



58. SJEZD ASOCIACÍ ČESKÝCH A SLOVENSKEKÝCH CHEMICKÝCH SPOLEČNOSTÍ

ÚSTÍ nad LABEM

4. – 7. září 2006

POŘÁDAJÍCÍ ORGANIZACE

Asociace českých chemických společností

**Asociace slovenských chemických společností
ve spolupráci s**

**Přírodovědeckou fakultou Univerzity Jana Evangelisty Purkyně
v Ústí nad Labem**

a

Spolkem pro chemickou a hutní výrobu a.s. Ústí nad Labem

ZÁŠTITU PŘEVZAL

Mgr. Jan Kubata, primátor města Ústí n.L.



PŘEDSEDNICTVO SJEZDU

Doc. PhDr. Z. Havel, CSc.

čestný předseda sjezdu

Prof. Ing. V. Báleš, DrSc.

Prof. RNDr. J. Čížmárik, CSc.

Prof. Ing. J. Drahoš, DrSc.

Ing. J. Knopp, DrSc.

Doc. Ing. J. Lederer, CSc.

Prof. RNDr. I. Nezbeda, DrSc.

Ing. Miloš Revús

Prof. RNDr. J. Ulrichová, CSc.

Doc. Ing. D. Velič, PhD.

Univerzita J. E. Purkyně

Slovenská spoločnosť chemického inžinierstva

Slovenská farmaceutická spoločnosť

Společnost chemického inženýrství

Slovenská spoločnosť pre biochémiu a molekulovú biológiu pri SAV

Společnost průmyslové chemie

Univerzita J. E. Purkyně

Slovenská spoločnosť priemyselnej chémie

Česká společnost chemická

Slovenská chemická spoločnosť



ORGANIZAČNÍ VÝBOR

I. Nezbeda (předseda)

M. Benešová

Z. Kolská

T. Loučka

H. Pokorná

J. Rejnek

Z. Rytíř

A. Šternová

SEKCE SJEZDU A JEJICH GARANTI

1. Analytická a fyzikální chemie

Doc. RNDr. Jiří Ludvík, CSc., Ústav fyzikální chemie a elektrochemie Akademie věd České republiky

2. Anorganická a materiálová chemie

Prof. Ing. Miloslav Frumar, DrSc., Univerzita Pardubice

3. Organická a farmaceutická chemie

Doc. RNDr. Martin Katora, CSc., Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy

4. Petrochemie a polymery

Prof. Ing. Gustav Šebor, CSc., Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Prof. Ing. Vratislav Ducháček, DrSc., Vysoká škola chemicko-technologická Praha

5. Výuka, informatika a historie chemie

RNDr. Pavel Zachař, CSc., Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Prof. RNDr. Hana Čtrnáctová, CSc., Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy

6. Chemie životního prostředí

Doc. Ing. Karel Ventura, CSc., Univerzita Pardubice

7. Chemie potravin a biotechnologie

Doc. Ing. Tomáš Macek, CSc., Ústav organické chemie a biochemie Akademie věd České republiky

8. Průmyslová chemie – CHEMPROGRESS

Doc. Ing. Zdeněk Bělohav, CSc., Vysoká škola chemicko-technologická Praha

Doc. Ing. Jaromír Lederer, CSc., Výzkumný ústav anorganické chemie a. s. Ústí n. L.

Vážení účastníci sjezdu Asociací chemických společností, vážení čtenáři!

Dostáváte do rukou speciální číslo jubilejního 100. ročníku Chemických listů věnované příspěvkům prezentovaným na 58. sjezdu Asociací českých a slovenských chemických společností.

Volba místa konání sjezdů nebývá náhodná. Konání 58. sjezdu v roce 2006 právě v Ústí nad Labem je jednou z událostí, kterou se připomíná 150. výročí založení Spolku pro chemickou a hutní výrobu (Spolchemie), chemického podniku, jehož význam dalece přesahuje hranice regionu. Druhou významnou událostí je pak skutečnost, že na podzim loňského roku vznikla na Univerzitě Jana Evangelisty Purkyně Přírodovědecká fakulta, teprve druhá svého druhu v Čechách. Organizací sjezdu byla proto pověřena právě Univerzita J. E. Purkyně a záštitu nad sjezdem převzali generální ředitel Spolchemie, Ing. M. Procházka, a primátoři města Ústí n. L., mgr. P. Gandalovič a poté i mgr. J. Kubata

Význam Sjezdu Asociací Českých a Slovenských společností podtrhuje i skutečnost, že se ho zúčastní rovněž i představitelé chemických společností Maďarska, Polska, Slovinska a Rakouska a skupina vybraných polských studentů.

Sjezd není jenom odbornou záležitostí, ale i událostí kulturně-společenskou, je to také příležitost pro prezentaci regionu. Organizátoři sjezdu proto pro vás připravili bohatý společenský program, který je doplněn výlety na atraktivní místa v okolí města Ústí n. L.

