, 762 72 Zlín, j.filip.com@gmail.com

<sup>3</sup>Katedra teoretickej a fyzikálnej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava

<sup>4</sup>Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava, jerigova@ilc.sk, duvellabs@gmail.com

<sup>5</sup>Centrum pre pokročilé materiály, Univerzita v Katare, P.O. Box 2713, Dauhá Katar, Východná Ázia, peter.kasak@qu.edu.qa

2D materiály sa stali predmetom záujmu vďaka ich špecifickým vlastnostiam, ktoré sa líšia v porovnaní s ich 3D náprotivkami. 2D karbidy/nitridy prechodných kovov nazývané "MXény" sa vyznačujú komplexnou vrstevnatou štruktúrou, ktorá poskytuje množstvo alternatív v zložení, ktoré z nich robia vhodné materiály pre rozličné aplikácie.

V našej štúdií sme skúmali elektrochemické správanie  $Ti_3C_2T_x$  MXénu (kde T: =O, -OH, -F) vo vodnom roztoku pre potenciálne aplikácie pri príprave senzorov. V prípade  $Ti_3C_2T_x$  bola skúmaná jeho schopnosť detegovať významné analyty ( $O_2$ ,  $H_2O_2$  a NADH) [1].  $Ti_3C_2T_x$  preukázal vynikajúcu elektrokatalytickú aktivitu pri redukcii  $H_2O_2$  s medzou detekcie na úrovni nM (doba odozvy ~10 s). Napriek tomu sme však zistili, že  $Ti_3C_2T_x$  je stabilný v katódickom a anódickom potenciálovom okne do +0,2 V.

V snahe zlepšiť jeho stabilitu sme MXén ďalej modifikovali s nanočasticami platiny [2, 3]. Senzor založený na nanokompozite  $Ti_3C_2T_x$ /Pt nanosenom na elektróde zo sklovitého uhlíka (GCE) dokázal detegovať  $H_2O_2$  s medzou detekcie 448 nM pri 0 V (oproti Ag/AgCl) v porovnaní s hodnotou 883  $\mu$ M pozorovanou pre GCE/ $Ti_3C_2T_x$ . Malé organické molekuly (acetaminofén, dopamín, kyselina askorbová, kyselina močová) sme detegovali použitím GCE/ $Ti_3C_2T_x$ /PtNP senzora taktiež s medzami detekcie na nanomolárnej úrovni. Takýto typ povrchu bude perspektívne využitý pri vývoji biosenzorov a v glykoprolifácii.

Autori ďakujú za finančnú podporu z projektov APVV-15-0227 a APVV-17-0300.

[1] Lorencova L., Bertok T., Dosekova E., Holazova A., Paprcikova D., Vikartovska A., Sasinkova V., Filip J., Kasak P., Jerigova M., Velic D., Mahmoud K.A., Tkac J.: *Electrochim. Acta* 235, 471-479 (2017).

[2] Lorencova L., Bertok T., Filip J., Jerigova M., Velic D., Kasak P., Mahmoud K.A., Tkac J.: *Sens. Actuators B-Chem.* 263, 360-368 (2018).

[3] Filip J., Zavahir S., Lorencova L., Bertok T., Yousaf A.B., Mahmoud K.A., Tkac J., Kasak P.: *J. Electrochem. Soc.* 166, H54-H62 (2019).

**3Po13****PREPARATION METHOD EFFECT ON ANTIBACTERIAL PROPERTIES OF SILVER NANOPARTICLES GRAFTED ONTO POLYETHYLENE TEREPHTHALATE**

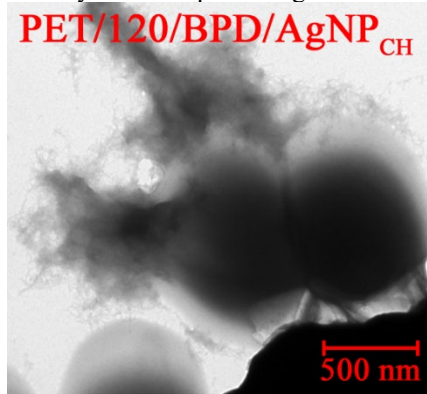
H. Y. Nguyenova<sup>1</sup>, B. Vokata<sup>2</sup>, V. Lacmanova<sup>1</sup>, V. Svorcik<sup>1</sup>, A. Reznickova<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Solid State Engineering, University of Chemistry and Technology, 166 28 Prague 6, Czech Republic, nguyeng@vscht.cz

<sup>2</sup>Department of Biochemistry and Microbiology, University of Chemistry and Technology, 166 28 Prague 6, Czech Republic

Antibacterial surfaces harbour great attention as prevention of nosocomial diseases [1, 2]. We report preparation of antibacterial polymer by grafting silver nanoparticles (Ag NPs) onto plasma activated polyethylene terephthalate (PET) via biphenyl-4,4'-dithiol interlayer [3]. Used Ag NPs were synthesized by chemical (Ag NP<sub>CH</sub>), electrochemical (Ag NP<sub>E</sub>) and physical (Ag NP<sub>P</sub>) methods. Ag NPs dispersions were characterized by UV-Vis spectroscopy and transmission electron microscopy. Surface properties of PET were studied before and after each preparation step. Chemical composition was determined using X-ray photoelectron and energy dispersive X-ray spectroscopies. Morphology changes were observed on atomic force and scanning electron microscopes. Prepared substrates wettability and zeta potential were also investigated. PET samples before and after modifications were subjected to antibacterial test against *Escherichia coli* and *Staphylococcus epidermidis*. Ag NP<sub>P</sub> sample was the most effective even though analyses determined Ag NP<sub>E</sub> to be the smallest and their number on PET surface was the greatest. Far greater amount of Ag NP<sub>P</sub> was revealed to be in the volume than on top of PET sample. Good wettability also enabled bacterial solution to be in contact with larger area of Ag NP<sub>P</sub> sample surface.

Such systems are promising as antimicrobial surfaces in medicine.



**Obr. 1.** TEM image of *S. epidermidis* bacteria exposed to PET treated by Ar plasma for 120 s, subsequently grafted with biphenyl-4,4'-dithiol and then with Ag nanoparticles

*This work was supported by Czech Science Foundation (GA CR) (Grant No. 17-00939S) and specific university research (MSMT No 21-SVV/2019).*

[1] Polivkova M., Hubacek T., Staszek M., Svorcik V., Siegel J.: *Int. J. Mol. Sci.* 18, 419 (2017).

[2] Munoz-Bonilla A., Fernandez-Garcia M.: *Prog. Pol. Sci.* 37, 281 (2012).

[3] Reznickova A., Kolska Z., Zaruba K., Švorcák V.: *Mater. Chem. Phys.* 145, 484 (2014).

### 3Po14

#### PEROVSKITOVÉ SOLÁRNE ČLÁNKY

Mária Omastová<sup>1</sup>, Agnieszka Iwan<sup>2</sup>, Riyas Subair<sup>3</sup>, Vojtech Nádaždy<sup>3</sup>, Matej Mičušík<sup>1</sup>, Matej Jergel<sup>3</sup>, Peter Šiffalovič<sup>3</sup>, Eva Majková<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava,

<sup>2</sup> Military Institute of Engineer Technology, Wrocław, Poland

<sup>3</sup> Fyzikálny ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 11 Bratislava

Organicko-anorganické perovskitové solárne články (PSCs) patria k najperspektívnejším fotovoltickým štruktúram s účinnosťou konverzie viac ako 20 %. Pre ich široké uplatnenie v praxi je potrebné ďalej zlepšovať ich konverziu svetelnej energie a dlhodobú stabilitu vo vonkajších podmienkach. Základom planárnych PSCs je viacvrstvomá štruktúra zložená z vrstvy perovskitu, kde prebieha konverzia svetla na voľné elektrické náboje, a vrstiev pre transport nosičov náboja (elektrónov a dier) k elektródam. Vlastnosti týchto vrstiev a ich rozhraní významne ovplyvňujú funkčnosť PSCs. V práci prezentujeme výsledky výskumu a vývoja týchto PSCs s cieľom zabudovania novej dierovej transportnej vrstvy PPL6 ((5*E*,6*E*)-*N*<sup>3</sup>,*N*<sup>5</sup>-bis(4-(*dip*-tolylamino)benzylidene)-1,2,4-thiadiazole-3,5-diamine) vyvíjanej v rámci spoločného projektu V4 - Korea Bezolovnaté perovskitové solárne články s dlhodobou stabilitou. Elektrónovú štruktúru PPL6 sme charakterizovali novou metódou ER-EIS (energeticky rozlíšiteľná elektrochemická impedančná spektroskopia) [1, 2], z ktorej sme určili hodnoty HOMO (-5.5 eV) a LUMO (-2.2 eV) a šírku transportného pásu 3.2 eV. Predmetom ďalšieho výskumu je náhrada dierovej vrstvy Spiro-OMeTAD (2,2',7,7'-tetrakis(*N,N*-di-*p*-methoxyphenylamine)-9,9'-spirobifluorene), ktorá je drahá a je aj zdrojom nízkej stability PSCs.

*Práca je podporená grantom PLL Bezolovnaté perovskitové solárne články s dlhodobou stabilitou V4-Kórea Joint Reseach Program on Chemistry and Chemical Engineering.*

[1] Nádaždy V, Schauer F, Gmucová K.: *Appl. Phys. Lett.* 105, 142109 (2014).

[2] Schauer F., Nádaždy V., Gmucová K.: *J. Appl. Phys.* 123, 161590 (2018).



**3Po15****SILVER NANOPARTICLES AS POTENTIAL ANTIBACTERIAL AGENT: HOW SILVER CAN OVERCOME ANTIBIOTIC RESISTANCE AND HOW BACTERIA CAN RESIST SILVER**Aleš Panáček<sup>1</sup>, Libor Kvítek<sup>1</sup>, Lucie Hochvaldová<sup>1</sup>, Renata Večeřová<sup>2</sup>, Milan Kolář<sup>2</sup><sup>1</sup>*Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Department of Physical Chemistry, Faculty of Science, Palacký University Olomouc, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Czech Republic, ales.panacek@upol.cz*<sup>2</sup>*Department of Microbiology, Faculty of Medicine and Dentistry, Palacký University Olomouc, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc, Czech Republic*

Silver nanoparticles (NPs) exhibit significant antimicrobial activity against a broad range of microorganisms at concentrations ranging from a few ppm to tens of ppm that are not cytotoxic to human cells [1]. Silver NPs also strongly enhance antibacterial activity against multiresistant *Enterobacteriaceae* when combined with antibiotics such as cefotaxime, meropenem, or gentamicin [2]. All the antibiotics, when combined with silver NPs, showed enhanced antibacterial activity at concentrations far below the minimum inhibitory concentrations of individual antibiotics and silver NPs. As a result, silver NPs have already been successfully applied in various biomedical technologies and products used in every-day life. While bacterial resistance to antibiotics has been discussed extensively in the literature, the possible development of resistance to silver NPs after repeated long-term exposure has not been fully explored. We report that the Gram-negative bacteria can develop resistance to silver NPs after prolonged exposure. The observed resistance stems from the production of the adhesive flagellum protein flagellin, which triggers the aggregation of silver NPs and eliminates their antibacterial effects. The resistance mechanism cannot be overcome by stabilization of silver NPs by polymers or surfactants. However, it is possible to suppress it by inhibiting flagellin production with pomegranate rind extract [3].

*The authors gratefully acknowledge the support provided by project LO1305 of the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic, the Czech Science Foundation (project No. 19-22720S), and the Internal Grant of Palacký University in Olomouc (IGA PrF\_2019\_033).*

[1] Panacek A., Kvitek L., Pucek R. et al.: *J. Phys. Chem. B* 110, 16248, (2006).[2] Panacek A., Smekalova M., Vecerova R., et al.: *Colloids Surf., B* 142, 392 (2016).[3] Panacek A., Kvitek L., Smekalova M. et al.: *Nature Nat.* 13, 65 (2018).**3Po16****NANOČASTICE STRIEBRA. VZŤAH MOLEKULOVÁ ŠTRUKTÚRA STABILIZÁTORA – FYZIKÁLNE VLASTNOSTI – BIOLOGICKÁ AKTIVITA STRIEBORNÝCH NANOČASTÍC**  
**Martin Pisárčik<sup>1</sup>, Miloš Lukáč<sup>1</sup>, Renáta Horáková<sup>1</sup>, Ferdinand Devínsky<sup>2</sup>**<sup>1</sup>*Katedra chemickej teórie liečiv, Farmaceutická fakulta, Univerzita Komenského, 832 32 Bratislava, pisarcik@fpfarm.uniba.sk*<sup>2</sup>*Farmaceutická fakulta, Univerzita Komenského, 832 32 Bratislava*

Nanočastice na báze striebra predstavujú atraktívnu oblasť nanomateriálov s prednostným využitím v biomedicínskych aplikáciách. Pozornosť verejnosti priťahujú predovšetkým ako perspektívne nástroje v diagnostike a terapii nádorových ochorení, aj ako nová generácia prostriedkov s vysokou biologickou aktivitou. Potvrdil sa antimikróbny, fungistatický a antivirotický účinok nanočastíc striebra aj voči multirezistentným patogénom. Hlavným problémom spojeným s prípravou strieborných nanočastíc je ich nedostatočná stabilita vo vodnom prostredí, ktorá sa prejavuje zánikom nanodisperzie po určitom časovom období, čo značne obmedzuje ich aplikačné využitie. Sľubným riešením tohto problému sa ukazuje byť aplikácia kationových povrchovoaktívnych zlúčenín ako stabilizátorov nanodisperzií striebra.

Kationové jednoreťazcové aj dvojreťazcové tzv. „gemini“ tenzidy majú silný stabilizačný účinok na nanodisperzie striebra. Ako vyplýva z našich meraní priemeru nanočastíc, ich zeta potenciálu a zo zobrazenia morfológie nanočastíc pomocou elektrónového mikroskopu [1, 2], strieborné nanokoloidy stabilizované kationovými tenzidmi vykazujú stabilný priemer nanočastíc a vysokú kladnú hodnotu ich zeta potenciálu. To zaručuje termodynamickú stabilitu nanodisperzie aj pri vysokých koncentráciách a počas dlhšieho časového obdobia bez výskytu fázovej separácie a nasledujúceho zániku nanodisperzie. Štúdium biologickej aktivity nanodisperzií striebra ukazuje mimoriadnu antimikróbnu aktivitu strieborných nanočastíc stabilizovaných kationovými tenzidmi voči Gram-pozitívnym, Gram-negatívnym kmeňom a kvasinkám, ktorá je vyššia ako aktivita samotných vodných roztokov kationových tenzidov stabilizujúcich strieborné nanodisperzie.

*Uvedený výskum je finančne podporovaný Grantovou agentúrou MŠ SR a SAV, projektom VEGA č. 1/0298/16, Agentúrou na podporu výskumu, projektom č. APVV-17-0373. Uvedený výskum využíva vedecké výsledky podporované grantom APVV-0516-12 a projektom CEBV, ITMS: 26240120034.*

[1] Pisárčik M. et al.: *Molecules* 22, 1794 (2017).

[2] Pisárčik M., Lukáč M. et al.: *Journal of Molecular Liquids* 272, 60 (2018).

### 3Po17

#### **PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE KOLOIDNÍCH ROZTOKŮ ZLATÝCH NANOČÁSTIC**

Markéta Pišlová<sup>1</sup>, Kateřina Kolářová<sup>1</sup>, Zdeňka Kolská<sup>2</sup>, Václav Švorčík<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Vysoká školy chemicko-technologická v Praze, Ústav inženýrství pevných látek, Technická 5, Praha 6- Dejvice, 166 28, [marketa.pislova@vscht.cz](mailto:marketa.pislova@vscht.cz)*

<sup>2</sup>*Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem, Přírodovědecká fakulta, České Mládeže 8, Ústí nad Labem, 400 96*

Tato práce se zabývá přípravou zlatých nanočástic (AuNPs). Koloidní roztoky AuNPs byly připraveny pomocí katodového naprašování do polyethylenglykolu (PEG) s molekulovou hmotností 600 g Mol<sup>-1</sup> [1] popř. do suspenze PEGu a přírodního polysacharidu. PEG i polysacharidy, zde byly použity jako stabilizátory. Tento postup přípravy je velmi jednoduchý a navíc je i šetrný k přírodě. Především vzhledem k tomu, že se zde nepoužívají žádná redukční činidla ani další stabilizátory.

Připravené koloidní roztoky nanočástic byly charakterizovány pomocí atomové absorpční a ultrafialovo-viditelné spektroskopie. Transmisní elektronová mikroskopie byla využita k určení tvaru a velikosti nanočástic. Dynamický rozptyl světla byl použit k potvrzení a upřesnění velikosti částic. Dále byly provedeny *in vitro* testy cytotoxicity a antibakteriální aktivity. U těchto roztoků byla také testována možnost sterilizace.

Naprašováním vznikají kulové nanočástice zlata. Velikost nanočástic se pohybuje v rozmezí od 3 do 35 nm v závislosti na složení roztoků.

*Autoři děkují za finanční podporu Grantové agentury ČR v projektu 17-00885S.*

[1] Slepíčka P., Elashnikov R., Ulbrich P., Staszek M., Kolská K., Švorčík V.: *J. Nanopart. Res.*, (2015)

### 3Po18

#### **MEDIATORLESS NANOPARTICLE COATINGS OF POLYMER: PROMISING PLATFORMS FOR BIOENGINEERING AND CATALYSTS**

Jakub Siegel, Markéta Polívková, Pavla Šuláková, Václav Švorčík<sup>1</sup>

*Department of Solid State Engineering, University of Chemistry and Technology Prague, Technická 5, 166 28 Prague, [jakub.siegel@vscht.cz](mailto:jakub.siegel@vscht.cz)*

In the beginning of this century nanostructured materials, especially nanoparticles, initiated technological revolution in almost all areas of human activity. They have been successfully applied in catalysts, energy storage devices, healthcare industry, cosmetics or textile industry. The successful synthesis itself, however, does not often lead to desired functional product [1]. Especially in catalysis, textile or healthcare industry the immobilization of NPs onto the carrier substrate represent important technological step crucial to the success of developed product in the view of their long-term functionality.

In this work we present unique approach for immobilization of electrochemically synthesized silver nanoparticles on polyethyleneterephthalate foil based on physical incorporation of particles into thin polymer surface layer induced by polarized excimer laser light [2]. Depending on the concentration of nanoparticle solution in immobilization process, one can effectively control surface morphology of processed sample, thus tailoring its specific surface area. Changes in chemical composition and the surface structure of polymer after the particle immobilization were studied by advanced analytical techniques such as ARXPS, EDX, RBS, FEGSEM, TEM, and AFM.

Laser-immobilized nanoparticle coatings of polymers are believed to open up new possibilities in the development of the next generation of cell-conform antimicrobial materials as well as being promising platforms applicable in catalysis.

*Authors are thankful to GACR for the financial support of this research under the project No. 18-07619S.*

[1] J. Siegel, K. Kolarova, V. Vosmanska, S. Rimpelova, J. Leitner, V. Svorcik, *Mater. Lett.* 113 59 (2013)

[2] J. Siegel, O. Lyutakov, M. Polívková, M. Staszek, T. Hubáček, V. Švorčík, *Appl. Surf. Sci.* 420, 661 (2017).

**3Po19****ADVANCED EPOXY COMPOSITES FILLED WITH NOVEL 2D NANOMATERIAL – MXENES**

Michal Procházka<sup>1</sup>, Simona Procházková<sup>2</sup>, Anastasiia Stepura<sup>1</sup>, Kateřina Kopecká<sup>3</sup>, Vladimír Špaček<sup>3</sup>, Mária Omastová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 84541 Bratislava, Slovakia; michal.prochazka@savba.sk*

<sup>2</sup>*Department of Analytical Chemistry, Faculty of Natural Sciences Comenius University, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava 4, Slovakia*

<sup>3</sup>*SYNPO a.s., S. K. Neumanna 1316, 532 07 Pardubice, Czech Republic*

MXenes are a new family of two-dimensional (2D) transition metal carbides and/or nitrides discovered in 2011[1]. A unique combination of metallic conductivity, a hydrophilic surface, and excellent mechanical properties renders MXenes as an attractive candidate for many technological applications. Water-compatible epoxy resin was used as a polymer matrix due to polarity and therefore covalent bonding of MXenes ensuring strong interface. The rationale for using this polymer is also explained by their versatile mechanical properties.

Epoxy/MXene composites films were prepared using wet applicator. Films contained different content of MXenes, and their thickness was 200 µm. Tensile tests of pure epoxy film and composites films were measured by Dynamometer Instron 3365 (Instron Corporation, USA) and mechanical properties were analysed by Nanoindenter Hysitron TI 750 Ubi (Hysitron, USA). The electrical conductivities of prepared films were measured by Broadband Dielectric Spectrometer Concept 40 (Novocontrol, Germany).

*This work was financially supported by grant No. M-ERANET-18-414-Nano2Com from Slovak Academy of Sciences, M-ERA.NET 2 Call 2018 European Partnership for Improved Composites (EPIC) and by project VEGA 02/0010/18.*

[1] Naguib M., Presser V., Lane N., Tallman D., Gogotsi Y., Lu J., Hultman L., Barsoum M.W., *RSC Advances*, 1, 1493 (2011).

**3Po20****HYDROPHILIC MODIFICATION OF SURFACES VIA PLASMA POLYMERIZATION**

Monika Stupavská<sup>1</sup>, Hana Dvořáková<sup>1</sup>, Lubomír Prokeš<sup>1</sup>, Vilma Buršíková<sup>1</sup>, Jan Čech<sup>1</sup>, Pavel Sťahel

<sup>1</sup>*Masaryk University, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Czech Republic, [stupavska@mail.muni.cz](mailto:stupavska@mail.muni.cz)*

Highly hydrophilic surfaces prepared by means of plasma polymerization could be a good alternative to classical direct plasma activation in simple atomic or molecular gasses. This approach enables the fast, simple and time stable hydrophilic modification of surfaces without dependence on the type and characteristics of treated material. In this work, the polypropylene surface was coated by thin layer of plasma polymer deposited from the mixture of propane-butane in nitrogen in atmospheric pressure plasma. This nontoxic and inexpensive mixture is already known to promote adhesion strength of polyester cords to rubber matrix [1]. Presented method has therefore a good potential to become a wider platform for creating cost-effective intermediate adhesive layers. Well hydrophilic thin surfaces were obtained for treatment time of 1 second and superhydrophilic surfaces were obtained after 10 seconds of plasma treatment. Thus prepared thin layers of plasma polymer have great time stability of wettability properties, are smooth, homogenous, moderately flexible and have good adhesion to the substrate. Wettability of deposited layer was characterized using water contact angle measurement and surface free energy evaluation. The chemical composition of deposited layer was characterized by XPS spectroscopy and ATR-FTIR spectroscopy. Surface morphology was observed via SEM.

*This research has been supported by the project CZ.1.05/2.1.00/03.0086 funded by European Regional Development Fund and project LO1411 (NPU I) funded by Ministry of Education Youth and Sports of Czech Republic.*

[1] Amir I., Hudec I., Volovič M., *Chem. Listy* **103** 1 (2009)

**3Po21****NON-CONTACT THICKNESS MEASUREMENT OF PROBLEMATIC LAYERS USING SEM WITH EDS DETECTOR**Tomáš Ingr*Katedra experimentální fyziky, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci*

One of the most important characteristics of nanomaterial samples is their size. Methods for measuring the thickness of 0D, 1D and 2D materials are significantly limited (e.g. AFM, TEM). The scanning electron microscope method with EDS detector eliminates some limitations of thickness measurement. The solution of the problems of measuring the layers thickness 1D material is demonstrated on a carbon fiber brush electrode with a Br layer. These problems are the curvature of the sample and preparation of samples for the contact methods. This method can measure one or more layers of samples that have a high roughness and have no sharp edges.

**3Po22****SEPARACE A REGENERACE TĚŽKÝCH KOVŮ POMOCÍ DVOUDIMENZIONÁLNÍ KARBOXYLOVÉ KYSELINY**Jan Kolařík<sup>1</sup>, Aristides Bakandritsos<sup>1</sup>, Radek Zbořil<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Regionální Centrum Pokročilých Technologí a Materiálů, Katedra Fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Palackého Univerzity v Olomouci, 17. Listopadu 1192/12, 77146 Olomouc, Česká Republika.*  
jan.kolarik@upol.cz

Znečištění vody těžkými kovy se stalo vážným environmentálním problémem. To vyžaduje neustálé snižování důlní činnosti a kontaminace životního prostředí. Proto je nejen separace ale i regenerace těžkých a vzácných kovů z vody klíčová výzva v budoucím řešení čištění vod. V tomto ohledu budou sorpční technologie hrát klíčovou roli pro svou vysokou účinnost a nízkou cenu. Výzvou je také recyklace sorbentů k opakovanému použití a také regenerace samotných kovů. Díky tomu jsou využívány i sorbenty s vyššími pořizovacími náklady a zároveň dochází ke snížení chemického odpadu a v neposlední řadě k recyklaci kovů. Abychom toho dosáhli, využili jsme selektivně a vysoce funkcionalizovaného grafenového derivátu s karboxylovými skupinami (Graphene Acid - GA), získaného z fluorografitu při velmi vysokých výtěžcích.[1]

Zde prezentujeme separaci a regeneraci iontů vzácných a těžkých kovů (Pb, Pd, Pt, Cd, Ga, In, Co, Cu, Zn) z kontaminované vody pomocí GA. Tyto ionty kovů jsou účinně adsorbovány na GA z kontaminované vody při nízkém pH (pH~3,5) a následně zpětně získány vymytím pomocí HCl. Nakonec je GA regeneraci opět připraveno k další separaci kovů. Tento cyklický proces se ukázal jako velmi efektivní a GA jako velmi stabilní pro opakované použití zachovávající si účinnost separace iontů kovů.

*Autoři tímto děkují za podporu internímu studentskému grantu (IGA) UP v Olomouci, (IGA\_PrF\_2018\_015) a Ministerstvu vnitra ČR (projekt č. VI 20162019017).*

[1] Bakandritsos A., et al.: *ACS Nano*. 11, 2982-2991 (2017).

**3Po23****ANTIMIKROBÁLNÍ ÚPRAVA TKANIN ZA VYUŽITÍ NANOČÁSTIC STŘÍBRA**Robert Pucek<sup>1</sup>, Barbora Křivová<sup>1</sup>, Aleš Panáček<sup>1</sup>, Milan Kolář<sup>2</sup>, Libor Kvítek<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Regionální Centrum Pokročilých Technologí a Materiálů, Katedra fyzikální chemie, Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc, Česká Republika, robert.pucek@upol.cz*  
<sup>2</sup>*Ústav mikrobiologie, Lékařská fakulta, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc, Česká Republika*

V prezentované studii byly zkoumány techniky impregnace různých typů tkanin (bavlna, polyester, bavlna/polyester, polyamid) nanočásticemi za účelem dosažení jejich antimikrobiálního charakteru.<sup>1</sup> Disperze nanočástic stříbra byly připravovány redukcí dusičnanu stříbrného pomocí tetrahydriboritanem sodným za přítomnosti sodné soli polyakrylové kyseliny o molekulové hmotnosti 15 000. Disperze nanočástic stříbra byly také připravovány za využití maltosy jakožto redeukčního činidla bez použití uvedeného stabilizátoru. Impregnace výše uvedených tkanin byla prováděna ponořením tkanin do disperze nanočástic stříbra (metoda *ex situ*) a také byla redukcí dusičnanu sodného ve vodném prostředí prováděna přímo za přítomnosti uvedených tkanin (metoda *in situ*). Velikost nanočástic stříbra na tkaninách se pohybovala v rozmezí 20 nm až 40 nm. Antimikrobiální účinnost impregnovaných tkanin byla testována na bakteriálních kmenech *Staphylococcus Aureus* a *Escherichia Coli*.

*Práce vznikla za finanční podpory projektu LO1305 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovi České republiky a projektu TE02000006 Technologické agentury České republiky.*

[1] Eremenko A. M., Petrik I.S., Smirnova N.P., Rudenko A.V., Marikvas Y.S., *Nanoscale Research* 11, Article num. 28, (2016).

## POSTERY - SEKCIA 4: ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA

### 4Po01

#### MOŽNOSTI ANALÝZY OBSAHU ANORGANICKÉHO UHLÍKU V PREKURZORECH PRO PŘÍPRAVU VYSOKOTEPLNÍCH SUPRAVODIČŮ

Mario Babuněk<sup>1,3</sup>, Ondřej Jankovský<sup>1</sup>, Tomáš Hlásek<sup>2</sup>, Vilém Bartůněk<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav anorganické chemie, Fakulta chemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6 - Dejvice, 166 28, Česká republika

<sup>2</sup>CAN SUPERCONDUCTORS, s.r.o., Ringhofferova 66, Kamenice 251 68, Česká republika

<sup>3</sup>ALS Czech Republic, s.r.o., Na Harfě 336/9, Praha 9, 190 00, Česká republika  
mario.babunek@alsglobal.com

Vysokoteplotní supravodiče na bázi kuprátů (YBCO, REBCO, BSCO) se dají použít k mnoha aplikacím v oblasti dopravy a energetiky. Pro přípravu je používána směs kalcinovaných oxidových prekurzorů, kde je důležitá relativně nízká koncentrace zbytkových uhličitánů a dlejších složek generujících plynou fází při vysokoteplotním zpracování produktu. Naopak určité množství zbytkových uhličitánů může při zpracování způsobit vznik defektů, sloužících jako pinningová centra a zlepšujících superavodivé vlastnosti materiálu. V této práci byla zkoumána možnost stanovení obsahu uhličitánu v prekurzorovém prášku pro přípravu YBCO supravodivých disků pomocí metody TIC (total inorganic carbon) coulometrickou titrací. Výsledky potvrdily dostatečnou účinnost kalcinačního procesu i vhodnost použité analytické metody.

*Tato práce vznikla za podpory grantu TAČR, program THĚTA, číslo grantu TK01030200.*

### 4Po02

#### ALKYKSILYL- A ALKYLSTANYLSELENIDY JAKO ALD PREKURZORY PRO DEPOZICE NANOVRSTEV

Jaroslav Charvot<sup>1</sup>, Filip Bureš<sup>1</sup>, Jan Macák<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, 53210 Pardubice, Česká republika (st41999@student.upce.cz)

<sup>2</sup> Centrum materiálů a nanotechnologií Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, 53002 Pardubice, Česká republika

Technologie ALD (Atomic Layer Deposition) umožňuje nanášet tenké vrstvy s minimálním počtem defektů, a to i na různě tvarované povrchy jako nanočástice či nanotrubičky. Alespoň jeden ALD prekurzor – tedy sloučeninu, která obsahuje nanášený atom je znám u téměř všech neradioaktivních prvků periodické tabulky. Pro selen však byly představeny vedle toxického H<sub>2</sub>Se a Me<sub>2</sub>Se (resp. Me<sub>2</sub>Se<sub>2</sub>) pouze bis(alkylsilyl)selenidy [1]. Tato práce se soustředí na přípravu bis(alkylsilyl)selenidů a analogických bis(alkylstanyl)selenidů jako potenciálních prekurzorů pro ALD technologii. Kritické porovnání přípravy látek je doplněno jejich charakterizací a dále zkoumáním termálních vlastností pomocí TGA a DSC, jakožto důležitého kritéria při výběru prekurzoru. Vybrané produkty pak byly úspěšně využity pro depozice atomárních vrstev. [2, 3]

*Tento projekt je financován Grantovou agenturou České republiky (18-03881S).*

[1] V. Pore, T. Hatanpää, M. Ritala, M. Leskelä, *J. Am. Chem. Soc.*, 131 (2009) 3478-3480.

[2] S. Ng, M. Krbal, R. Zazpe, J. Příkryl, J. Charvot, F. Dvořák, L. Strizik, S. Slang, H. Sopha, Y. Kosto, V. Matolín, F. K. Yam, F. Bureš, J. M. Macák, *Adv. Mater. Interfaces* (2017) 1701146.

[3] F. Dvořák, R. Zazpe, M. Krbal, H. Sopha, J. Příkryl, S. Ng, L. Hromádka, F. Bureš, J. M. Macák, *Appl. Mater. Today* 14 (2019) 1-20.

**4Po03****NIKLEM AKTIVOVANÉ ŠTĚPENÍ PEPTIDŮ – DFT ANALÝZA REAKČNÍHO MECHANISMU**

Adéla Gottwaldová, Michal Čajan

*Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Oddělení Biologicky aktivní komplexy a molekulové magnety, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc.  
adela.gottwaldova01@upol.cz, michal.cajan@upol.cz*

Hydrolýza peptidické vazby aktivovaná koordinací přechodného kovu je alternativou ke standardním metodám sekvenace peptidických řetězců, například enzymatického štěpení. V tomto smyslu byla jako štěpící činidla pro oligopeptidy, polypeptidy či proteiny testována celá řada iontů přechodných kovů a jejich komplexů. [1] Z hlediska popisu průběhu štěpné reakce byly na základě experimentálních kinetických měření navrženy tři typy reakčních mechanismů – mechanismus oxidativní, fotooxidativní a hydrolytický. [2] Práce je zaměřena na teoretickou analýzu vztahů mezi strukturou a stabilitou komplexů niklu s oligopeptidy s důrazem na aktivaci procesů vedoucích ke štěpení peptidické vazby. DFT kvantově chemickou analýzou na bázi B3LYP a PBE funkcionálů byly lokalizovány klíčové body reakčních mechanismů na PES a studována jejich struktura, distribuce elektronové hustoty a související vlastnosti. Detailně byl rovněž studován vliv možného složení koordinační sféry komplexního útvaru a funkcionalizace peptidu v okolí štěpené vazby na vlastnosti a energii reakčních meziproductů i tranzitních stavů.

*Práce byla realizována s podporou projektů LO1305 a PrF\_2019\_009 financovaných Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy ČR.*

[1] Belczyk-Ciesielska, A., Zawisza, I. A., Mital, M., Bonna, A., Bał, W.: Sequence-Specific Cu(II)-Dependent Peptide Bond Hydrolysis: Similarities and Differences with the Ni(II)-Dependent Reaction. *Inorg. Chem.* 2014, 53, 4639-4646.

[2] Wezynfeld, N. E., Fraczyk, T., Bał, W.: Metal assisted peptide bond hydrolysis: Chemistry, biotechnology and toxicological implications. *Coord. Chem. Rev.* 2016, 327-328, 166-187.

**4Po04****PREPARING ULTRA-HARD TITANIUM CERMETS**Vlastimil Brožek<sup>1</sup>, Libor Mastný<sup>2</sup>, Pavel Rohan<sup>3</sup>, Jan Horníček<sup>2</sup>, Miroslav Šimek<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Plasma Physics CAS v.v.i., Za Slovankou 1782/3, 182 00 Prague, Czech Republic, EU,  
brozek@ipp.cas.cz*

<sup>2</sup>*University of Chemistry and Technology, Technická 1905/5, 166 28 Prague 6, Libor.Mastny@vscht.cz*

<sup>3</sup>*Czech Technical University in Prague, Technická 1902/4,, 166 07 Prague 6, pavel.rohan@fs.cvut.cz*

The hardest materials, besides diamond, which are technically attainable as well as affordable, include silicon carbide, boron carbide, titanium diboride, titanium trisilicide, titanium carbide and titanium nitride. The hardness ranges from 36 GPa (SiC) to 29 GPa (TiN), thus significantly exceeding hardness of corundum (14 GPa). Another characterization is a relatively low density, reaching max. of 5 g / cm<sup>3</sup>. These compounds can be formed primarily only in form of powders or thin layers. It is technologically challenging to compact them due to their extremely high melting point, being around 3000 K. Their main industrial application is in machining and mechanical wear protection. Powdered materials are processed into appropriate shape and size by sintering, separately or with metal or ceramic binders.

Another, lesser publicly stressed, area of application is anti-ballistic protection. However, the fragility of hard materials complicates the selection of optimal binder component. In this study, we focused on reactions of the above-mentioned materials with elementary titanium at the highest available melting temperatures in the electric arc. Under these conditions, the molten titanium reacts to form additional new hard compounds and acts in excess as sintering binder. Such combinations increase the fracture toughness of ultra-hard metal-ceramic materials, making them a suitable candidate for anti-ballistic protection to a certain extent.

**4Po05****FOTOASISTOVANÉ LEPTÁNÍ TENKÝCH VRSTEV CHALKOGENIDOVÉHO SKLA AS<sub>2</sub>S<sub>3</sub>**Jiří Jančálek<sup>1</sup>, Karel Pálka<sup>1,2</sup>, Miroslav Vlček<sup>2</sup><sup>1</sup>*Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Pardubice 532 10, Česká republika*<sup>2</sup>*Centrum materiálů a nanotechnologií, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Pardubice 532 10, Česká republika*

Chalkogenidová skla a jejich tenké vrstvy jsou materiály studované pro své výjimečné optické vlastnosti, zvláště pro vysoké hodnoty indexu lomu a širokou oblast propustnosti v IČ oblasti spektra. Pro řadu aplikací tenkých vrstev chalkogenidových skel je třeba jejich strukturování, k čemuž je využíváno řady litografických metod (optická litografie, litografie elektronovým svazkem, či přímý laserový zápis aj. [1,2]), z nichž velká část využívá mokrého leptání.

V rámci této práce byl studován vliv fyzikálně-chemických podmínek na selektivitu fotoasistovaného leptání (simultánní mokré leptání a expozice monochromatickým zářením) tenkých vrstev As<sub>2</sub>S<sub>3</sub> deponovaných metodami vakuového napařování a spin-coating v aminových leptacích lázních. Na rozdíl od vrstev leptaných po expozici, kdy u napařených tenkých vrstev dochází ke zvýšení chemické odolnosti v důsledku fotopolymerace [3], bylo v případě fotoasistovaného leptání vrstev pozorováno zpravidla snížení chemické odolnosti. Byla zjištěna závislost selektivity leptání (poměr leptacích rychlostí exponovaných a neexponovaných vzorků) na metodě depozice tenkých vrstev, intenzitě expozičního záření, teplotní historii vzorků i složení použité lázně. Vysoká selektivita leptání byla pozorována i při leptání temperovaných napařených vrstev, které jsou vzhledem k stabilizované struktuře málo fotocitlivé pro tradiční litografické strukturování. Díky možnosti řízení selektivity leptání podmínkami leptání a díky konstrukční jednoduchosti metody je fotoasistované leptání zajímavou alternativou běžně používaných metod strukturování.

*Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky prostřednictvím projektů LM2015082, ED4.100/11.0251 a No.CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_013/0001829 a Evropskému fondu pro regionální rozvoj prostřednictvím projektu No.CZ.02.1.01/0.0/0.0/17\_048/0007376.*

[1] M. Vlček, H. Jain, J. Optoelectr. Adv. Mater. 8 (2006) 2108-2111.