Jsem přesvědčen, že tento sjezd bude důstojným pokračovatelem tradice každoročních setkání odborníků z oblasti chemie a jménem organizačního výboru vám přeji příjemný a úspěšný pobyt v Ústí nad Labem a jeho okolí.

*Ivo Nezbeda
předseda organizačního výboru*

PL 1
NEWS FROM OLD DRUGS:
INVESTIGATIONS ON THE POLYMORPHISM OF
GLUCOCORTICOIDS

CHRISTIAN NÄTHER

*Institut für Anorganische Chemie der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Olshausenstraße 40, D-24098 Kiel
 cnaether@ac.uni-kiel.de*

Polymorphism, which is defined as the ability of a compound to exist in more than one crystalline modification is a widespread phenomenon and is of great importance in a number of areas like material science or pharmaceutical development. In drug polymorphism several aspects are of importance: Before a new drug is marketed it has to be adhered to the standards of the authorities, which also includes investigations on the polymorphism. In addition, because polymorphic modifications frequently exhibit different physical properties like e. g. solubility, melting point, compressibility, bioavailability or stability on storage, information on the influence of the corresponding phase onto the chemical, biological or physical properties of a drug are needed. Finally, polymorphic modifications can be patented separately if they have some advantages compared to that phase which is in use.

However, also the polymorphism of very old drug substances can be of great interest, which in most cases has not been investigated satisfactorily. This is the case e.g. for glucocorticoids, which belong to the most versatile and effective drugs and which are used in therapy for a very long time. In several cases they are administered as a crystalline suspension and hence marketed in glass ampoules. During the preparation of the dosage form, these drugs must be sterilized, for which different methods exist. A very interesting method is the sterile filtration in which the compound is dissolved in a given solvent, filtered off, recrystallized, dried and micronized. During this procedure different polymorphic or pseudopolymorphic (solvates or co-crystals) modifications can occur and in the end it has to be guaranteed that only that phase is formed which is used in therapy or which is preferred by the producer.

Therefore, we have performed systematic investigations on the polymorphism of glucocorticoids, which also includes investigations on the pseudopolymorphism, because it has to be proved which polymorphic modification is formed on desolvation of a given solvate. To investigate such typical solid-state phenomena different methods are needed. This includes X-ray single crystal and powder diffraction, simultaneously differential thermoanalysis (DTA) and thermogravimetry (TG) coupled to mass spectroscopy (MS), differential scanning calorimetry (DSC), temperature dependent X-ray powder diffraction as well as thermomicroscopy. For a systematic search for new forms a polymorphic screening has to be performed in the beginning.

For triamcinoloneacetone e. g. we have found two different modifications namely the trigonal form (space group R-3) that corresponds to the patented and commercial available product and a second, tetragonal form (space group P4₁2₁2). We have found that the commercial product contains a small amount of water that is responsible for the stability of

that form. Therefore, the form that is patented and used in therapy is in fact a hydrate. If the water is removed a transformation into the tetragonal form is observed. Therefore, the melting point given in the patent does not correspond to the patented and trigonal form, it corresponds to the new and hitherto unknown tetragonal form.

Triamcinoloneacetate crystallizes as solvates in nearly all solvents used for crystallization. Altogether three different structure types have been observed. In addition to these pseudopolymorphic forms we have identified two solvent free polymorphic modifications.

For pure triamcinolone we have found two crystalline modifications and one hydrate. Interestingly the commercial product is thermodynamically metastable at room temperature and can only be prepared by decomposition of the hydrate. If crystalline suspensions of this form are stirred a transformation into the thermodynamic stable form is observed.

Prednisolone also exists in two different polymorphic modifications and one hydrate. In contrast to triamcinolone, desolvation of the hydrate leads to that form which represents the thermodynamically most stable form at room temperature.

For hydrocortisone several different pseudopolymorphic forms were discovered in the beginning. In addition, from most solvents a solvent free thermodynamically stable modification is obtained which corresponds to that form which is used in therapy. Surprisingly, if single crystals were crystallized from these solvents a new and hitherto unknown metastable form of hydrocortisone is obtained.

Summarizing, these investigations show that even for well-known drugs one can find new and surprisingly results, which are of great importance for the preparation and sterilization of drug substances.