[2] A. Zakery, S.R. Elliott, J. Non-Cryst. Solids 330 (2003) 1-12.

[3] A. Kovalskiy, M. Vlček, H. Jain, A. Fiserova, C.M. Waits, M. Dubey, J. Non-Cryst. Solids 352 (2006) 589-594.

**4Po06****COMPOUNDS OF 1H-PYRAZOLE-1-CARBOXAMIDINE – CRYSTAL STRUCTURE; NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES AND INTERPRETATION OF VIBRATIONAL SPECTRA USING QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS**Soňa Kohúteková<sup>1</sup>, Irena Matulková<sup>1</sup>, Ivana Císařová<sup>1</sup>, Róbert Gyepes<sup>1</sup>, Ivan Němec<sup>1</sup><sup>1</sup>*Charles University, Faculty of Science, Department of Inorganic Chemistry, Hlavova 8, 128 40 Praha 2, Czech Republic  
kohuteks@natur.cuni.cz*

The field of nonlinear optics (NLO) is currently one of the most attractive fields of research because of its technical applications in various areas. Wide range of applications includes generation of new laser lines, e.g. second harmonic generation (SHG), optical communication and optical data storage. [1]

Recent approaches of crystal engineering are used for preparation of materials with appropriate symmetry. Very promising type of compounds are molecular crystals in which organic molecules are responsible for NLO properties. These cations are usually derivatives of heteroaromatic rings with highly delocalised  $\pi$ -electron systems. Unfortunately, due to their high value of dipole moment they tend to form unwanted centrosymmetric pairs. Therefore, selected acids are used as co-crystallisation partners, which are inter-connected with cations by hydrogen bonds. Mostly N-H...N, N-H...O or O-H...O H-bonds are formed. [2]

In this poster selected crystalline compounds of 1H-pyrazole-1-carboxamide (**pcam**) will be described. Prepared materials were characterised mainly by the means of vibrational spectroscopy and X-ray diffraction analysis. Quantum-chemical calculations were used for a prediction of NLO potential as well as for interpretation of recorded vibrational spectra. Lastly, measurements of SHG efficiency of powder samples with non-centrosymmetric crystal structures were performed.

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

- [1] Träger, F. (Ed.), *Springer Handbook of Lasers and Optics* (Springer, Berlin, 2007).  
 [2] Matulková, I.; Němec, I.; Němec, P.: *Československý časopis pro fyziku*. 61 (2), 76-84 (2011).

**4Po07****PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF MOLTEN LANTHANIDE SYSTEMS**

Blanka Kubíková<sup>1</sup>, Jarmila Mlynáriková<sup>1</sup>, Eva Mikšíková<sup>1</sup>, Miroslav Boča<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Ústav anorganickej chémie SAV, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, blanka.kubikova@savba.sk*

The systems with the rare-earth elements and their compounds are widely investigated in the last decades. Besides their applications based on their magnetic and optical properties, the research of molten lanthanides mixtures is related to metallurgy and/or nuclear energy applications and the reprocessing of spent nuclear fuel.

This work is focused on molten systems containing 4 lanthanide fluorides LaF<sub>3</sub>, SmF<sub>3</sub>, GdF<sub>3</sub> and NdF<sub>3</sub>, and comparison of their physico-chemical properties. Phase equilibrium, density and volume properties have been investigated in the eutectic composition of LiF-CaF<sub>2</sub>.

The results show similarities as well as differences in behavior of investigated properties. Unusual behavior was observed in all four cases, when molar volumes decrease with initial LnF<sub>3</sub> additions up to 1 mol% of LnF<sub>3</sub>. Further LnF<sub>3</sub> additions result in molar volumes increase. In the case of GdF<sub>3</sub> system anomalous molar volume behavior was observed.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-15-0479 and by the Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic and the Slovak Academy of Sciences under no. 2/0114/16.*

**4Po08****SYNTEZA KURKUMINOIDOV A ICH KOVOVÝCH KOMPLEXOV AKO POTENCIÁLNE BIOLOGICKY AKTÍVNE LÁTKY**

Jana Leskovská<sup>1</sup>, Jindra Valentová<sup>1</sup>, Natalia Miklášová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Univerzita Komenského v Bratislave, Farmaceutická fakulta, Katedra Chemickej teórie liečiv, Kalinčiakova 8, 832 32 Bratislava 3, leskovska5@uniba.sk*

Kurkuminoidy sú bioaktívne látky prírodného pôvodu extrahované z kurkumy pravej (*Zingiberaceae*). Sú známe pre svoju chemopreventívnu a protinádorovú aktivitu proti niekoľkým typom malignít, ktoré sú schopné modulovať niekoľko molekulárnych dráh a cieľových buniek zapojených do rôznych štádií iniciácie, rastu a metastáz nádorov. Prášok koreňa kurkumy obsahuje 3 hlavné komponenty – kurkumín, bisdemetoxylkurkumín a demetoxylkurkumín. Kurkumín, ktorý sa nachádza v kurkume s percentuálnym zastúpením približne 95 % disponuje veľmi nízkou stabilitou, rozpustnosťou a biologickou dostupnosťou. Bisdemetoxylkurkumín (BDMC – približne 3 % -né zastúpenie) vykazuje vyššiu biologickú stabilitu oproti kurkumínu. Vyznačuje sa protinádorovým účinkom – zasahuje v rôznych štádiách karcinogenézy a má antioxidantné a protizápalové účinky [1]. Tvorbou komplexov kurkuminooidov s rôznymi kovmi, ako napríklad Ru, Pd je možné zvýšiť biologickú dostupnosť a aktivitu kurkuminooidov.

Cieľom našej práce bola syntéza, štruktúrna charakterizácia a porovnanie biologickej aktivity nových ruténiových komplexov, ktoré boli pripravené modifikovanou metódou syntézy intermediátov [2] ruténiových komplexov obsahujúcich ligandy 2,2'-bipyridyl a 4,4'-dimetyl-2,2'-dipyridyl [3] s jednotlivými derivátmi kurkumínu v prítomnosti dimetylformamidu.

*Problematika bola riešená za podpory grantu FaF UK/19/2019 pre mladých vedeckých pracovníkov.*

- [1] Ramezani M, Hatamipour M, Sahebkar A. *J Cell Physiol*. 233, 880–887 (2018).  
 [2] Ozawa H, Kawaguchi H, Okuyama Y, Arakawa H. *Chem Lett*. 40, 658–60 (2011).  
 [3] Al-Rawashdeh NAF, Chatterjee S, Krause JA, Connick WB. 53, 294–307 (2014).

**4Po09****ADSORPCE DUSÍKU A OXIDU UHLÍČITÉHO NA BIOCHAR**

Miloslav Lhotka<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*VŠCHT Praha, Ústav anorganické technologie, Technická 5, Praha 6-Dejvice, 166 28, Tel.: +420220445019, e-mail: Miloslav.Lhotka@vscht.cz*

Biochar je vysoce porézní materiál, vyrobený pyrolýzou z různých surovin organického původu. [1]. Jako vstupní materiál byla použita biomasa rostlinných a dřevinných rostlin, která byla zpracována pomalou pyrolýzou při 5



teplotách (400-600°C). Vzorky biochar byly charakterizovány adsorpcí dusíku a oxidu uhličitého. Specifický povrch biochar ( $S_{\text{BET}}$  a  $S_{\text{t-plot}}$ ), analýza mikropórů a distribuce objemu mezopórů byly měřeny na přístroji 3Flex za použití objemové sorpční techniky ( $\text{N}_2$  při 77 K). Adsorpční izotermny byly vyhodnoceny metodou BET pro specifický povrch, objem mikropórů metodou t-plot a distribuce objemu mezopórů metodou BJH. Objem mikropórů a izosterické teplo adsorpce byly měřeny metodou adsorpce oxidu uhličitého ( $\text{CO}_2$  při 273-333 K) na přístroji ASAP 2050. Adsorpční izotermny vzorků biochar odpovídají adsorpčním izotermám typu Ib a IVa, vzorky tedy představují směs mikropórů a mezopórů s klasickým typem hysterezní smyčky H4, která odpovídá šterbinovým pórům. Hodnota specifického povrchu se měnila podle materiálu použitého pro jeho výrobu. Zpracováním dat z adsorpčních izoterm biochar za použití t-plotu bylo zjištěno, že specifický povrch mezopórů ( $S_{\text{t-plot}}$ ) je významně nižší než specifický povrch metodou BET. V této studii byly získány nové výsledky týkající se komplexní analýzy biochar. Závěrem lze konstatovat, že texturní vlastnosti biocharu hrají klíčovou roli v pochopení výběru vstupní suroviny a mechanismu pyrolýzy.

*This work was realized within the Operational Programme Prague – Competitiveness (CZ.2.16/3.1.00/24501) and “National Program of Sustainability” (NPU I LO1613) MSMT-43760/2015 and the project 19-02836S (Grant Agency of Czech Republic).*

[1] J. Lehmann et al., *Mitig. Adapt. Strategies Glob. Chang.* 2006, 11, 403.

[2] Břendová, K., et al. (2017). "Biochar physicochemical parameters as a result of feedstock material and pyrolysis temperature: predictable for the fate of biochar in soil?" *Environmental Geochemistry and Health* 39(6): 1381-1395

#### 4Po10

### SYNTEZA A VLASTNOSTI ČÁSTEČNĚ NAOXIDOVANÉHO NANOGRAFITU

Boris Lochman<sup>1</sup>, Michal Lojka<sup>1</sup>, Adéla Jiříčková<sup>1</sup>, Ondřej Jankovský<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Ústav anorganické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha, [b.lochman@centrum.cz](mailto:b.lochman@centrum.cz)*

Oxid nanogرافitu je perspektivní materiál pro výrobu redukováného grafenu nebo jako složka kompozitních materiálů. V rámci výzkumu byla tzv. manganistanovou metodou [1] připravena řada vzorků částečně naoxidovaného nanogرافitu, na jejichž přípravu byla použita různá množství oxidačního činidla. Následně byl analyzován vliv množství oxidačního činidla na chemické složení. Morfologie a struktura byla studována pomocí SEM, XRD a Ramanovy spektroskopie, chemické složení bylo analyzováno elementární spalovací analýzou, EDS a XPS. Teplotní stabilita byla studována metodou STA-MS v argonové atmosféře, elektrochemické vlastnosti byly zkoumány pomocí cyklické voltametrie. Data byla porovnána s již dříve připravenými vzorky oxidu mikrografitu a byl posouzen vliv velikosti částic na oxidaci grafitu.

[1] Marcano, D.C., et al., *Improved Synthesis of Graphene Oxide.* *Acs Nano*, 2010. 4(8): p. 4806-4814.

#### 4Po11

### DESTRUCTION OF TETRAFLUOROMETHANE IN A SLIDING ELECTRIC DISCHARGE

Libor Mastný<sup>1</sup>, Oldřich Živný<sup>2</sup>, Vlastimil Brožek<sup>2</sup>, Jan Horníček<sup>1</sup>, Miroslav Šimek<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*University of Chemistry and Technology, Technická 1905/5, 166 28 Prague 6, [Libor.Mastny@vscht.cz](mailto:Libor.Mastny@vscht.cz)*

<sup>2</sup>*Institute of Plasma Physics CAS v.v.i., Za Slovankou 1782/3, 182 00 Prague, Czech Republic, EU, [brozek@ipp.cas.cz](mailto:brozek@ipp.cas.cz)*

The decomposition and elimination of CFCs is successfully addressed by both chemical and thermal processes, which is however financially challenging and require expensive equipment. The most effective disposal procedures include the decomposition in the WSP® water-stabilized plasma generator or in the electrical discharge procedures developed and published by the Institute of Plasma Physics of the Academy of Sciences, Czech Republic.

The results of  $\text{CF}_4$  decomposition experiments in moving electrical discharge are described in this study. A new type of glide-arc apparatus with individually cooled titanium electrodes, 0.2 mm slot, 1.5 kW, 30 kV electrical power was constructed. The electrode tilt angle affecting the length of the electrical discharge is an important factor in this type of apparatus. Since  $\text{CF}_4$  is a typical electric discharge interrupter,  $\text{CF}_4$  vapor was fed between the electrodes mixed with argon or air, so that the discharge was continuous up to concentrations of about 90% of  $\text{CF}_4$ . Fluoride decomposition products were collected in alkaline washes with KOH or  $\text{Ba}(\text{OH})_2$ . The process efficiency evaluated from the input / output ratio was 30-40 %. Decomposition of the input  $\text{CF}_4$  and capture of decomposed products is influenced by the structure and quality of absorbers, in this case realized by glass frits with ISO 4793-S0-S1 grain . Quantitative results can be influenced by cascaded wiring of individual glide-arc segments, which is allowed by the proposed design.

*Acknowledgement: This work was supported by the Czech Science Foundation (GA CR) under project No. GC17-10246J.*

#### 4Po12

### STRUKTUROVÁNÍ TENKÝCH VRSTEV AMORFNÍCH CHALKOGENIDŮ POMOCÍ ELEKTRONOVÉ LITOGRAFIE

Karel Pálka<sup>1,2</sup>, Jiří Jančálek<sup>1</sup>, Michal Kurka<sup>1</sup>, Stanislav Šlang<sup>2</sup>, Miroslav Vlček<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Pardubice 532 10, Česká republika, karel.palka@upce.cz*

<sup>2</sup>*Centrum materiálů a nanotechnologií, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Pardubice 532 10, Česká republika*

Chalkogenidová skla jsou intenzivně studovanými materiály zejména pro své výjimečné optické vlastnosti - vysoké hodnoty indexu lomu, širokou oblast propustnosti v infračervené oblasti spektra a častou fotocitlivost (v závislosti na složení, formě a historii vzorku). Fotoindukovaná změna chemické odolnosti spolu s dobrou rozpustností chalkogenidových skel v zásaditých roztocích může být využita pro jejich selektivní leptání. Řada praktických aplikací chalkogenidových skel vyžaduje řízené strukturování jejich povrchu. K tomu lze využít celou řadu metod jako např.: hot embossing, přímý zápis laserovým svazkem, či v případě fotocitlivých vzorků rozličné litografické metody. Pro přípravu mikro/nano-struktur lze s výhodou použít elektronové litografie, která umožňuje přípravu nanostruktur s rozměry až v řádech jednotek nanometrů [1].

Prezentovaná práce ukazuje možnosti využití elektronové litografie pro strukturování tenkých vrstev arsenových chalkogenidových skel. Pro vyvolání naexponovaných struktur bylo použito mokré leptání v organických lázních na bázi aminů. Byl studován vliv parametrů expozice elektronovým svazkem (urychlovací napětí a expoziční dávka), složení, metody depozice a teplotní historie vzorku na změnu chemické odolnosti chalkogenidového skla. Optimalizované parametry byly využity pro přípravu periodických a neperiodických mikro a nanostruktur.

*Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky prostřednictvím projektů LM2015082, ED4.100/11.0251 a No.CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_013/0001829 a Evropskému fondu pro regionální rozvoj prostřednictvím projektu No.CZ.02.1.01/0.0/0.0/17\_048/0007376.*

[1] A. Kovalskiy, J. Cech, Mir. Vlcek, C.M. Waits, M. Dubey, W.R. Heffner and H. Jain, J. Micro/Nanolith. MEMS MOEMS 8(4) (2009) 043012.

#### 4Po13

### VÝBĚR A VYUŽITÍ SKELNÝCH VLÁKEN VE HMOTĚ TVRZENÉHO KAMENE

Jakub Píchal, Libor Mastný, Renáta Slavětinská

*Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 1905/5, 166 28 Praha 6, Libor.Mastny@vscht.cz*

Prezentovaná práce je součástí programu aplikovaného výzkumu a experimentálního vývoje, jehož účastníkem je VŠCHT Praha, COC Pardubice a hlavním řešitelem Technistone, a.s. Hradec Králové. Jedním z cílů projektu je získání desek tvrzeného kamene s lepšími vlastnostmi z hlediska tepelného šoku a pevnosti v ohybu. Jednou z metod, jak toho docílit, je využití vhodné vláknité suroviny. V práci byl srovnán vliv skelných vláken s různými vlastnostmi a čedičové sítě v deskách umělého kamene na jejich odolnost proti suchému teplu a pevnosti v ohybu. Příměs skelného vlákna ovlivnila vzhled připravených desek a změnu barvy tvrzeného kamene v průběhu testu odolnosti proti suchému teplu. U tepelně namáhaných vzorků obsahujících skelná vlákna nedošlo ke snížení hodnoty pevnosti v ohybu. Skelná vlákna měla pozitivní vliv na lomový mechanismus, který nebyl tak destruktivní jako v případě referenčních vzorků. Vyšší obsah vláknité suroviny měl příznivější vliv na testované vlastnosti, delší a pevnější vlákna byla výhodnější ve srovnání s vláknem kratším a méně pevným. Aplikace čedičové sítě pro daný typ desek se projevila jako nevhodná.

*Společný programový projekt vzniká za podpory Ministerstva průmyslu a obchodu, 3 výzva, TRIO.*

**4Po14****HODNOCENÍ FOTOAKTIVITY RŮZNÝCH TYPŮ TITANOVÉ BĚLOBY V DLAŽDICÍCH TVRZENÉHO KAMENE**Michaela Drozdová, Libor Mastný, Daniel Bartoň, Ondřej Ruml*Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 1905/5, 166 28 Praha 6, Libor.Mastny@vscht.cz*

Předkládaná práce se zabývá studiem nové modifikace tvrzeného kamene zaměřené na oblast samočisticích vlastností zajišťujících degradaci organických polutantů působením anorganických plniv zabudovaných do matrice tvrzeného kamene. Fotoaktivita byla zkoumána u vzorků průmyslově vyráběného fotoaktivního oxidu titaničitého Pretiox CG a běžně vyráběných typů pigmentované titanové běloby. Schopnost degradace organických polutantů resp. fotoaktivita byla měřena rozkladem barevného indikátoru 2-nitroso-1-naftolu při expozici tvrzeného kamene světlu.

Aplikace použitých typů Pretiox CG zařazených z hlediska velikosti částic mezi nanovýrobky však požadovaný efekt nepřinesla. Ve vysokých koncentracích navíc docházelo po expozici světlu k modrání testovaných vzorků. Použité nanočástice titanové běloby nevykazují pigmentové vlastnosti a jejich cena by při aplikaci do výrobku významně zvyšovala náklady.

Při porovnání fotoaktivity aditiva anatas:rutil zapracovaného do dlaždice je zřejmé, že použitím kombinace běžně vyráběných typů titanové běloby lze připravit dlaždice, které vykazují určité fotokatalytické chování. Množství použitého pigmentu je významně vyšší, než v případě nanotypů. Při srovnání se vzorky obsahujícími nano oxid titaničitý jsou zřejmé výhody v ceně a relativně stálé barvě dlaždice obsahující běžné typy titanové běloby.

Práce je součástí programu aplikovaného výzkumu a experimentálního vývoje, jehož účastníkem je VŠCHT Praha, COC Pardubice a hlavním řešitelem Technistone, a.s. Hradec Králové

*Společný programový projekt vzniká za podpory Ministerstva průmyslu a obchodu, 3 výzva, TRIO.*

**4Po15****ROZKLAD FLUOROVANÝCH UHLOVODÍKŮ TECHNOLOGIÍ GLID-ARC**Libor Mastný<sup>1</sup>, Michaela Drozdová<sup>1</sup>, Miroslav Šimek<sup>1</sup>, Vlastimil Brožek<sup>2</sup><sup>1</sup>*Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 1905/5, 166 28 Praha 6, Libor.Mastny@vscht.cz*<sup>2</sup>*Ústav fyziky plazmatu AVČR v.v.i. Praha, za Slovankou 3, 182 00 Praha 8, brozek@ipp.cas.cz*

Freony a halony představují velmi stabilní látky, které se rozkládají fotochemicky až ve vyšších vrstvách atmosféry. Vzniklé radikály chloru a bromu napadají molekuly ozonu a ničí tak přirozenou vrstvu ozonu.

Generace plazmatu elektrickým výbojem má řadu variant, z nichž metoda klouzavého výboje, známá pod pojmem Glid-Arc, je vhodným laboratorním nástrojem k efektivnímu ověření plazmochemických rozkladů perzistentních organických látek.

Cílem této práce bylo pomocí metody Glid-Arc rozložit vybrané zástupce ze skupiny freonů a charakterizovat vznikající rozkladné produkty. Použitá aparatura, sestavená na VŠCHT, pracující na principu doutnavého výboje, umožnila vzhledem k malé šířce kanálu efektivní rozklad vstupujících uhlovodíků.

Funkčnost aparatury byla ověřena pomocí rozkladu CF<sub>4</sub> v atmosféře vzduchu i argonu. V případě argonu docházelo ke zhášení výboje a vylučování elementárního uhlíku na elektrodách.

V samotném experimentu byly rozkládány freony CFC-112, CFC-113 a CFC-114B2. Rozkladné produkty byly zachycovány do dvou po sobě jdoucích promývaček s roztokem triethylaminu a chloroformu. V případě halonu docházelo ke zhášení výboje kvůli přítomnému bromu. Analýza NMR prokázala vznik triethylammonium fluoridu a potvrdila účinný rozklad těchto inertních látek.

*Tato práce byla podpořena Grantovou agenturou ČR v rámci projektu č. GC17-10246J.*

**4Po16****FLUORO-, OXO- AND OXOFLUORO-ALUMINATES: SYNTHESIS, AND THEIR STABILITY**

František Šimko<sup>1</sup>, Aydar Rakhmatullin<sup>2</sup>, Emmanuel Véron<sup>2</sup>, Mathieu Allix<sup>2</sup>, Pierre Florian<sup>2</sup>, Tomáš Bučko<sup>3</sup>, Zuzana Netriová<sup>1</sup>, Michal Korenko<sup>1</sup>, Catherine Bessada<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, 845 36 Bratislava, Slovakia, uachsim@savba.sk

<sup>2</sup> Conditions Extrêmes et Matériaux: Haute Température et Irradiation, CEMHTI, UPR 3079 -CNRS Univ. Orléans 450 71, Orléans, France.

<sup>3</sup> Faculty of Natural Sciences, Comenius University, 841 04 Bratislava, Slovakia.

A critical evaluation of the chemistry and the thermal stability of fluoro-, oxo- and oxo-fluoro-aluminates in the MF–AlF<sub>3</sub>–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–M<sub>2</sub>O (M = K, Rb, Cs) systems was carried out.

Precise research of the binary MF–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (M = K, Rb, Cs) sub-systems was done by means of combining X-ray powder diffraction, high field solid state NMR spectroscopy, and thermal analysis methods. M<sub>3</sub>AlF<sub>6</sub>, MAlO<sub>2</sub>, M<sub>2</sub>Al<sub>22</sub>O<sub>34</sub> and new phases, M<sub>2</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>F<sub>2</sub>, were identified in the system. The structure of this new rubidium and cesium oxo-fluoro-aluminate was determined. It is build up from single layers of oxygen connected (AlO<sub>3</sub>F) tetrahedra, those layers being separated into by fluorine atoms. The similar structural arrangement of O<sub>3</sub>Al–O–AlO<sub>3</sub> and FO<sub>2</sub>Al–O–AlO<sub>2</sub>F tetrahedra of the conduction plans in M<sub>2</sub>Al<sub>22</sub>O<sub>34</sub> and M<sub>2</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>F<sub>2</sub> were confirmed by <sup>27</sup>Al NMR measurements. The thermal analysis of MF–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system revealed that it can be more defined as a pseudo-binary sub-systems of the more general quaternary MF–AlF<sub>3</sub>–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>–M<sub>2</sub>O systems. From phase analysis of individual phase fields, the mutual metastable behavior of all founded phases can be considered. It was observed that fluoro- and oxo-aluminates existing abreast. M<sub>2</sub>Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>F<sub>2</sub> is more stable under high-temperature. Fluoro- and oxo-aluminates are metastable precursors of thermodynamically more stable structure of oxo-fluoro-aluminates.

*This study was financially supported by the CAMPUS FRANCE (PHC STEFANIK project N°31799NM), the Slovak bilateral project (N° SK-FR-2013-0039) and Slovak Grant Agencies (VEGA-2/0060/19; APVV-15-0738). We acknowledge the facilities of "IR RMN" at the NMR 850MHz spectrometer.*

**4Po17****PŘÍPRAVA RŮZNÝCH VELIKOSTÍ NANO-PINNINGOVÝCH CENTER PRO VYSOKOTEPLTNÍ SUPRAVODIVÝ SYSTÉM REBCO**

Kryštof Skrbek<sup>1</sup>, Ondřej Jankovský<sup>1</sup>, Tomáš Hlásek<sup>2</sup>, Vilém Bertůněk<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Ústav anorganické chemie, Fakulta chemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6 - Dejvice, 166 28, Česká republika

<sup>2</sup> CAN SUPERCONDUCTORS, s.r.o., Ringhofferova 66, Kamenice 251 68, Česká republika  
krystof.skrbek@vscht.cz

Vysokoteplotní supravodiče REBCO se dají použít k mnoha aplikacím. Jednou z nich je využití supravodivých disků pro magnetickou levitaci, využívající magnetického pole zachyceného v objemu supravodiče při provozních podmínkách. Pro vylepšení levitační síly je vhodné použít přísadu pinningových center ve formě oxidových nanočástic určitých velikostí. Příprava oxidových nanočástic precipitačním způsobem představuje velice snadnou a rychlou metodu, zajišťující vznik nanočástic o rozměrech velice malých, v řádech jednotek nanometrů. Vzhledem k potřebě zkoumat různé kategorie velikostí nanočástic se ovšem precipitační reakce může zdát nevhodnou z důvodu příliš komplikovaného ovlivňování kinetiky reakce a tím i ovlivňování velikosti připravených nanočástic. V této práci bylo proto studováno ovlivňování růstu nanočástic připravených precipitační metodou vlivem zvýšené teploty.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MPO TRIO, program Zéta, číslo grantu FV10522.*

**4Po18****KRYŠTALOCHEMIA VYBRANÝCH KOMPLEXOV NIKLU(II) S 2-(AMINOETYL)PYRIDÍNOM**

Slavomíra Šterbinská, Juraj Kuchár, Juraj Černák

Ústav chemických vied, Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice,

\*slavomira.sterbinska@student.upjs.sk

V rámci širšieho štúdia komplexov Ni(II) ako magneticky aktívnych materiálov [1-3] sa experimentálne študovali vodno-etanolové sústavy NiX<sub>2</sub> – 2aepy (X = Cl a NO<sub>3</sub>; 2aepy = 2-(aminoetyl)pyridín). V podobe monokryštálov

sa izolovali dve komplexné zlúčeniny zloženia  $[\text{Ni}(\text{2aepy})_2\text{Cl}(\text{H}_2\text{O})]\text{Cl}\cdot\text{H}_2\text{O}$  (**1**) a  $[\text{Ni}(\text{2aepy})_2(\text{NO}_3)]\text{NO}_3$  (**2**). Obidve látky **1** a **2** majú iónovú štruktúru tvorenú komplexným kationom s deformovane oktaedricky koordinovaným atómom Ni(II) a príslušným aniónom X; v štruktúre **1** je navyše prítomná jedna kryštalová molekula vody. V kryštalovej štruktúre **1** je atóm Ni(II) koordinovaný dvoma chelátovo viazanými ligandami *2aepy* a koordinačná sféra je doplnená dvoma koncovo viazanými akva a chlorido ligandmi umiestnenými vzájomne v *cis* polohách. V komplexnom katione štruktúry **2** sú *2aepy* ligandy viazané rovnako ako v **1** a koordinačnú sféru dopĺňa chelátovo viazaný nitráto ligand. V oboch štruktúrach **1** a **2** sa pomocou vodíkových väzieb vytvára 2D supramolekulárna štruktúra.

*Práca bola finančne podporená grantmi APVV-18-0016, VEGA (1/0075/13) a VVGS-PF-2019-1051.*

- [1] Farkašová N., Černák J., Falvello L. R., Orendáč M., Boča R.: *Acta Cryst.* C71, 252–257 (2015).  
 [2] Vráblová A., Falvello L. R., Campo J., Miklovič J., Boča R., Černák J., Tomás M.: *Eur. J. Inorg. Chem.*, 928–934 (2016).  
 [3] Černák J., Hegedüs M., Váhovská L., Kuchár J., Šoltésová D., Čižmár E., Feher A., Falvello L.R.: *Solid State Sciences* 77, 27-36 (2018).

#### 4Po19

### POMALÁ MAGNETICKÁ RELAXÁCIA V NI-LN (LN = CE, GD, DY) DVOJJADROVÝCH KOMPLEXOCH

Anna Vráblová<sup>1,2</sup>, Tomás Milagros<sup>3</sup>, Larry R. Falvello<sup>1</sup>, Ľubor Dlháň<sup>4</sup>, Juraj Černák<sup>2</sup>, Roman Boča<sup>5</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (ICMA), Departamento de Química Inorgánica, University of Zaragoza–CSIC, E-50009 Zaragoza, Spain*

<sup>2</sup>*Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, Košice, Slovensko, [anna.vrablova@student.upjs.sk](mailto:anna.vrablova@student.upjs.sk)*

<sup>3</sup>*Centro de Química y Materiales de Aragón (CEQMA-ISQCH), Departamento de Química Inorgánica, Pedro Cerbuna 12, University of Zaragoza–CSIC, E-50009 Zaragoza, Spain*

<sup>4</sup>*Oddelenie anorganickej chémie, Slovenská technická univerzita, 812 37 Bratislava, Slovensko*

<sup>5</sup>*Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave, 917 01 Trnava, Slovensko*

Trojrovňovou syntézou za miernych podmienok sme pripravili sériu troch nových izomorfných komplexov zloženia  $[\text{Ni}(\text{o-van-en})\text{LnCl}_3(\text{H}_2\text{O})]$  [ $\text{H}_2(\text{o-van-en}) = \text{N,N}'\text{-etylén-bis}(3\text{-metoxysalicylaldiminát})$ ; Ln = Ce (**1**), Gd (**2**), Dy (**3**)]. Všetky tri zlúčeniny boli štruktúrne charakterizované – tvoria dvojjadrové komplexné molekuly, v ktorých atómy Ni(II) a Ln(III) sú vo vnútri polydentátneho ligandu typu Schiffovej bázy (*o-van-en*)<sup>2-</sup> a sú navzájom premostené dvoma O-monoatómovými mostíkmi. Kým atóm Ni(II) je diamagnetický v dôsledku jeho štvorcovej koordinácie (donorový set je  $\text{N}_2\text{O}_2$ ), atóm Ln(III) je oktakoordinovaný (chromofór  $\{\text{LnCl}_3\text{O}_5\}$  s *fac*-usporiadaním troch chlorido ligandov). AC magnetické merania ukázali, že všetky tri komplexy vykazujú poľom indukovanú pomalú magnetickú relaxáciu s dvomi alebo tromi relaxačnými kanálmi, a to aj v prípade Ln = Gd, ktorý je obvykle magneticky izotropný.

*Tento výskum bol realizovaný vďaka podpore zo slovenských (APPV-18-0016, VEGA 1/0063/17, VVGS-PF-2018-777) a španielskych (MAT2015-68200-C2-1-P, PGC2018-093451-B-I00, FEDER, NFP313010V954, the Diputación General de Aragón, Project M4, E11\_17R) projektov a podpore poplatkov za publikácie získanej od organizácie CSIC Open Access Publication Support Initiative.*

## POSTERY - SEKCIA 5: ORGANICKÁ CHÉMIA

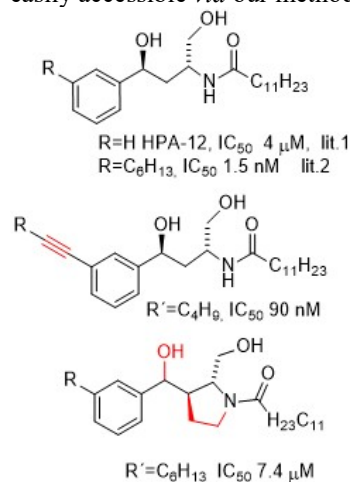
### 5Po01

#### CONSTRAINT ANALOGS OF ARYLCERAMIDE HPA-12

Branislav Ferko<sup>1</sup>, Marián Zeman<sup>1</sup>, Dušan Berkeš<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 15 Bratislava, Slovakia*

At the beginning of the millennium, the (*R,R*)-HPA-12 was found to be the first antagonist of ceramide transporter CERT, which has been identified as a key factor for the ER-to-Golgi trafficking of ceramides.[1] Ten years later, we have revised the stereochemistry of the most active HPA-12 diastereomer to (*R,S*)-diastereomer[2] and developed synthesis of more potent alkyl substituted HPA-12 analogs. [3] In this contribution, we describe a straightforward approach to the constraint analogs of HPA-12 starting from *N*-substituted 3-bromobenzoyl alanine easily accessible *via* our methodology. The results of the binding assays to the CERT protein will be discussed.



*This research was supported by Slovak Research and Development Agency under contract No. APVV-16-0258 and VEGA 1/0489/19.*

- [1] Yasuda, S.; Kitagawa, H.; Ueno, M.; Ishitani, H.; Fukasawa, M.; Nishijima, M.; Kobayashi, S.; Hanada, K., *J.Biol.Chem.* 276, 43994 (2001).  
[2] Duris, A.; Wiesenganger, T.; Moravcikova, D.; Baran, P.; Kozisek, J.; Daich, A.; Berkes, D., *Org.Lett.* 13, 1642 (2011).  
[3] Duris, A.; Daich, A.; Santos, C.; Fleury, L.; Ausseil, F.; Rodriguez, F.; Ballereau, S.; Genisson, Y.; Berkes, D., *Chem.Eur.J.* 22, 6676 (2016).

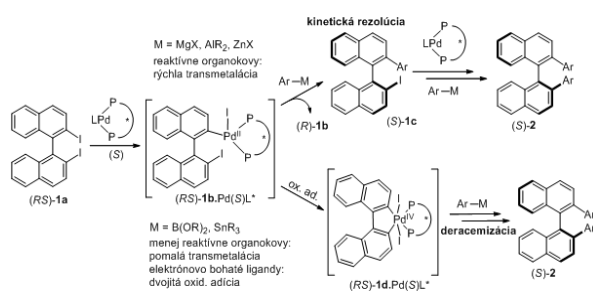
### 5Po02

#### SUZUKIHO REAKCIA S DERACEMIZÁCIOU BINAFTALÉNOVÉHO SUBSTRÁTU

Filip Bulko, Martin Putala\*

*Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, bulkofilip@gmail.com*

Enantioméne čisté 2,2'-disubstituované binaftyly predstavujú pozoruhodnú skupinu axiálne chirálnych zlúčenín, ktoré môžu byť použité v asymetrickej katalýze ako účinné ligandy [1], alebo v supramolekulovej chémii ako základný skelet moderných senzorov [2]. Na prípravu binaftylového skeletu sa najčastejšie používa enantioselektívny alebo diastereoselektívny Suzukiho coupling, kedy je možné pripraviť jeden z atropoizomérov vo vysokom enantiomérom nadbytku a to vďaka stereoindukcii vyvolanej ligandom alebo chirálnej informácii na východiskovom skelete. Brath a kol. [3] ukázali, že je možné získať enantioméne obohatený 2,2'-diarylovaný binafetyl pomocou Suzukiho reakcie, vychádzajúc z racemického 2,2'-dijód-1,1'-binaftyly. Elektronovo bohatý ligand BINAP umožňuje deracemizačný priebeh reakcie cez konfiguračne nestabilný 5-článkový paladacyklus, s indukciou chiralít z ligandu. Cieľom práce je uskutočniť sériu reakcií s rôzne substituovanými arylborónovými kyselinami za katalýzy chirálnym katalytickým komplexom Pd-BINAP a objasniť vplyv substituentu na priebeh deracemizácie a úpravou reakčných podmienok kontrolovať priebeh reakcie.



Obr. 1. Schéma deracemizácie binaftyly.

- [1] Connon J. S. *Angew. Chem. Int. Ed.* 45, 3909 (2006).  
 [2] Tadashi E.; Tanida D.; Hamada K.; Sakai T. *J. Org. Chem.* 22, 9129 (2008).  
 [3] Brath H., Mešková M., Putala M.; *Eur. J. Org. Chem.* 3315 (2009).

## 5Po03

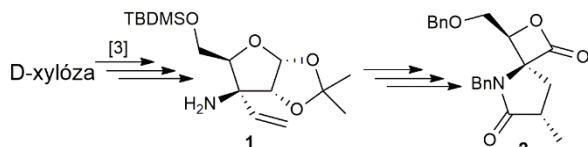
## STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA SPIRO-B-LAKTÓNOVÉHO DERIVÁTU

Martin Fábian<sup>1</sup>, Jozef Gonda<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovenská republika, martin.fabian@upjs.sk

Laktóny predstavujú cyklické estery, ktoré sú generované intramolekulovou esterifikáciou z príslušnej hydroxykarboxylovej kyseliny. β-Laktóny vznikajú zo zodpovedajúcich β-hydroxykyselín a sú vysoko reaktívne [1]. Zlúčeniny obsahujúce spiro-β-laktónový fragment, ako napríklad oxazolomycín [2], sú zaujímavé z hľadiska ich biologického profilu, pretože disponujú antivirálnou, antibakteriálnou a cytotoxickou aktivitou [2].

Naša syntetická stratégia vedúca k syntéze **2** využíva ako východiskový templát dostupnú D-xylózu, z ktorej bola sekvenciou viacerých transformácií [3] pripravená vhodne funkcionalizovaná aminofuranóza **1** (Obr. 1). Následnou aplikáciou RCM metatézy bol kreovaný γ-laktónový kruh. Fragmentácia 1,2-*O*-izopropylidénového skeletu, sledovaná dvomi za sebou idúcimi oxidačnými krokmi spoločne viedli k tvorbe β-hydroxykyseliny, ktorej intramolekulová cyklizácia poskytla chránený derivát **2**. Biologický skrining realizovaný na viacerých rakovinových bunkových liniach odhalil zaujímavý antiproliferačný/cytotoxický potenciál pripravenej spirozlúčeniny **2**.

Obr. 1. Syntéza spiro-β-laktónového derivátu **2**.

Tento príspevok vznikol s finančnou podporou projektu VEGA 1/0375/19.

- [1] F. A. Carey, R. M. Giuliano: *Organic Chemistry* (McGraw-Hill, 8th ed.), 798–799 (2011).  
 [2] M. G. Moloney, P. C. Trippier, M. Yaqoob, Z. Wang: *Curr. Drug Discovery Technol.*, 1, 181 (2004).  
 [3] M. Martinková, J. Gonda, J. Raschmanová: *Molecules*, 11, 564–573 (2006).