PL 2
MASS SPECTROMETRY IN CLINICAL
ENZYMOLGY: TOWARD NEWBORN SCREENING
OF INBORN ERRORS OF METABOLISM

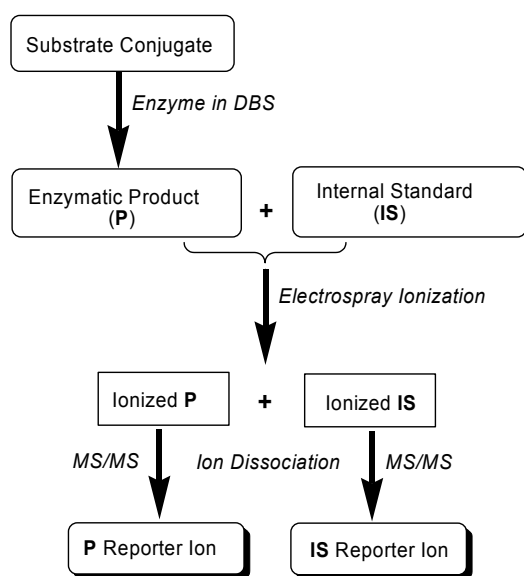
**FRANTIŠEK TUREČEK^a, MICHAEL H. GELB^{a,b},
 C. RONALD SCOTT^c, YIJUN LI^a, and DING WANG^a**

*Departments of Chemistry^a, Biochemistry^b and Pediatrics^c
 University of Washington, Seattle, WA, USA
 turecek@chem.washington.edu*

Mass spectrometry is a highly sensitive method that has been widely used for the selective detection and quantitation of various metabolites that are present at trace levels in body fluids and manifest genetic diseases. Here we describe a novel approach of using tandem mass spectrometry for the detection of inborn errors of metabolism in patients. In particular, we focus on two groups of lysosomal storage diseases (LSD) that are caused by defective enzymes in the lysosome¹. The first group includes diseases caused by deficiencies of lysosomal enzymes involved in catabolic degradation of sphingolipids. The other group is mucopolysaccharidoses (MPS) that are caused by deficiencies of enzymes that catalyze degradation of glycosaminoglycans, such as heparan sulfate and dermatan sulfate. The methods reported here have evolved from our previous studies of mass spectrometric methods for diagnos-

ing enzyme deficiencies in cultured cells using affinity capture-elution electrospray ionization mass spectrometry (ACESIMS)^{2,3} that addressed several LSD and congenital disorders of glycosylation. The advantage of tandem mass spectrometry over other mass spectrometry-based approaches is that it (i) provides highly selective and efficient separation of ions from low-abundance analytes in the mass spectrometer, (ii) increases overall selectivity and sensitivity, (iii) works with rehydrated dried blood spots (DBS) from newborn screening cards as biological sample, and, last but not least, (iv) uses simpler and less expensive substrates and procedures for routine use in clinical practice.

The use of MS/MS for enzyme assays in DBS is illustrated in Scheme 1 (ref.⁴). The sample, which is a 2-5 mm diameter punch of a DBS on a Guthrie screening card, is incubated with a buffer containing a non-endogenous substrate conjugate that incorporates a structure moiety that is similar to that in the natural substrate and is recognized by the enzyme. Action of the enzyme forms the enzymatic product (P) whose molecular mass is different from that of the substrate conjugate. Electrospray ionization (ESI) produces gas-phase ions (Ionized P) by protonation, alkali metal ion attachment, or deprotonation of P that are directly related to its molecular mass and can be readily separated in the mass spectrometer from those of the substrate conjugate. Internal standard (IS) is added to P that upon ESI forms gas-phase ions that are chemically similar to ionized P, but differ in mass. Collisional activation in the tandem mass spectrometer produces fragment ions from ionized P and IS that are unequivocally related to P and IS and are used to monitor the ionized P and IS intensities. Since ion intensities from electrospray are proportional to analyte concentrations, the measured relative intensities of P and IS reporter fragment ions are proportional to P and IS concentrations. The proportionalities (response factors in ESI-MS/MS) are determined from calibration curves for P and IS.



Scheme 1. Flow chart of tandem MS enzyme assays

In case IS is an isotopomer of P, their ESI-MS/MS response factors are nearly identical and no external calibration is necessary.

Examples will be given of determinations of activities in dried blood spots for lysosomal enzymes glucocerebrosidase (Gaucher disease), acid sphingomyelinase (Niemann-Pick disease variants A and B), galactocerebrosidase β -galactosidase (Krabbe disease), acid- α -galactosidase (Fabry disease), acid α -glucosidase (Pompe disease), and α -D-iduronidase (mucopolysaccharidosis Type I, Hurler disease) from affected patients, heterozygotes, and normal individuals. The activities were measured simultaneously by multiple-reaction monitoring of ion dissociations from cations produced by electrospray ionization of enzymatic products. Simple and inexpensive assay protocols were developed that are readily adopted for handling multiple samples in 96-well microtiter plates, employ simple separation steps, and use $\leq 3 \mu\text{mol}$ of synthetic or commercially available substrates and $< 25 \text{ nmol}$ of internal standards per analysis. The assays have the potential of being used for large-scale screening of newborns for the detection of inborn errors of metabolism.