## 5Po04

## MICROWAVE ASSISTED SYNTHESIS OF A HYPNOTIC DRUG: ZOLPIDEM

Nikola Fajkis<sup>1</sup>, Marcin Kolaczowski<sup>1</sup>, Monika Marcinkowska<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Medicinal Chemistry, Jagiellonian University Medical College Medyczna 9, 30-388, Krakow nikola.fajkis@gmail.com

Zolpidem is a hypnotic drug introduced to the market over 3 decades ago. It has been widely used to induce sleep initiation without the next day hang over (1). Lately, several clinical findings reported promising pharmacological activities related with zolpidem usage: arousal after brain injury, reversal of brain stroke symptoms, antipsychotic, antiparkinsonian (2). These promising clinical reports initiated numerous in vivo pharmacological studies, which require preparation of zolpidem in multi gram scale.

Recently, several synthetic strategies to obtain zolpidem have been reported, mainly based on one-pot chemistry (3). However those methodologies rely on the usage of starting materials which are not commercially available and thus require preparation in a multistep synthesis.

We have developed fast and effective 3 step microwave assisted synthesis of zolpidem, which is effective as well in solvent free conditions. It relies on the formation of 2-phenylimidazo[1,2-a]-pyridine ring in the first step and further incorporation of N,N-dimethylaminoacetamide moiety in position 3 of the heterocyclic core. Our work shows that it is possible to obtain zolpidem in a multigram scale using 3 step synthesis under microwave irradiation.

[1] Sanna E, Busonero F, Talani G, Carta M, Massa F.: *J. Eur. J. Pharmacol.* 13, 451 (2002).

[2] Sutton J.A.: *Brain Inj.* 31, 8 (2017).

[3] Shucheng W, Xuhu H, Zemei G.: *RSC Advances.* 68, (2016).

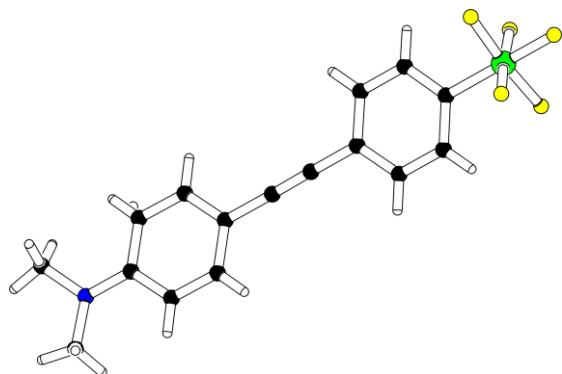
## 5Po05

### SYNTEZA PUSH-PULL CHROMOFORŮ S SF<sub>5</sub> AKCEPTORNÍ SKUPINOU

Michaela Fecková<sup>1</sup>, Filip Bureš<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, Pardubice, 53210, Česká Republika, michaela.feckova@student.upce.cz

Pentafluorsulfanylová skupina (SF<sub>5</sub>), někdy též označována jako „super-trifluormethyl“ skupina [1], představuje jednu z mála zcela nových funkčních skupin zavedených do syntéz v organické chemii v posledních sto letech. Vzhledem k neobvyklé kombinaci vlastností, jako vysoká termická, hydrolytická i chemická stabilita, odolnost vůči kyselinám a zásadám, vysoká hustota a lipofilita, biologická aktivita a především silný elektron akceptorní charakter, se chemie SF<sub>5</sub> skupiny stává centrem pozornosti mnoha výzkumných ústavů a nachází širokou škálu uplatnění, a to především v agrochemii, medicíně a chemii materiálů [2].



**Obr. 1.** ORTEP diagram vybraného cílového derivátu.

Tato práce se zabývá polarizací vybraných push-pull sloučenin prostřednictvím SF<sub>5</sub> skupiny. Za tímto účelem byly připraveny série D- $\pi$ -A nebo D(- $\pi$ -A)<sub>3</sub> chromoforů s aminoskupinou jako donorní částí. Vlastnosti cílových derivátů byly modulovány změnou  $\pi$ -konjugované cesty kombinací 1,4-fenylenových a acetylenických jednotek, polohou a počtem SF<sub>5</sub> skupin a celkovým rozložením chromoforu (lineární, tripodální).

[1] Umemoto T., Garrick L. M., Saito N.: *Beilstein J. Org. Chem.* 8, 461 (2012)

[2] Savoie P. R., Welch J. T.: *Chem. Rev.* 115, 1130 (2015).

## 5Po06

### SYNTHESIS AND ANALYSIS OF MOLECULAR PROPERTIES OF ACENE DERIVATIVES WITH ELECTRON-WITHDRAWING GROUPS AS POTENTIAL N-TYPE SEMICONDUCTORS

Lucia Feriancová<sup>1</sup>, Martin Putala<sup>1</sup>

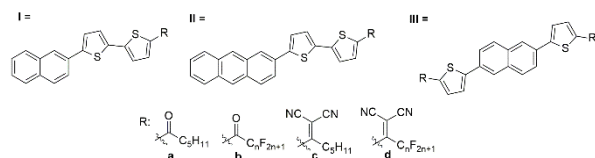
Comenius University, Faculty of Natural Sciences, Department of Organic Chemistry, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovakia, feriancova13@uniba.sk

Organic semiconductors used as an active layer in organic electronic materials, such as organic field-effect transistors (OFET), attract a lot of attention due to many advantages.[1] Compared to conventional inorganic



semiconductors, benefits of these materials include the ability to be deposited through inexpensive solution-based techniques and capability to modify their structure via functionalization to obtain compounds with appropriate properties for further application in electronics.[2] Nevertheless, the development of n-type organic semiconductors still lags behind the p-type semiconductors. Due to demand for these materials, we designed new series of mono- and disubstituted oligothiényl acene derivatives **I-III** with different EWG **a-d** as potential n-type semiconductors with application in OFET (Fig.).

Herein, the synthesis and comparison of experimental and theoretical characteristics of frontier molecular orbitals are presented. Also, the effect of electron-withdrawing groups to these properties was studied.



**Fig.** Mono- and disubstituted oligothiényl acenes **I-III** with potential semiconducting properties.

[1] Quinn J., Zhu J., Li X., Wang, J., Li, Y. *J. Mater. Chem. C* 5, 8654 (2017).

[2] Siringhaus H. *Adv. Mater.* 26, 1319 (2014).

[3] Filo J., Mišičák R., Cigáň M., Weis, M., Jakabovič, J., Gmucová, K., Pavúk, M., Dobročka, E., Putala, M. *Synth. Met.* 202, 73 (2015).

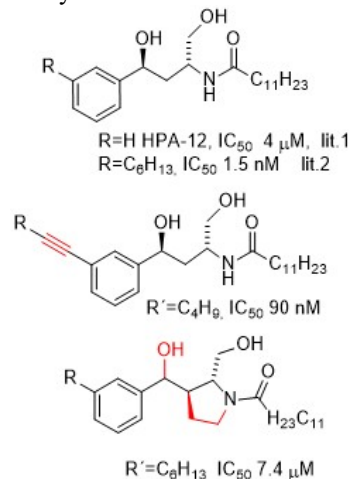
## 5Po07

### CONSTRAINT ANALOGS OF ARYLCERAMIDE HPA-12

Branislav Ferko<sup>1</sup>, Marián Zeman<sup>1</sup>, Dušan Berkeš<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 15 Bratislava, Slovakia*

At the beginning of the millennium, the (*R,R*)-HPA-12 was found to be the first antagonist of ceramide transporter CERT, which has been identified as a key factor for the ER-to-Golgi trafficking of ceramides.[1] Ten years later, we have revised the stereochemistry of the most active HPA-12 diastereomer to (*R,S*)-diastereomer[2] and developed synthesis of more potent alkyl substituted HPA-12 analogs. [3] In this contribution, we describe a straightforward approach to the constraint analogs of HPA-12 starting from N-substituted 3-bromobenzoyl alanine easily accessible *via* our methodology. The results of the binding assays to the CERT protein will be discussed.



*This research was supported by Slovak Research and Development Agency under contract No. APVV-16-0258 and VEGA 1/0489/19.*

[1] Yasuda, S.; Kitagawa, H.; Ueno, M.; Ishitani, H.; Fukasawa, M.; Nishijima, M.; Kobayashi, S.; Hanada, K., *J.Biol.Chem.* 276, 43994 (2001).

[2] Duris, A.; Wiesenganger, T.; Moravcikova, D.; Baran, P.; Kozisek, J.; Daich, A.; Berkes, D., *Org.Lett.* 13, 1642 (2011).

[3] Duris, A.; Daich, A.; Santos, C.; Fleury, L.; Ausseil, F.; Rodriguez, F.; Ballereau, S.; Genisson, Y.; Berkes, D., *Chem.Eur.J.* 22, 6676 (2016).

**5Po08****CYTOTOXICITY OF THE LIPOPHOSPHONOXINS, NEW POTENT ANTIMICROBIAL COMPOUNDS FOR PROSPECTIVE APPLICATIONS IN PREVENTION AND THERAPY OF MUSCULOSKELETAL INFECTIONS**Adéla Galandáková<sup>1</sup>, Jitka Ulrichová<sup>1</sup>, Jiří Gallo<sup>2</sup>, Milan Kolář<sup>3</sup>, Libor Krásný<sup>4</sup>, Dominik Rejman<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Department of Medical Chemistry and Biochemistry, <sup>2</sup>Department of Orthopedics, <sup>3</sup>Department of Microbiology, Faculty of Medicine and Dentistry, Palacký University Olomouc, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc, Czech Republic. <sup>4</sup>Laboratory of Microbial Genetics and Gene Expression, Institute of Microbiology, Czech Academy of Sciences v.v.i., Vídeňská 1083, 142 20 Prague 4, Czech Republic. <sup>5</sup>Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Czech Academy of Sciences v.v.i., Flemingovo nám. 2, 166 10 Prague 6, Czech Republic. galandakova.a@seznam.cz

Musculoskeletal infections are caused by bacterial invasion into the bone, synovial joints, and related soft-tissues. The major problem in musculoskeletal infections is the biofilm formation associated with orthopaedics implants. Bacteria in the biofilm, most often staphylococci and streptococci, are more resistant against antibiotics than the planktonic bacteria. The most frequent strategy to prevent these infections is usage of antibiotics either systemically or in local carriers such as polymethylmethacrylate (PMMA). The antibiotic is released from the PMMA surface during several hours/days targeting bacteria on its surface and in the vicinity. However, the resistance to clinically used antibiotics is increasing. Therefore, new compounds with improved antibacterial/antibiofilm characteristics and a low propensity for the development of resistant strains are highly required. Lipophosphonoxins (LPPO) are recently discovered compounds that possess antibacterial activity. The first-generation LPPO has bactericidal activity against Gram-positive species, including multi-resistant strains, [1] while the second-generation LPPO is effective also against Gram-negative pathogens [2]. The aim of this study was to evaluate cytotoxicity and haemolytic activity of new synthesized LPPO (3<sup>rd</sup> and 4<sup>th</sup> generation) that could be used as additives in PMMA bone cement to prevent bacterial biofilm formation on the cemented prosthetic surfaces. Results will be discussed on the poster presentation.

*This work was supported by Czech ministry of health (Grant No.17-29680A) and the Institutional Support of Palacký University in Olomouc RVO 61989592.*

[1] Rejman D.: *J. Med. Chem.* 54 (22), 7884 (2011).

[2] Seydlova G.: *J. Med. Chem.* 60 (14), 6098 (2017).

**5Po09****SYNTÉZA 1-(FENYLKARBAMOYL)NAFTALEN-2-YL ALKYLKARBAMÁTŮ JAKO POTENCIÁLNÍCH ANTITUBERKULOTIK**Tomáš Goněc<sup>1</sup>, Šárka Pospíšilová<sup>2,3</sup>, Lukáš Fukan<sup>1</sup>, Adriana Tomanová<sup>1</sup>, Vladimíra Vysoká<sup>3</sup>, Andrea Nagyidayová<sup>3</sup>, Hana Michnová<sup>2,3</sup>, Jiří Kos<sup>2</sup>, Alois Čížek<sup>3</sup>, Josef Jampílek<sup>2,4</sup>

<sup>1</sup> Ústav chemických léčiv, Farmaceutická fakulta, VFU Brno, Palackého 1, 612 42 Brno, [tgonec@vfu.cz](mailto:tgonec@vfu.cz)

<sup>2</sup> Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Přírodovědecká fakulta, UP Olomouc, Šlechtitelů 27, 783 71 Olomouc

<sup>3</sup> Ústav infekčních chorob a mikrobiologie, Fakulta veterinárního lékařství, VFU Brno, Palackého 1, 612 42 Brno

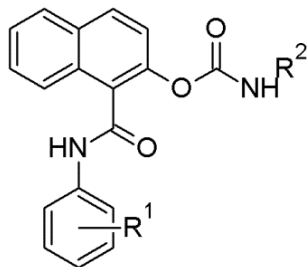
<sup>4</sup> Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta, UK Bratislava, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava

Na přímé následky tuberkulózy v současnosti umírá přibližně 1,3 milionu lidí ročně a dalších 300 tisíc při koinfekci s HIV. Onemocnění vyvolané bakteriemi rodu *Mycobacterium* tak představuje globální hrozbu. Pro rychle rostoucí počet multirezistentních (MDR) kmenů, nebo smrtelných kombinací HIV s mykobakteriálními infekcemi je nutné hledat léky s novými mechanismy účinku [1].

V poslední době byly na ÚCHL FAF VFU Brno syntetizovány série *N*-fenylyhydroxynaftalenkarboxamidů, z nichž některé látky vykázaly slibnou antimykobakteriální aktivitu [2]. Zavedením karbamátové skupiny došlo k výraznému zlepšení fyzikálně-chemických vlastností, zejména rozpustnosti, při současném zachování aktivity. [3]. Proto bylo připraveno 26 nových derivátů zahrnujících tento strukturální fragment (obr. 1). **R<sup>1</sup>: -CF<sub>3</sub>, -Cl; R<sup>2</sup>: ethyl – oktyl, isopropyl, cyklopentyl-cyklohexyl, fenylethyl, fenylbutyl.**

Syntéza probíhala ve dvou krocích. V prvním kroku reaguje kyselina 2-hydroxynaftalen-1-karboxylová a substituovaný anilin v přítomnosti chloridu fosforitého v prostředí chlorbenzenu a působení mikrovlnného záření za vzniku příslušného *N*-fenyl-2-hydroxynaftalen-1-karboxamidu. Ve druhém kroku reaguje *N*-fenyl-2-hydroxynaftalen-1-karboxamid s příslušným isokyanátem za katalýzy triethylaminem. Reakce probíhá při laboratorní teplotě v prostředí acetonitrilu. Připravené sloučeniny byly přečištěny rekrystalizací ze směsi

ethylacetát/ethanol nebo sloupcovou chromatografií. Struktura látek byla ověřena spektrálními metodami (NMR, IR, HRMS) a jejich čistota chromatograficky (TLC, HPLC). Všechny látky vykázaly antimykobakteriální aktivitu srovnatelnou s mateřskými sloučeninami, některé dokonce lepší – pravděpodobně díky zlepšenému průniku mykobakteriální buněčnou stěnou.



**Obr. 1.** Substituované 1-(fenylkarbamoyl)naftalen-2-yl alkykarbamáty

Projekt vznikl s podporou grantů IGA VFU: 314/2019/FAF; SRDA: APVV-17-0373, APVV-17-0318; NPUI: LO1305.

[1] WHO-Global Tuberculosis Report (2018)

[2] Goněc, T. et al. *Molecules* 21 (2016) 1068

[3] Goněc, T. et al. *Molecules* 21, (2016) 1089.

### 5Po10

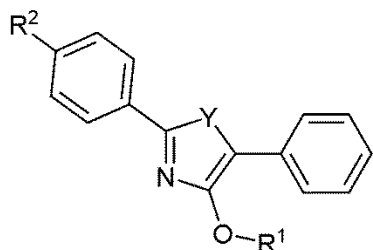
#### SYNÉZA A FLUORESCENČNÍ VLASTNOSTI 2,5-DIFENYL-4-HYDROXY- A 2,5-DIFENYL-4-ACETOXYHETEROAZOLŮ

Vladimír Finger<sup>1</sup>, Jiří Hanusek<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav organické chemie a technologie, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Jiri.Hanusek@upce.cz

1,3-Heteroazolový skelet (nejběžnějšími heteroatomy v něm jsou kyslík, síra nebo dusík) se nalézá v řadě prakticky využitelných sloučenin, jako jsou různá barviva, léčiva nebo organické katalyzátory. V nedávné minulosti bylo zjištěno, že 4-hydroxy-1,3-thiazolový skelet je přítomen v řadě sloučenin s významnou fluorescenční aktivitou [1-3]. V nich přítomná hydroxyskupina se vyznačuje snadnou ionizovatelností a významně se podílí na spektrálních emisních charakteristikách ( $\lambda_{em}$ ,  $\epsilon_{em}$ , Stokesův posun) jak v neutrální, tak i v ionizované formě.

V návaznosti na naše práce [2,3] jsme připravili dvě série látek s 2,5-difenyl-4-hydroxy heteroazolovým skeletem **1-2** a jim odpovídající acetoxyderiváty **3-4** (Obr. 1) a změřili jejich absorpční i emisní spektra. Všechny připravené sloučeniny vykazují fluorescenci v aprotických rozpouštědlech (dioxan, DMSO,  $CH_2Cl_2$ , THF, EtOAc). Kvantové výtěžky 4-hydroxythiazolů (**1**) vyznačujících se zářivě modrou fluorescencí se podle substituce a rozpouštědla pohybovaly v rozmezí  $\Phi = 0.07-0.87$ . Analogické 4-hydroxyoxazoly jsou nestálé avšak kvantový výtěžek 4-Me derivátu (který byl jako jediný připraven v čistotě dostačující pro měření) je  $\Phi = 0.52$ , což je hodnota vyšší než u odpovídajícího thiazolu. Acetylace kyslíku u obou sérií hypochromně posunuje absorpční i emisní maxima cca o 30-40 nm a snižuje kvantový výtěžek zhruba na polovinu. Všechny spektrální charakteristiky jsou lineárně závislé na Hammettových  $\sigma$ -konstantách.



**1:** Y = S, R<sup>1</sup> = H, R<sup>2</sup> = MeO, Me, H, Cl, CF<sub>3</sub>

**2:** Y = O, R<sup>1</sup> = H, R<sup>2</sup> = Me, Cl

**3:** Y = S, R<sup>1</sup> = Ac, R<sup>2</sup> = MeO, Me, H, Cl, CF<sub>3</sub>

**4:** Y = O, R<sup>1</sup> = Ac, R<sup>2</sup> = MeO, Me, H, Cl

**Obr. 1.** Struktura připravených 1,3-heteroazolů.

*Auori dĕkujĭ MŠMT ĀR za institucionĀlnĭ podporu a takĕ studentskĕmu projektu SGS-2019-003.*

- [1] Stippich K., Weiss D., Guether A., Grls H., Beckert R.: *J. Sulphur Chem.* 30, 109-118 (2009).  
 [2] Kammel R., TarabovĀ D., Machalickĭ O., Nepraš M., FrumarovĀ B., Hanusek J.: *Dyes Pigments* 128, 101-110 (2016).  
 [3] Kammel R., TarabovĀ D., VĀna J., Machalickĭ O., Nepraš M., Hanusek J.: *J. Mol. Struct.* 1175, 804-810 (2019).

### 5Po11

#### DESIGN, SYNTHESIS AND BIOLOGICAL ACTIVITIES OF NEW SYNTHETIC GALLOTANNINS

Jana HricovĭniovĀ<sup>1</sup>, Hana MichnovĀ<sup>2</sup>, Andrea ŤevĕoviĕovĀ<sup>3</sup>, ŤĀrka PospĭšilovĀ<sup>2</sup>, Josef Jampĭlek<sup>2,4</sup>,  
Zuzana HricovĭniovĀ<sup>5</sup>

<sup>1</sup>*Cancer Research Institute, BMC Slovak Academy of Sciences, Bratislava, SK-845 05 Bratislava*

<sup>2</sup>*Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Faculty of Science, Palackĭ University Olomouc, CZ-783 71 Olomouc*

<sup>3</sup>*Department of Genetics, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, SK-842 15 Bratislava*

<sup>4</sup>*Department of Analytical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, SK-842 15 Bratislava*

<sup>5</sup>*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, SK-845 38 Bratislava, [Zuzana.Hricoviniova@savba.sk](mailto:Zuzana.Hricoviniova@savba.sk)*

Natural polyphenols attracted increasing interests to science and industry due to their beneficial health effects. Manifold biological activities of polyphenolic compounds are responsible for their significant chemopreventive (antioxidant, antibacterial, anti-inflammatory, anti-carcinogenic, anti-mutagenic) properties [1]. In accordance with this concept, natural and synthetic gallotannins became the subject of intense investigations [2, 3].

Presented research has been directed towards the synthesis and biological activity evaluation of new, unnatural penta-1,2,3,4,6-*O*-galloyl-D-glucose (PGG) analogues. The molecular structures of new gallotannins derived from D-glucose, D-mannose and L-rhamnose were confirmed by various spectroscopic methods (NMR, IR, HRMS). The antioxidant activities of tested compounds were determined employing 1,1-diphenyl-2-picryl-hydrazyl (DPPH) assay and reducing power assay. Genotoxicity of gallotannins was assessed by alkaline comet assay and modified comet assay with enzyme formamidopyrimidine DNA-glycosylase (FGP). Antibacterial activity was evaluated *in vitro* against a panel of bacterial species.

Experimental data revealed that new synthetic gallotannins possess significant radical scavenging/antioxidant activities. Tested compounds showed low genotoxic effect on human lymphocytes. Further studies on these compounds are underway to explore their potential applications.

*This work was supported by the Scientific Grant Agency VEGA of the Slovak Republic (Projects 2/0022/18, 1/0410/18), Slovak Research and Development Agency (APVV-17-0373, APVV-17-0318) and by the Ministry of Education of the Czech Republic (LO1305).*

- [1] Manach C., Scalbert A., Morand C., Remesy C., Jimenez L.: *Am. J. Clin. Nutr.* 79, 727 (2004).  
 [2] Khanbabae K., van Ree T.: *Nat. Prod. Rep.* 18, 641 (2001).  
 [3] Zhao W., Wang Y., Hao W., Peng S.: *Biochem. Biophys. Res. Commun.* 445, 2 (2014).

### 5Po12

#### STEREOSELEKTĪVNA SYNTĚZA NOVĀYCH TYPOV C-VETVENĀYCH SFINGOZĪNOV

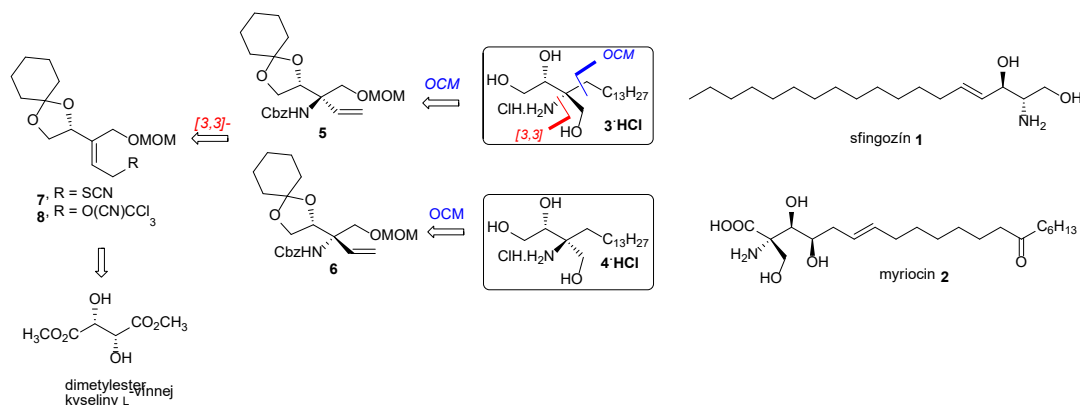
Dominika JackovĀ<sup>1</sup>, Miroslava MartinkovĀ<sup>1</sup>, Jozef Gonda<sup>1</sup>, MĀria BrunderovĀ

<sup>1</sup>*Āstav chemickĕyĕh vied, Katedra organickej chĕmie, Univerzita Pavla Jozefa ŤafĀrika, Moyzesova 11, 040 01 KoŤice, SlovenskĀ republika, [dominika.jackova@gmail.com](mailto:dominika.jackova@gmail.com)*

V 20. storoĕi boli z rznycĕch druhov termofilnĕyĕh hĕb izolovanĕ zaujĭmavĕ metabolity reprezentovanĕ  $\alpha$ -substituovanĕmi  $\alpha$ -aminokyselinami, ktorĕ predstavujĕ Ťtruktĕrne analgy sfingozĭnu **1**, a preto sĕ taktieĖ zaradvanĕ do rodiny sfingoidnĕyĕch bĀz [1]. Ich najvĕznamnejšĭm predstaviteĕom je myriocĭn **2** [1]. Tieto nezvyĕajnĕ aminokyseliny disponujĕ inhibiĕnou aktivitou voĕi enzĭmu serĭnpalmitoyltransferĀza (SPT), ktorĕ je klĕĕovĕ pri prvom kroku biosyntĕzy sfingolipidov v eukaryotickĕyĕch bunkĀch [1].

Na Obr. 1 je znĀzornĕnĀ naŤa retrosyntetickĀ stratĕgia vedĕca k analgom SPT inhibĭtorov, C-vetvenĕm sfingoidnĕm bĀzĀm **3.HCl** a **4.HCl** s potenciĀlnou antiproliferaĕnou a antimikrobiĀlnou aktivitou. Lipofilnĕyĕ uĕhĕovodĭkovĕyĕ reĕazec cieĕovĕyĕch zlĕĕenĭn bol zabudovanĕ pomocou OCM reakcie prekursorov **5** a **6** s koreŤpondujĕcim komerĕnĕm alkĕnom. Novĕ kvartĕrne stereogĕnne centrĀ syntnov **5** a **6** boli inkorporovanĕ pomocou [3,3]-heterosigmatronnĕyĕch preŤmykov alylovĕyĕch substrĀtov, tiokyanĀtu **7** a imidĀtu **8**, ktorĕ boli zĭskanĕ

modifikáciou východiskového dimetylésteru kyseliny L-vínnej. Antiproliferačná/cytotoxická aktivita finálnych molekúl bude ohodnotená na 7 typoch humánných rakovinových bunkových línií.



**Obr. 1.** Retrosyntetická stratégia pre prípravu sfingolipidových molekúl **3.HCl** a **4.HCl**.

Prezentovaná práca vznikla vďaka finančnej podpore grantov VEGA 01/0047/18 a VEGA 01/0375/19.

[1] Brunner M., Koskinen A. M. P.: *Curr. Org. Chem.* 8, 1629–1645 (2004); (b) Liao J., Tao J., Lin G., Liu D.: *Tetrahedron* 61, 4715–4733 (2005); (c) Byun H.-S., Lu X., Bittman R.: *Synthesis* 15, 2447–2474 (2006).

### 5Po13

#### IMIDAZO[1,2-C]PYRIMIDIN-5(6H)-ON: NOVÝ SKELET PRO INHIBITORY CYKLIN-DEPENDENTNÍ KINÁZY 2

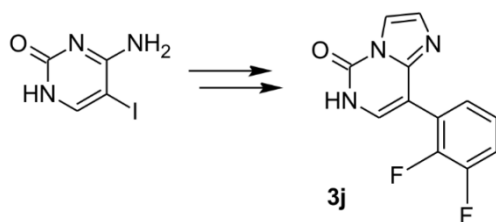
Josef Jansa<sup>1</sup>, Antonín Lyčka<sup>1</sup>, Vladimír Kryštof<sup>2</sup>, Martin Lepšík<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Výzkumný ústav organických syntéz a.s., Rybitví 296, 533 54 Rybitví, josef.jansa@vuos.com

<sup>2</sup> Laboratoř růstových regulátorů, Centrum regionu Haná pro biotechnologický a zemědělský výzkum, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého a Ústav experimentální botaniky AV ČR, Šlechtitelů 27, 783 71, Olomouc

<sup>3</sup> Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemingovo náměstí 542/2, 166 10, Praha 6

Byla provedena syntéza sloučenin na bázi imidazo[1,2-c]pyrimidin-5(6H)-onu, substituovaného v poloze 8. Získané sloučeniny byly testovány jako inhibitory cyklin-dependentní kinázy 2 (CDK2) a bylo dosaženo hodnot IC<sub>50</sub> v řádu jednotek μmol/l. Obecně bylo lepších hodnot IC<sub>50</sub> dosaženo s menšími substituenty (thienyl, substituované fenyle), zatímco větší substituenty (substituované bifenyle) snižovaly inhibiční aktivitu.[1]



CDK2/cyclin E

IC<sub>50</sub> = 1.3 μM

**Obr. 1.** Příklad aktivní sloučeniny.[1]

Na základě molekulového dokování byly identifikovány vazebné módy jednotlivých sloučenin v aktivním místě CDK2, které se liší především orientací imidazopyrimidinového jádra a umístěním substituentu v poloze 8. Identifikované vazebné módy slouží pro design a syntézu dalších sloučenin.

Získané poznatky umožňujú návrh nových štruktúr a nová experimentálna data poukazujú na možnosti substitúcie ďalších poloh imidazopyrimidinového jadra, vedúci k vyšším a špecifitnejším *in vitro* aktivitám, ktoré budú monitorované i na ďalších proteín kinázach.

Tato práce vznikla za podpory Grantovej agentúry ČR (registračné číslo grantu 19-08410S).

[1] H. Ajani H., J. Jansa J., C. Köprülüoğlu, P. Hobza, V. Kryštof, A. Lyčka, M. Lepšík: *J. Mol. Recognit.* **2018**, *31*, e2720, <https://doi.org/10.1002/jmr.2720>.

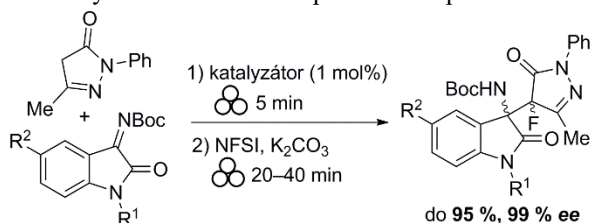
### 5Po14

#### ORGANOKATALYTICKÉ DOMINO MANNICHOVE REAKCIE/ FLUORÁCIE V PODMIENKACH MECHANICKEJ AKTIVÁCIE

Dominika Krištofiková<sup>1</sup>, Mária Mečiarová<sup>1</sup>, Radovan Šebesta<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava 4, Slovenská republika; [kristofiko11@uniba.sk](mailto:kristofiko11@uniba.sk)

Domino Mannichova reakcia s následnou  $\alpha$ -fluoráciou je diastereoselektívna metóda na prípravu chirálnych heterocyklických zlúčenín obsahujúcich dve nové kvartérne stereogénne centrá [1]. Enolizovateľné pyrazolóny, oxazolóny alebo izoxazolóny sa adujú na *N*-chránené imíny odvodené od izatínu. Následnú reakciu s elektrofilnými fluoračnými činidlami sa získali produkty vo vysokých výťažkoch (do 95 %) a enantiomérnych nadbytkoch (do 99 %). Stereoselektívny priebeh reakcie bol dosiahnutý použitím vhodných chirálnych katalyzátorov na báze tiomočovín, skvaramidov, či guanidínov, ktoré môžu aktivovať substráty tvorbou vodíkových väzieb. Reakcie prebiehali v podmienkach mechanickej aktivácie v guľových mlynch.



R<sup>1</sup> = Me, Bn, prop-2-én-1-yl, 3-Ph-prop-2-én-1-yl

R<sup>2</sup> = H, Br, OMe

Za finančnú podporu ďakujeme Grantu UK 72/2019.

[1] Bao X., Wang B., Cui L., Zhu G., He Y., Qu J., Song Y.: *Org. Lett.* *17*, 5168 (2015).

### 5Po15

#### STRUCTURE OF AMINO BENZOSELENADIAZOLES

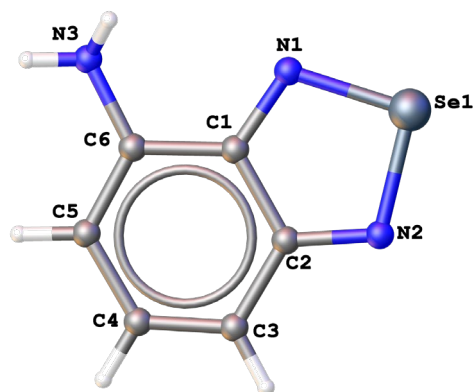
Ján Lokaj<sup>1,2</sup>, Ján Moncol<sup>1</sup>, Viktor Milata<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Faculty of Food and Chemical Technology Slovak University of Technology Radlinského 9, 812 37 Bratislava <sup>2</sup> Faculty of Faculty of Material Science and Technology, Slovak University of Technology, Bottova 2781/25, 917 24 Trnava

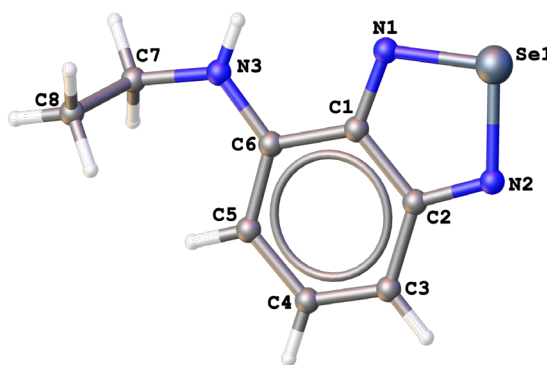
In continuation of our work of azolocondensed quinolones like analogues of nalidixic acid we decided to study those ones containing selenium atom hoping for their enhanced biological activity. Cyclisation of 1,2-phenylenediamines with selenous dioxide did not oxidize amino group(s) but produced almost quantitative yields of selenadiazoles thus being a suitable method to establish selenium (IV) or 1,2-phenylenediamines, respectively. 4-Amino-2,1,3-benzoselenadiazole was prepared from 1,2,3-benzenetriamine (obtained from 2,6-dinitroaniline or 4-nitro-2,1,3-benzothiadiazole). Its *N*-ethyl homologue has been synthesized by application of multistep reactions and it was a precursor for novel anticancer compound on fibroblast cells. The crystal structures of both compounds have been determined using single-crystal crystallography at 100 K. The compound 1 crystallizes in the orthorhombic system with space group *Pccn*. The second compound crystallizes in the monoclinic system with space group *P2<sub>1</sub>/n*.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract no. APVV-17-0513

## Molecular structure of compound 1



## Molecular structure of compound 2



[1] Bella M., Schulz M., Milata V., Koňariková K., Breza M.: Application of the Gould-Jacobs reaction to 4-amino-2,1,3-benzoselenadiazole. *Tetrahedron* 66 (41), 8169 – 8174, 2010

[2] Bella M., Milata V.: Synthesis of 9-ethyl[1,2,5]selenadiazolo[3,4-h]quinolones by the application of modified Gould-Jacobs reaction to N-ethyl-2,1,3-benzoselenadiazol-4-amine. *Arkivoc* (v), 181-198 (2014)

## 5Po16

## TRITIUM-LABELED TRACERS HOW TO BOOST STABILITY?

Aleš Marek, Ján Tarábek

*Institute of Organic Chemistry and Biochemistry; The Czech Academy of Sciences, Synthesis of Radiolabeled Compounds, Flemingovo nám. 2, Prague 6, 16610, Czech Republic*

*E-mail: marek@uochb.cas.cz*

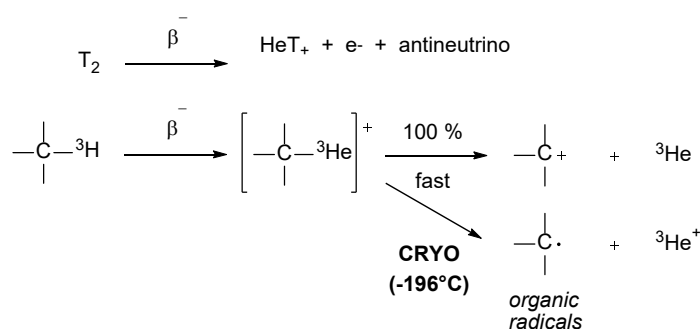
Application of tritium labeled compounds, mostly used as a tracers, demands on a very high purity of such tracer and misleading information derived from use of tracer contaminated by impurities need to be eliminated. Organic compounds labeled with tritium decompose on storage and the decomposition is accelerated by self-irradiation. (1, 2) The degree of decomposition is directly related to the storage conditions of the compound. Measures which can be taken into control and minimize the rate of self-radiolysis are perhaps not always so well known.

Almost complete total radiation energy of the tritium beta decay is absorbed by the compound itself or by its environs. If the former occurs, then the excited molecules may break-up in some manner; if the latter occurs the radiation energy can produce free radicals(3) which may then cause destruction of the labeled tracer.

The methods of control - effect of temperature, diluent, free radical scavengers - providing best results for long-term (years) storage of tritium labeled compounds in our laboratory will be discussed at the meeting.

Examples of decomposition for a considerable number of compounds labeled with tritium and stored under various conditions will be presented. These general principles will be discussed with a hope that this will lead to the best use being made of the available protective measures.

Preliminary studies of fate of organic molecule remnants after spontaneous tritium disintegration using EPR technique showing radical course of reaction will be disclosed.



**Fig. 1.** Modes of chemical aftereffect pathway after decomposition of [ $^3\text{H}$ ]-label

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

- [1] Bayly RJ. *Journal of Labelled Compounds* **1966**, 2(1), 1.  
 [2] Evans EA, Stanford FG, *Nature* **1963**, 197(486), 551.  
 [3] Kohan LM, Sanguanmith S, Meesungnoen J, Causey P, Stuart CR, Jay-Gerin J-P, *RSC Advances* **2013**, 3, 19282.