Supported by the National Institutes of Diabetes and Digestive and Kidney Diseases (NIH-DK 67859), the Genzyme Corporation, and Applied Biosystems.

REFERENCES

1. Scriver C. R., Beaudet A. L., Sly W. S., Valle D. (ed.): *The Metabolic & Molecular Bases of Inherited Disease*, 8th Edition, Part 16, Lysosomal Storage Disorders. McGraw-Hill, New York 2001,
2. Gerber S. A., Scott C. R., Tureček F., Gelb M. H.: *J. Am. Chem. Soc.* 121, 1102 (1999).
3. Tureček F.: *J. Mass Spectrom.* 37, 1 (2002).
4. Li Y., Scott C. R., Chamois N. A. (†), Ghavami A., Pinto B. M., Tureček F., Gelb M. H.: *Clin. Chem.* 50, 1785 (2004).

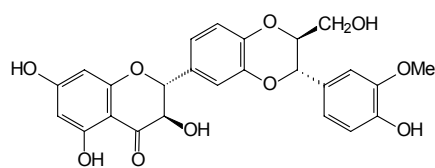
PL 3

SILYBIN A SILYMARIN - NOVÉ MOŽNOSTI APLIKACE V BIOMEDICÍNĚ ANEB STARÉHO PSA LZE (NĚKDY) NAUČIT I NOVÝM KOUSKŮM

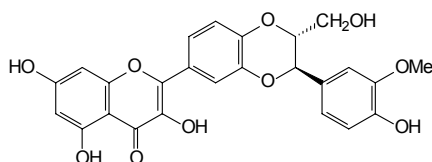
VLADIMÍR KŘEN^{a,b}, RADEK GAŽÁK^a, DANA WALTEROVÁ^b, JITKA ULRICOVÁ^b a VILÍM ŠIMÁNEK^b

^a Mikrobiologický ústav AV ČR, Centrum biokatalýzy a biotransformací, Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4, ^b Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta, Universita Palackého, Hněvotínská 3, 775 13 Olomouc
kren@biomed.cas.cz

Silymarin je směsí flavonolignanů a polyfenolů ze semen bodláku ostropestřec mariánský (*Silybum marianum*)¹. Flavonolignany silymarinu jsou užívány v léčení a podpůrné terapii jaterních onemocnění a některých onemocnění trávicího traktu od starověku do současnosti. V nedávné době byly přesně určeny struktury (stereochemie) silybinu A a B - hlavní komponenty silymarinu - a byly popsány některé zcela nové mechanismy účinku na signální procesy ve zdravých a nádorových buňkách².



Silybin B

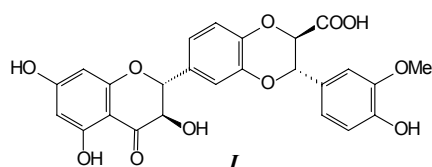
2 *R*, 3 *R*, 10 *S*, 11 *S*

2,3-Dehydrosilybin A

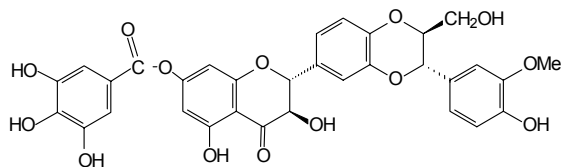
10 *R*, 11 *R*

Pomocí rozsáhlé série nových derivátů jsme upřesnili mechanismus antioxidačního působení silybinu a určili tyto mechanismy u jeho farmakologicky významného derivátu 2,3-dehydrosilybinu v systémech *in vitro* a *ex vivo*. Byly též identifikovány některé produkty oxidativní oligomerizace těchto látek. Dále byla studována selektivní oxidace obou těchto flavonolignanů a připraveny nové deriváty – např. kyselina silybinová **I** – vyznačující se změněnými farmakodynamickými parametry³.

U jednoho z diastereomerů silybinu (silybin B) jsme nově popsali estrogenní účinky⁴. Dále byla série nových derivátů výše uvedených sloučenin testována jako inhibitory Pgp a MDR proteinů (multi-drug-resistance protein). Tato SAR studie určila strukturální požadavky derivatizace obou molekul pro optimální účinek na buněčné transportérové systémy a byla identifikována nová skupina látek (deriváty 2,3-dehydrosilybinu) s velmi nízkou toxicitou pro inhibici mnohonásobné lékové rezistence⁵.

**I**

Připravili jsme též hybridní antioxidanty na bázi silybinu s řádově vyššími antioxidačními účinky – např. galloyl silybin **II**.

**II**

Během nedávné doby byly uvedeny na trh ve spolupráci s průmyslovými partnery nové přípravky na bázi silymarinu s výhodnějšími a/nebo novými účinky. V současné době je

vyvíjen nový preparát na bázi 2,3-dehydrosilybinu pro dermatologické aplikace.