### 5Po17

#### IZOLÁCIA A CHEMICKÁ MODIFIKÁCIA POLYFENOLOVÝCH BISBIBENZYLOV Z PORASTNICE MNOHOTVAREJ

Máριο Markuliak<sup>1</sup>, Miloš Lukáč<sup>1</sup>, Branislav Horváth<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Farmaceutická fakulta UK v Bratislave. Katedra chemickej teórie liečiv, Kalinčiakova 8, 83232 Bratislava, markuliak1@uniba.sk

<sup>2</sup>Farmaceutická fakulta UK v Bratislave. Centrálné laboratórium NMR, Odbojárrov 10, 83232 Bratislava

Porastnica mnohotvará (*Marchantia polymorpha*) je bežne vyskytujúci sa druh pečeňovky na Slovensku. Hlavnými sekundárnymi metabolitmi je skupina cyklických bisbibenzylov nazývaných marchantíny, ktoré vykazujú antibakteriálnu, antifungálnu, antioxidačnú a cytotoxickú aktivitu [1,2]. Najväčšie zastúpenie v porastnici mnohotvarej má marchantín A (2,15-dioxapentacyklo[22.2.2.1<sup>3,7</sup>.1<sup>10,14</sup>.0<sup>16,21</sup>]triakonta-1(26),3(30),4,6,10(29),11,13,16(21),17,19,24,27-dodekaén-4,5,17-triol). V niekoľkonásobne nižšom množstve sa nachádza marchantín B (2,15-dioxapentacyklo[22.2.2.1<sup>3,7</sup>.1<sup>10,14</sup>.0<sup>16,21</sup>]triakonta-1(26),3(30),4,6,10(29),11,13,16(21),17,19,24,27-dodekaén-4,5,17,18-tetraol), ktorý okrem vyššej antioxidačnej aktivity v porovnaní s marchantínom A vykazuje inhibíciu tvorby prostaglandínov a leukotriénov [3].

Práca prezentuje prípravu marchantínu B oxidáciou marchantínu A. Marchantín A bol získaný z porastnice mnohotvarej maceráciou v metanole a kolónovou chromatografiou s použitím stacionárnych fáz: silikagél a Sephadex LH-20. Polosyntetická príprava marchantínu B spočívala v oxidácii marchantínu A s kyselinou 2-jodoxybenzoovou na chinónový medziprodukt s následnou redukciou tetrahydridoboritanom sodným. Štruktúry a čistota reaktantu a produktu boli potvrdené spektrálnymi metódami. Uvedená príprava je v porovnaní s izoláciou marchantínu B z porastnice mnohotvarej výt'aznosťou účinnejšia.

Práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/0054/19 a UK/178/2019

- [1] Asakawa, Y.: *Curr Pharm Des.* 14, 3067-3088 (2008).  
 [2] Asakawa Y. a kol.: *Spectroscopy.* 14, 149-175 (2000).  
 [3] Schwartner, C. a kol.: *Phytomedicine.* 2, 113-117 (1995).

### 5Po18

#### STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA SFINGOIDNÝCH BÁZ SO ZABUDOVANÝMI MOLEKULOVÝMI PREPÍNAČMI

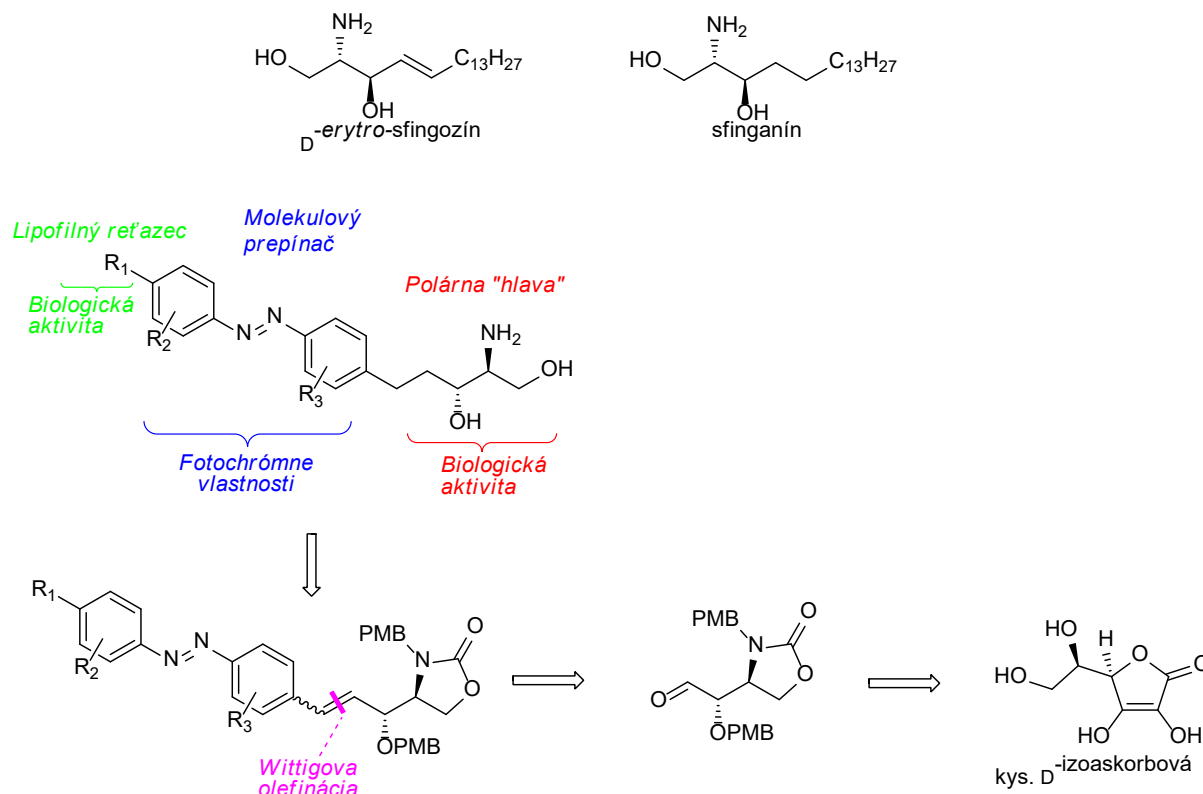
Tatiana Mitriková<sup>1</sup>, Jozef Gonda<sup>1</sup>, Simona Fazekašová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice, tatiana.mitrik@gmail.com

Vzhľadom na svoje zaujímavé vlastnosti našli azobenzény a ich deriváty uplatnenie v radoch aplikácií, ktoré majú veľký význam najmä v oblasti chemického priemyslu [1]. Okrem toho, v posledných rokoch bolo skúmané začlenenie azobenzénov ako molekulových prepínačov do biologicky aktívnych látok a bola overená aj modulácia ich biologickej aktivity fotoprepínaním medzi ich trans- a cis-formami [2].

Náš výskum je orientovaný na syntézu analógov prírodných, biologicky aktívnych sfingoidných báz takých ako D-erytro-sfingozín alebo sfinganín [3] (Obr. 1), s inkorporovanými, rôzne modifikovanými azobenzénovými prepínačmi, ktoré po ožiarení UV, resp. vis svetlom prechádzajú z trans- do cis-formy a naopak. Po finalizácii ich syntézy sa zameriame na testovanie fotochrómnych vlastností pripravených derivátov, stability cis-izomérov, stanovenia rýchlosti tepelnej relaxácie a zistenia rozdielu biologických aktivít medzi vyššie zmienými geometrickými formami.





**Obr. 1.** Analógy sfinganínu so zabudovanými molekulovými prepínačmi.

Tento príspevok vznikol s podporou projektov VEGA 1/0375/19 a VVGS-PF-2019-1056.

- [1] Merino, E., Ribagorda, M.: *Beilstein J. Org. Chem.* 8, 1071–1090, (2012).  
 [2] Quandt, G., Höfner, G., Pabel, J., Dine, J., Eder, M., Wanner, K. T.: *J. Med. Chem.* 57, 6809–6821, (2014).  
 [3] Wennek, T., van den Berg, R. J. B. H. N., Boot, R. G., van der Marel, G. A., Ovekleef, H. S., Aerts, J. M. F. G.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 48, 8848–8869, (2009).

## 5Po19

### SYNTECKÉ CESTY PRÍPRAVY SULFO ANALÓGU OSELTAMIVIRU

Viktória Modrocká<sup>1</sup>, Mária Mečiarová<sup>1</sup>, Radovan Šebesta<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská dolina CH-2, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, viktoria.modrocka@gmail.com

Chrípkové epidémie predstavujú permanentné ohrozenie zdravotného stavu populácie vo všetkých častiach sveta. [1] Známe antivirálne liečivá používané na liečbu chrípky typu A (Oseltamivir, Zanamivir) strácajú svoju účinnosť v dôsledku získanej rezistencie vírusov na tieto látky. Z tohto dôvodu bol navrhnutý sulfo analóg oseltamiviru, u ktorého sa predpokladá silnejší inhibičný účinok voči neuramidázam chrípkových vírusov. Navrhli sme niekoľko spôsobov prípravy sulfo analógov oseltamiviru. Jedna z nich začína stereoselektívnou Michaelovou reakciou *N*-(2-nitrovinyl)-acetamidu s 3-pentyloxyacetaldehydom [2], po ktorej nasleduje Hornerova-Wadsworthova-Emmonsova reakcia so sulfovinylfosfonátom (Obr. 1). Kľúčovým krokom je príprava sulfovinylfosfonátu, ktorého syntéza nie je v literatúre opísaná.

Michaelovu adíciu sme optimalizovali z pohľadu diastereoselektivity. Testovali sme rôzne rozpúšťadlá, ktoré spĺňajú požiadavky zelenej chémie (rozpúšťadlá z obnoviteľných zdrojov, iónové kvapaliny, eutektické zmesi...). Diastereoselektivita reakcie sa zvýšila z 1:1 na 3:1 v prospech žiadaného diastereoméru. Z testovaných rozpúšťadiel sa najlepším ukázal byť 2-MeTHF, v ktorom vznikol Michaelov adukt v 70 % výťažku so 76 % enantiomérnym nadbytkom.



**Obr. 1.** Retrosyntéza sulfo analógu oseltamiviru

[1] Sriwilajaroen N., Suzuki Y.: *J. Methods Mol. Biol.* 1200, 447 (2014).

[2] Tisovský P., Peňaška T., Mečiarová M., Šebesta R. *ACS Sust. Chem. Eng.* 3, 3429 (2015).

### 5Po20

#### EFFECT OF STRUCTURAL MODIFICATION ON PHOTOCHROMIC PROPERTIES OF BENZOYLPIRIDINE BASED HYDRAZONES

Bernard Mravec<sup>1</sup>, Juraj Filo<sup>1</sup>, Klaudia Csicsai<sup>1</sup>, Marek Cigán<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Chemistry, Comenius University in Bratislava, Faculty of Natural Sciences, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, [mravec7@uniba.sk](mailto:mravec7@uniba.sk)*

Irradiation of hydrazones can induce isomerisation of their C=N double bond.<sup>1</sup> The biggest issue of formed Z isomers is their low stability (fast back thermal isomerisation). Lehn and Arahamian introduced novel hydrazones systems which Z isomers form H-bond.<sup>2,3</sup> This modification markedly improved stability of Z isomers and offers new possible source of photoswitches.

This study focuses on the comprehensive investigation of photoswitching behaviour of benzoylpyridine based hydrazones prepared by simple condensation reaction. Our results showed that designed skeleton exhibits desired photochromic behaviour with very good addressability and good thermal stability. Effects of substituents was also studied. Both acceptor and donor substituents improve the addressability and quantum yields of photoisomerization.

Interestingly, the thermal stability and mechanism of back thermal isomerisation associates with acidity of hydrazine N-H hydrogen and solvent polarity. Both inversion mechanism or auto-catalysed H<sup>+</sup> transfer can occur and therefore the stability of hydrazones depends on the type of back thermal isomerisation.

*This research was funded by Comenius University Science Park, ITMS: 26240220086.*

[1] Kuhn R., Münzig W. *Chemische Berichte* **1952**, 85, 29-35.

[2] Qain, H.; Pramanik, S.; Arahamian, I. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, 139, 9140–9143.

[3] Jan van Dijken, D.; Kovaříček, P.; Ihring, S.; Hecht, S. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, 137, 14982-14991.

### 5Po21

#### VYUŽITÍ ASYMETRICKÉ HENRYHO REAKCE PRO PŘÍPRAVU CLAVAMINOLU A XESTOAMINOLU C

Gabriela Nováková<sup>1</sup>, Pavel Drabina<sup>1</sup>, Miloš Sedlák<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav organické chemie a technologie, Studentská 573, 532 10 Pardubice, [Gabriela.Novakova@student.upce.cz](mailto:Gabriela.Novakova@student.upce.cz)*

Sfingolipidy představují důležitou strukturní a funkční složku buněčných membrán. Vyskytují se nejen u prakticky všech živočichů, rostlin či hub, ale i u řady prokaryotických organismů. Jedná se o strukturně velmi různorodou třídu sloučenin, jejichž základem je tzv. sfingoidní báze (charakteristická přítomností různých funkčních skupin a dlouhým alifatickým řetězcem), na níž je amidovou vazbou navázána libovolná mastná kyselina. [1]

V posledních letech si řada sfingoidních bazí (např. Spisulosin, Safingol, Clavaminol A-N nebo Xestoaminol A-C) získala značnou pozornost, a to zejména díky své protinádorové aktivitě. [2]

Sfingoidní báze mohou být připraveny různými syntetickými cestami [2-3], včetně Henryho reakce a následné redukce nitroskupiny.

Cílem této práce bylo studium katalytické aktivity a enantioselektivity vybraných enantioselektivních katalyzátorů asymetrické Henryho reakce při syntéze Clavaminolu A resp. Xestoaminolu C, a jejich stereoizomerů. Bylo

zjištěno, že nejúčinnější katalyzátor poskytuje příslušný nitroalkohol s enantioselektivitou vyšší než 90 % ee. Zároveň byla studována katalytická aktivita a možnost recyklace imobilizované formy katalyzátoru. V tomto případě byl získán nitroalkohol s enantioselektivitou 90 % ee, navíc nedošlo ani po desetinásobné recyklaci ke snížení enantioselektivity.

*Tato práce byla finančně podporována Grantovou agenturou ČR, projekt č. 17-08499S.*

[1] Merrill A. H.: *Chem. Rev.* **111**, 6387 (2011).

[2] Chen B-S., Yang L-H., Ye J-L., Huang T., Ruan Y-P., Fu J., Huang P-Q.: *Eur. J. Med. Chem.*, **46**, 5480 (2011).

[3] Fabišíková M., Martinková M., Hirková S., Gonda J., Pilátová M. B., Gönciová G.: *Carbohydr. Res.*, **435** 26, (2016).

## 5Po22

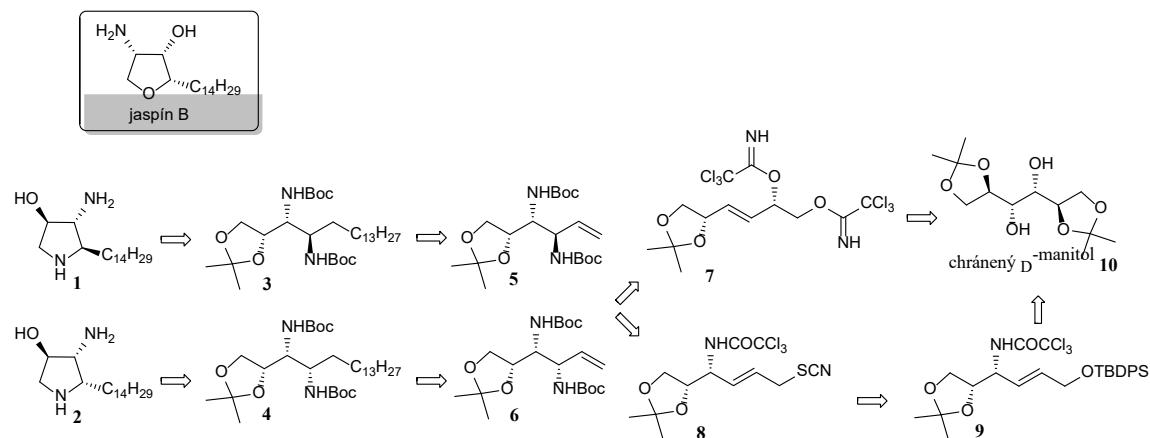
### STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA REGIOIZOMÉRNÝCH AZA-ANALÓGOV JASPÍNU B

Michaela Novotná<sup>1</sup>, Miroslava Martinková<sup>1</sup>, Jozef Gonda<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice, michaela.novotna@student.upjs.sk

Jaspín B (pachastrissamin, Schéma 1) je prírodný anhydrofytofosfingozín, ktorý bol izolovaný nezávisle dvomi vedeckými skupinami z morských hubiek rodu *Pachastrissa* sp. [1] a *Jaspis* sp. [2]. Po štruktúrnej stránke ide o jednoduchú cyklickú molekulu, ktorej základom je tetrahydrofuranový kruh s tromi stereogénnymi centrami. Samotný skelet disponuje vicinálnym aminoalkoholovým usporiadaním a lipofilným ramenom obsahujúcim 14 uhlíkových atómov. Jaspín B vykazuje pozoruhodnú cytotoxicitu na širokej palete rakovinových bunkových línií [3]. Postupne sa ukázalo sa, že nielen jaspín B, ale aj jeho analógy sú zaujímavé z hľadiska biologickej aktivity [1]. Všeobecne sa pri ich syntéze sledujú dva aspekty a to v zmysle modifikácií na samotnom THF jadre a transformácií na postrannom reťazci.

Cieľom práce je realizácia stereoselektívnej syntézy regioizomérnych aza-analógov jaspínu B **1** a **2**. Syntetická stratégia využíva metodológiu *the Chiron approach*, kde ako východisková látka bude použitý vhodne chránený D-manitol **10**. Syntézy vyššie zmienených štruktúr využívajú [3,3]-sigmatropné prešmyky alylových substrátov **7**, **8** a OCM reakciu pokročilých syntónov **5**, **6** ako kľúčové transformácie pri príprave cieľových štruktúr **1** a **2** (Schéma 1).



**Schéma 1.** Retrosyntetická analýza prípravy aza-analógov jaspínu B

*Tento príspevok vznikol s podporou projektov VEGA 01/0047/18, VEGA 01/0375/19 a VVGS-PF-2019-1056.*

[1] Kuroda, I.; Musman, M.; Ohtani, I. I.; Ichiba, T.; Tanaka, J.; Gravalos, D. G.; Higa, T. *J. Nat. Prod.* **2002**, *65*, 1505–1506.

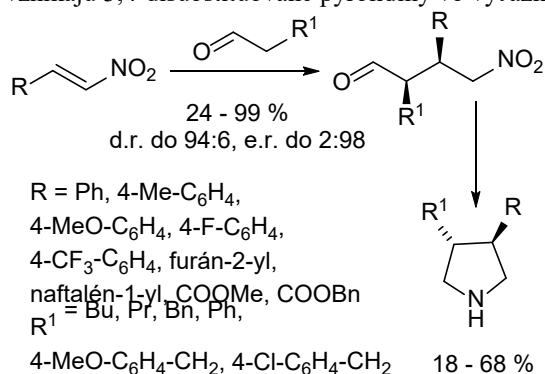
[2] Ledroit, V.; Debitus, C.; Lavaud, C.; Massiot, G. *Tetrahedron Lett.* **2003**, *44*, 225–228.

[3] Martinková, M.; Gonda, J. *Carbohydr. Res.* **2016**, *423*, 1–42 a práce tam citované.

## 5Po23

**SKVARAMIDOVÉ A TIOSKVARAMIDOVÉ KATALYZÁTORY V STEREOSELEKTÍVNEJ SYNTÉZE PREKURZOROV 3,4-DISUBSTITUOVANÝCH PYROLIDÍNŮV**Kristína Ormandyová<sup>1</sup>, Stanislav Bilka<sup>1</sup>, Mária Mečiarová<sup>1</sup>, Radovan Šebesta<sup>1</sup><sup>1</sup> Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká Fakulta, Katedra organickej chémie, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava 4, Slovenská republika; kristina.ormandyova@gmail.com

Chirálné 3,4-disubstituované pyrolidíny sú často sa objavujúcim motívom v štruktúre antibiotík, prípadne v ich medziproduktoch, ale aj v látkach s antitumorovou a antivirotickou aktivitou [1]. Prvým krokom jednej z viacerých možných syntetických stratégií je Michaelova adícia aldehydov na nitroalkény, v priebehu ktorej vznikajú dve stereogénne centrá. Stereoselektivita adície je zabezpečená použitím vhodných chirálnych katalyzátorov, v tomto prípade bifunkčných skvaramidov a tioskvaramidov s pyrolidínovým fragmentom, ktoré aktivujú aldehydy tvorbou enamínov a nitroalkény prostredníctvom vodíkových väzieb. Michaelove adukty boli získané vo výťažkoch 24–99 % s pomerom diastereomérov do 94:6 a s pomerom enantiomérov najviac 2:98 pre *syn* izomér a 92:8 pre *anti* izomér. Druhým krokom je redukčná cyklizácia Michaelových aduktov, pričom vznikajú 3,4-disubstituované pyrolidíny vo výťažkoch 18–68 %.



Za finančnú podporu ďakujeme grantovej agentúre APVV (číslo projektu: APVV-15-0039) a Univerzite Komenského (Grant pre doktorandov a mladých vedeckých pracovníkov UK/354/2019).

[1] Trepos R., Cervin G., Hellio C., Pavia H., Stensen W., Stensvag K., Svendsen J.-S., Haug T., Svenson J. J. *Nat. Prod.* 77, 2105 (2014).

## 5Po24

**4,7-BIS(PHENYLETHYNYL)-SUBSTITUTED BENZOTHIAZOLES AND BENZOTHIADIAZOLES AS FLUORESCENT DYES FOR BIOIMAGING**Patrik Osuský<sup>1</sup>, Peter Hrobárik<sup>1</sup>, Peter Magdolen<sup>2</sup><sup>1</sup> Comenius University Bratislava, Faculty of Natural Sciences, Department of Inorganic chemistry, Ilkovičova 6, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava 4, Slovak republic; patrikosusky70@gmail.com<sup>2</sup> Comenius University Bratislava, Faculty of Natural Sciences, Department of Inorganic chemistry, Ilkovičova 6, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava 4, Slovak republic

We report herein a synthesis of  $\pi$ -conjugated benzothiazoles and benzothiadiazoles substituted at the C-4 and C-7 positions with phenylacetylenes decorated with various electron-accepting and electron-donating groups. Target compounds were prepared from 4,7-dibromo-2-methylbenzothiazole, 4,7-dibromobenzo-1,2,5-thiadiazole, trimethylsilylacetylene and corresponding *para*-substituted iodobenzenes using palladium-catalyzed Sonogashira cross-coupling reactions, and were characterized by <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C NMR, HRMS and UV-Vis absorption and emission spectroscopies. Most of the title compounds exhibit high fluorescence quantum yields and are computed to display large two-photon absorption (TPA) cross-sections, making them attractive as diagnostic agents in 3D fluorescence imaging.

This research was carried out within the framework of projects funded by the Ministry of Education, Science, Research and Sport (VEGA, grant 1/0712/18), the Research and Development Agency (grant APVV-17-0324) as well as the European Commission under the Marie Skłodowska-Curie program (TWOSENSE, Grant No. 752285).

[1] Lin T. C., Huang Y. J., Chen Y. F., et al. *Tetrahedron*, 2010, 66, p. 1375

[2] Yao D., Zhao S., Guo J., et al. *J. Mater. Chem.* 2011, 21, p. 3568

[3] Hrobáriková V., Hrobárik P., Gajdoš P., et al. *J. Org. Chem.* 2010, 75, p. 3053

## 5Po25

## NOVÉ HALOGENSUBSTITUOVANÉ BENZODITIOFÉNOVÉ HETEROCYKLY AKO FOTO- / ELEKTROAKTÍVNE MATERIÁLY

Branislav Pavilek<sup>1</sup>, Daniel Végh<sup>1</sup>, Júlia Kožišková<sup>1</sup>, Viktor Milata<sup>1</sup><sup>1</sup>Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Brano.Pavilek@gmail.com

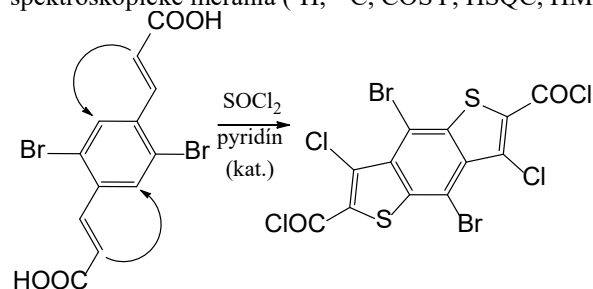
Cieľom tejto práce bol vývoj a uskutočnenie novej, efektívnej metódy prípravy lineárnych benzo[b]ditiófenových (BDT) derivátov, ktoré sú v súčasnosti jedny z najvyužívanejších stavebných blokov pri syntéze a dizajne moderných polovodičových materiálov so širokým využitím v optoelektronických aplikáciách ako sú organické fotovoltaické články (OVP), organické svetlo-emitujúce diódy (OLED), poľom ovplyvňované tranzistory (OFET), senzory, detektory a iné [1].

Koncept novej metódy vznikol modifikáciou východiskového materiálu využívaného pri príprave angulárnych benzo[b]ditiófenov [2] pre vznik lineárnych benzo[b]ditiófenov, ktoré v súčasnosti preukazujú najvyššiu účinnosť v konverzii svetelnej energie na elektrickú [3]. Táto modifikácia spočívala v zavedení orto-substituenta do štruktúry východiskového materiálu, ktorý následne regioselektívne riadil vznik produktu s lineárnou štruktúrou molekuly. Predmetnou metódou boli tieto lineárne benzo[b]ditiófeny pripravené prvý krát.

Jej veľkou výhodou boli nenáročné laboratórne podmienky a komerčne dostupný východiskový materiál (1,4-xylén), ktorý bol elektrofilnou substitúciou dibromovaný do orto-polôh, následne oxidovaný na 2,5-dibromtereftalaldehyd a kondenzovaný Doebnerovou modifikáciou Knoevenagelovej reakcie na 2,5-dibrom-1,4-fenyldiakrylovú kyselinu. Táto dikyselina cyklizovala v kľúčovom kroku syntézy za vzniku dichloridu BDT (obr. 1), ktorý bol ďalej esterifikovaný na lepšie rozpustný diester BDT.

Z finálneho produktu syntézy diesteru BDT bol získaný monokryštál s dostatočnou kvalitou pre meranie experimentálnej nábojovej hustoty.

Celkovo bolo pripravených 6 zlúčenín, z ktorých boli 3 nové, doposiaľ nepopísané v chemických databázach (SciFinder®, Reaxys®). Vybrané fyzikálne vlastnosti a štruktúra všetkých nových zlúčenín bola jednoznačne stanovená dostupnými fyzikálno-chemickými metódami s dôrazom na X-ray kryštalografickú analýzu a NMR spektroskopické merania (<sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, COSY, HSQC, HMBC techniky).



Obr. 1. kľúčový krok syntézy BDT.

Práca bola uskutočnená s finančnou podporou projektu APVV-17-0513. Autori ďakujú STU za finančnú podporu v rámci Grantovej schémy na podporu mladých výskumníkov.

[1] Rieger R., Beckmann D., Mavrinskiy A., Kastler M., Müllen K.: *Chem. Mater.* 22, 5314 (2010).

[2] Hassan Z., Reimann S., Wittler K., Ludwig R., Villinger A., Langer P.: *Adv. Synth. Catal.*, 354, 731 (2012).

[3] Yao H., Ye L., Zhang H., Li S., Zhang S., Hou J.: *Chem. Rev.* 166, 7397 (2016).

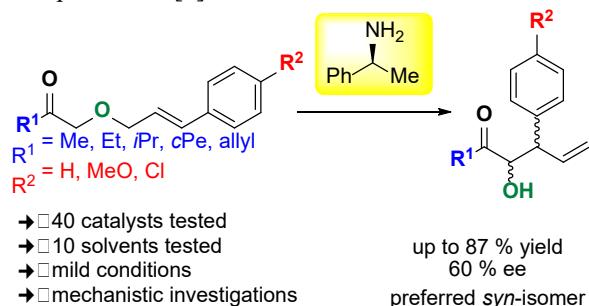
## 5Po26

## HOW ORGANOCATALYSTS AFFECT STEREOSELECTIVITY OF [2,3]-WITTIG REARRANGEMENT

Tibor Peňaška<sup>1</sup>, Melinda Meyer Mojzes<sup>1</sup>, Mária Mečiarová<sup>1</sup>, Radovan Šebesta<sup>1</sup><sup>1</sup>Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovakia, tibor.penaska@uniba.sk

Sigmatropic rearrangements have found many applications in the synthesis of bioactive compounds, including natural products and pharmaceutical agents. The sigmatropic [2,3]-rearrangements are 6 $\pi$ -electron rearrangements proceeding via 5-membered cyclic transition state. The Wittig [2,3]-rearrangement is a transformation of allyl ethers to homoallylic alcohols. Strong bases and low temperatures, typical for classical reaction conditions, can be avoided using organocatalysis. Gaunt and co-workers described the first organocatalytic sigmatropic [2,3]-Wittig rearrangement catalyzed with pyrrolidine [1]. In our work organocatalytic [2,3]-Wittig rearrangement of allyloxyketones was investigated. Extensive screening of chiral amine organocatalysts showed that small

pyrrolidine-based catalysts or simple phenylethylamine with the primary amino group were the most effective ones. Interestingly, CF<sub>3</sub>-derived pyrrolidine affords rearrangement product with opposite absolute configuration than corresponding non-fluorinated proline derived catalysts. Mechanistic and computational investigations were also performed [2].



This work was supported by the Slovak Grant Agency VEGA, grant no. VEGA 1/0414/16. I would like to thank Juraj Filo for his help with NMR experiments and Helena Jurdáková for measuring MS and HRMS spectra.

[1] McNally A., Evans B., Gaunt M. J.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 45, 2116 (2006).

[2] Peňaška T., Mojzes M. M., Filo J., Jurdáková H., Mečiarová M., Šebesta, R.: *Eur. J. Org. Chem.* 2, 605 (2019).

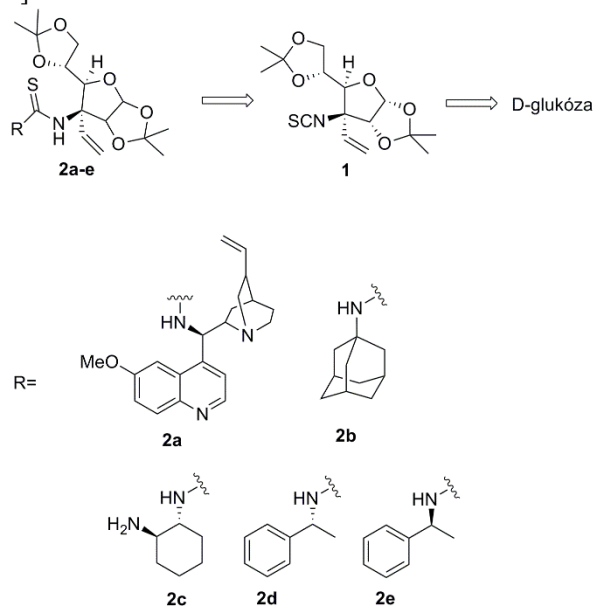
## 5Po27

### NOVÉ SACHARIDOVÉ TIOMOČOVINY AKO POTENCIÁLNE ORGANOKATALYZÁTORY

Róbert Rončák<sup>1</sup>, Monika Tvrdoňová<sup>1</sup>, Jozef Gonda<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice, roncakrobo@gmail.com

Prítomnosť viacerých stereogénnych centier v štruktúrach sacharidov dáva možnosť vzniku širokej palety izomérov. Túto ich vlastnosť je možné využiť v modernej organickej syntéze. V posledných rokoch sa v literatúre objavuje koncept spojenia sacharidového templátu so štruktúrami, ktoré majú organokatalytické vlastnosti, za účelom sledovania vplyvu cukorného substrátu na selektivitu organokatalyzovaných reakcií [1, 2]. Spojenie dvoch vopred pripravených štruktúr je často realizované prostredníctvom močovínového alebo tiomočovínového linkera. Takto pripravené organokatalyzátory poskytujú veľmi dobré selektivity v rôznych typoch modelových reakcií [1, 2].



Obr. 1. Retrosyntetická stratégia pre syntézu nových tiomočovín **2a-e** ako organokatalyzátorov.

Naša stratégia využíva teda vyššie zmienený koncept spojenia dvoch jednotiek pomocou tiomočovínového linkera. Syntéza vychádzala s komerčne dostupnej D-glukózy, ktorá bola sledom viacerých transformácií, s využitím [3,3]-sigmatropného prešmyku ako kľúčového kroku, modifikovaná na príslušný izotiokyanát **1** [3], ktorý predstavuje pokročilý syntón pre prípravu tiomočovín **2a-e** (Obr. 1). Reakciou **1** s rôznymi dostupnými chirálnymi amínmi

bola pripravená séria tiomočovín **2a-e**, ktorých organokatalytická aktivita bola overená v podmienkach Michaelovej adície rôznych CH-kyselín na viaceré substituované  $\beta$ -nitrostyrény.

*Predkladaná práca vznikla za podpory Vedeckej grantovej agentúry Ministerstva školstva SR (Vega 1/0375/19)*

[1] Liu K., Cui H.-F., Nie J., Dong K.-Y., Li X.-J., Ma J.-A.; *Org. Lett.* 9, 923-925 (2007).

[2] Agarwal J., Peddinti R. K.; *Tetrahedron Lett.* 52, 117-121, (2011).

[3] Gonda J., Martinková M., Raschmanová J., Balentová E.; *Tetrahedron: Asymmetry* 17, 1875-1882 (2006).

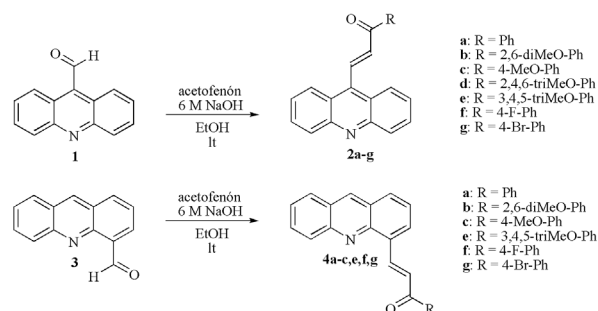
## 5Po28

### SYNTÉZA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA NOVÝCH AKRIDÍN-CHALKÓNOV

Paulína Slepčíková<sup>1</sup>, Mária Vilková<sup>1</sup>, Ján Imrich<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovenská republika, [paulina.plachetkova@gmail.com](mailto:paulina.plachetkova@gmail.com)

Séria nových derivátov akridínu s chalkónovým fragmentom v polohách C-4 a C-9 bola pripravená z akridín-9 (4)-karbaldehydu za základných podmienok. Pripravené zlúčeniny boli testované na *in vitro* cytotoxicitu proti rôznym ľudským rakovinovým bunkovým líniam. Z testovaných látok zlúčenina **2c** vykazovala široké spektrum biologickej aktivity s hodnotami IC<sub>50</sub> nižšími ako 25,0 mikromól/L proti všetkým testovaným rakovinovým bunkovým líniam. Chalkóny **4a** a **4b** indukovali bunkovú smrť v bunkách HCT-116 a Jurkat a navyše derivát **4e** v bunkách MDA-MB-231.



**Obr. 1.** Syntéza substituovaných akridín-chalkónov **2a-g** a **4a-c,e,f,g**.

[1] Takáč, P., Kello, M., BagoPilátová, M., Kudličková, Z., Vilková, M., Slepčíková, P., Petik, P., Mojžiš, J.; *Chem. Biol. Interact.* 292, 37 (2018).

[2] Vilková, M., Prokaiová, M., Imrich, J.; *Tetrahedron* 70, 944 (2014).

## 5Po29

### ENAMINONITRILY A DIAZONIOVÉ SOLI JAKO STAVEBNÍ BLOKY PRO SYNTÉZU BOROVÝCH HETEROCYKLŮ

Markéta Svobodová<sup>1</sup>, Petra Škraňková<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav organickej chémie a technológie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, [marketa.svobodova@upce.cz](mailto:marketa.svobodova@upce.cz)

Polarizované ethyleny jsou prekuzory pro syntézu mnoha typu heterocyklických sloučenin (např. pyridiny, dihydropyridiny, pyrazoly, chinoliny, . . .). My se zabýváme reakcemi takových *push-pull* alkenů jako jsou enaminy, enaminoamidy, enaminoestery a enamionitrily. Jejich reakcemi s diazoniovým iontem lze získat pyrididaziniové soli [1], pyrazoly [2] a různé heterocykly s atomem boru v kruhu [3]. Poslední z uvedených heterocyklů byly izolovány při použití 4-subst.benzendiazonium-tetrafenylborátů.

Enaminonitrily při reakci s výše uvedenou diazonovou solí v dichlormethanu nebo ve směsi dichlormethan-toluen poskytují triazaboriny (**Schéma**), ale pouze v případě, kdy  $R^2 = H, CH_3$  a na benzenovém jádře diazoniové soli jsou elektrondonorní substituenty. Výtěžky se pohybují v rozmezí 30–62 % po chromatografii a krystalizaci. Vzhledem k nestabilitě diazoniium-tetrafenylborátů s elektronakceptorní skupinou X, nebylo možné touto cestou syntetizovat takové triazaboriny, kde  $X = Br, NO_2, CN$ . Pro tyto triazaboriny byla zvolena jiná cesta, a sice přes azokopulační sloučeniny, které reakcí s difenylborinovou kyselinou poskytují požadovaný heterocyklus (**Schéma**).

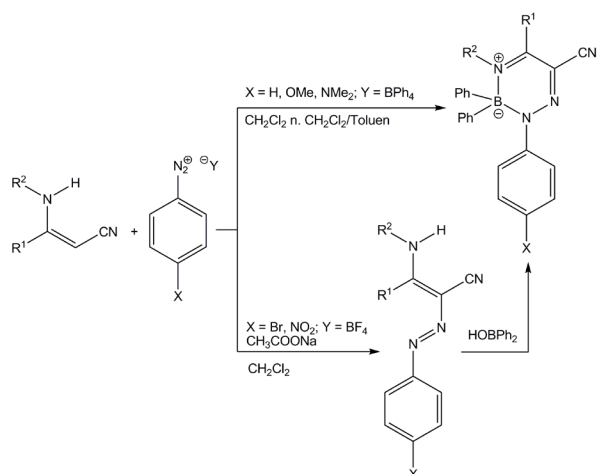


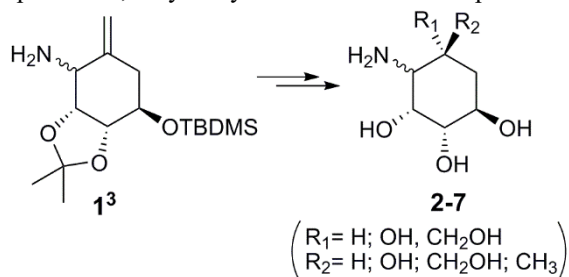
Schéma.

- [1] Šimůnek P., Pešková M., Bertolasi V., Lyčka A., Macháček V.: *Eur. J. Org. Chem.* 5055 (2017).  
 [2] Šimůnek P., Svobodová M., Macháček V.: *J. Heterocyclic Chem.* 46, 650 (2018).  
 [3] Pešková M., Šimůnek P., Bertolasi V., Macháček V., Lyčka A.: *Organometallics* 25, 2025 (2006).