Silybin a některé jeho nové deriváty mají též vysoký potenciál jako podpůrné léčivo při terapii některých nádorových onemocnění (např. rakovina prostaty), což je založeno na nově popsaných mechanismech působení².

LITERATURA

1. Šimánek V., Křen V., Ulrichová J., Vičar J., Cvak L.: *Hepatology* 32, 442 (2000).
2. Křen V., Walterová D.: *Biomed. Papers* 149, 29 (2005).
3. Gažák R., Svobodová A., Psotová J., Sedmera P., Příkrylová V., Walterová D., Křen V.: *Bioorg. Med. Chem.* 12, 5677 (2004).
4. Plíšková M., Vondráček J., Křen V., Gažák R., Sedmera P., Walterová D., Psotová J., Šimánek V., Machala M.: *Toxicology* 215, 80 (2005).
5. Džubák P., Hajdúch M., Gažák R., Svobodová A., Psotová J., Walterová D., Sedmera P., Křen V.: *Bioorg. Med. Chem.* 14, 3793 (2006).

PL 4

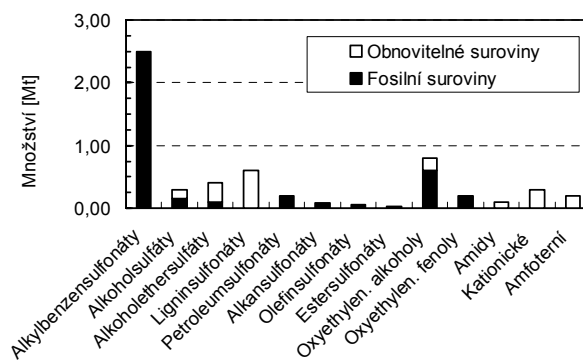
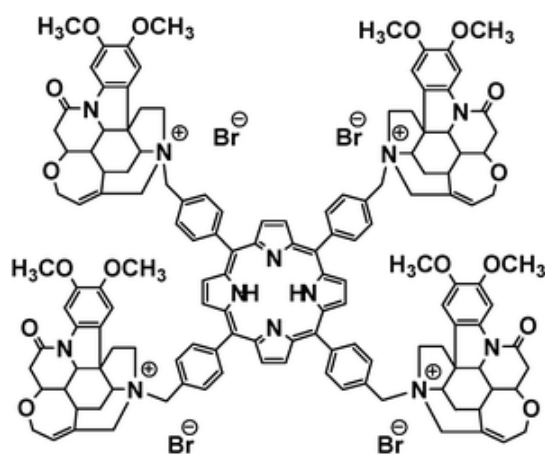
OPTICAL SENSING SYSTEM FOR ATP USING PORPHYRIN-ALKALOID CONJUGATES

ZDENĚK KEJÍK^a, KAMIL ZÁRUBA^a, DAVID MICHALÍK^a, JIŘÍ ŠEBEK^{ab}, JURAJ DIAN^c, STATIS PATARIDIS^a, KAREL VOLKA^a, and VLADIMÍR KRÁL^{ab}

^a Institute of Chemical Technology Prague, Technická 5, Prague 6, 166 28 Prague, ^b Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, Flemingovo n. 2, 166 10 Prague 6, ^c Charles University Prague, Department of Chemical Physics and Optics, Ke Karlovu 3, 121 16 Prague 1
kralv@vscht.cz

The sensing of ATP has received considerable attention in recent years as ATP serves as the primary energy currency of the cell. ATP depletion is a central process in pathogenesis, in particular ischemia, Parkinson's disease, hypoxia and hypoglycemia. ATP plays important roles in sensory transduction acting as a link from non-neural to neural cells. Overabundance of ATP in blood can lead to circulatory shock.

The tetrabrucin-porphyrin selector, which we describe here as a sensor for ATP, fulfills the condition of multiple binding modes leading to selectivity for ATP under physiological conditions. Our design is based on a combination of aromatic π - π stacking (porphyrin macrocycle and/or peripheral phenyl ring moiety with adenosine) and sufficient positive charge leading to charge neutralization of the receptor-ATP complex. A porphyrin core enhances the interaction of porphyrin with ATP by the binding of hydroxyl groups. Moreover, the use of a porphyrin as an excellent signaling unit (chromophore and fluorophore) connected to four binding sites represents a unique selector structure. The calculated values of the stability constants of 1:1 complexes of porphyrin and nucleotides were 64 000, 6700, and 2400 for ATP, ADP, and AMP, respectively (nonlinear re-



Obr. 2. Výroba jednotlivých typů tenzidů

gression of measured data pointed to the creation of a 1:1 complex for each analyte used). The estimated values afford evidence for the good selectivity of sensor towards ATP.

The financial support from the Ministry of Education of the Czech Republic MSM 6046137307 and LC512, the Grant Agency of Czech Republic (grants no. 203/03/0900 and 203/06/1038), and European Union project (CIDNA NMP4-CT-2003-505669) is gratefully acknowledged.

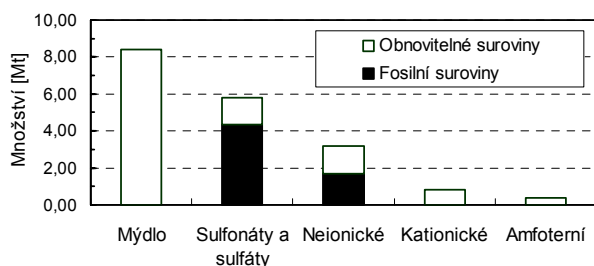
PL 5 TENZIDY

JAN ŠMIDRKAL a VLADIMÍR FILIP

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

Pokud je na vývoji chemie a technologie tenzidů v posledních letech něco charakteristické, tak je to změna surovinové základny, je to přechod z fosilních surovin na suroviny obnovitelné a to zejména na suroviny rostlinného původu.

Na obr. 1 je znázorněna světová výroba tenzidů podle typů a je vidět, že kromě mýdla se ostatní tenzidy vyrábějí převážně z fosilní suroviny (ropy). Téměř 3/4 výroby sulfonátů a sulfátů vyráběných z fosilních surovin tvoří natriumdo-

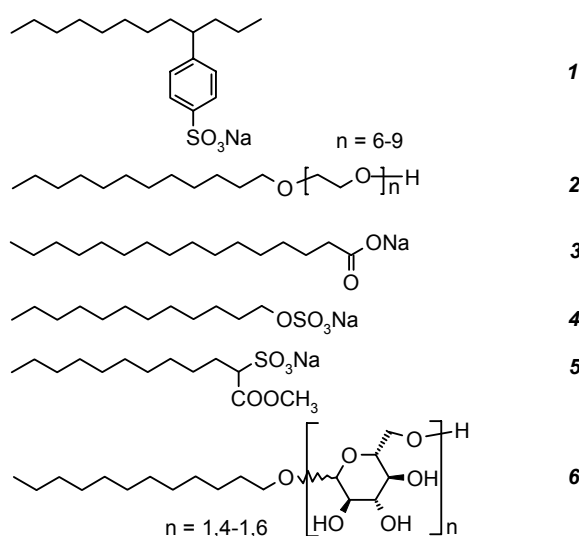


Obr. 1. Světová výroba tenzidů podle typů (rok 2000)

decyl-benzensulfonát. (1), který stále zůstává, hlavním tenzidem v práškových pracích prostředcích. V poslední době jeho množství v pracích prostředcích klesá a naopak roste obsah oxyethylenovaných mastných alkoholů (2), původem z ropy a částečně z kokosového oleje (Malajsie). Třetím základním tenzidem v práškových pracích prostředcích je sodné mýdlo (3).

Z obr. 2 je zřejmé, jak dominantní postavení má mezi tenzidy (1), druhé místo co do množství zaujímají oxyethylenované mastné alkoholy (2).

Natriumdodecylbenzensulfonát se patrně nestal majoritním tenzidem díky svým vlastnostem, ale spíše kvůli velice dobré dostupnosti a ceně. Jeho výroba je oproti ostatním sulfonátům a sulfátům, které připadají v úvahu jako tenzidy do práškových pracích prostředků (alkylsulfáty, alkamsulfonáty, olefin sulfonáty či estersulfonáty), technologicky méně náročná. Další výhodou (1) je, že jeho kyselá forma tj. kyselina dodecylbenzensulfonová, jejíž neutralizací se vyrábí, je na rozdíl od kyselých forem výše uvedených sulfátů a sulfonátů neomezeně stabilní, dá se snadno převážet a neutralizuje se až



na místě. Ostatní výše uvedené sulfáty a sulfonáty se převážejí ve formě sodných solí obvykle jako 30–40% pasty, což znamená vyšší přepravní náklady, kromě toho jsou tyto pasty vzhledem k obsahu vody korozivní a musí se obvykle při čerpání z cisterny rozeřhívat parou.

Z obnovitelných surovin jsou z uvedených sulfátů a sulfonátů běžné pouze alkylsulfáty (4) a estersulfonáty (5). Alkylsulfáty a estersulfonáty mají tu nevýhodu, že mohou v pracím roztoku hydrolyzovat a výroba estersulfonátů, které se vyrábějí sulfonací methylesterů vyšších mastných kyselin, je vzhledem k přítomnosti esterové skupiny technologicky mnohem náročnější než příprava ostatních sulfonátů.