**5Po30****SYNTÉZA NOVÝCH AMINOCYKLITOLOV AKO POTENCIÁLNYCH INHIBÍTOROV GLYKOZIDÁZ**Michael Široký<sup>1</sup>, Vladimír Bindzár<sup>1</sup>, Jozef Gonda<sup>1</sup>, Miroslava Martinková<sup>1</sup><sup>1</sup>Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra Organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice, michael.siroky@student.upjs.com

Inhibitory glykozidáz sú cieľom mnohých syntetických stratégií vďaka ich terapeutickému potenciálu pri liečbe ochorení spojených s metabolizmom sacharidov.<sup>1</sup> V minulosti boli pripravené viaceré regio a stereoizoméry aminocyklitolov vykazujúce antiglykozidázovú aktivitu<sup>2</sup>.

Táto práca popisuje prípravu nových syntetických aminocyklitolových derivátov, ktoré vo svojej štruktúre obsahujú jednu amino a štyri až päť hydroxylových skupín s rôznymi kombináciami ich stereochemického usporiadania. Samotná syntéza vychádza z nami pripraveného amínu<sup>3</sup> pripraveného Overmanovým prešmykom z kyseliny šikimovej, pričom na funkcionalizáciu exocyklickej násobnej väzby bola využitá ozonolýza, epoxidácia, dihydroxylácia a oxidatívne štiepenie.

**Obr. 1.** Retrosyntéza cieľových aminocyklitolov.

Vzhľadom na charakter takýchto látok sa dá predpokladať sľubná biologická aktivita aj u našich derivátov, preto boli finálne zlúčeniny testované na inhibíciu niekoľkých glykozidáz.

Prezentovaná práca bola podporená Grantovou Agentúrou Ministerstva Školstva Slovenskej Republiky (č. 1/0375/19).

- [1] Asano N.: *Glycobiology* 13, 93R–104R (2003).  
 [2] Ogawa S., Asada M., Ooki Y., Mori M., Itoh M., Korenaga T.: *Bioorg. Med. Chem.* 13, 4306–4314 (2005).  
 [3] Gonda J., Široký M., Martinková M., Homolya S., Vilková M., Bago Pilátová M., Šesták S.: *Tetrahedron* 75, 398–408 (2019).



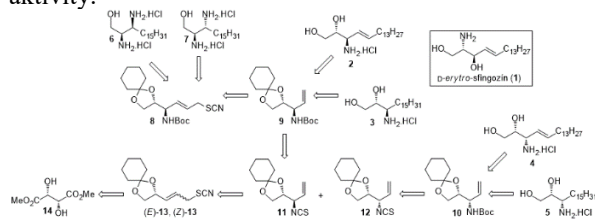
## 5Po31

## TOTÁLNA SYNTÉZA IZOMÉRNÝCH ANALÓGOV D-ERYTRO-SFINGOZÍNU S POTENCIÁLNOU CYTOTOXICKOU AKTIVITOU

Jana Špaková Raschmanová<sup>1</sup>, Miroslava Martinková<sup>1</sup>, Jozef Gonda<sup>1</sup>, Martina Bago Pilátová<sup>2</sup><sup>1</sup>Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice, [jana.raschmanova@upjs.sk](mailto:jana.raschmanova@upjs.sk)<sup>2</sup>Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Lekárska fakulta, Ústav farmakológie, Trieda SNP 1, 040 66 Košice

D-erythro-Sfingozín **1** (Schéma 1) je 2-amino-1,3-diol disponujúci dlhým nenasýteným uhl'ovodíkovým reťazcom [1]. Prvýkrát bol izolovaný J. L. W. Thudichumom v roku 1884 z lipidovej frakcie mozgového tkaniva [1] a neskôr sa zistilo, že predstavuje nielen základnú zložku sfingolipidov, ale rovnako tak funguje aj ako signalizačná molekula vo viacerých bunkových procesoch [1, 2]. Z vyššie uvedených dôvodov sa stal predmetom záujmu viacerých syntetických chemikov [1–3].

V našej syntéze izomérnych analógov **1**, reprezentovaných látkami **2–7**, sme vychádzali z dostupného dimetylésteru kyseliny L-vínnej **14** ako vhodného chirálneho templátu (Schéma 1). Sériou chemických transformácií boli zo syntónu **14** pripravené tiokyanáty (*E*)-**13** a (*Z*)-**13**, reprezentujúce vhodné alylové substráty pre kľúčový *aza*-Claisenov prešmyk, prostredníctvom ktorého bolo do molekuly implementované nové stereogénne centrum s dusíkovou funkcionalitou. Produkty prešmyku **11** a **12** boli modifikované na pokročilé stavebné bloky, *N*-Boc-deriváty **9** a **10**. Tie boli postupne transformované na požadované cieľové molekuly **2–5**, pričom na inkorporáciu postranného lipofilného fragmentu bola využitá OCM reakcia. V prípade 3-amino-3-deoxy-analógov **6** a **7** bola druhá C–N väzba zabudovaná s využitím [3,3]-sigmatropnému prešmyku, realizovaného u rodanidu **8**, ktorý bol odvodený z majoritného diastereoizoméru **9** cez vzájomnú premenu funkčných skupín (Schéma 1). Cieľové molekuly **2–7** boli poskytnuté na testovanie ich potenciálnej cytotoxickej aktivity.

Schéma 1. Retrosyntéza prípravy izomérnych analógov D-erythro-sfingozínu **1**.

Tento príspevok vznikol s finančnou podporou projektov VEGA (1/0047/18, 1/0375/19).

[1] Koskinen, P. M.; Koskinen, A. M. P. *Synthesis* **1998**, 1075–1091 a práce tam citované.

[2] Morales-Serna, J. A.; Llaveria, J.; Díaz, Y.; Matheu, M. I.; Castellón, S. *Curr. Org. Chem.* **2010**, *14*, 2483–2521 a práce tam citované.

[3] Gao, Y.; He, X.; Ding, F.; Zhang, Y. *Synthesis* **2016**, *48*, 4017–4037 a práce tam citované.

## 5Po32

## IMOBILIZÁCIA FUNKČNÝCH HYDRAZÓNOV

Pavol Tisovský<sup>1</sup>, Jana Donovalová<sup>1</sup>, Anton Gáplovský<sup>1</sup><sup>1</sup> Univerzita Komenského, Prírodovedecká Fakulta, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, [pavol.tisovsky@uniba.sk](mailto:pavol.tisovsky@uniba.sk)

Jednou z výziev fotochémie a supramolekulovej chémie v súčasnosti je príprava kolorimetrických a fluorescenčných senzorov pre biologicky a environmentálne dôležité ióny a neutrálne molekuly. Chemosenzory možno definovať ako miniatúrne zariadenia schopné podať v reálnom čase online informácie o analyte [1]. Chemosenzory na kationy vo všeobecnosti pozostávajú z komplexačnej jednotky, ktorá chelátuje časticu (receptor), signálnej jednotky signál sa mení v závislosti od stupňa komplexácie a linkera, ktorý tieto podjednotky spája. Takýmto zlúčeninami sú napr. cyklámy, azacrowny príp. pseudocrowny [2,3]. Projekt je zameraný na prípravu, kovalentnú imobilizáciu a výskum v oblasti fotochémie, fotofyziky inter, (ióny), a intramolekulových interakcií hydrazónov izatínu s 2-alkylbenzoizochinolín-1,3-diónovým fragmentom. Elektrón akceptorný charakter 2-alkylbenzoizochinolín-1,3-diónového fragmentu zvýši pravdepodobnosť tautomerizácie pred geometrickou izomerizáciou okolo C=N väzby hydrazónov. Hnacou silou tohto procesu budú prítomné anióny. Predpokladáme, že takto ovplyvníme selektivitu hydrazónov predovšetkým voči aniónom a zvýši sa detekčný limit. Projekt prinesie okrem nových originálnych poznatkov z oblasti inter a intramolekulových interakcií a fotochémie predmetných hydrazónov aj nové poznatky o vplyve štruktúry hydrazónu na proces programovo riadeného reverzibilného viazania, resp. uvoľňovania biologicky a ekologicky dôležitých kationov pomocou

vonkajšieho stimulu (svetlo). Externým stimulom bude možné kontrolovať/riadiť okamžitú koncentráciu katiónu alebo ligandu napr. v prostredí živej bunky.

*Táto práca bola podporená Vedeckou grantovou agentúrou - projekt VEGA 1/0618/19.*

- [1] Orellana G., Moreno Bondi, M. C: *Frontiers in Chemical Sensors*, New York (USA): Springer, 5(2005).  
 [2] He L., Dong B., Liu Y., Lin, W.: *Chem. Soc. Rev.* 45, 6449 (2016).  
 [3] Goswami S., Sen D., Das N. K.: *Org. Lett.* 12, 856 (2010).

### 5Po33

#### ORGANOKATALYTICKÁ SYNTÉZA CHIRÁLNYCH DISUBSTITUOVANÝCH PYROLIDÍNŮV S POTENCIÁLNOU ANTIMIKROBIÁLNOU AKTIVITOU

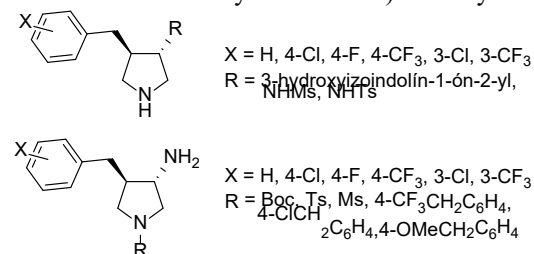
Lenka Turčíková<sup>1</sup>, Mária Mečiarová<sup>2</sup>, Radovan Šebesta<sup>2</sup>, Helena Bujdaková<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Synkola, s.r.o., Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, [turcikova@synkola.sk](mailto:turcikova@synkola.sk)

<sup>2</sup>Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Ilkovičova 6, Mlynská Dolina, 842 15 Bratislava 4

<sup>3</sup>Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra mikrobiológie a virológie, Ilkovičova 6, Mlynská Dolina, 842 15 Bratislava 4

Pyrolidínový cyklus je jedným z najviac frekvencovaných alifatických heterocyklov vyskytujúcich sa v štruktúrach biologicky účinných látok. Prítomnosť disubstitúovaných pyrolidínov v niekoľkých komerčných antibiotikách (Sitaflaxacín, Gemifloxacín, Linkomycín, Klindamycín) poukazuje na ich veľký potenciál v syntéze nových biologicky aktívnych zlúčenín. Potreba nových antimikrobiálnych látok je v súčasnosti, v dobe rastúcej antibiotickej rezistencie, veľmi aktuálna. Vypracovali sme jednoduchú praktickú syntézu chirálnych 3,4-disubstitúovaných pyrolidínov, ktorá využíva organokatalytickú Michaelovu adíciu ako kľúčový krok, v ktorom vznikajú stereogénne centrá [1]. Najlepšie výsledky boli dosiahnuté použitím komerčne dostupného Jörgensenovho-Hayashiho katalyzátora v kombinácii s dietyléterom, kedy bol prakticky pripravený len jeden izomér. Pyrolidínový cyklus je vytvorený v jednom reakčnom kroku – redukcii nitroskupiny, ktorá je nasledovaná cyklizáciou. Veľkou výhodou tejto metódy je obmedzenie použitia stĺpcovej chromatografie a možnosť prípravy bohatej knižnice rôzne substituovaných derivátov. Antimikrobiálna aktivita získaných pyrolidínových derivátov bola testovaná na kmeňoch *Staphylococcus Aureus* a *Escherichia Coli* (látky boli testované vo forme hydrochloridov). Prvé výsledky testovania ukazujú veľmi sľubnú antimikrobiálnu aktivitu.



**Obr. 1.** Štruktúry pripravených pyrolidínov.

*Za finančnú podporu ďakujeme grantovej agentúre APVV (projekt APVV-15-0039).*

- [1] Zhu, S.; Yu, S.; Wang, Y.; Ma, D. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2010**, 49, 4656 – 4660.

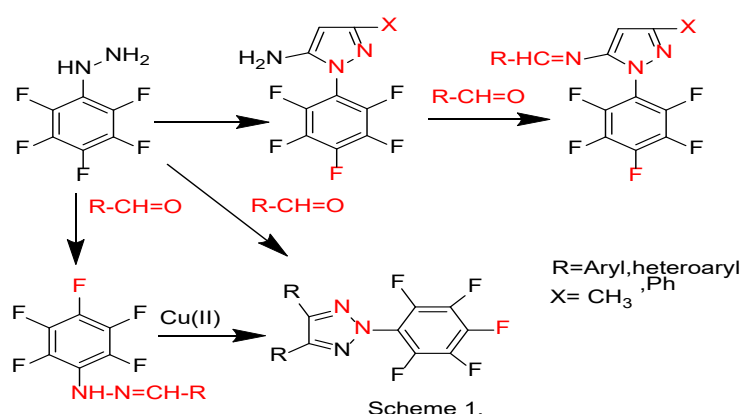
### 5Po34

#### SYNTHESIS OF NEW PERFLUOROPHENYL SUBSTITUTED PI-CONJUGATED HETEROCYCLIC COMPOUNDS AS POTENTIAL NOVEL OPTO-ELECTRONIC AND BIOLOGICALLY ACTIVE MATERIALS

Daniel Végħ<sup>1</sup>, Jakub Šofranko<sup>1</sup>, Dušan Bortňák<sup>1</sup>, Viktor Milata<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic. E-mail: [daniel.vegh@stuba.sk](mailto:daniel.vegh@stuba.sk)

Perfluorophenyl substituted pi-conjugated heterocyclic compounds as pyrazines and 1,2,3-triazoles and its derivatives are attractive building blocks for the synthesis of biologically relevant fluorinated aromatic and heterocyclic compounds and novel opto-electronic materials [1-2]. Recently, the convenient and new synthesis of pentafluorophenyl substituted 5-amino-pyrazines and 4,5-diheteroarylsubstituted-1,2,3-triazoles is described from commercially available pentafluorophenyl hydrazine.



Herein we presented some preliminary reports of the transformation of pentafluorophenyl hydrazine, resulting novel 5-amino-pyrazoles and 1,2,3-triazoles (Scheme 1.) with pentafluorophenyl ring. The syntheses of these functionalized derivatives provides several possibilities for the preparation of large number of new fluorinated building blocks of novel opto-electronic materials as OLED materials, fotolabeling reagents, low molecular weight gelators, photosensitizers and excellent antibacterials, antifungal, antiviral and citostatic compounds. Structures of target compounds were proved by IR, UV,  $^1\text{H}$  NMR,  $^{13}\text{C}$  NMR and  $^{19}\text{F}$  NMR spectral methods, and by X-ray analysis.

This work was financially supported by Science and Technology Assistance Agency under contract No. APVV-17-0513.

[1] Roesky H. W., ed. Efficient Preparations of Fluorine Compounds, J. Wiley & Sons Ltd, 1-479 (2013).

[2] Ojima I., ed. Fluorine in medicinal chemistry and chemical biology, J. Wiley & Sons Ltd, Blackwell Publishing Ltd 1-640 (2009).

### 5P035

## NOVÉ SLOUČENINY PŮSOBÍCÍ NA *MYCOBACTERIUM ABSCESSUS*: MALÉ MOLEKULY A JEJICH PEPTIDOVÉ KONJUGÁTY

Martin Krátký<sup>1</sup>, Lilla Horváth<sup>2</sup>, Zsuzsa Baranyai<sup>2</sup>, Rudolf Vosátka, Szilvia Bősze<sup>2</sup>, Jarmila Vinšová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Akademia Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, [vinsova@faf.cuni.cz](mailto:vinsova@faf.cuni.cz)

<sup>2</sup>MTA-ELTE Research Group of Peptide Chemistry, Pázmány Péter Sétány 1/A, Budapešť, Maďarsko

*Mycobacterium abscessus* (MA) je závažný lidský patogen zodpovědný za široké spektrum infekcí, většinou u imunosuprimovaných pacientů. Patří do skupiny rychle rostoucích netuberkulózních mykobakterií. Léčba je komplikovaná díky vysoké virulenci a multilékové odolnosti. V léčbě se kombinuje makrolid s aminoglykosidem a dalším léčivem (linezolid, moxifloxacin, tigecyklin, cefoxitin, imipenem); klinická účinnost tohoto režimu je však sporná [1]. Tato fakta odůvodňují vývoj nových anti-MA léčiv se zvýšenou aktivitou, bez zkřížené rezistence, s nízkou toxicitou a dobrým účinkem proti intracelulární subpopulaci mykobakterií.

Na základě našich předchozích zkušeností s nosiči odvozenými od oligotuftsínu [2], jsme konjugovali vybrané malé antimykobakteriálně účinné molekuly s těmito peptidy cílicími do makrofágů. Nosiče byly syntetizovány na pevné fázi pomocí Fmoc/*t*-Bu strategie. Byly připraveny nosiče o různé délce ( $[\text{TKPKG}]_n$ ,  $n = 1-4$ ), s nebo bez enzymaticky štěpitelných linkerů mezi peptidem a malou molekulou. Pro konjugaci nosiče s účinnou složkou byla použita oximová a amidová vazba. Konjugáty byly také hodnoceny proti MA a byly porovnávány s mateřskými malými molekulami. Prokázali jsme, že konjugace může zlepšit aktivitu malých molekul (např. analog 4-aminosalicylové kyseliny) nebo dokonce přinést aktivitu původně neúčinných derivátů.

U neúčinnějších sloučenin byly zkoumány cytotoxické a cytostatické vlastnosti. Většina peptidových konjugátů nevykázala toxicitu pro eukaryotické buňky (HepG2, MonoMac6) v koncentraci 250  $\mu\text{M}$ .

Tato práce vznikla za podpory projektu GAČR 17-27514Y, EFSA-CDN (reg. č.: CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000841) spolufinancovaného z EFRR a FIKP 1783-3/2018/FEKUTSTRAT.

[1] Baranyai Z., Krátký M., Vinšová J., Szabó N., Senoner Z., Horváti K., Stolaříková J., Dávid S., Bősze S.: *Eur. J. Med. Chem.* 101, 692 (2015).

[2] Baranyai Z., Krátký M., Vosátka R., Szabó N., Senoner Z., Dávid S., Vinšová J., Bősze, S.: *Eur. J. Med. Chem.* 133, 152 (2017).

## POSTERY - SEKCIA 6: POLYMÉRY

### 6Po01

#### EXTRACELLULAR BIOPOLYMERS PRODUCED BY GREEN MICROALGAE

Peter Capek<sup>1</sup>, Michal Halaj<sup>1</sup>, Ema Paulovičová<sup>1</sup>, Lucia Paulovičová<sup>1</sup>, Soňa Jantová<sup>2</sup>, Jozef Turjan, Vladislav Cepák<sup>3</sup>, Jaromír Lukavský<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Chemistry, Center for Glycomics, Slovak Academy of Sciences, Bratislava,* <sup>2</sup>*Institute of Biochemistry and Microbiology, Slovak University of Technology, Bratislava,* <sup>3</sup>*Institute of Botany, Czech Academy of Sciences, Třeboň, [chemcape@savba.sk](mailto:chemcape@savba.sk)*

Microscopic algae are a broad group of photosynthetic organisms that occupy all the territories of our planet. It is assumed that their number is several millions, however, only about 35,000 microalgae species are recorded in the database. Of these, about 3,000 green microalgae have been detected so far. Some microalgae species produce a wide range of highly valuable compounds of interest for various biotechnology applications [1,2]. Cultivation of freshwater microalgae of the genus *Dictyosphaerium* showed particularly interesting yields of extracellular biopolymers [3]. It has been found that all the isolated biopolymers are heterogeneous in molecular weight distribution, with the dominant components being found to have a high molecular weight. The biopolymers examined were found to be anionic proteoglycans with approximately the same protein content. Analysis of the sugar composition of biopolymers produced by three representatives of the genus *Dictyosphaerium* showed a high content of hexose and deoxyhexose sugars and the presence of partially methylated monosaccharides. The dominant sugar component of all biopolymers was found to be galactose. Extracellular biopolymers were subjected to immuno-biological and immuno-toxicological tests to verify their potential effects.

*This work was supported by the Slovak Grant Agency VEGA (grant nos. 2/0051/18, 1/0041/15 and 2/0098/17) and the Technology Agency of the Czech Republic (grant TE 01020080).*

[1] Matos, J., Cardoso, C., Bandarra, N. M., Afonso, C.: *Food & Function*, 8, 2672 (2017).

[2] Singh, S., Kate, B. N., Banerjee, U. C. *Biotechnol.* 25, 73 (2005).

[3] Halaj, M. et al., *Carbohydr. Polym.* 198, 215 (2018).

### 6Po02

#### FORMULACE FDM FILAMENTU PRO PŘÍPRAVU LÉKOVÝCH FOREM S OKAMŽITÝM UVOLŇOVÁNÍM LÉČIVA

Jan Elbl<sup>1</sup>, Jan Muselík<sup>1</sup>, Aleš Franzl<sup>1</sup>, Natália Janigová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, Farmaceutická fakulta, Ústav technologie léků. Palackého tř. 1946/1, Brno, [elblj@vfu.cz](mailto:elblj@vfu.cz)*

V medicínských oborech se 3D tisk uplatňuje např. při výrobě protetických náhrad, kostních náhrad, specifických biosenzorů, tkáňových struktur a velmi intenzivně je zkoumáno pole tzv. bioprintingu [1]. V oblasti nových lékových forem připravených technologií 3D tisku probíhá také rozsáhlý výzkum těžící z již zmíněných aspektů této technologie, nicméně do praxe se zatím prosadil pouze jediný přípravek [2]. Naším cílem byla příprava filamentů vhodných k aditivní výrobě tablet určených k terapii závislosti na benzodiazepinech a Z-hypnoticích. FDM filamenty byly připravovány v teplotním rozmezí 120 – 180 °C pomocí extruderu Noztek Pro. Jako majoritní složka byl vybrán Eudragit® E nebo Affinisol® VA64. Jako aditiva byly využity plastifikátory triethylcitrát, kyselina citronová, polyethylenglykol a mannitol. Pro usnadnění extruze pak stearan vápenatý. Filamenty byly hodnoceny texturometricky s ohledem na jejich využití ve FDM tisku a především byla sledována odchylka průměru, která má významný vliv na obsahovou stejnoměrnost účinné látky v konečné lékové formě. Ze směsí s obsahem Eudragitu® E, triethylcitrátu a stearanu vápenatého byly připraveny filamenty s vhodnými texturometrickými vlastnostmi, ale nepodařilo se zajistit jejich konzistentní průměr.

[1] J. Jang, J. Y. Park, G. Gao, and D.-W. Cho.: *Biomaterials*, 156, 88 (2018).

[2] J. Norman et al.: *Adv. Drug Deliv. Rev.*, 108, 39 (2017).

**6Po03****INTERPRETÁCIA MS SPEKTIER HETEROGÉNNYCH NEOGLYKOKONJUGÁTOV**

Pavol Farkaš, Jana Valáriková, Alžbeta Čížová

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

Navrhli sme numerickú metódu na odhad substitúcie,  $n$ , heterogénnych neoglykokonjugátov. Výpočet vychádza z predpokladanej štatistickej distribúcie aduktov a píkov ktorých tvar definuje Študentova  $t$ -distribúcia. Vypočítané spektrum sa postupne aproximuje k najnižšej hodnote odchýlky s nameraným spektrom. Metódu sme evaluovali na modelových konjugátoch proteínu BSA, peptidu a rôznych oligosacharidov. Ako referenčná analýza bola použitá kolorimetria. Uvedený postup môže byť implementovaný do nástrojov na MS analýzu spektier a byť nápomocný na presnejší odhad substitúcie u homogénnych glykokonjugátov, ale aj na riešenie zložitých MS spektier.

*Práca vznikla s finančnou podporou projektu APVV-15-0161.*

**6Po04****THE TOXICITY AND BIOCOMPATIBILITY OF THE FILM BASED ON NATURAL POLYMERS (CHITOSAN-HYALURONIC ACID)**Jana Franková<sup>1</sup>, Rash M. Abdelrahman<sup>2</sup>, Renáta Sklenářová<sup>1</sup>, M. Abdel-Mohsen<sup>2,3,4</sup>, Jitka Ulrichová<sup>1</sup>, Josef Jancar<sup>2,3,5</sup>

<sup>1</sup>*Palacky University, Faculty of Medicine and Dentistry, Department of Medical Chemistry and Biochemistry, Hněvotínská 3, Olomouc, 775 15, Czech Republic*

<sup>2</sup>*CEITEC-Central European Institute of Technology, Brno University of Technology, Brno, 612 00*

<sup>3</sup>*SCITEG, a.s., Brno, 612 00, Czech Republic*

<sup>4</sup>*National Research Centre, Dokki, Cairo, Egypt*

<sup>5</sup>*Institute of Materials Chemistry, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Brno, Czech Republic*

Several factors contribute to the challenges of wound management including the location, size, and depth of the wound and what underlying tissue is involved in the wound [1]. Over the past several decades, various biological and synthetic biomaterials have been widely used for wound care in multiple physical formats, such as membranes, scaffold, and hydrogel. Among different type of materials is used for supporting healing wounds, the chitosan arises as one of the preeminent materials due to its inherent biocompatibility, antimicrobial properties, hemostatic and healing properties [2, 3]. Chitosan is able to improve the wound healing stimulating the cells to produce anti-inflammatory cytokines and as well as support the deposition of the collagen.

In our study, we compared the toxicity of seven samples containing the mixture of chitosan and hyaluronic acid with the different ratios of the content. To define the influence of materials toxicity on the viability of the cells, we provided MTT test on normal human dermal fibroblasts (NHDF) and Saos-2 (osteoblasts-like cells). Moreover, the evaluation of the live/dead cells was determined by fluorescent microscopy on the Saos-2 cells and we declare that none of the prepared materials showed a toxic effect on the cells.

*This work was supported by grants: IGA\_LF\_2019\_015 and CEITEC 2020 (LQ1601) under the National Sustainability Programme II.*

[1] Kim SY et al: *J. Ind. Eng. Chem.* 142, 73 (2019).

[2] Miguel PS et al: *Int. J. Biol. Macromol.* 460, 127 (2019).

[3] A.M. Abdel-Mohsen et al: *Int J Pharm.* 520, 241 (2017).

**6Po05****VÝVOJ PERORÁLNEJ LIEKOVEJ FORMY KU KOLONICKÉMU PODANIU BIOLOGICKÉHO MATERIÁLU**Nicole Fülöpová<sup>1</sup>, Aleš Franc<sup>1</sup>, Michaela Garajová<sup>1</sup>, Jana Koščová<sup>2</sup>, Miroslava Pavelková<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Veterinárná a farmaceutická univerzita Brno, Palackého tř. 1946/1, 612 42 Brno, f18207@vfu.cz*

<sup>2</sup>*Univerzita veterinárneho lekárstva a farmácie v Košiciach, Komenského 73, 04181 Košice*

V súčasnosti je častým ochorením kolonu infekcia *Clostridium difficile*, ktoré vzniká ako následok nadužívania antibiotík [1]. Ďalšie antibiotiká už nekorigujú patogénny mikrobióm v čreve, ale potencujú jeho poškodenie [2]. Alternatívnou terapiou je fekálna mikrobiálna transplantácia (FMT). Jedná sa o prenos stolice zdravého jedinca

do čriev pacienta za účelom obnovy črevného mikrobiómu [1]. FMT sa podáva nasosejunalnými sondami alebo klystírmi, čo nie je príjemné.

Boli teda k aplikácii FMT skúmané aj enterosolventné tobolky DrCaps™ [3]. Metódou rozpadavosti týchto toboliek s obsahom fyziologického roztoku a pufru o pH 4,5 bolo zistené, že tobolky DrCaps™ nie sú enterosolventné, pretože dôjde k rozpusteniu steny tobolky z vnútra. Ak sa však vodná náplň vemulguje do vonkajšej oleofilnej fáze, tobolky testu vyhovujú. Náplň W/O je schopná behom emulgácie pojať bez poškodenia bakteriálnej steny aj suspenziu laktobacilov, stimulujúcich baktérie obsiahnuté v FMT. Bolo to preukázané následnou kultiváciou náplne na UVLF v Košiciach.

V súčasnosti sa výskum zameriava na vonkajšie obalenie tobolky enterickými polymérmi Eudragit® FS, celacefátom, acrylEZE®. K obalu vnútornej strany tobolky bude použitá etylcelulóza, Eudragit® E alebo PVA, ktoré zabránia rozpusteniu z vnútra. Obalenie toboliek z oboch strán by zaručovalo kolonické podanie. Výsledný produkt sa hodnotí na rozpadavosť, hmotnostnú rovnomernosť, disolúciu a mikroskopickú štruktúru obalovej vrstvy.

[1] Members of the steering committee for the aga fmt registry: *Gastroenterol.* 45, 223-237 (2015).

[2] Borody T. J., Paramsomthy S., Agrawal G.: *Curr. Gastroenterol.* 15, 337 (2013)

[3] Youngster I., Russell G. H., *Jama*, 17, 1772-1778 (2014)

## 6Po06

### THE EFFECT OF PROCESSING PARAMETERS ON THE PREPARATION OF BIO-DERIVED POLYMERIC NANOPARTICLES

Jozef Kollár<sup>1</sup>, Ľudmila Hrková<sup>1</sup>, Jaroslav Mosnáček<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Polymer Institute SAS, Dúbravská cesta 9, 84541 Bratislava, Slovakia, Jozef.Kollar@savba.sk

Polymeric nanoparticles derived from nature were synthesized via emulsion polymerization in the absence or presence of surfactant well as via nanoprecipitation technique.  $\alpha$ -Methylene- $\gamma$ -butyrolactone (MBL) can be derived from tuliposide found in tulips or can be synthesized from biomass sugar-based itaconic anhydride. A similar monomer,  $\gamma$ -methyl-  $\alpha$ -methylene-  $\gamma$ -butyrolactone (MeMBL) can be synthesized from bio-derived levulinic acid. In this study, we report on synthesis of nanoparticles from bio-derived MBL [1] and MeMBL [2]. The influence of processing technique (batch, semibatch, nanoprecipitation), type of surfactant, surfactant concentration, monomer content and ionic strength of the aqueous phase on molar mass and size of the nanoparticles was studied. The weight average molecular weights and molecular weight distributions were determined by size exclusion chromatography (SEC). DLS and SEM were used to evaluate the size distribution profile and size of polymeric particles. The size of the particles increases gradually with increasing ionic strength of the aqueous phase as well as with higher monomer content. More uniform nanoparticles were obtained by emulsion polymerization vs nanoprecipitation procedure. Nanoparticles with negative Zeta potential values between -40 to -60 mV have high degree of colloidal stability. According to experimental conditions the size of nanoparticles can be tuned from 0.15 to 0.60  $\mu$ m.

*Acknowledgements: Authors thank for financial support to APVV grant agency through grant no. APVV-14-0891, APVV-15-0296, APVV-15-0545, APVV-15-0528 and VEGA 2/0158/17.*

[1] Mosnáček, J.; Matyjaszewski, K; *Macromolecules*, 41, 5509 (2008)

[2] Cockburn R.A., McKenna T.F.L., Hutchinson R. A.; *Macromol. Chem. Phys.*, 211, 501 (2010)

## 6Po07

### POVRCHOVÉ ÚPRAVY POLYMERŮ (CELULÓZY) PRO RŮZNÉ APLIKACE

Zdeňka Kolská<sup>1,2</sup>, Viktorie Neubertová<sup>2</sup>, Monika Benkocká<sup>2</sup>, Kateřina Kolářová<sup>1</sup>, Václav Švorčík<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav inženýrství pevných látek, FCHT, VŠCHT Praha, Technická 3, 166 28 Praha, [zdenka.kolska@ujep.cz](mailto:zdenka.kolska@ujep.cz)

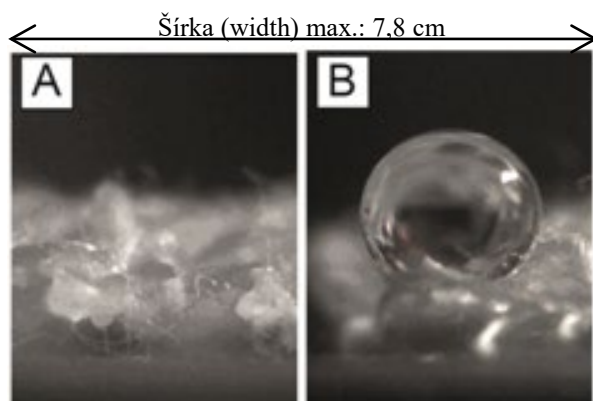
<sup>2</sup>Ústecké materiálové centrum, PřF, UJEP v Ústí nad Labem, České mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem

V našem výzkumu nejprve aktivujeme polymerní povrchy a následně různé chemické sloučeniny. Aktivace povrchu je provedena (i) plazmatem, (ii) UV-zářením, (iii) laserem nebo (iv) tzv. Piranha roztoky různých složení. Předem aktivované povrchy jsou následně roubovány (i) boranovými sloučeninami pro luminiscenční vlastnosti nebo pro antimikrobiální aktivitu [1-3], nebo (ii) aminokyselinami nebo jinou chemickou sloučeninou pro lepší buněčnou adhezi a proliferaci [1-3].

Po všech krocích aktivace a modifikace povrchu dochází k výřazným změnám povrchových vlastností. Ty byly studovány různými metodami, rentgenovou fotoelektronovou spektroskopií, elektrokinetickou analýzou, goniometrií, mikroskopií atomové síly, BET analýzou, UV-Vis spektroskopií, rastrovací elektronovou mikroskopií, atd.

Na vybraných vzorcích byly následně provedeny mikrobiální testy na (i) antimikrobiální vlastnosti a/nebo (ii) *in vitro* studie adheze a proliferace buněk.

Tímto způsobem jsme schopni připravit nové nanokompozitní materiály, které mohou nalézt uplatnění v oblastech vývoje nových (i) luminoforů, (ii) povrchů s antimikrobiálními vlastnostmi a/nebo (iii) povrchů s lepší adhezí a proliferací buněk pro oblast tkáňového inženýrství.



**Obr. 1.** Smáčivost povrchu celulózy před (A) a po (B) ošetření plazmatem.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GACR, projekt č. 17-00885S.*

[1] Benkocká M, Lupínková S, Matoušek J, Kolářová K, Kolská Z.: *RSC Adv.* 8, 15001 (2018).

[2] Benkocká M, Kolářová K, Matoušek J, Semerádtová A, Šícha V, Kolská Z.: *Appl. Surf. Sci.* 441, 120 (2018).

[3] Benkocká M, Lupínková S, Knapová T, Svorcik V, Matousek J, Kolska Z.: *Mater. Sci. Eng. C-Mater* 96, 479 (2019).

## 6Po08

### CÍLENÁ INHIBICE METASTATICKÝCH PROCESŮ POMOCÍ BIODEGRADABILNÍCH KONJUGÁTŮ S INHIBITORY MMP

Jana Kousalová<sup>1</sup>, Tomáš Etrych<sup>1</sup>, Libor Kostka<sup>1</sup>, Vladimír Šubr<sup>1</sup>, Marek Kovář<sup>2</sup>, Ladislav Sivák<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav makromolekulární chemie AV ČR v. v. i., Heyrovského náměstí 2, 16206 Praha 6, Česká republika

<sup>2</sup>Mikrobiologický ústav AV ČR, Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4, Česká republika

Cílená protirakovinná léčba je inovativní oblast onkologie, která významně přispívá ke zlepšení léčby různých typů rakoviny. Jeden z rysů nádoru je schopnost napadat okolní tkáň a tvořit metastázy. Vývoj v biologii nádorových buněk umožnil detekci buněčných procesů, které jsou zodpovědné za šíření rakovinných buněk do okolních tkání a vzniku metastáz. Z tohoto důvodu se matrix metaloproteinázy jeví jako vhodných potencionální cíl protinádorové léčby. Jedná se o skupinu proteináz zodpovědných za degradaci a remodelaci bazální membrány[1]. Matrix metaloproteinasy jsou ve vysoké koncentraci obsaženy v různých maligních buňkách a jejich nadměrná exprese je spojena s agresivitou nádoru a tvorbou metastáz[2,3]. Přičemž MMP-2 a MMP-9 jsou nejčastěji detekovány v těchto tkáních.

Proto jsme se rozhodli použít nízkomolekulární inhibitory MMP-2 a MMP-9 a konjugovat je s vysokomolekulárním biodegradovatelným polymerním nosičem. Taková konjugace by mohla vézt ke zlepšení farmakologických vlastností inhibitorů, zvýšení akumulace v solidních nádorech prostřednictvím EPR efektu a snížení vedlejší toxicity. Aktinonin byl vybrán jako inhibitor uvedených matrix metaloproteináz a kopolymer HPMA jako vhodný polymerní nosič. Byla připravena série polymerních konjugátů lišících se v použité spojce k vazbě aktinoninu na polymer. U všech konjugátů byla změřena hydrolýza při různých hodnotách pH a také *in vivo* aktivita.

*Tato práce byla podpořena Grantovou agenturou ČR v rámci grantu 19-61427S.*

[1] Verma, R.P., Hansch, C: *Bioorg. Med. Chem.* 15, 2223 (2007).

[2] Chambers, A.F. et al.: *J Natl Cancer Inst.* 89, 1260 (1997).

[3] Kahari, V.M. et al.: *Ann Med* 31, 34 (1999).

**6Po09****RUBBER COMPOSITES ABLE TO ABSORB ELECTROMAGNETIC RADIATION**<sup>a</sup>Ján Kruželák, <sup>b</sup>Jozef Preťo, <sup>b</sup>Ján Hronkovič, <sup>c</sup>Jarmila Vilčáková, <sup>a</sup>Ivan Hudec<sup>a</sup>*Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia*<sup>b</sup>*Vipo, a.s., Generála Svobodu 1069/4, 958 01, Partizánske*<sup>c</sup>*Centre of Polymer Systems, University Institute, Tomas Bata University in Zlín, třída Tomáše Bati 5678, 760 01 Zlín, Czech Republic*

Due to increasing amount of electronic and radiation sources, the need electromagnetic radiation shielding has become more and more actual.

In generally, three mechanisms contribute to the overall effectiveness of electromagnetic radiation shielding, namely absorption, reflection and multiply reflection. The primary mechanism of shielding is reflection, which refers to a simple reflection of electromagnetic radiation wave from the surface of the shield. Absorption is secondary mechanism of shielding and depends on the thickness of shielding material. In addition to reflection and absorption, the third mechanism of shielding is multiply reflection which refers to reflection of electromagnetic waves from various surfaces and phase interfaces in the shielding material.

Rubber magnetic composites tested in this work were prepared by incorporation of magnetic soft manganese-zinc ferrite into rubber matrix based on acrylonitrile butadiene rubber. The aim was to investigate the influence of magnetic filler content on the cross-linking, physical-mechanical and shielding properties of the rubber magnets. The results showed that although the tensile strength showed decreasing trend with increasing content of magnetic filler, the tested composites are able to efficiently shield the harmful electromagnetic radiation in the selected frequency range. The biggest preference of these materials is their ability to shield the electromagnetic radiation by absorption mechanisms.

*This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-16-0136.*

**6Po10****POLYSACCHARIDE-BASED POLYMERS FOR IMMUNORADIOTHERAPY**Lenka Loukotová<sup>1</sup>, Linda Srbová<sup>1</sup>, Mariia Rabyk<sup>1</sup>, Jan Kučka<sup>1</sup>, Kristýna Venclíková<sup>1</sup>, Daniela Machová<sup>1</sup>, Olga Janoušková<sup>1</sup>, Jan Pankrác<sup>2</sup>, Tomáš Heizer<sup>2</sup>, Luděk Šefc<sup>2</sup>, Petr Štěpánek<sup>1</sup>, Martin Hrubý<sup>1</sup><sup>1</sup>*Institute of Macromolecular Chemistry AS CR, v. v. i., Heyrovsky Sq. 2, Prague, 162 06, Czech Republic, e-mail: lenci.l@seznam.cz*<sup>2</sup>*Charles University in Prague, 1st Faculty of Medicine, Center for Advanced Preclinical Imaging, Salmovska 3, Prague, 120 00, Czech Republic*

A conceptually new cancer treatment, immunoradiotherapy, was demonstrated using thermoresponsive immunostimulatory radiolabeled polymers. The principle of the treatment is as follows: Radiation destroys the tumor cells as well as tumor-associated immunosuppressive cells, and after the radionuclide decays, the immunomodulator enhances an immune response against the tumor cell debris and metastases.

For this purpose, selected polysaccharides –  $\beta$ -glucan from *Auricularia auricula-judae*,  $\kappa$ -carrageenan from *Kappaphycus alvarezii* and lentinan from *Lentinula edodes* – widely known for their immunostimulatory and anticancer activities[1], were grafted with poly(2-isopropyl-2-oxazoline-co-2-butyl-2-oxazoline)s (POXs) (different graft lengths and grafting densities) that induced a cloud point temperature (CPT) of the final polymers to keep them in the solid tumor after intratumoral administration. The polymers with the ideal CPT for the brachytherapy application (~ 32 °C) were modified to bear the complexes of 1,4,7,10-tetraazacyclododecane-1,4,7,10-tetraacetic acid with yttrium-90(III). The antitumor efficiency of the immunoradiotherapy was tested *in vivo* on mice with EL4 lymphoma using the chosen synthesized polymer, demonstrating an extraordinary treatment success – the growth of the primary tumors was almost stopped compared to the control groups and ~ 50 % mice were completely cured. Such result was probably caused by a considerable synergistic effect of using immunoradiotherapy compared to separate use of immunotherapy or radiotherapy.

*Financial support from the Czech Science Foundation (grant # 19-01602S) is gratefully acknowledged.*

[1] Wasser, S. P., Weis, A. L. *Critical Reviews™ in Immunology* 19, 2162 – 6472 (1999).



**6Po11****BIOLOGICAL ACTIVITY OF POLY(2-ISOPROPENYL-2-OXAZOLINE)**Monika Majerčíková<sup>1</sup>, Vladimír Raus<sup>2</sup>, Juraj Kronek<sup>1</sup>, Zuzana Kroneková<sup>1</sup><sup>1</sup> Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 841 04 Bratislava, Slovakia  
[upolmoma@savba.sk](mailto:upolmoma@savba.sk)<sup>2</sup> Institute of Macromolecular Chemistry, Czech Academy of Sciences, Heyrovského nám.2, 162 06 Praha 6, Czech Republic

Poly(2-oxazolines) are a class of biocompatible polymers with a potential use in biomedicine [1]. 2-Isopropenyl-2-oxazoline (IPOx) is a unique member of the 2-oxazoline family as it contains two orthogonal polymerization groups. When the double bond of IPOx is polymerized *via* radical or anionic polymerization, the pendant oxazoline rings can be conveniently modified with carboxylic acids or thiols, e.g., to conjugate biologically active substances [2]. In addition, such polymers are water-soluble and *in vitro* studies showed their non-toxicity [3].

Our previous studies indicated that the molecular weight of poly(2-Isopropenyl-2-oxazoline) (PIPOx) might influence its biological activity. In the present work, we decided to investigate this aspect in detail. We employed the Cu-RDRP method to prepare well-defined PIPOx with molecular weights of about 10 000, 16 000, and 22 000. We then evaluated the cytotoxicity of these polymers by studying the viability of macrophages and of 3T3 mouse fibroblasts. In addition, the co-localization of the polymers in cells was followed using the organelle trackers. We found that the cytotoxicity of PIPOx is decreasing with their increasing molecular molar mass. In the co-localization study, we observed the penetration of the polymers into macrophages in the form of vesicles that partially co-localized with the endosomes.

*Authors are thankful to the Slovak Grant Agency VEGA for financial support in the project Nr. 2/0124/18.*

[1] Lorson T., Lubtow M.M.: *Biomaterials* 178, 204 (2018).

[2] Jerca F.A., Jerca V.V.: *Polym. Chem.* 9, 3473 (2018)

[3] Kroneková Z., Mikulec M.: *Macromol. Biosci.* 1200 (2016).

**6Po12****POLYMER PROTECTIVE COATINGS FOR DEPLETED URANIUM COMPONENTS**Jiří Pánek<sup>1</sup>, Zdeňka Sedláková<sup>1</sup>, Peter Černocho<sup>1</sup>, Miroslava Dušková<sup>1</sup>, Martin Hrubý<sup>1</sup>, Tomáš Chmela<sup>2</sup>, Pavel Krupička<sup>2</sup><sup>1</sup>Institute of Macromolecular Chemistry AS CR, Heyrovsky Sq. 1888/2, 162 06 Prague 6, Czech Republic,  
[panek@imc.cas.cz](mailto:panek@imc.cas.cz)<sup>2</sup>UJP PRAHA a.s., Nad Kamínkou 1345, 156 10 Prague 5, Czech Republic.

The depleted uranium is an indispensable material in numerous areas, however its range of applications is limited by high reactivity and susceptibility to corrosion. The current state of art for the storage of depleted uranium intended for further reprocessing stands on expensive procedures, as alloying with up to 20% of molybdenum or encapsulation in aluminum or steel containers. Our work aims simplification of the technology for production, processing and protection of depleted uranium based materials and reduction of their manufacturing costs. Within our project we develop new coatings for depleted uranium based on polymer matrices filled with nanofillers.

The matrices are made of polyurethanes, poly(2-alkyl-2-oxazolines), polyesters or polymer resins. Tailor-made polyurethanes (PU) were reinforced with inorganic fillers (e.g. modified graphene or hydrophobized silica) and further stabilized with hindered-amine BHT or Tinuvin-type stabilizers for scavenging of radiation-induced radicals. It was proven that the protective layers are stable up to doses 100 kGy of gama irradiation.



**Fig. 1.** Samples of depleted uranium coated with polymer protective layer before and after corrosion test (100h, 117 °C).

*Financial support was provided by the Ministry of Industry and Trade of the Czech Republic (grant # FV10164).*

### 6Po13

#### VLIV FORMULAČNÍCH A PROCESNÍCH PARAMETRŮ NA VLASTNOSTI $\text{Cu}^{2+}$ /ALGINÁTOVÝCH ČÁSTIC PŘIPRAVENÝCH VNĚJŠÍ IONTOVOU GELACÍ HODNOCENÝ ANALÝZOU HLAVNÍCH KOMPONENT

Miroslava Pavelková<sup>1</sup>, Jakub Vysloužil<sup>1</sup>, Kateřina Kubová<sup>1</sup>, Sylvie Pavloková<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, Palackého tř. 1946/1, 612 42 Brno, pavelkovam@vfu.cz*

V současné době je metoda vnější iontové gelace v přípravě alginátových částic s úspěchem používána nejen na poli farmacie a medicíny, ale zejména v oblasti biotechnologie [1].

Proto byla příprava alginátových částic a jejich následné hodnocení pomocí analýzy hlavních komponent stěžejním cílem našeho experimentu. Kvůli optimalizaci této metody jsme se zaměřili na hodnocení vlivu různých formulačních (koncentrace polymeru, koncentrace tvrdícího roztoku) a procesních parametrů (velikost vnějšího průměru injekční jehly) na vlastnosti vzniklých částic (výtěžek, sféricita, ekvivalentní průměr a bobtnavost při pH 6).

Naše výsledky potvrdily vnější iontovou gelaci jako bezpečnou, spolehlivou a robustní metodu pro přípravu částicové  $\text{Cu}^{2+}$ /alginátové lékové formy. Ta i přes poměrně širokou variabilitu vstupních parametrů vedla k vytvoření hydrogelových částic s dobře definovanými charakteristikami. Morfologické parametry (velikost a tvar) všech šarží byly hodnoceny jako vyhovující. Schopnost bobtnat v prostředí pH 6 byla dle očekávání enormní, nicméně bez výrazného vlivu většiny testovaných parametrů. Na základě výsledků vícerozměrné analýzy dat lze konstatovat, že koncentrace natrium-alginátu byla jediným faktorem, který zásadně ovlivnil výsledné vlastnosti všech připravených šarží. Připravená mukoadhezivní částicová léková forma je potenciálně využitelná i bez nutnosti enkapsulace léčiva k podání na sliznice (zejména vaginální) díky obsahu antimikrobiálně působící mědi [2], případně k zapracování dalších účinných látek.

[1] Lee K. Y., Mooney D. J.: *Prog. Polym. Sci.* 37, 106-126 (2012).

[2] O'Gorman J., Humphreys H.: *J. Hosp. Infect.* 81, 217-223 (2012).

**6Po14****PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE POLYMERNÍCH, ENZYMOVĚ ŠTĚPITELNÝCH NOSIČŮ KANCEROSTATIK**

Michal Pechar, Jan Zelený, Robert Pola, Jozef Parnica, Olga Janoušková, Tomáš Etrych

*Ústav makromolekulární chemie, AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, Praha 6, pechar@imc.cas.cz*

Současně s rozvojem protinádorových léčiv vyvstává stále častěji otázka, jak tato léčiva, která mnohdy sama o sobě vykazují vysokou toxicitu, s jistotou a efektivně dopravovat přímo do postižených tkání a předejít tak jejich destruktivním účinkům na zbytek organismu. Jednou z možností, jak dopravovat léčivo do nádorové tkáně, je využití některé ze specifických vlastností této tkáně, z nichž jednou je tzv. EPR-efekt. Tento jev, který bude v této práci dále diskutován, umožňuje makromolekulám, které jsou příliš objemné na to, aby pronikly z krevního řečiště do nepostižené tkáně, proniknout do tkáně nádorové a hromadit se v ní. Je-li tedy protinádorové léčivo připojeno k vhodné makromolekule, může díky tomuto efektu společně s ní vstoupit do nádorové tkáně. Je-li navíc toto léčivo připojeno k makromolekule prostřednictvím enzymově štěpitelné spojky, lze využít přítomnosti lysozomálních proteas (např. katepsinu B, který je v některých rakovinných buňkách zastoupen ve vyšší míře než v buňkách zdravých) k jeho odštěpení a zpětné aktivaci.

Byly připraveny a charakterizovány polymerní konjugáty protinádorových léčiv doxorubicinu a pirarubicinu se třemi různými peptidovými spojkami (Gly-Phe-Leu-Gly, Val-Cit a  $\beta$ -Ala) mezi léčivem a polymerním nosičem na bázi kopolymerů N-(2-hydroxypropylmethakrylamidu). U těchto polymerních konjugátů byla změřena rychlost uvolňování protinádorových léčiv, stanovena jejich cytotoxicita a porovnána jejich intracelulární distribuce v nádorových buňkách *in vitro*. Měření protinádorové aktivity *in vivo* na zvířecích modelech v současné době probíhá na spolupracujícím zahraničním pracovišti.

*Práce vznikla za podpory Grantové Agentury České Republiky, grant č. 19-08176S.*

[1] Ulbrich K et al.: *Chem. Rev.* 116, 5338 (2016).

**6Po15****ANTIBAKTERIÁLNÍ VLASTNOSTI STŘÍBREM DEPONOVANÉHO POVRCHU CELULÓZY**Václav Švorčík<sup>1</sup>, Kateřina Kolářová<sup>1</sup>, Zdeňka Kolská<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická, 166 28 Praha 6, Česká republika  
vaclav.svorcik@vscht.cz*

<sup>2</sup>*Ústecké materiálové centrum, Univerzita J. E. Purkyně, 40096, Ústí nad Labem, Česká republika*

Příspěvek je zaměřen na studium a charakterizaci povrchových vlastností regenerované celulózy po plazmové modifikaci, která významně ovlivňuje její fyzikální a chemické vlastnosti (zejména smáčivost, povrchová chemie a povrchová morfologie). V závislosti na zvolených parametrech (doba plazmatické expozice substrátu, jeho stárnutí a doba naprašování stříbra) byl modifikovaný materiál studován různými analytickými metodami. Ablace substrátu byla studována gravimetricky. Změny drsnosti povrchu byly detekovány mikroskopií atomárních sil (AFM), chemické změny byly studovány pomocí rentgenové spektroskopie (XPS). Na aktivovaném substrátu byly nanoseny stříbrné nanovrstvy a poté byly studovány antibakteriální vlastnosti těchto vrstev. Byla stanovena doba „stárnutí“ povrchu modifikovaného při různých expozičních časech. Gravimetrická analýza ukázala téměř lineární ztrátu hmotnosti (ablace) v závislosti nadobě expozice v plazmatu, drsnost povrchu mírně klesá s působením plazmatu. XPS analýza ukázala, že obsah kyslíku vzrostl v důsledku vyšší reaktivity povrchu modifikované celulózy. Antibakteriální testy ukázaly, že stříbrná vrstva deponovaná na plazmatem aktivovanou regenerovanou celulózu významně snižuje kolonie *E. coli* a *S. epidermidis*, to znamená, že byl prokázán silný antibakteriální vliv takto modifikované celulózy.

*Autoři děkují za finanční podporu GAČR z projektu č. 17-00885S.*

**6Po16****SAMOUSPOŘÁDANÉ POLYMERNÍ SYSTÉMY NESOUCÍ FLUOROVANÉ DERIVÁTY FERROCENU**Pavel Švec<sup>1,2</sup>, Kristýna Kolouchová<sup>1,2</sup>, Ondřej Groborz<sup>1</sup>, Ondřej Sedláček<sup>3</sup>, Martin Hrubý<sup>1</sup><sup>1</sup>Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 1888/2, 162 06, Praha 6,  
e-mail: [prion2@seznam.cz](mailto:prion2@seznam.cz)<sup>2</sup>Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Hlavova 8, 128 00,  
Praha 2<sup>3</sup>Supramolecular Chemistry Group, Department of Organic and Macromolecular Chemistry,  
Ghent University, Krijgslaan 281-S4, 9000 Ghent, Belgie

V současné době probíhá intenzivní vývoj fluorovaných kontrastních látek pro fluorovou magnetickou rezonanci (<sup>19</sup>F MRI). Dnes lze protonovou i <sup>19</sup>F MRI používat simultánně v kombinaci, což umožňuje sledování distribuce kontrastní látky s velkou anatomickou přesností [1]. Námi navržené fluorované amfifilní kopolymery, které ve vodném prostředí vytvářejí nanočástice s hydrofilním povrchem a hydrofobním jádrem, mohou sloužit jako kontrastní látky pro neinvazivní teranostiku (kombinace diagnostiky pomocí <sup>19</sup>F MRI a terapie). Hydrofobní část polymeru obsahuje monomerní jednotky modifikované fluorovanými deriváty ferrocenu. Do hydrofobního jádra nanočástic, které se ve zvýšené míře kumulují v nádorech a zánětlivých ložiscích díky tzv. EPR efektu (Enhanced Permeability and Retention effect), je možné vázat lipofilní léčivo [2]. Fluorované deriváty ferrocenu, citlivé na reaktivní formy kyslíku (ROS) a biooxidaci (tvorba ferroceniového kationtu) [3], zároveň slouží jako skupina umožňující cílený rozpad částic v oxidativním prostředí narušením amfifilní povahy kopolymery. Oxidace ferrocenu na ferroceniový kationt vede ke změně MRI signálu jader <sup>19</sup>F chemicky vázaných na ferrocenovou jednotku. Nahradění částic a následné uvolnění léčiva v cílové tkáni pak bude neinvazivně sledovatelné pomocí <sup>19</sup>F MRI (funkční diagnostika). Z výše uvedených důvodů tedy mohou navrhované polymery sloužit současně jako diagnostický kontrast i dopravní systém pro léčiva s cíleným uvolňováním.

Autoři děkují za finanční podporu Grantové agentury University Karlovy (grant č. 766119 a 60211) a Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (grant INTER-COST č. LTC19032).

[1] Wolters, M.; Mohades, S. G.; Hackeng, T. M.; Post, M. J.; Kooi, M. E.; Backes, W. H. *Invest. Radiol.* **2013**, 48, 341.

[2] Liu, J.; Lee, H.; Allen, C. *Curr. Pharm. Des.* **2006**, 12, 4685.

[3] Maschke, M.; Alborzina, H.; Lieb, M.; Wölfl, S.; Metzler-Nolte, N. *ChemMedChem* **2014**, 9, 1188.

**6Po17****ADHÉZIA BRONZU A ZMESI PŘÍRODNÉHO KAUČUKU METÓDOU MOLEKULÁRNEJ ADHÉZIE**Oravec Ján<sup>1</sup>, Meluš Pavol<sup>1</sup>, Preťo Jozef<sup>1</sup>, Hidetoshi Hirahara<sup>2</sup>, Jing Sang<sup>2</sup><sup>1</sup>VIPO a. s., ul.gen.Svobodu 1069/4, 95801 Partizanske, Slovakia<sup>2</sup>Department of Frontier Materials and Function Engineering, Graduate School of Engineering, Iwate University, 4-3-5 Ueda, Morioka 020-8551, Japan, [joravec@gmail.com](mailto:joravec@gmail.com)

Experiment je zameraný na aplikáciu metódy molekulovej adhézie pri spájaní polymérnych substrátov s kovovými povrchmi pri pogumovaní ocelových drôtov s nanosom bronzu. Pri molekulovej adhézii vzniká chemická väzba medzi funkčnými skupinami väzobného činidla a povrchmi spájaných substrátov, pričom vo vzniknutom spoji nefigúrujú kohézne sily medzi molekulami lepidla. Afinita testovaných väzobných činidiel ku kovovým povrchom a zmeny na povrchu boli hodnotené pomocou FT-IR, XPS a AFM. Fyzikálne vlastnosti vytvorených filmov na povrchu uhlíkovej ocele, bronzu boli sledované pomocou nanotermickej analýzy (AFM-nanoTA). Laboratórne sme testovali okrem komerčných väzbových činidiel na báze alkoxyasilánov aj pripravené väzbové činidlá s odlišnou štruktúrou molekuly. Tieto obsahovali triazínove jadro, ktoré umožňuje stéricku lokalizáciu funkčných skupín jednak podobných ako v prípade komerčných činidiel a taktiež odlišné skupiny (sodná soľ merkaptó zlučenín -SNa), ktoré umožňujú väzbu s polárnymi skupinami v polymérnom reťazci. Pri návrhu štruktúry sa vychádzalo sa z predošlých skúseností použitia uvedených činidiel pre adhezívne aplikácie na rozhraní polymér - kov, uvedené v literatúre [1,2]. Najúčinnnejšie sa javili činidlá obsahujúce vo svojej molekule trietoxysililové štruktúry a súčasne merkaptó- alebo amino- funkčnú skupinu a tiež činidlá obsahujúce sulfidickú väzbu, napríklad bis(trietoxysilylpropyl)tetrasulfid [Si 69], avšak jeho vyššia koncentrácia pôsobila negatívne na postspracovateľský efekt. Z väzobných činidiel triazínovej štruktúry najlepšie výsledky vykazovala sodná soľ 1,3,5-triazín-2,4,6-tritiolu [TTNa].

Tento príspevok je výstupom projektu APVV-15-0113 „Spájanie polymérnych substrátov s kovovými povrchmi metódou molekulárnej adhézie“ podporeného Agentúrou na podporu výskumu a vývoja.

- [1] Hirahara H., Aisawa S., Mori K., Narita E., Oishi Y.: Surface and interface analysis. 953, 35 (2003).  
[2] Mori K., Shi X., Hirahara H., Oishi Y.: Rubber chemistry and technology. 1019, 76 (2003).

**6Po18****VPLYV ÚPRAVY POVRCHU DRÔTU SILANMI NA POČIATOČNÚ ADHÉZIU GUMOVEJ ZMESI VO VÝROBE PÄTKOVÝCH LÁN**

Pavol Meluš<sup>1</sup>, Ján Oravec<sup>1</sup>, Ján Hronkovič<sup>1</sup>, Jozef Preťo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>VIPO a.s., Gen. Svobodu 1069/4, 958 01 Partizánske, pmelus@vipo.sk

Vo výrobe pätkových lán automobilových plášťov sa oceľový drôt povrchovo upravený mosadzou alebo bronzom pokrýva tenkou vrstvou gumovej zmesi pomocou pogumovacieho extrúdera s priečnou vytlačovacou hlavou. Extrúzne pogumovanie drôtu vo výrobe pätkových lán je špecifický proces, kde kvalita pogumovania závisí na adhézii gumovej zmesi k povrchu drôtu. Po vulkanizácii musí nános gumovej zmesi zaistiť i dostatočnú súdržnosť jednotlivých návinov drôtu, keďže pätkové lano je rozhodujúcim komponentom spájajúcim plášť s ráfom kola. S cieľom zvýšiť kvalitu pätkových lán sa vykonali experimenty orientované na zvýšenie adhézie gumovej zmesi k povrchu drôtu v nekvulkanizovanom stave (počiatočná / zelená adhézia) a po vulkanizácii (finálna adhézia) úpravou povrchu drôtu chemickými činidlami na báze silanov. Na úpravu povrchu drôtu sa použilo deväť druhov činidiel vo forme etanolických roztokov obsahujúcich 1, 3 a 10 hmotnostných % činidla. Experimenty sa vykonávali na drôte s priemerom 1,6 mm s bronzovou povrchovou úpravou. Na povrchovo upravených vzorkách sa stanovila počiatočná a finálna adhézia. Pre porovnanie účinnosti povrchovej úpravy sa stanovila počiatočná a finálna adhézia i na neupravenom drôte. Výsledky experimentov ukázali, že pri úprave drôtu 3% etanolickým roztokom bis(triethoxysilylpropyl)tetrasulfidu (Si-69) sa v porovnaní s neupraveným drôtom výrazne zvyšuje hodnota počiatočnej i finálnej adhézie.

*Tento príspevok je výstupom projektu APVV-15-0113 „Spájanie polymérnych substrátov s kovovými povrchmi metódou molekulárnej adhézie“ podporeného Agentúrou na podporu výskumu a vývoja.*

## POSTERY - SEKCIA 7: JADROVÁ CHÉMIA

### 7Po01

#### VÝVOJ FLUORIDOVÝCH TERČOVÝCH MATRIC PRO STANOVENÍ <sup>26</sup>Al METODOU AMS

Kateřina Fenclová<sup>1</sup>, Josef Tecl<sup>2</sup>, Tomáš Prášek, Maryana Bilous, Mojmír Němec

<sup>1</sup>Katedra jaderné chemie, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT, Břehová 7, 115 19 Praha 1,

<sup>2</sup>Ústav jaderné fyziky, Akademie věd České republiky, Husinec - Řež, čp. 130, 250 68 Řež

[katerina.fenclova@jfifi.cvut.cz](mailto:katerina.fenclova@jfifi.cvut.cz)

Kosmogenní radioizotop hliníku <sup>26</sup>Al s dlouhým poločasem rozpadu ( $7 \cdot 10^5$  let) lze využít k řadě analytických aplikací, např. ke zjištění stáří meteoritů nebo doby expozice hornin kosmickému záření. Vzhledem ke stopovým koncentracím tohoto nuklidu ve vzorcích je optimální metodou stanovení urychlovačová hmotnostní spektrometrie (AMS) [1]. Cílem výzkumu bylo nalézt a připravit ve vodě nerozpustné sloučeniny hliníku ve formě fluoridů poskytující vysokou odezvu iontových proudů při odprašování v cesiovém iontovém zdroji AMS. Za tímto účelem byla připravena sada terčových vzorků na bázi Na<sub>3</sub>AlF<sub>6</sub>, k jejichž analýze bylo vzhledem k obdobné technice ionizace využito detekční trasy systému lineárního tandemového urychlovače Tandetron 4130 MC. Postupně byly proměřeny hodnoty iontových proudů jak pro samostatné vzorky, tak i pro jejich směsi s práškovým Ag, PbF<sub>2</sub>, CaF<sub>2</sub>, W a Cu. Posouzení vhodnosti matrice a vzájemné porovnání vzorků bylo provedeno na základě získaných hmotnostních spekter, přičemž hlavním kritériem byl zvolen proud iontu AlF<sub>4</sub><sup>-</sup>. V současné době probíhají experimenty, které při optimálních parametrech produkce AlF<sub>4</sub><sup>-</sup> zjišťují míru tvorby molekulárních iontů isobarického <sup>26</sup>Mg, který je hlavním interferentem tohoto typu měření.

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

[1] W. Kutschera, AMS – from DNA to astrophysics, EJP Web of Conferences 63, 03001 (2013).

### 7Po02

#### STANOVENÍ PŘÍRODNÍCH RADIONUKLIDŮ

Alena Kelnarová<sup>1</sup>, Šárka Maříková<sup>1</sup>, Michal Fejgl<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Státní ústav radiační ochrany, Bartoškova 28, 140 00 Praha 4, [alena.kelnarova@suro.cz](mailto:alena.kelnarova@suro.cz)

Laboratoř radiochemie v SÚRO Praha věnuje velkou pozornost stanovení izotopů uranu, thoria a radia ve vzorcích životního prostředí i z pracovišť s možností zvýšeného ozáření z přírodních zdrojů (NORM) a odpadů z nich. Byly vypracovány metodiky pro stanovení jednotlivých izotopů i pro sekvenční stanovení, použitelné pro monitorování radiační situace v ČR a pracovišť NORM i pro sledování vnitřní kontaminace osob. Metodiky vycházejí z publikací IAEA i z vlastních zkušeností a možností laboratoře. Pro stanovení izotopů <sup>238</sup>U, <sup>235</sup>U, <sup>234</sup>U a <sup>232</sup>Th, <sup>230</sup>Th a <sup>228</sup>Th se využívá spektrometrie alfa, pro stanovení <sup>226</sup>Ra emanometrie a <sup>228</sup>Ra spektrometrie gama po chemické separaci. Pro účinnost separace jsou využívány monitory výtěžku <sup>232</sup>U, <sup>229</sup>Th, <sup>133</sup>Ba. Správnost postupů je pravidelně ověřována účastí v mezilaboratorních porovnáních. V práci jsou uvedeny postupy stanovení a jejich porovnání a výsledky.

*Financováno z institucionální podpory MV-32469-1/OBVV-2019*

### 7Po03

#### SROVNÁVACÍ STUDIE SORPCE RADIA A STRONCIA NA CEMENTOVÉ MATERIÁLY

Jana Kittnerová<sup>1</sup>, Barbora Drtinová<sup>1</sup>, Dušan Vopálka<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Katedra jaderné chemie, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha 1, Česká republika, [Jana.Kittnerova@jfifi.cvut.cz](mailto:Jana.Kittnerova@jfifi.cvut.cz)

Radium je důležitý radionuklid pro hodnocení dlouhodobé bezpečnosti hlubinného úložiště vyhořelého jaderného paliva. Je nutné zkoumat jeho pohyblivost, která je ovlivněna sorpcí na materiálech inženýrských bariér. V této studii byla sledována sorpce a difúze radia a stroncia, označovaného jako analog radia, v přítomnosti cementových materiálů. Chování obou radionuklidů je popsáno distribučním poměrem mezi kapalnou a pevnou fází,  $R_d$ .

Bylo použito několik komerčních cementových materiálů nadrcených na prášek a také jedna syntetická cementová fáze (CSH). Materiály byly analyzovány pomocí XRD a použity pro studium rovnovážné sorpce zejména <sup>223</sup>Ra a <sup>85</sup>Sr. Sorpční experimenty s <sup>223</sup>Ra byly prováděny v beznosičovém uspořádání s koncentrací Ra cca  $10^{-12}$  mol/L, zatímco experimenty se Sr byly provedeny s nosičem s počáteční koncentrací Sr

$c_0 = 3,5 \cdot 10^{-4}$  mol/L nebo také beznosičově. Podmínky, za kterých byly experimenty prováděny, zahrnovaly proměnlivou teplotu (22, 50, 65 a 80 ° C) a různý poměr kapalné a pevné fáze ( $V/m$  10 až 1000 L/kg). Kapalnou fází byl nasycený  $\text{Ca}(\text{OH})_2$ .

Bylo stanoveno, že hodnoty  $R_d$  pro sorpci  $R_a$  se pohybují v rozmezí 35-435 L/kg, zatímco pro Sr 10-130 L/kg na skutečných cementových materiálech. Byl potvrzen rozdíl mezi cementy a čistou fází CSH, kde  $R_d$  vykazují řádově vyšší hodnoty. Difúzní experimenty potvrdily chování pozorované během sorpce.

*Tato práce vznikla za podpory projektu Evropské unie pro výzkum a odbornou přípravu v rámci programu Horizont 2020 Evropského společenství pro atomovou energii (EURATOM) (H2020-NFRP-2014/2015) v rámci grantové dohody č. 662147 (CEBAMA).*

#### 7Po04

### ZAKONCENTROVANIE TECHNECISTANU NA UHLIKOVÝCH SORBENTOCH PRE MERANIE METÓDOU URÝCHLOVAČOVEJ HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRIE

Martin Daňo<sup>1</sup>, Jan Kujan<sup>1</sup>, Karel Štamberg<sup>1</sup>, Eva Viglašová<sup>1,2</sup>, Michal Galambos<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Katedra jaderné chemie, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické, Břehová 7, 115 19 Praha 1

<sup>2</sup>Katedra anorganické chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava 4

<sup>3</sup>Katedra jadrovej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava 4

Technécium v jeho aniónovej chemickej forme  $^{99}\text{TcO}_4^-$  predstavuje vysoko mobilný mileniálny rádionuklid, vznikajúci v jadrových reaktoroch s vysokým štípnym výťažkom. Rádioizotop  $^{99}\text{Tc}$  je jedným z najdôležitejších sledovaných rádionuklidov pri hodnotení bezpečnej úrovne antropogénnej rádioaktivity životného prostredia a jeho, pri vyradovaní jadrových zariadení a nakladaní s jadrovým odpadom, ako aj skladu, či konečného úložiska pre jadrový odpad. Na zakoncentrovanie Tc vo vzorkách a odstránenie interferentov pre jeho stanovenie je nutné vykonať rozsiahlu chemickú separáciu, počas ktorej dochádza k zníženiu výťažku Tc [1, 2]. Zakoncentrovanie Tc je taktiež dôležitým krokom pre prípravu matrice pre meranie prostredníctvom urýchľovačovej hmotnostnej spektrometrie. Jednou z možností ako znížiť počet separačných krokov a zlepšiť tak separačné a detekčné limity je zakoncentrovať Tc na uhlíkových sorbentoch. Tento príspevok sa zaoberá štúdiom dynamickej sorpcie  $^{99}\text{TcO}_4^-$  na aktivovanom uhlíku a biouhlí metódou prienikových kriviek. Dynamické parametre boli vypočítané programom FAMULUS (K. Štamberg, ČVUT v Praze) [3]. Sorpcia  $\text{TcO}_4^-$  (nosič  $10^{-2}$  M  $\text{ReO}_4^-$ ) sa uskutočnila z kyslého prostredia (pH 2) na vzorke aktivovaného uhlíka AC-SCi. Podľa získaných hodnôt (Pecletovo kritérium charakteru toku  $P_e = 25,90 \pm 0,03$ , kritérium fitu  $\text{WSOS/DF} = 4.83$  (má byť  $<20$ )) vyplýva, že sorpcia  $\text{TcO}_4^-$  prebieha nelineárne s retenčným koeficientom 8.

*Tento príspevok bol financovaný Operačným programom VVV č. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000728 – Výzkum ultrastopových izotopů a jejich využití v sociálních a environmentálních vědách urychlovačovou hmotnostní spektrometrií.*

[1] Shi K.: *Anal. Chim. Acta. Chem.* 709 (2012).

[2] Schönberg P.: *Anal. Chem.* 98, 17 (2017).

[3] Filipská H., Štamberg K. *Acta Polytech.* 45, 5 (2005)

#### 7Po05

### VLIIV NANOKOMPOZITNÍCH MATERIÁLŮ VYVÍJENÝCH PRO PDTX NA ŽIVÉ BUŇKY V PŘÍTOMNOSTI RENTGENOVÉHO ZÁŘENÍ

Barbora Neužilová<sup>1</sup>, Kseniya Popovich<sup>1</sup>, Jindřich Fleišmann<sup>1</sup>, Viliam Múčka<sup>1</sup>, Václav Čuba<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Katedra jaderné chemie, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha 1, Česká republika  
b.neuzilova@gmail.com

Rentgenem buzená fotodynamická terapie (PDTX) je moderní metoda pro léčbu nádorových onemocnění. Jejím výzkumu je v posledních letech věnována intenzivní pozornost. Využívá se při ní kombinace rentgenového záření s vysokou pronikavostí do tkáně a klasické metody PDT.

Princip metody spočívá v aplikaci nanokompozitního materiálu (scintilující nanočástice a konjugovaná molekula fotosenzibilizátoru) do nádorového ložiska. Po excitaci nanočástice rentgenovým zářením dojde k přenosu energie na fotosenzibilizátor a ten při své deexcitaci vytvoří cytotoxický singletní kyslík. [1]

Tyto nanokompozitní materiály jsou testovány na mikrobiální kultuře. Je vyvíjena metodika umožňující reprodukovatelné stanovení vlivu luminiscenčních nanokompozitů na přežití buněk. Buňky jsou v přítomnosti

nanokompozitu ozařovány rentgenovým zářením (dávka 90 Gy, dávková rychlost 45 Gy/h). Metodou vyočkování a vyhodnocování počtu vyrostlých kolonií na miskách je sledována toxicita nanokompozitu jak samotného, tak v kombinaci se zářením.

*Tato práce vznikla za podpory projektu Centra pokročilých aplikovaných přírodních věd (CZ.02.1.01/0.0/0.0/16-019/0000778), Grantové agentury České republiky (projekt 17-06479S), ČVUT (projekt SGS17/195/OHK4/3T/14).*

[1] Popovich K., Tomanová K., Čuba V., Procházková L., Pelikánová I. T., Jakubec I., Mihóková E., Nikl M.: *J. Photochem. Photobiol. B* 179, 149 (2018).

## 7Po06

### PRODUKCE SINGLETOVÉHO KYSLÍKU PRO FOTODYNAMICKOU TERAPII INDUKOVANOU RENTGENOVÝM ZÁŘENÍM

Iveta Terezie Pelikánová<sup>1</sup>, Kseniya Popovich<sup>1</sup>, Lenka Procházková<sup>1</sup>, Jindřich Fleišmann<sup>1</sup>, Eva Mihóková<sup>2</sup>, Václav Čuba<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Katedra jaderné chemie, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha 1, Česká republika

<sup>2</sup>Fyzikální ústav AV ČR, Cukrovarnická 10, 162 00 Praha 6, Česká republika  
iveta.terezie.pelikanova@fffi.cvut.cz

Fotodynamická terapie indukovaná rentgenovým zářením (PDTX) je metoda vyvíjená pro léčbu rakoviny, která kombinuje klasickou fotodynamickou terapii indukovanou viditelným zářením a použití rentgenového záření s větší pronikavostí. Tato kombinace umožňuje léčbu nádorů nacházejících se hlouběji pod pokožkou a uvažuje se o ní jako o doplňkové léčbě ke klasické radioterapii. Principem je přenos energie ze scintilující nanočástice na fotocitlivou látku schopnou generovat singletový kyslík, který následně působí destruktivně na rakovinné buňky. Pro tento účel jsou studovány různé nanoscintilátory, např. LuAG dopovaný Ce<sup>3+</sup> nebo Pr<sup>3+</sup> **Error! Reference source not found.**, ZnO dopovaný Ga<sup>3+</sup> 0 nebo dopované fluoridy La či Ce, CeF<sub>3</sub>:Tb<sup>3+</sup> 0. Pro produkci singletového kyslíku je využíváno různých druhů fotocitlivých látek dle co největšího překryvu emise scintilujícího jádra a absorpce fotocitlivé látky, spolu s dalšími parametry. Nejčastěji používanými jsou modifikace porfyriu, merocyanin 540 či bengálská červeň. Tyto látky mohou být chemicky navázány na jádro nebo mohou být navázány či inkorporovány do obalové vrstvy jádra. Další důležitou komponentou kompozitu pro PDTX je obalová vrstva z polyethylenglykolu (PEG), která napomáhá biokompatibilitě materiálu, případně další látky umožňující cílení kompozitu do nádorových ložisek.

Tato práce je zaměřena na studium produkce singletového kyslíku indukovaného rentgenovým zářením, kdy je využito přenosu energie ze scintilující nanočástice na fotosenzitizér schopný generovat singletový kyslík, který je následně detekován chemickými fluorescenčními sondami.

*Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (projekt 17-06479S), ČVUT (projekt SGS17/195/OHK4/3T/14) a projektu Centra pokročilých aplikovaných přírodních věd (CZ.02.1.01/0.0/0.0/16-019/0000778).*

[1] Popovich K., Tomanová K., Čuba V., Procházková L., Pelikánová I. T., Jakubec I., Mihóková E., Nikl M.: *J. Photochem. Photobiol. B* 179, 149 (2018).

[2] Procházková L., Pelikánová I. T., Mihóková E., Dědic R., Čuba V.: *Radiation Measurements* 121, 13 (2019).

[3] Popovich K., Procházková L., Pelikánová I. T., Vlk M., Palkovský M., Jarý V., Nikl M., Múčka V., Mihóková E., Čuba V.: *Radiation Measurements* 90, 325 (2016).