Alternativou k (2) jsou alkylnopolylglukosidy (6), které jsou zcela na bázi obnovitelných surovin, jejich nevýhodou pro použití v práškových pracích prostředcích je jejich pěnovost a vyšší cena. Vzhledem k těmto vlastnostem se (6) používají v recepturách kosmetických mycích přípravků, tj. ve vlasových šamponech, tekutých mýdlech atp.

V budoucnosti lze zřejmě očekávat postupné snižování množství natriumdodecylbenzensulfonátu (1) v recepturách, ale zřejmě to bude proces pomalý, který však může být urychlen zvyšováním cen ropy, či legislativně, podobně jako se to stalo v České republice tohoto roku s fosfáty.

Tato práce vznikla za podpory MŠMT ČR: VZ 6046137305.

LITERATURA

1. Šmidrkal J.: Chem. Listy 93, 421 (1999).
2. Johansson I., Karsa D.: Surfactants derived from oils & fats; A Story of Continuous Development; 3rd Euro Fed Lipids Congress, Edinburgh, 5.-8.09.2004.
3. Sbírka zákonů ČR: Vyhláška 109/2005 Sb.

PL 6

SACHARIDY

JITKA MORAVCOVÁ

*Ústav chemie přírodních látek, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6
Jitka.Moravcova@vscht.cz*

Sacharidy jsou nejdostupnější organické sloučeniny z obnovitelných zdrojů, a proto byly a stále jsou pokládány za perspektivní náhradu surovin z fosilních zdrojů. Jsou důležitou složkou naší potravy a v biologických systémech byly sacharidy po řadu let považovány pouze za stavební jednotky, zásobárnu energie, nezbytné složky pojivových tkání a součástí biologicky důležitějších molekul. V tomto posledním případě se jako významná role sacharidů oceňovala jejich schopnost modifikovat fyzikálně-chemické vlastnosti molekul, dodávat jim rozpustnost ve vodě či ovlivňovat prostorové uspořádání molekul pomocí sítí vodíkových vazeb, modulovat jejich biologickou aktivitu nebo stabilizovat jejich strukturu.

Zjištění, že rozpoznávání na buněčné úrovni je založeno na interakci sacharidového epitopu glykoproteinu nebo glykolipidu s proteinovým receptorem, vedlo k explozi zájmu o chemii sacharidů. Tak se sacharidy účastní adheze infekčních buněk na buňku hostitelskou, zrání a směřování leukocytů, interakci imunitního systému nebo tvorby a diferenciace

rakovinných buněk a jejich metastáz a dalších životně důležitých pochodů. Porozumění tomu, jakými mechanismy sacharidy při těchto dějích vystupují, je velice důležité, protože rozpoznávání je vždy první fází onemocnění a cílené zásahnout v tomto okamžiku je samozřejmě žádoucí. Obecně hledání inhibitorů tohoto děje sleduje dva základní motivy: aktivitu proti biosyntéze glykokonjugátů a nebo interferenci s glykokonjugáty v procesu rozpoznávání. Přes obrovské úsilí vědců jsou zatím pokroky v hledání léčiv a vakcín na bázi sacharidů poněkud problematické. Důvodů je několik. Prozatím chybí metodika porovnatelná se syntézou peptidů na pevném nosiči, modifikace polyfunkčních molekul jsou vždy obtížné a drahé a sacharidy obecně mají dosti nevhodné vlastnosti pro použití jako léčiva: jejich afinita k proteinům je nízká a podávané orálně jsou inaktivní, protože jsou hydrolyzovány snadno enzymy *in vivo*. Mohou být proto podávány pouze injekčně pro léčbu akutních symptomů, ale i tak mohou podléhat ataku glykosidas např. v séru. Z uvedených důvodů je často výhodné nahradit sacharidy látkami, které napodobují jejich strukturu a funkci v procesu rozpoznávání, ale které mají lepší stabilitu, selektivitu, afinitu a syntetickou dostupnost. Nicméně pro porozumění procesu rozpoznávání je definování role sacharidů velice důležité, a proto bádání většinou začíná u sacharidů s cílem definovat ty funkční skupiny, které jsou pro interakce s proteiny nejdůležitější. Zvláštní pozornost bude v přednášce věnována hledání inhibitorů galaktosyltransferas.

Ovšem manipulace s polyfunkčními a polárními molekulami, jakými sacharidy jsou, přináší s sebou řadu překážek, které musí organický chemik překonávat. V přednášce budou uvedeny i příklady běžných organických reakcí, které vedly k neočekávaným produktům, pokud byly použity pro modifikace sacharidů.

Práce je součástí řešení výzkumného záměru MŠMT 6046137305 a projektu GA ČR 203/04/0355.