## POSTERY - SEKCIA 8: VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE

### 8Po01

#### MOBILNÍ APLIKACE PRO STUDENTY VŠCHT

Daniel Bartoň<sup>1</sup>, Tomáš Mládek<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 6, 16628, Praha 6, cis-support@vscht.cz

Přechod ze střední na vysokou školu může být pro některé studenty stresující jak z důvodu změny prostředí, způsobu výuky, tak i její náročností. Pro zlepšení orientace studenta Vysoká škola chemicko-technologická v Praze vyvíjí mobilní a webovou aplikaci EMIL. Aplikace provází studenta akademickým rokem a ve správných okamžicích jej informuje o důležitých událostech, jako například změně výuky, termínu či výsledku zkoušky. Aplikace je navázaná jak na výukové informační systémy VŠCHT Praha (e-learning, výukové aplikace, studijní informační systém), tak i na systémy podpůrné (mapové podklady a telefonní seznam). Aplikace hodnotí studentův výkon a upozorňuje ho v případě ohrožení zdárného průběhu studia.

### 8Po02

#### MLADÍ BADATELÉ NA ZŠ

Petra Blokešová<sup>1</sup>, Kateřina Trčková<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, P18165@student.osu.cz

<sup>2</sup>Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, katerina.trckova@osu.cz

Příspěvek zahrnuje ukázkou zadání a způsob řešení motivačních úloh zaměřených na pH z pracovních listů určených pro žáky 1. stupně ZŠ. V předvýzkumu realizovaného v rámci projektu SGS (Studentská grantová soutěž) se do testování pracovního listu zapojilo 6 žáků z kroužku „Malý chemik“ a 20 žáků 3. a 4. ročníku Montessori školy. Každý žák pracoval samostatně. V příspěvku je srovnávána úspěšnost řešení jednotlivých úloh, manuální zručnost žáků, schopnost řešit problémové situace a přístup ke zpracování pracovních listů. Pracovní list zahrnuje 5 úloh na doplňování textu a tabulky, vybarvování a vylustění šifry. Praktickým zpracováním jednotlivých úloh žáci získávají „klíč“ k řešení úlohy následující. Během testování bylo zjištěno, že žáci nemají zásadní problém s praktickým provedením úlohy, následným zápisem výsledků spojeným s vybarvováním a luštěním šifry, kde byla dokonce 96% úspěšnost. Největší potíž mají žáci s odpověďmi na otevřené otázky a následným zápisem do pracovního listu, větší úspěšnost zde prokázali žáci Montessori školy. Z ověřování vyplynulo, že je potřeba pro tuto skupinu žáků připravit pracovní listy, které jsou z hlediska délky textu méně náročné, používat více zkrácený nebo nonverbální zápis zadání, větší písmo a povolit práci s informačními zdroji s možností dohledání správných odpovědí na otevřené otázky.

*Tento text vznikl za podpory Projektu SGS01/PřF/2019-2020, Inovativní metody ve výuce chemie.*

### 8Po03

#### BUDOVANIE STÁLEJ EXPOZÍCIE VÝVOJA LABORÁTORNYCH PRÍSTROJOV

Monika Jerigová<sup>1,2</sup>, Ján Benko

<sup>1</sup>Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava

<sup>2</sup>Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava

Prístroje v chemickom laboratóriu zaznamenali v priebehu niekoľkých desaťročí nebývalý rozvoj. Je to dané rozvojom elektroniky, citlivých detektorov a výpočtovej techniky. Merania fyzikálno-chemických veličín sa tým stali presnejšie a rýchlejšie. No vo výučbe, hlavne v laboratórnych praktikách, sa často stáva, že študenti nemajú možnosť oboznámiť sa s princípom, na ktorom je meranie založené. Väčšinu súčasných prístrojov predstavuje „skrinka“ s priestorom na vzorku a riadenie merania, zber dát a vyhodnocovanie sa robí pomocou počítača. Cieľom našej expozície je predstaviť staršie laboratórne prístroje a ich postupný vývoj. Na obrázku je prvý sériovo vyrábaný polarograf V-301 z roku 1949, na ktorom vidno celý princíp metódy, záznam merania sa robil na fotografický papier. Ešte v osemdesiatych rokoch minulého storočia bola elektronika mnohých prístrojov založená na elektrónkach, napr. pH metre. Už o 15 – 20 rokov neskôr boli pH metre digitálne s rozmerom „pier“. Podobne je to aj s ďalšími prístrojmi a zariadeniami. Súčasťou expozície je aj výpočtová technika, od logaritmických tabuliek, logaritmických pravítok až po prvé kalkulačky a počítače napr. PMD 85. Budovanie expozície je pomerne náročné, nakoľko v minulosti sa museli odpísané prístroje nemilosrdne zošrotovať.

*Preto autori ďakujú všetkým kolegyniam a kolegom, ktorí prispeli do budovanej expozície a budú vďační za každý nový exponát, ktorým by sa rozšírila naša zbierka.*



**Obr. 1.** Prvý sériovo vyrábaný polarograf V-301 z roku 1949

#### 8Po04

### ELEKTRONICKÉ VÝUKOVÉ APLIKACE PRO PODPORU VÝUKY ZÁKLADNÍCH PŘEDMĚTŮ

Tomáš Mládek<sup>1</sup>, Martin Mastný<sup>1</sup>, Miroslav Šimek<sup>1</sup>, Jan Horníček<sup>1</sup>, Ondřej Ruml<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 6, 16628, Praha 6, cis-support@vscht.cz

Z dôvodu zvýšenia študijní úspešnosti zejména v prvých ročníkoch bakalárskeho štúdia a vzrastajúcej popularity elektronických študijných materiálov a aplikácií, vzniklo na Vysoké škole chemicko-technologickej v Praze niekoľko interaktívnych študijných opor pro podporu štúdia základných predmetů.

Po úspešnej aplikácii „Organická chemie“, ktorá již existuje na VŠCHT Praha niekoľko let, vznikly i aplikace pro anorganickou chemii a analytickou chemii. Aplikace „Anorganická chemie“ se zabývá zejména elektronovými vzorci, vlastnostmi vazeb a geometrií molekul obecně. Nově vzniklý portál Analytické chemie umožňuje studentům interaktivní procházení témat tohoto oboru. Všechny aplikace kladou velký důraz na interaktivitu a možnosti sebetestování.

Aplikace jsou volně k dispozici nejen pro akademickou obec Vysoké školy chemicko-technologické v Praze, ale i pro studenty ostatních vysokých škol, pedagogy a širokou odbornou veřejnost.

#### 8Po05

### INOVÁCIA PRAKTICKÝCH CVIČENÍ JEDNOTLIVÝCH CHEMICKÝCH ODBOROV S ÚČASŤOU POTENCIÁLNYCH ZAMESTNÁVATEĽOV Z PRAXE

Zuzana Vargová<sup>1</sup>, Renáta Oriňáková<sup>1</sup>, Miroslav Almáší<sup>1</sup>, Rastislav Serbin<sup>1</sup>, Rastislav Varháč<sup>1</sup>, Mária Ganajová<sup>1</sup>, Jana Dinajová<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ústav chemických vied UPJŠ, Moyzesova 11, SK-041 54 Košice, Slovensko

<sup>2</sup>DUSLO, a. s. Šaľa, výrobná prevádzka Strážske, Priemyselná 720, SK-07222 Strážske, Slovensko  
zuzana.vargova@upjs.sk

Dnes je škola iba jedným z miest, kde sa žiaci učia. Často sa dnes stretávame s výzvami adresovanými zamestnávateľom, aby podporili zásadu partnerstva a spoluprácu všetkých zúčastnených strán na rozvoji vzdelávacích systémov, systémov prípravy a na rozvoji celoživotného vzdelávania. V tejto súvislosti sa čoraz viac uznáva úloha dialógu medzi školami a zamestnávateľmi. Okrem automobilového priemyslu si takéto prepojenie žiadajú aj iné oblasti hospodárstva ako je chemický, potravinársky či farmaceutický priemysel alebo oblasti služieb ako je zdravotníctvo či školstvo, aby mladí ľudia našli uplatnenie na Slovensku a nemuseli odchádzať za prácou do zahraničia. Nakoľko je v súčasnosti trendom v chemickom hospodárstve preferovať prijímanie pripravených absolventov bez ochoty financovať ich prax, vysoké školy musia na tieto potreby reagovať. Na základe týchto požiadaviek pripravujeme praktické cvičenia s cieľom čiastočnej implementácie požiadaviek zamestnávateľov, pričom takýmto spôsobom inovujeme obsah učiva i koncepcie sprístupnenia tejto výučby študentom na bakalárskom stupni v študijných odboroch Anorganická chémia, Analytická chémia, Fyzikálna chémia a Biochémia.

V príspevku budú prezentované analytické metódy (potenciometrické a komplexometrické titrácie pri stanovovaní obsahu CaO a MgO v reálnej vzorke) používané v spoločnosti Duslo, a.s., ktoré boli študentom predvedené na praktickom cvičení pod vedením odborníkov z praxe.

*Autori srdečne ďakujú za finančnú podporu Slovenskej grantovej agentúry KEGA 008UPJŠ-4/2018.*

## POSTERY - SEKCIA 9: ŽIVOTNÉ PROSTREDIE, POTRAVINÁRSTVO A BIOTECHNOLÓGIE

### 9Po01

#### ADSORPCE LÉČIV Z VODNÉHO PROSTŘEDÍ NA AKTIVNÍ UHLÍ NA BÁZI BIOMASY

Jan Bednárek<sup>1,2</sup>, Ivan Koutník<sup>1</sup>, Barbora Sokolová<sup>1</sup>, Lenka Matějová<sup>1</sup>, Gerardo Juan Francisco Cruz<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Institut environmentálních technologií VŠB-TUO, 17. listopadu 15/2172, 708 00 Ostrava-Poruba,

<sup>2</sup>jan.bednarek@vsb.cz

<sup>3</sup>Universidad Nacional de Tumbes, Laboratorio de Análisis Ambiental, Av. Universitaria s/n, Campos Universitario Pampa-Grande, Tumbes, Peru

V současné době probíhá stále intenzivnější výzkum původu a odstraňování xenobiotik z vodního prostředí. Tato práce se zabývá odstraněním tří druhů léčiv – paracetamolu, diklofenaku a ibuprofenu – z vodného prostředí pomocí adsorpce na aktivní uhlí, které bylo připraveno z odpadní biomasy získané ze zemědělské produkce v Peru. Pro přípravu aktivního uhlí byla použita biomasa na bázi kukuřičných klasů (CC), kávových slupek (CH), ingy jedlé (GS), semen druhu *spondias purpurea* (RMS) a pecek manga (vnitřní části MSIP, vnější části MSEP). Nejlepších výsledků dosahoval sorbent na bázi semen *spondias purpurea*, nejnižší sorpční kapacitu měl oproti tomu sorbent na bázi ingy jedlé. Co se týče srovnání léčiv mezi sebou, nejtěžší probíhala adsorpce paracetamolu, nejvyšší adsorpční účinnosti bylo naopak dosaženo při nižších koncentracích u diklofenaku, zatímco při vyšších koncentracích se nejnáze sorboval ibuprofen.

Tato práce vznikla za podpory projektu Institut environmentálních technologií - excelentní výzkum reg. č.: CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000853 financovaného z EFRR.

„Experimentální výsledky byly získány s využitím velké výzkumné infrastruktury ENREGAT podporované MŠMT, č. projektu LM2018098.“

### 9Po02

#### KONTAMINACE ANTIMONEM V MÍSTECH ZATÍŽENÝCH DOPRAVOU

Barbora Doušová<sup>1</sup>, Miloslav Lhotka<sup>1</sup>, František Bůzek<sup>2</sup>, David Koloušek<sup>1</sup>, Bohuslava Čejková<sup>2</sup>, Iva Jáčková<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha, ČR, [dousovab@vscht.cz](mailto:dousovab@vscht.cz)

<sup>2</sup>Česká geologická služba, Geologická 6, 152 00 Praha 5, ČR

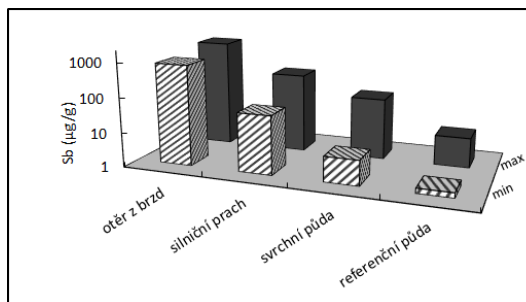
Kontaminace prostředí antimonem (Sb) je dnes spojována s místy extrémně zatíženými dopravou, kde dochází k brzdění motorových vozidel, a tím i k oteru brzdového obložení, které obsahuje až 5 % hmotn. Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub>. Antimon uvolněný během brzdění se zachycuje především v jemných atmosférických částicích (až 32 µg Sb na jedno brzdění jednoho automobilu), menší podíl se deponuje v nepolétavých emisních částicích, tzv. silničním prachu [1]. Z hlediska toxicity antimonu je nebezpečná následná interakce atmosférických částic s organismy (dýcháním), a také s půdou prostřednictvím infiltrujících srážek. V povrchové vrstvě půd poblíž křižovatek přesahuje koncentrace antimonu až 60x pozadové hodnoty (<0.5 – 9 µg.g<sup>-1</sup>) [2].

Byly vybrány tři křižovatky z různých oblastí České republiky (Praha (P), České Budějovice (CB) a Ostrava (O), které byly v průběhu 2015 – 2017 monitorovány na obsah antimonu v silničním prachu a svrchní půdě. Antimon se v pevné fázi váže především na jemné částice (tab. 1) a koncentrace v silničním prachu jsou řádově vyšší než ve svrchní půdě. Pokles obsahu antimonu od zdrojového materiálu (otěru z brzd) až k referenční půdě\* zachycuje obr. 1, který charakterizuje gradient znečištění antimonem v místech exponovaných dopravou. Aktuální stupeň kontaminace závisí na dané lokalitě [3] a sezónních změnách (teplota, množství srážek).

**Tab. 1.** Průměrné obsahy Sb ve vzorcích půd a silničního prachu.

Lokalita	Svrchní půda		Silniční prach	
	<0.1 <sup>*)</sup>	0.1 – 0.315	<0.1	0.1 – 0.315
P	13.6	5.5	45.3	29.9
ČB	53.7	23.1	164.6	89.1
O	5.6	2.5	12.8	6.5

\*) velikost částic v mm



Obr. 1. Gradient znečištění antimonem v místech dopravních uzlů.

Práce vznikla za podpory projektu Grantové agentury ČR č. 19-04682S.

[1] Iijima A. et al.: *Environ. Sci. Technol.* 42, 2937 (2008).

[2] Wang X.S.: *Open Environ. Pollut. Toxic. J.* 1, 89 (2009).

[3] Dousova B. et al.: *Eur. J. Soil Sci.* 66, 74 (2015).

### 9Po03

#### COMPLEX PROCESSING OF PLANTAIN

Alžbeta Chochulová<sup>1</sup>, Vladimír Štefuca<sup>1</sup>, Jana Kubincová<sup>1</sup>, Jozef Višňovský<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Axxence Slovakia s.r.o., Mickiewiczova 9, 811 07 Bratislava, Slovak republic, e-mail: alžbeta.chochulova@axxence.sk

<sup>2</sup>SynthCluster, Komenského 14, 900 01 Modra, Slovak republic

Plantain (*Plantago lanceolata*) is source of many biologically active substances. Such high added value substances include: **phenylethanoids**, e.g. verbascoside and plantamajoside, **flavonoids**, e.g. apigenin, quercetin, plantagin, and **iridoid glucosides**, e.g. catalpol and aucubin, whose content in plant leaves is up to 2-3%. Therefore, plantain has enormous potential that determines its remarkable spectrum of therapeutic effects due to the aforementioned substances: neuroprotective, anticancer and antitumor, retarding aging, anti-inflammatory, antibacterial, antiviral, antimicrobial, diuretic, cough aid.

The aim of this work was to develop complex methods of economical treatment of plantain, using comprehensive isolation techniques. The selection of the most suitable extraction solvents and optimization of (bio) separation method on a laboratory scale was performed. Extraction of the active substances by boiling water was carried out, followed by elimination of some co-extracting compounds (saccharides) by fermentation. Adsorption and desorption on charcoal followed by purification of aucubin by FPLC to Amberlite XAD4 and final lyophilization or crystallization was performed. By this procedure, aucubin with a purity of 60% and other extracts enriched with a different ratio of high added value substances with higher or lower carbohydrate content can be prepared. Optimum conditions of aucubin isolation and process scale-up has been proposed.

„This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-14-0538“.

### 9Po04

#### KONTAMINACE ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ PLATINOVÝMI KOVY V ZÁVISLOSTI NA INTENZITĚ AUTOMOBILOVÉ DOPRAVY – SROVNÁVACÍ STUDIE

Stanislav Ježek<sup>1</sup>, Renata Komendová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie a technologie ochrany životního prostředí, Purkyňova 464/118, Brno, 612 00 xcejzek@fch.vut.cz

Studie je zaměřena na kontaminaci životního prostředí platinovými kovy a jsou v ní porovnávány půdní vzorky ze tří evropských měst: Brno, Vídeň a Moskva. Výzkum byl zaměřen na stanovení množství platiny a palladia v půdách, které byly odebírány v různých městských částech zmíněných měst. Výběr odběrových míst byl zaměřen na křižovatky a silnice s vysokou intenzitou automobilové dopravy, zejména pak místa, kde jsou časté kolony v obydlených oblastech.[1]

Hlavním zdrojem znečištění životního prostředí platinou a palladiem jsou autokatalyzátory. Platinové kovy jsou imobilizovány na povrchu katalyzátoru, kde jsou vystaveny měnícím se podmínkám chemickým, fyzikálním a redoxním, které mají za následek opotřebování těchto katalyzátorů. [2] Toto opotřebení vede k postupnému uvolňování do okolního prostředí během provozu automobilu. Ze získaných výsledků je patrné, že nejvyšší koncentrace platiny a palladia v půdě jsou v těsné blízkosti těchto komunikací. K největšímu uvolňování pak

dochází při rozjezdu automobilů. Proto se rušné křižovatky velkých měst jeví jako nejvýznamnější lokalitou pro kontaminaci. Nadlimitní koncentrace jsou pak v místech s se špatnými rozptylovými podmínkami. [3]

*Tato práce byla podpořena v rámci projektu FCH-S-19-5971, Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy ČR.*

- [1] KOMENDOVA, R. a S. JEZEK. The distribution of platinum in the environment in large cities: a model study from Brno, Czech Republic. *International Journal of Environmental Science and Technology*. 2019, 16(7), 3109-3116. DOI: 10.1007/s13762-018-1954-x. ISSN 1735-1472. Dostupné také z: <http://link.springer.com/10.1007/s13762-018-1954-x> Milata V., Omastova M.: *J. Org. Chem.* 100, 1203 (2018).
- [2] Bencs, L., Ravindra, K. & Van Grieken, R. 2011, Platinum: environmental pollution and health effects. In *encyclopedia of Environmental Health*. Elsevier, pp. 580 - 595.
- [3] WANG, Yajun a Xiaozheng LI. Health Risk of Platinum Group Elements from Automobile Catalysts[online]. [cit. 2016-03-15]. DOI: 10.1016/j.proeng.2012.08.273. ISBN 10.1016/j.proeng.2012.08.273. Dostupné z: <http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1877705812032857>

## 9Po05

### VBRAŇNÉ PODMÍŇKY UŽITÍ STRÍBRNÉ AMALGAMOVÉ ELEKTRODY JAKO POTENCIOMETRICKÉHO ČIDLA INDIKUJÍCÍHO NEČISTOTY VE VODÁCH

Ladislav Novotný<sup>1</sup>, Aneta Karasková<sup>1</sup>, Renáta Petráňková<sup>1</sup>, Abraham Kabutey<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 573, 532 10 Pardubice, [nvt.l@seznam.cz](mailto:nvt.l@seznam.cz)

Problematika indikace nečistot zejména v čistých průmyslových i užitných vodách je běžnou součástí provozní nebo laboratorní kontroly sledovaných vzorků. Patrně nejrozšířenější metodou pro tyto účely je v současnosti konduktometrie. Souběžně s tím je však trvale vyvíjené úsilí o vyřešení dalších operativně dostupných metod nebo postupů, založených na nezávislých principech. Důvody pro to jsou zejména dva: 1) potřeba metod detekujících dostatečně citlivě nejen přítomnost stop iontů nebo polárních látek, ale i stop látek neutrálních resp. nepolárních. 2) Potřeba mít připravenou nebo získat možnost další nezávislé kontroly pomocí principiálně jiné (nezávislé) metody.

Pro uvedené účely bylo nedávno navrženo [1-3] testování metody založené na potenciometrii se speciálními stříbrnými amalgamovými elektrodami (AgAE), s výhodou v zapojení s mimořádnou rezistentní ochranou těchto detekčních čidel. Na základě zjištěných změn potenciálů těchto elektrod například v různých odebraných vzorcích vod, obsahujících vedle různých stopových nečistot i vždy stejnou koncentraci přidaného dusičnanu stříbrného, lze vzájemně porovnat stupeň znečištění zmíněných vzorků vod. Už předběžné testy však ukázaly oprávněnost a užitečnost postupného vyhledání optimálních experimentálních podmínek a parametrů, zejména z hlediska citlivosti a opakovatelnosti měření. Předmětem prezentovaného sdělení jsou informace o vybraných podmínkách ovlivňujících využití zmíněných potenciometrických detekčních elektrod AgAE pro popisované účely.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR SGSFChT\_2019\_001 a projektu Univerzity Pardubice č. SD373001/82/30352 (2016).*

- [1] Novotný L.: ÚPV Praha, UV 2014-30527, 2014.
- [2] Novotný L., Kabutey A., Petráňková R., Langášek P.: *WASTE FORUM* 2, 209 (2018).
- [3] Novotný L., Kočanová V., Kabutey A., Karásková A., Dušek L., Petráňková R., Mikulášek P.: *WASTE FORUM* 2, 117 (2018).

## 9Po06

### CHEMICKÁ ANALÝZA PLASTOVÉHO ODADU POMOCOU FTIR A XPS ZO ZBERU USKUTOČNENÉHO POZDĹŽ DUNAJA V BRATISLAVE

Matej Mičušík<sup>1</sup>, Angela Kleinová<sup>1</sup>, Michal Procházka<sup>1</sup>, Silvia Podhradská<sup>1</sup>, Alexandra Rabayová<sup>2</sup>, Gabriel Bodor<sup>2</sup>, Mária Omastová<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovakia

<sup>2</sup> RepaNet o.z, Staré grunty 14, 84104 Bratislava, Slovakia

Plasty a ďalšie syntetické polymérne materiály sa radia medzi veľmi rôznorodé čo do zloženia a využitia. Stretávame sa s nimi v takmer každej oblasti nášho života, obalmi počnúc a konštrukčnými či stavebnými materiálmi (ne)končiac. Enormné množstvo používaných plastov v každodennom živote vedie k závažným problémom. Tie sa týkajú tak plastového odpadu, ako aj nakladania s ním a rieka Dunaj, jej tok a brehy nie sú výnimkou. V súčasnosti neexistujú žiadne normy pre analýzu plastového odpadu a ani kritériá hodnotenia

znečistenia plastovým odpadom v riečnom systéme. V rámci projektu *PlasticFreeDanube* cezhraničnej spolupráce medzi Rakúskom a Slovenskom vznikla platforma komplexného skúmania a hľadania udržateľných riešení na zamedzenie znečistenia rieky Dunaj plastovým odpadom.

Všetky materiály interagujú s okolím prostredníctvom svojho povrchu. Prostredie, v ktorom sa materiál nachádza, takisto vplyva na fyzikálne a chemické charakteristiky povrchu. Metódami na skúmanie chemických zmien na povrchu materiálov sú tak FTIR (*Fourier-transform infrared spectroscopy*, infračervená spektroskopia), ako aj XPS (*X-ray photoelectron spectroscopy*, röntgenova fotoelektrónová spektroskopia).

FTIR [1] a XPS [2] umožňujú rýchlu a spoľahlivú analýzu vzoriek plastového odpadu vďaka existencii rozsiahlych databáz spektier polymérov. Pomocou uvedených spektrálnych metód sa dajú takisto sledovať procesy degradácie odpadu a je takisto možné stanoviť kontamináciu vzoriek napr. kovmi, alebo pôdou.

*Táto práca vznikla za podpory projektu Rakúsko – Slovenskej cezhraničnej spolupráce Interreg Slovakia-Austria – PlasticFreeDanube (PFD), č. kontraktu ZSKATV023.*

[1] M.R.Jung et al.: Validation of ATR FT-IR to identify polymers of plastic marine debris, including those ingested by marine organisms, *Marine Pollution Bulletin* 127, 704 (2018).

[2] S. Chen et al.: Separation of polyvinylchloride from waste plastic mixtures by froth flotation after surface modification with sodium persulfate, *Journal of Cleaner Production* 218, 167 (2019).

### 9Po07

#### SELEKTIVNÍ ODSTRANĚNÍ OXOANIONTŮ SELENU (IV) A (VI) Z VODNÝCH ROZTOKŮ

Lenka Matoušková<sup>1</sup>, Helena Parschová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav energetiky, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, matouskl@vscht.cz

Selen je esenciální stopový prvek živých organismů, včetně lidí, který je důležitý pro prevenci nádorových onemocnění, imunitní funkci, kardiovaskulární onemocnění a plodnost. Selen je na druhou stranu bioakumulativní a toxický, když koncentrace selenu v těle přesáhne koncentraci homeostatickou [1].

Selen se vyskytuje podobně jako síra v oxidačních stavech -2, 0, +4, +6. Nejvíce toxický pro organismy je seleničitan > selenan > selenocystein > methylované sloučeniny selenu. Selen se vyskytuje v půdě, horninách, podzemních vodách a ovzduší. Maximální přípustná koncentrace selenu v pitné vodě je 10 µg.l<sup>-1</sup> [2].

Cílem této práce bylo otestovat různé typy sorbentů za účelem selektivního odstranění oxoaniontů selenu IV a VI z modelových roztoků obsahujících různé doprovodné anionty (chloridy, dusičnany, sírany), které simulují reálné podmínky a mohou ovlivnit sorpci oxoaniontů selenu. Kromě optimalizace sorpčních podmínek byla sledována i účinnost desorpce oxoaniontů selenu ze sledovaných sorbentů.

Na základě výsledků vsádkových experimentů, při kterých byla zjištěna pro každý sledovaný sorbent optimální hodnota pH pro odstranění jednotlivých oxoaniontů selenu, byly provedeny kolonové dynamické experimenty. Bylo zjištěno, že na odstranění Se(IV) je nejvhodnější sorbent na bázi hydratovaného oxidu železa GEH a na odstranění Se(VI) sorbent Purolite S110 s aminomethylglucitolovou funkční skupinou.

[1] U. S DEPARTMENT OF HEALTH AND HUMAN SERVICES. Toxicological profile for selenium. <https://www.atsdr.cdc.gov/ToxProfiles/tp92.pdf> (17. 6. 2019).

[2] Vyhláška č. 70/2018 Sb.

### 9Po08

#### VLIV TĚŽBY POROSTU BOROVICE LESNÍ NA KVALITU PODPOVRCHOVÝCH A PODZEMNÍCH VOD

Jiří Palarčík<sup>1</sup>, Miloslav Slezák<sup>1</sup>, Petra Peroutková<sup>1</sup>, Ondřej Špulák<sup>2</sup>, Jan Leugner<sup>2</sup>, Jiří Mikeš<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 573, 532 10 Pardubice, [jiiri.palarcik@upce.cz](mailto:jiiri.palarcik@upce.cz)

<sup>2</sup>Výzkumný ústav lesního hospodářství a myslivosti, v.v.i., Výzkumná stanice Opočno, Na Olivě 550, 517 73 Opočno

<sup>3</sup>TERAMED, Nad Kamínkou 1345, 156 00 Praha 16, ČR

V současné době se vedou rozsáhlé diskuze na různých hladinách odborné úrovně o vlivu a případných důsledcích těžby lesního porostu na stav a kvalitu podpoверхových a podzemních vod. Cílem této práce bylo v první fázi zmapovat množství a kvalitu podkorunových srážek v porovnání se srážkami volné plochy, podpoверхových a podzemních vod v dospělém lesním porostu s dominancí borovice lesní na písčitéch půdách na stanovišti borové doubravy. Následně, v rámci druhé fáze, je cílem monitorovat stav a kvalitu těchto vod po odtěžení lesního porostu

v porovnaní s porostem kontrolným. Hlavnými sledovanými parametrami, kromě množství vod, byly obsahy dusičnanů, amoniakálního dusíku, fosforečnanů, síranů, organických látek, vybraných kationtů ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ) a pH. Doposud získané výsledky naznačují, že obavy z kontaminace podzemních vod nežádoucími přirozenými kontaminanty v důsledku lesní těžby nejsou opodstatněné. Odtěžení lesního porostu se u podzemních vod projevilo zcela nevýznamnou měrou u obsahu organických látek, u podzemních vod se těžba na žádném ze sledovaných parametrů vůbec neprojevila.

*Tento příspěvek je realizován za finanční podpory projektu TH02030823*

### 9Po09

#### ZMENA PH AKO SPÔSOB ZVYŠOVANIA ÚČINNOSTI SORPCIE FARMACEUTÍK

Petra Szabová<sup>1</sup>, Michaela Plekancová<sup>1</sup>, Monika Kováčová<sup>1</sup>, Igor Bodík<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Oddelenie environmentálneho inžinierstva FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, petaszabova@gmail.com*

Cieľom predkladanej práce je porovnať adsorpčné materiály na odstraňovanie farmaceutických látok z odtoku čistiarne odpadových vôd a následne zmenou pH vyčistenej odpadovej vody zvýšiť účinnosť odstraňovania sledovaných látok. Vo vyčistenej odpadovej vode z čistiarne odpadových vôd Devínska Nová Ves bola detegovaná sumárna koncentrácia liečiv na úrovni 12 043 ng/l. Následne boli realizované sorpčné testy po dobu 2 hodín na piatich rôznych adsorbentoch ako zeolity (200 $\mu\text{m}$ ), zeolity (0,5 – 1,5mm), zeolity (1 – 2,5mm), granulované aktívne uhlie (GAC) a práškové aktívne uhlie (PAC). Pri neutrálnom pH adsorpčné materiály nedosahovali vysokú účinnosť odstraňovania farmaceutických látok. V ďalšom experimente bola realizovaná zmena pH vyčistenej odpadovej vody na pH=2 a pH=12. Najlepšie dosiahnuté výsledky boli pri pH 2, kedy účinnosť eliminácie liečiv pri použití zeolitov bola 74 % pre práškovú frakciu, 79 % pre strednú frakciu a 75 % pre najväčšiu frakciu. GAC a PAC odstraňovali sledované látky pri danom pH až na 100 %.

Z výsledkov práce vyplýva účinnosť odstraňovania farmaceutických látok na adsorbenty:

Pri pH 2: PAC > GAC > zeolity (0,5 – 1,5) > zeolity (1 – 2,5) > zeolity (prášok),

Pri pH 12: PAC > GAC > zeolity (prášok) > zeolity (1 – 2,5) > zeolity (0,5 – 1,5).

*Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy Zmluvy č.APVV-17-0119".*

### 9Po10

#### SELEKTIVNÍ ODSRANĚNÍ IONTŮ KOVŮ Z MODELOVÝCH ROZTOKŮ KYSELÝCH DŮLNÍCH VOD

Yelena Toropitsyna<sup>1</sup>, Luděk Jelínek<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Ústav energetiky, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, gordyaty@gmail.com*

Kyselé důlní vody jsou, vzhledem k obsahu iontů toxických kovů, velmi vážným problémem pro životní prostředí, zejména pro vodní organismy. Také nízké pH těchto roztoků působí toxicky na živé ekosystémy [1], podporuje rozpustnost těžkých kovů [2] a zásadním způsobem znesnadňuje sorpční procesy na běžně používaných ionexech a sorbentech.

V této práci byly testovány tři typy sorbentů za účelem selektivního odstranění iontů kovů ( $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Mn}^{2+}$  a  $\text{Fe}^{2+}$ ) z modelového roztoku kyselých důlních vod: chelatační sorbent s bispikolyloaminovou funkční skupinou – Lewatit TP 220, chelatační sorbent s IDA funkční skupinou – Lewatit Mono Plus TP 208 a slabě bazický anex s DETA funkční skupinou – Purolite A 830.

Bylo zjištěno, že chelatační sorbent Lewatit TP 220 vykazoval nejlepší výsledky sorpce mědi, niklu a kobaltu. Pro sorpci zinku a železa se ukázal jako vhodný Lewatit MonoPlus TP 208. Nejnižší účinnosti bylo dosaženo při experimentech se slabě bazickým anexem Purolite A 830, kdy nedošlo k sorpci kovů z modelového roztoku (změny koncentrace byly na úrovni chyby měření).

Další část práce byla zaměřena na elektrochemické získávání vybraných kovů (Cu a Ni) z použitých regeneračních roztoků. Pomocí sestaveného elektrolyzérů s fluidním ložem byla odstraněna téměř veškerá měď z desorpčního roztoku a snížena koncentrace niklu.

[1] Tao Chen; Bo Yan; Chang Lei; Xianming Xiao Pollution control and metal resource recovery for acid mine drainage. *Hydrometallurgy* 147-148, 112 (2014).

[2] Kebede K. Kefeni; Titus A.M. Msagati; Bhekhe B. Mamba. Acid mine drainage: Prevention, treatment options, and resource recovery: A review. *Journal of Cleaner Production*, 151, 475–493 (2017).

**9Po11****RHEOLOGICAL PROPERTIES AND CONTENT OF ACRYLAMIDE PRECURSORS OF HYBRID CEREAL TRITICALE**

Kristína Kukurová<sup>1</sup>, Zuzana Ciesarová<sup>1</sup>, Viera Jelemenská<sup>1</sup>, Jana Horváthová<sup>1</sup>, Miona Belović<sup>2</sup>, Alexandra Torbica<sup>2</sup>

<sup>1</sup>NPPC VÚP National Agricultural and Food Centre, Food Research Institute, Priemysel'ná 4, 824 75 Bratislava, Slovak Republic, [kristina.kukurova@nppc.sk](mailto:kristina.kukurova@nppc.sk)

<sup>2</sup>FINS Institute of Food Technology, Bulevar cara Lazara 1, 21000 Novi Sad, Republic of Serbia, [miona.belovic@fins.uns.ac.rs](mailto:miona.belovic@fins.uns.ac.rs)

Triticale (*x Triticosecale*) is a hybrid cereal developed by the crossing of wheat (*Triticum*) and rye (*Secale*), which combines the valuable properties of both parent crops as a high yield potential and quality of wheat grain with resistance to disease and environmental tolerance of rye.

Presented study was focused on comparison of rheological properties of wheat and rye flours produced in Slovakia and triticale flour from Serbia using the Mixolab instrument (Chopin, France) in terms of quality of protein structure and starch against mechanical and thermal stress. Determination of qualitative properties by Mixolab simulates technological conditions in bakery production from the dough processing, baking and prediction of final quality of bakery products as a specific volume, textural properties and rate of staling during storage.

In terms of safety and potential acrylamide formation, the content of the free non-essential amino acid L-asparagine was determined in flours, which is a key precursor of this processing contaminant produced during baking of pastry and bakery products.

*This contribution was supported by the bilateral project SK-SRB-18-0035 "Collaborative study of acrylamide occurrence and qualitative aspects of triticale-based confectionery products" and the research project APVV-16-0088 "Complex use of plant biomass in organic food with added value". The infrastructure of the Centre of Excellence for Contaminants and Microorganisms in Foods (ITMS 26240120042) and the Laboratory of Cereal Technology obtained in the project "Strategy of acrylamide elimination in food processing" (ITMS 26240220091) was used.*

[1] Zhu F.: *Food Chem.* 241, 468 (2018).

[2] Przygodzka G., Piskula M. K., Kukurová, K., Ciesarová Z. et al.: *J. Cereal Sci.* 65, 96 (2015).

**9Po12****ODSTRAŇOVÁNÍ HALOGENOVANÝCH ORGANICKÝCH LÁTEK Z KONTAMINOVANÝCH VOD METODOU REDUKTIVNÍ DEHALOGENACE S VYUŽITÍM RANEYOVY SLITINY**

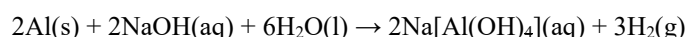
Petr Lacina<sup>1</sup>, Michal Hegedüs<sup>1</sup>, Miroslav Plotěný<sup>2</sup>, Jaroslav Lev<sup>2</sup>, Barbora Kamenická<sup>3</sup>

<sup>1</sup>GEOTest, a.s., Šmahova 1244/112, 627 00 Brno

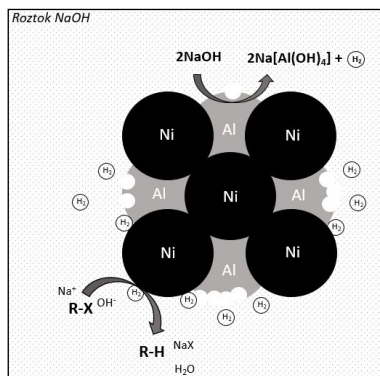
<sup>2</sup>ASIO, s.p.a., Kšířova 552/45, 619 00 Brno

<sup>3</sup>Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice; [barbora.kamenicka@student.upce.cz](mailto:barbora.kamenicka@student.upce.cz)

Halogenované aromatické látky představují rozsáhlou skupinu chemických sloučenin v ČR vyráběných především jako součást rozpouštědel i jako prekurzorů pro přípravu biocidních přípravků, zpomalovačů hoření, barev, technických kapalin, ale i pesticidů a léčiv. Díky vysoké stabilitě vazby C-X (X = F, Cl, Br, I) představují tyto látky perzistentní polutanty, které se na základě jejich polaritě mohou akumulovat v živých organizmech, případně kontaminovat hydrosféru. Z tohoto důvodu je snaha tyto látky rychle a efektivně degradovat pomocí vhodných technologií. Redukční technologie představují selektivní cestu, při které jsou atomy halogenu postupně substituovány za atomy vodíku, přičemž nedochází ke vzniku vedlejších produktů. Tyto technologie však často vyžadují použití katalyzátorů na bázi drahých kovů [1] za zvýšené teploty a tlaku. Mezi ekonomicky přijatelnější varianty je možné zařadit redukci pomocí kovového sodíku/vápníku [2], nebo použití silných redukčních činidel jako je hydrazin nebo NaBH<sub>4</sub> [3]. Technologická náročnost realizace takovýchto reakcí, jako i nízká stabilita uvedených činidel ve vodných roztocích, způsobila upření pozornosti na jednodušší alternativu, a to v podobě tzv. zero-valent-metals. Nejběžněji se pak jedná o nulamocné železo, které se aplikuje obvykle v podobě nanočástic (nZVI) [4], což zvyšuje jeho reaktivitu. Mezi silná redukční činidla se řadí i slitiny hliníku s niklem (Raneyova slitina), jejíž silné redukční vlastnosti se projevují v zásaditém prostředí [5]. Principem jejich účinku je katalytická dehydrogenace na povrchu pórovitého niklu působením vodíku vznikajícího reakcí hliníku s hydroxidem sodným/draselným.







Předkládaná studie je zaměřena na využití technologie na bázi výše popsané reakce Raneyovy slitiny v alkalickém vodném prostředí pro degradaci halogenovaných organických látek přímo v kontaminovaných vodách, a to za běžných teplot a tlaků. Pro účely ověření bylo zkonstruováno speciální technologické zařízení pro zpracování vod ve větších objemech a ověřeno jak na modelových vzorcích vod, tak i široké škále reálných vod (průmyslové odpadní, podzemní, skládkové). Ve všech případech došlo k výraznému odstranění všech sledovaných organických halogenovaných kontaminantů vč. těch perzistentních, a to již během několika hodin. Využití Raneyovy slitiny Al-Ni pro odbourání halogenovaných organických látek (AOX) přímo v kontaminovaných vodách za alkalických podmínek se tak jeví jako velmi perspektivní metoda především pro čištění silně kontaminovaných či zakoncentrovaných vod s obsahem jakýchkoliv takovýchto látek.

*Tato práce vznikla za podpory Ministerstva průmyslu a obchodu České republiky, projekt č. CZ.01.1.02/0.0/0.0/16\_084/0009123.*

- [1] SUZUKA, T.: *Molecules*, 20, 9906 (2015)
- [2] ALONSO, F.: *Metal-Mediated Reductive Hydrodehalogenation of Organic Halides*. *Chem. Rev.*, 102, 4009 (2002).
- [3] BELL, H. M.: *J. Org. Chem.* 34, 3923 (1969)
- [4] BIGG, T.: *Environ. Technol.* 21, 661 (2000)
- [5] WEIDLICH, T.: *Cent. J. Eur. Chem.*, 9, 590 (2011)

## POSTERY - SEKCIA 10: CHEMPROGRESS - CHEMICKÉ TECHNOLOGIE

10Po01

### THE INFLUENCE OF DIENE LIGANDS AND ANIONIC PART OF RUTHENIUM COMPLEXES ON HYDROGENATION OF BUTYL SORBATE

M. Kotova, K. Kollárová, E. Vyskočilová, L. Červený

Department of Organic Technology, The University of Chemistry and Technology, Technická 5, Praha 6, CZ 116 28 Maria.Kotova@vscht.cz

Selective hydrogenation of butyl sorbate to butyl (Z)-hex-3-enoate can be performed using ruthenium complex with the structure  $[\text{Cp}^*\text{Ru}(\text{butyl sorbate})]\text{CF}_3\text{SO}_3$  ( $\text{Cp}^*$  = pentamethylcyclopentadienyl). The influence of the reaction conditions (temperature, pressure, amount of catalyst, solvent type) on the reaction rate and selectivity in hydrogenation have been investigated [1]. The influence of various diene ligands and anionic part of complexes on the process of hydrogenation has not been studied yet.

This work deals with the preparation of Ru complex of the type  $[\text{Cp}^*\text{Ru}(\text{diene})]^+\text{Y}^-$ . Sorbic acid, butyl sorbate, 1,3-cyclohexadiene, 1,3-cyclooctadiene, 1,5-cyclooctadiene and 2,3-dimethylbuta-1,3-diene were used as diene ligands for the synthesis of Ru complexes **1 - 6** respectively (Figure 1). Anionic part of complexes ( $\text{Y}^-$ ) was represented by triflate, perchlorate and tetrafluoroborate anions.

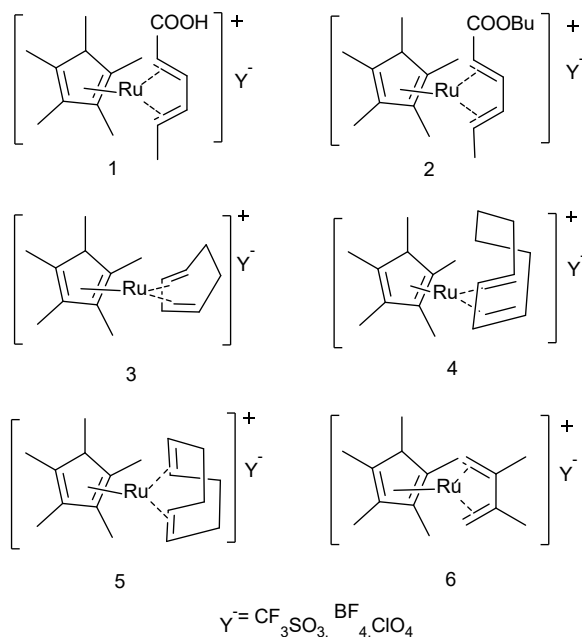


Figure 1. Prepared ruthenium complexes.

Complexes **1 - 6** were used for hydrogenation of butyl sorbate in homogeneous arrangement. The reaction conditions were set to 50 °C and 4 MPa. The butyl sorbate hydrogenation to butyl (Z)-hex-3-enoate, butyl (E)-hex-2-enoate and butyl hexanoate took place. Selectivity was not influenced by the type of diene ligand. Reaction rate increased with increasing size of diene ligand. The highest hydrogenation rates were achieved using complexes with triflate anion.

Financial support from specific university research (MSMT No 21-SVV/2019).

#### References

[1] M. Kotova, E. Vyskočilová, L. Červený, *Catalysis Letters* 147 (2017), 1665.

**10Po02****PŘÍPRAVKY S OBSAHEM ALARELINU NEBO METOKLOPRAMIDU K OVLIVNĚNÍ REPRODUKCE RYB**

Jan Muselík<sup>1</sup>, Jakub Vysloužil<sup>1</sup>, Kateřina Kubová<sup>1</sup>, Tamás Kázmer<sup>1</sup>, Nikola Dvořáková<sup>1</sup>, Martina Holická<sup>1</sup>, Peter Podhorec<sup>2</sup>, David Vetchý<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, Ústav technologie léků, Palackého tř. 1, 61242 Brno, [muselikj@vfu.cz](mailto:muselikj@vfu.cz)

<sup>2</sup>Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích, Fakulta rybářství a ochrany vod, Branišovská 31a, 37005 České Budějovice

Intenzivní akvakultura je závislá na násadovém materiálu z umělého nebo poloumělého výtěru. Nevyhnutelnost hormonálně indukovaného výtěru pramení z neschopnosti většiny hospodářsky významných druhů ryb podstoupit finální zrání gamet v kontrolovaných podmínkách [1]. Řešením této reprodukční dysfunkce je buď aplikace hormonálních preparátů (kapří hypofýzy, choriogonadotropin) nahrazujících nedostatečnou produkci endogenního luteinizačního hormonu (LH) nebo preparátů stimulujících samotnou produkci a sekreci LH (analogy gonadotropin-uvolňujícího hormonu, inhibitory dopaminu). Vedle typu ošetření je zásadním faktorem ovlivňujícím účinnost preparátu forma administrace. V případě „klasické“ aplikace v podobě hormonálního preparátu ve fyziologickém roztoku je výraznou překážkou rychle postupující enzymatická degradace administrovaného peptidu.

Cílem práce je mikroenkapsulace léčiv do injekčních mikročástic na bázi poly(mléčné kyseliny) (PLGA) nebo konvenčních parenterálních přípravků. V humánní medicíně je PLGA nejrozšířenějším biomateriálem pro mikroenkapsulaci a prodloužené uvolňování léčiv a vyniká biologickou rozložitelností, biokompatibilitou a bezpečností [2]. Dalším cílem je ověření rychlosti uvolňování léčiv z připravených přípravků a ověření chemické stability v různých časech a teplotních režimech.

Pro tyto účely byly optimalizovány a validovány HPLC metody pro stanovení alarelinu a metoklopramidu a byla prokázána chemická stabilita jejich roztoků při různých teplotách (4 °C až 25 °C). Optimalizované podmínky disolučních testů *in vitro* byly použity pro stanovení disolučních charakteristik přípravků s obsahem alarelinu nebo metoklopramidu.

Práce byla realizována za podpory NAZV, projekt č. QK1810221.

[1] Podhorec P., Kouřil J.: *J. Vet. Med.* 54, 97 (2009).

[2] Han F.Y., Thurecht K.J., Whittaker A.K., Smith M.T.: *Front Pharmacol.* 7, 185 (2016).

**10Po03****STUDIUM MOŽNOSTI VYUŽITÍ KONVERZNÍ REAKCE K PŘEPRACOVÁNÍ PRŮMYSLOVÝCH SÁDROVCŮ**

Ivona Sedlářová<sup>1</sup>, Jan Videnský<sup>1</sup>, Patrik Volner<sup>1</sup>, Kateřina Bednářová<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, [Ivona.Sedlarova@vscht.cz](mailto:Ivona.Sedlarova@vscht.cz)

Práce je zaměřena na studium chemické přeměny průmyslových sádrovců, které vznikají při odsířování spalin z tepelných elektráren nebo jako vedlejší produkty z různých chemických výrob. Jejich produkce je v současné době vyšší než spotřeba, proto je žádoucí hledat další způsoby, jak tyto suroviny dále zpracovat. V tomto příspěvku je pozornost konkrétně zaměřena na konverzní reakci mezi sádrovcem, chemicky dihydrátem síranu vápenatého, a roztokem uhličitánu sodného. Reakcí vznikají dobře využitelné produkty, síran sodný a práškový uhličitán vápenatý. Experimenty probíhaly v izotermním míchaném vsádkovém reaktoru. Byl sledován průběh reakce a vliv reakčních podmínek (intenzita míchání, teplota, koncentrace vstupních látek) v systému s čistým dihydrátem síranu vápenatého. Za vybraných podmínek byly provedeny experimenty s průmyslovými sádrovci (energósádrovec ze 4 zdrojů, titanosádrovec, fosfosádrovec). Stupeň konverze v jednotlivých časových intervalech byl zjištěn pomocí turbidimetrického stanovení síranových iontů. Připravené produkty byly analyzovány různými metodami (XRF, XRD, SEM, optická mikroskopie). Ze získaných výsledků [1] vyplynulo, že reaktivita průmyslových sádrovců je o něco nižší než čistého dihydrátu síranu vápenatého, nicméně všechny reakce probíhají velmi rychle téměř do 100 % už při laboratorní teplotě. Jedná se tedy o energeticky nenáročnou technologii poskytující zajímavé produkty, která by mohla najít průmyslové uplatnění.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 21-SVV/2019).

[1] Volner P.: *diplomová práce*, VŠCHT Praha (2018).

**10Po04****STABILITNÍ STUDIE INOVATIVNÍHO DETEKTORU VE FORMĚ PELET S PATENTOVANOU KOMPOZICÍ PRO DETEKCI INHIBITORŮ CHOLINESTERÁZY**

David Vetchý<sup>1</sup>, Jiří Zeman<sup>1</sup>, Sylvie Pavloková<sup>1</sup>, Vladimír Pitschmann<sup>2</sup>, Aleš Franc<sup>1</sup>, Martina Urbanová<sup>3</sup>, Ivana Šeděnková<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Ústav technologie léků, farmaceutická fakulta, Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, ČR

<sup>2</sup>Oritest spol. s.r.o., ČR

<sup>3</sup>Ústav makromolekulární chemie, Akademie věd ČR

Pelety s imobilizovanou acetyl- nebo butyrylcholinesterázou jsou moderním typem nosičů určených k enzymatické kolorimetrické detekci nervových látek (soman, sarin, tabun, VX, Novichok) a dalších inhibitorů cholinesterázy, jako jsou organofosfátové a karbamátové insekticidy (paration, malathion) [1-3].

Stabilita imobilizovaného enzymu butyrylcholinesterázy na nosičích ve formě pelet obsahujících rostoucí množství unikátního sorbentu Neusilin® byla hodnocena během 12-měsíčního skladování při třech různých teplotách a vlhkostech. Tyto podmínky simulovaly skladování detektorů naplněných těmito nosiči v polních podmínkách v různých klimatických oblastech po celém světě. Pelety byly připraveny metodou extruze/sferonizace, sušeny za dvou různých podmínek a následně impregnovány enzymem butyrylcholinesterázou s výslednou aktivitou 50 nkat.g<sup>-1</sup>. Pro účely testu stability byly pelety z každé šarže vloženy do tří stabilitních boxů (25 ° C, 30 ° C a 40 ° C s danou vlhkostí). Během skladování byly vzorky hodnoceny z hlediska fyzikálně-chemických vlastností a především z hlediska aktivity a inhibice imobilizované butyrylcholinesterázy. Aktivita byla testována podle standardní Ellmanovy metody. Bylo pozorováno, že po 12 měsících skladování byla aktivita a intenzita barevného detekčního přechodu bílá-žlutá významně vyšší u vzorků obsahujících Neusilin®. To znamená, že tento jedinečný sorbent má pozitivní vliv na udržení stabilního enzymu po delší dobu než komerčně používané nosiče, a to i v drsnějších klimatických podmínkách.

[1] Vysloužil J, Vetchý D, Zeman J, Farsa O, Franc A, Gajdziok J, Vysloužil J, Ficeriová K, Kulich P, Koblíha Z, Pitschmann V: *J Pharm Biomed Anal* 161, 206 (2018).

[2] Zeman J, Vetchý D, Franc A, Pitschmann V: *Chem. Listy*. 112, 434 (2018).

[3] Zeman J, Vetchý D, Franc A, Pavloková S, Pitschmann V, Matějovský L: *Eur J Pharm Sci*. 109, 548 (2017).

## AUTORSKÝ INDEX

## A

Abdel-Mohsen M .....	199
Abdelrahman R M .....	199
Aguedo J .....	137
Allix M .....	174
Almáši M .....	86, 128, 212
Álvarez-Raya C .....	142
Aniskevich A .....	78
Antal V .....	79
Asher J .....	149

## B

Babuka D .....	104
Babuněk M .....	167
Bača Ľ .....	83
Bago Pilátová M .....	195
Bakandritsos A .....	166
Balogh R .....	99
Banó G .....	128
Baralić M .....	143
Baran P .....	85
Baranyai Z .....	98, 197
Baráth M .....	98
Barek J .....	143
Bartáček J .....	90
Barták P .....	145
Bartoň D .....	173, 211
Bartůněk V .....	155, 167
Bednárek J .....	213
Bednařík J .....	105
Bednářová K .....	125, 221
Beier P .....	89, 94
Bellová R .....	69
Belović M .....	218
Benko J .....	211
Benkocká M .....	200
Benková A .....	145
Berkeš D .....	95, 96, 176, 179
Berkutová A .....	128
Bertók T .....	161
Bertůněk V .....	174
Bessada C .....	174
Bilka S .....	190
Bilous M .....	208
Bindzár V .....	194
Blastik Z E .....	89
Blaško J .....	151
Bleha T .....	101
Blokešová P .....	211
Blišáková A .....	137
Bobál P .....	91
Boča M .....	82, 170
Boča R .....	175
Bodík I .....	113, 217

Bodík M .....	77
Bodor G .....	215
Bondarev D .....	74
Bortňák D .....	128, 196
Bősze S .....	98, 197
Bouzek K .....	121, 122, 123, 127
Brisudová A .....	65, 141
Brož B .....	92
Brožek V .....	168, 171, 173
Brunderová M .....	182
Búčiková K .....	65
Bučko T .....	174
Budáč D .....	127
Budzák Š .....	75
Buffa R .....	105
Bugárová N .....	77
Bujdáková H .....	196
Bulko F .....	176
Burčová Z .....	116, 118, 119
Bureš F .....	167, 178
Buršíková V .....	165
Bůzek F .....	213

## C

Caletková O .....	96
Capek P .....	198
Capková D .....	59
Carda M .....	127
Cengelová E .....	63
Cepák V .....	198
Cibulková Z .....	148, 151, 154
Ciesarová Z .....	218
Ciesasrová Z .....	60
Ciešlak M .....	97
Cífra P .....	101
Cigán M .....	188
Císařová I .....	169
Cruz G J F .....	213
Csicsai K .....	188
Culková E .....	69
Czímerová A .....	82

## Č

Čajan M .....	168
Čaplovič J .....	112
Čech J .....	165
Čejková B .....	213
Černák J .....	174, 175
Černocho P .....	150, 203
Černošková E .....	82
Červený L .....	220
Červinka R .....	107
Čierniková M .....	80
Čížek A .....	180
Čížmár E .....	128

Čížová A ..... 199  
 Čuba V ..... 209, 210  
 Čuchorová J ..... 138

**D**

Daňhel A ..... 139, 146  
 Danielik V ..... 121, 125  
 Danko M ..... 99, 105, 153  
 Danková M ..... 63  
 Danková Z ..... 156  
 Daňo M ..... 209  
 Debnárová K ..... 126  
 Denk K ..... 124  
 Denk Karel ..... 122  
 Devínsky F ..... 116, 163  
 Dinajová J ..... 212  
 Distler P ..... 110  
 Dixon D J ..... 96  
 Dlháň L ..... 175  
 Doháňošová J ..... 96  
 Dokupilová S ..... 131  
 Doležal P ..... 129  
 Doležalová J ..... 129  
 Donovalová J ..... 195  
 Doušová B ..... 213  
 Drabina P ..... 90, 91, 97, 188  
 Drakselová M ..... 121  
 Drozdová M ..... 173  
 Drtinová B ..... 208  
 Držík M ..... 74  
 Dubaj T ..... 148, 151, 154  
 Dunajová A A ..... 139  
 Durdiak J ..... 69  
 Dusza J ..... 79  
 Dušek L ..... 114  
 Dušková M ..... 150, 203  
 Dvořáková H ..... 165  
 Dvořáková N ..... 221

**E**

Eckstein Andicsová A ..... 99  
 Elbl J ..... 198  
 Etrych T ..... 201, 205  
 Exnar P ..... 80

**F**

Fábian M ..... 177  
 Fajkis N ..... 177  
 Falvello L ..... 175  
 Farkaš P ..... 199  
 Fašková L ..... 123, 124  
 Faturíková K ..... 80  
 Fazekašová S ..... 186  
 Fecková M ..... 178  
 Feixová V ..... 97  
 Fejgl M ..... 208  
 Fenclová K ..... 208  
 Feranc J ..... 83  
 Feriancová L ..... 178

Feringa B L ..... 59  
 Ferko B ..... 96, 176, 179  
 Filip J ..... 161  
 Filo J ..... 151, 188  
 Finger V ..... 181  
 Fleiřmann J ..... 209, 210  
 Florian P ..... 174  
 Fohlerová Z ..... 95  
 Fojta M ..... 59, 66, 139, 146  
 Formica M ..... 96  
 Fortelný I ..... 102  
 Franc A ..... 199, 222  
 Francová P ..... 103  
 Franková J ..... 199  
 Franz A ..... 198  
 Fukan L ..... 180  
 Fülöpová N ..... 199

**G**

Gajdořová V ..... 155  
 Gál M ..... 69, 139  
 Galamboř M ..... 209  
 Galandáková A ..... 180  
 Gallo J ..... 180  
 Ganajová M ..... 212  
 Gáplovský A ..... 195  
 Garaj J ..... 135  
 Garajová M ..... 199  
 Gelinger V ..... 118  
 Gemeiner P ..... 79, 156, 157  
 Girman V ..... 156  
 Giurg A ..... 124  
 Gligorijević N ..... 143  
 Gogotsi O ..... 78  
 Gomez-Romero P ..... 59  
 Gonda J ..... 177, 182, 186, 189, 192, 194, 195  
 Goněc T ..... 180  
 Gorejová R ..... 72  
 Gottwaldová A ..... 168  
 Greifová M ..... 118  
 Gridchin M ..... 124  
 Groborz O ..... 103, 104, 206  
 Guboova A ..... 156  
 Gyepes R ..... 86, 128, 169

**H**

Haizer L ..... 74  
 Hajdúchová Z ..... 83  
 Halaj M ..... 198  
 Halko R ..... 140, 144  
 Hallon E ..... 111  
 Hanusek J ..... 181  
 Harutyunyan S R ..... 88  
 Hařšo M ..... 65  
 Hatala M ..... 156, 157  
 Havlíček V ..... 130, 132  
 Havranová P ..... 139  
 Ház A ..... 156  
 Hečková M ..... 156  
 Hegedüs M ..... 218

Heizer T .....	202
Henke P .....	77
Herink P .....	114
Hirahara H .....	206
Híveš J .....	123, 124, 126
Hlásek T .....	167, 174
Hřasová Z .....	143
Hlobeňová F .....	66
Hnát J .....	122
Hodan J .....	102
Hochvaldová L .....	157, 159, 163
Holická M .....	221
Homola T .....	79
Horák M .....	139
Horáková R .....	116, 163
Horká M .....	146
Horníček J .....	168, 171, 212
Horváth B .....	186
Horváth L .....	98, 197
Horváthová J .....	218
Hotová G .....	150
Houšť J .....	130
Hovan A .....	128
Hovancová J .....	70, 156
Hradilová Š .....	80
Hrčková E .....	200
Hrdlička V .....	143
Hricovíni M .....	149
Hricovíniová J .....	182
Hricovíniová Z .....	182
Hrobárik P .....	190
Hroboňová K .....	68
Hronkovič J .....	202, 207
Hrouzková S .....	65, 141, 142
Hrubovčáková M .....	72
Hrubý M .....	84, 103, 104, 150, 202, 203, 206
Hubálek M .....	94
Hudec I .....	202
Hudecová D .....	86
Hudecova L .....	153
Hvojník M .....	157

**C**

Charvot J .....	167
Chemela T .....	84
Chmela T .....	150, 203
Chocholouš P .....	71
Chochulová A .....	214

**I**

Imrich J .....	193
Ingr T .....	166
Iwan A .....	162
Izadi N .....	69

**J**

Jablonský M .....	68, 125
Jacková D .....	182
Jacquemin D .....	75

Jaček M .....	140
Jačková I .....	213
Jakubčínová J .....	98
Jakubec P .....	95, 96
Jampílek J .....	180, 182
Jancar J .....	199
Jančálek J .....	169, 172
Janek M .....	83
Janigová N .....	198
Jankovič D .....	82
Jankovský O .....	167, 171, 174
Janoušková O .....	202, 205
Jansa J .....	183
Jantová S .....	198
Jelemenská V .....	218
Jelínek L .....	217
Jergel M .....	162
Jerigová M .....	74, 131, 149, 155, 161, 211
Ježek S .....	214
Jiráček D .....	104
Jiríčková A .....	171
John J .....	110
Jomova K .....	153
Jomová K .....	154
Jonas F .....	117
Jorík V .....	110
Jurišová J .....	125
Jůza J .....	102

**K**

Kabutey A .....	215
Kaimlová M .....	158
Kaman O .....	138
Kamenická B .....	114, 126, 218
Kaprálková L .....	101
Karásek P .....	146
Karásková A .....	115, 215
Karkeszová K .....	117
Karlubíková O .....	95
Kasák P .....	81, 105, 158, 161
Kašpar M .....	108
Katrlík, J .....	143
Kazda T .....	59
Kázmer T .....	221
Kejík L .....	139
Kelar J .....	79
Kello M .....	86
Kelnar I .....	101
Kelnarová A .....	208
Kesa P .....	117
Kinnertová E .....	83
Király N .....	128
Kittnerová J .....	208
Kleinová A .....	113, 215
Klíma J .....	75
Klimánková I .....	94
Knotek P .....	82
Kobera L .....	104
Kodým R .....	121
Kohout M .....	155
Kohúteková S .....	169

Kolaczkowski M .....	177	Kujovská Krčmová L .....	133
Koláčná L .....	75	Kukurová K .....	218
Kolář M .....	163, 166, 180	Kuliček J .....	113
Kolařík J .....	166	Kulpová K .....	149
Kolářová K .....	164, 200, 205	Kupková M .....	72
Kolivoška V .....	154	Kurka M .....	172
Kollár J .....	200	Kutálek P .....	82
Kollárová K .....	220	Kuzderová G .....	86
Kolouchová K .....	103, 104, 206	Květoň F .....	130
Koloušek D .....	213	Kvítek L .....	157, 159, 163, 166
Kolská Z .....	164, 200, 205		
Komendová R .....	214		
Konefal M .....	84	<b>L</b>	
Konefal R .....	104	Labuda J .....	61, 135
Koneracká M .....	77	Lacina K .....	95
Konhefr M .....	95	Lacina P .....	218
Kopecká K .....	165	Lacmanova V .....	160, 161
Kordík D .....	136	Lauro P .....	153, 154
Korenko M .....	174	Lazar P .....	78
Kos J .....	180	Lemr K .....	132
Kostka L .....	201	Lepšík M .....	183
Koščová J .....	199	Leskovská J .....	170
Kotova M .....	220	Leugner J .....	216
Kousalová J .....	201	Lev J .....	218
Koutník I .....	213	Lhotka M .....	170, 213
Kováčová M .....	217	Ligmajer F .....	139
Kovář M .....	201	Lobaz V .....	84, 104, 150
Kovářová L .....	105	Lochman B .....	171
Kozmon S .....	98	Lojka M .....	171
Kozovska Z .....	153	Loka J .....	184
Kožíšek J .....	84	Lorenc D .....	74, 150, 153
Kožíšková J .....	191	Lorencová L .....	79, 155, 156, 161
Králik M .....	68, 125	Loukotová L .....	202
Králiková E .....	123	Lučeničová J .....	131
Krásný L .....	180	Ludvík J .....	75
Krátký M .....	98	Lukáč M .....	116, 163, 186
Krátký M .....	197	Lukáčová-Chromisteková Z .....	69
Krejčíková S .....	102	Lukavský J .....	198
Kreps F .....	116, 118, 119	Lukešová M .....	150
Kriegerová K .....	140, 144	Lüköová A .....	87
Krijt J .....	103	Luptáková D .....	130
Křištofiková D .....	184	Lyčka A .....	183
Kříž M .....	62		
Krnáč D .....	67, 141	<b>M</b>	
Kronek J .....	203	Macák J .....	167
Kroneková Z .....	105, 203	Mackuřak T .....	113
Krupička P .....	84, 150, 203	Magdolen P .....	190
Kruželák J .....	202	Machková M .....	142
Kryštof V .....	183	Machová D .....	202
Křivová B .....	166	Machová L .....	102
Kubasová N .....	65, 141	Maier V .....	132
Kubát P .....	77	Majerčíková M .....	203
Kubíková B .....	82, 170	Majková E .....	162
Kubíková M .....	159	Mališ J .....	123
Kubiňáková E .....	124, 126	Malkina O .....	149
Kubincová J .....	214	Mandincová M .....	66
Kubová K .....	204, 221	Marcinkowska M .....	177
Kucerova L .....	153	Marek A .....	92, 185
Kučka J .....	103, 105, 202	Markos A .....	89
Kuchár J .....	87, 174	Marková L .....	138
Kuchtová G .....	114	Marková V .....	123
Kujan J .....	209		



Markuliak M	186
Martincová J	78
Martinková M	182, 189, 194, 195
Maříková Š	208
Mastihuba V	117
Mastihubová M	117
Mastný L	168, 171, 172, 173
Mastný M	212
Matějová L	213
Matoušek D	64
Matoušek V	94
Matoušková L	216
Matulková I	169
Mazúr M	76
Mečiarová M	184, 187, 190, 191, 196
Melicherčíková D	69
Melníková E	69
Meluš P	206, 207
Mestak O	117
Meyer Mojzes M	191
Mičušík M	77, 78, 113, 162, 215
Mihóková E	210
Michalík J	74
Micháliková M	142
Michnová H	180, 182
Mikeš J	216
Miklášová N	170
Mikšíková E	170
Míkula M	79, 156, 157
Mikuš P	131
Milagros T	175
Milata V	109, 111, 128, 184, 191, 196
Miljuš G	143
Misiura A	78
Mitříková T	186
Mládek T	211, 212
Mlynáříková J	82, 170
Modrocká V	187
Moncol J	87, 96, 153, 184
Montesdeoca-Esponda S	142
Morávková T	129
Mosinger J	77
Mosnáček J	200
Mravec B	188
Mrlík M	105
Můčka V	209
Mudra E	79
Mudráková B	93
Mudroňová D	86
Muselík J	198, 221

**N**

Nádaždy V	162
Nádvorníková J	145
Nagyidayová A	180
Navrátil T	143
Nedić O	143
Němec I	169
Němec M	110, 208
Němečková-Makrlíková A	143
Némethová I	93

Netriová Z	82, 174
Neubertová V	200
Neuman J	64
Neužilová B	209
Nguyenova H Y	160, 161
Noskovičová E	150, 153
Novák J	130
Nováková G	91, 188
Nováková J	131, 149
Novotná M	189
Novotný L	115, 215

**O**

Obersteiner G	113
Olejšníková P	86, 96
Omaníková L	83
Omastová M	77, 78, 113, 155, 162, 165, 215
Ondrášková A	66
Oravec J	206, 207
Oriňak A	70, 72, 73
Oriňaková R	59, 70, 72, 73, 156
Oriňaková R	212
Ormandyová K	190
Orsagová Králová Z	72
Osička J	105
Ostatná V	69, 146
Osuský P	190
Otevřel J	91
Otyepka M	78

**P**

Pagáčová J	80
Paidar M	122, 123, 124, 127
Palařík J	216
Pálka K	169, 172
Palma-Alejandro K	117
Panáček A	80, 159, 163, 166
Pánek J	84, 150, 203
Pankrác J	202
Papučová I	80
Páral P	103
Parchaňská A	150
Parnica J	205
Parráková L	79, 156
Parschová H	216
Pastoreková S	77
Paulovičová E	198
Paulovičová L	198
Pavelková M	199, 204
Pavilek B	191
Pavličková M	79, 157
Pavličková M	156
Pavlík J	110
Pavlinak D	79
Pavloková	222
Pavloková S	204
Pavůvková D	123, 124
Pažitná L	143
Pechar M	205
Pecher D	131

Pelikánová I .....	210
Peňaška T .....	191
Penezić A .....	143
Peppelenbosch M .....	131
Peroutková P .....	216
Petra L .....	118
Petráňková R .....	215
Píchal J .....	172
Pisárčik M .....	116, 163
Pišlová M .....	164
Pitschmann V .....	222
Plavec R .....	83
Plekancová M .....	113, 217
Plevová M .....	122
Plotěný M .....	218
Plško A .....	80
Pluháček T .....	132
Podhorec P .....	221
Podhradská S .....	113, 215
Podolec P .....	138
Podrojková N .....	72
Pola R .....	205
Polák P .....	75
Poláková L .....	103
Polívková M .....	164
Popovičová A .....	157
Popovich K .....	209, 210
Pospíšilová S .....	180, 182
Potočňák I .....	87
Prášek T .....	107, 208
Prášilová J .....	109
Pratx G .....	104
Pravda M .....	152
Preťo J .....	202, 206, 207
Pribus M .....	151
Pribusová Slušná L .....	74
Prieboj J .....	64
Procházka M .....	78, 113, 155, 165, 215
Procházková L .....	210
Procházková S .....	78, 140, 144, 155, 165
Prokeš L .....	165
Prokop M .....	124
Prokopec V .....	133
Prucek R .....	159, 166
Putala M .....	100, 176, 178

**R**

Rabayová A .....	215
Rabyk M .....	202
Rajcaniova S .....	153
Rakhmatullin A .....	174
Raus V .....	203
Rebenda D .....	152
Rečková V .....	127
Reguli J .....	60
Reiffová K .....	67, 141
Rejman D .....	180
Rendošová M .....	86
Repovský D .....	74
Reznickova A .....	160, 161
Rievaj M .....	69

Robajac D .....	143
Rohan P .....	168
Rončák R .....	192
Rosendorf T .....	107
Roth M .....	146
Ruml O .....	173, 212
Růžička F .....	146

**Ř**

Řezanka P .....	68, 138, 144
-----------------	--------------

**S**

Sabol M .....	111
Sabolová D .....	86
Samolřová E .....	87
Sang J .....	206
Santana-Rodríguez J J .....	142
Sarakhman O .....	65, 68, 145
Sebechlebská T .....	154
Sedláček O .....	104, 206
Sedlák M .....	90, 91, 97, 188
Sedláková Z .....	150, 203
Sedlářová I .....	125, 221
Seřc L .....	117
Seřřa P .....	110
Seřkorová K .....	147
Sekretář S .....	116, 118, 119
Serbin R .....	212
Shembel E .....	59
Shepa I .....	70, 79
Shestivska V .....	154
Schmidt Š .....	116, 118, 119
Schoeller M .....	87
Schwarz J .....	82
Schwarzová K .....	66
Siegel J .....	158, 164
Simkovičová K .....	159
Simunkova M .....	153
Sisáková K .....	73
Sivák L .....	201
Sklenářová H .....	71
Sklenářová R .....	199
Skopalová J .....	145
Skrbek K .....	174
Slavětínská R .....	172
Slepčiková P .....	193
Slezák M .....	216
Slovák V .....	83, 150
Smolík J .....	82
Sokolová B .....	213
Solich P .....	71
Sosa-Ferrera Z .....	142
Srbová L .....	202
Sřáhel P .....	165
Staněk J .....	82
Stepura A .....	165
Stiborová M .....	66
Stolarska M .....	97
Straková Fedorková A .....	59
Strečanská K .....	76

Strečková M .....	156
Strejc M .....	108
Stryšovský T .....	159
Stupavská M .....	79, 165
Stupka R .....	129
Subair R .....	162
Sulovský T .....	145
Svoboda J .....	91
Svobodová M .....	193
Svorcik V .....	160, 161
Sýkora D .....	68, 112
Szabová P .....	113, 217
Szarka A .....	65
Szocs V .....	74

## Š

Šácha M .....	110
Šalintroš I .....	85
Šalplachta J .....	146
Šebest P .....	139, 146
Šebesta R .....	88, 93, 184, 187, 190, 191, 196
Šeděnková I .....	222
Šedová P .....	105
Šefc L .....	103, 202
Šelešovská R .....	66
Ševčovičová A .....	182
Šiffalovič P .....	77, 162
Šimek M .....	168, 171, 173, 212
Šimko F .....	174
Šimon P .....	148, 151, 154
Šimunková M .....	154
Šimurda M .....	82
Široký M .....	194
Šišoláková I .....	70
Škraňková P .....	193
Škríba A .....	130
Škultéty Š .....	111
Šlang S .....	172
Šofranko J .....	128, 196
Šoral M .....	128
Špaček V .....	165
Špaková Raschmanová J .....	195
Špírková M .....	102
Špitálský Z .....	77
Špulák O .....	216
Štamberg K .....	209
Štefuca V .....	214
Štěpánek P .....	202
Štěpánková Š .....	147
Šterbinská S .....	174
Šubr V .....	201
Šuláková P .....	164
Šunderić M .....	143
Švancarová Laštincová J .....	70
Švec Jr. P .....	82
Švec P .....	82, 103, 104, 206
Švecová M .....	133
Švestka D .....	91
Švindrnach .....	132
Švorc E .....	65, 68, 145
Švorčík V .....	158, 164, 200, 205

Švorec J .....	110
----------------	-----

## T

Tarábek J .....	185
Tatar A .....	68, 144
Tatarko M .....	110
Tecl J .....	208
Tiňo R .....	68, 125
Tisovský P .....	195
Tkáč J .....	79, 130, 137, 155, 156, 161
Tobrman .....	75
Tomanová A .....	180
Tomanová K .....	83
Tomčík P .....	69
Tomčíková K .....	139
Torbica A .....	218
Toropitsyn E .....	152
Toropitsyna Y .....	217
Torres-Pradrón M E .....	142
Trčková K .....	111, 211
Trousil J .....	103
Tůma P .....	140
Turčíková L .....	196
Turjan J .....	198
Tvrdoňová M .....	192

## U

Uher M .....	111
Ulrichová J .....	180, 199
Urbanczyk-Lipkowska Z .....	97
Urbanová M .....	222

## V

Valáriková J .....	199
Valent I .....	151
Valentin M .....	118
Valentová J .....	170
Valko M .....	153, 154
Vaněčková E .....	154
Váňa J .....	90
Vargová D .....	88, 93
Vargová Z .....	86, 212
Varháč R .....	212
Večerník P .....	107
Večeřová R .....	163
Végh D .....	128, 191, 196
Velebný V .....	152
Velič D .....	61, 74, 131, 149, 150, 153, 155, 161
Venclíková K .....	202
Vernerová A .....	133
Véron E .....	174
Veselý S .....	96
Veteška P .....	83
Vetřný D .....	221, 222
Vetrik M .....	104
Vídenský J .....	125, 221
Viglašová E .....	209
Vilčáková J .....	202
Vilková M .....	86, 87, 193

Vinšová J ..... 98, 197  
Višňovský J ..... 214  
Vizárová K ..... 68, 125  
Vlček M ..... 169, 172  
Vojteková T ..... 153  
Vojtko M ..... 70, 79  
Vokata B ..... 160, 161  
Volarević V ..... 87  
Volner P ..... 221  
Volochanskyi O ..... 133  
Voltrová S ..... 89  
Vopálka D ..... 107, 208  
Vorčáková K ..... 147  
Vosátka R ..... 197  
Vráblová A ..... 175  
Vrbický M ..... 91  
Vykydalová A ..... 148, 151, 154  
Vyskočil V ..... 143  
Vyskočilová E ..... 220  
Vysloužil J ..... 204, 221  
Vysoká V ..... 180

**W**

Walther C ..... 110  
Weidlich T ..... 114, 126

**Y**

Yousaf A ..... 158

**Z**

Zachář P ..... 112  
Zaidi S J ..... 158  
Záruba K ..... 68  
Zaťovičová M ..... 77  
Závišová V ..... 77  
Zbořil ..... 166  
Zelenák V ..... 128  
Zelenáková A ..... 128  
Zeleniakiene D ..... 78  
Zelenka T ..... 83  
Zelený J ..... 205  
Zelienka P ..... 124  
Zelinková Z ..... 131  
Zeman J ..... 222  
Zeman M ..... 96, 176  
Zeman Z ..... 179  
Zichová S ..... 65  
Zlámal M ..... 125

**Ž**

Žitka J ..... 122  
Živný O ..... 171

Organizátori a autori ďakujú všetkým, ktorí podporili  
71. Zjazd chemikov a vydanie ChemZi so zborníkom!

## Zlatý sponzor



## Strieborní sponzori



## Generálny sponzor sekcie Analytická chémia



## Sponzori



## Mediálni sponzori



## Partneri



SLOVENSKÁ TECHNICKÁ  
UNIVERZITA V BRATISLAVE  
FAKULTA CHEMICKEJ  
A POTRAVINÁRSKEJ TECHNOLOGIE