PL 7

PŘÍKLADY POUŽITÍ ORGANICKÉ POLAROGRAFIE

PETR ZUMAN

*Department of Chemistry, Clarkson University, Potsdam,
136 99 – 5810 NY, USA
zumanp@clarkson.edu*

Polarografie, t.j. měření křivek intenzity proudu v závislosti na napětí za použití kapkové rtuťové elektrody, je metoda objevená r. 1923 profesorem Jaroslavem Heyrovským (Nobelova cena 1959). Tato metoda patřila v letech 1950–1970 mezi pět nejčastěji užívaných analytických metod. Díky rozvinutí chromatografických a dalších analytických metod je dnes k analýzám užívaná méně. Jsou však stále obory, v nichž je použití polarografie výhodné při řešení problémů aplikovaného i základního výzkumu. Jen z naší laboratoře a ze spolupracujících pracovišť je možné uvést řadu příkladů takového použití polarografie z poslední doby (cca sedmi let). Jsou to analýzy léčiv, xenobiotik v životním prostředí, dále výzkum některých heterogenních systémů, jako studium reakce žlučových kyselin s ionty Me^{2+} , sledování interakce

nitrosaminů či pesticidů s ligninem apod. V heterogenních směsích byl též studován původ huminových kyselin a alkalický rozklad ligninu.

Mezi řešení problémů základního výzkumu patří studium elektronové delokalizace v azinovém seskupení $>C=N-N=C<$,

diprotonace hydrazonů a oximů, vznik iminu jako reakčního meziprojektu, důkaz vzniku karbinolaminů, hydratace azomethinových vazeb a vazeb $C=O$ v aromatických dialdehydech.

**1L-01
VYUŽITÍ NETRADIČNÍCH ELEKTRODOVÝCH
MATERIÁLŮ PRO VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ
SUBMIKROMOLÁRNÍCH KONCENTRACÍ
VYBRANÝCH PESTICIDŮ**

**JIŘÍ BAREK, JAN FISCHER, KAREL ČÍŽEK
a KAROLINA PECKOVÁ**

*Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, 128 43 Praha 2
Barek@natur.cuni.cz*

Přednáška bude zaměřena na využití moderních elektroanalytických metod pro voltametrické či amperometrické stanovení submikromolárních koncentrací různých typů pesticidů v různých environmentálních vzorcích. Pozornost bude věnována využití tuhých amalgamových elektrod¹ a diamantových filmových elektrod² ke stanovení elektrochemicky redukovatelných herbicidů a uhlíkových pastových elektrod na bázi mikrokuliček ze skelného uhlíku³, diamantových filmových elektrod a klasických tuhých elektrod modifikovaných uhlíkovými filmy⁴ pro stanovení elektrochemicky oxidovatelných herbicidů. Budou diskutovány otázky související s elektrochemickou či chemickou předúpravou těchto elektrod. Bude popsáno i využití těchto elektrod ve spojení s předběžnou separací a prekoncentrací pomocí kapalinové extrakce či extrakce tuhými fází. Diskutováno bude i využití výše uvedených typů elektrod ve spojení s průtokovými metodami (průtoková injekční analýza či vysokoúčinná kapalinová chromatografie s elektrochemickou detekcí) v uspořádání „thin layer“ či „wall jet“.

JF děkuje za finanční podporu Grantové agentury Univerzity Karlovy (projekt 332/2005) a JB děkuje za finanční podporu MŠMT (projekt LC 06035).

LITERATURA

1. Yosypchuk B., Novotný L.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 32, 141 (2002).
2. Pecková K.: Ph.D. Thesis. Charles University, Faculty of Science, Prague 2006.
3. Berek J., Muck A., Wang J., Zima J.: *Sensors* 4, 47 (2004).
4. Yosypchuk B., Berek J., Fojta M.: *Electroanalysis*, v tisku.

**1L-02
VYUŽITÍ ELEKTROCHEMIE KE STUDIU ÚČINKŮ
SUPLEMENTOVANÉHO KREATINU NA LIDSKÝ
METABOLISMUS**

**TOMÁŠ NAVRÁTIL^a, MIROSLAV PETR^b, ZDEŇKA
ŠENHOLDOVÁ^c, KAMILA PŘISTOUPILOVÁ^d,
TOMÁŠ IVAN PŘISTOUPIL^d, MICHAEL HEYROVSKÝ^a,
DANIELA PELCLOVÁ^c a EVA KOHLÍKOVÁ^b**

^a Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AV ČR, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Česká republika, ^b Katedra

*fyzologie a biochemie, Fakulta tělesné výchovy a sportu, Karlova univerzita, José Martího, 162 52 Praha 6, ^c Klinika nemocí z povolání, 1. Lékařská fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Na Bojišti 1, 128 00 Praha 2, ^d Na Hřebenkách 19, 150 00 Praha 5
Navratil@jh-inst.cas.cz*

Právě v letošním roce konání olympiády je slyšet poměrně často slovo doping. Problém dopingů je především otázkou vymezení látek a metod, které s ohledem na úroveň poznání jejich účinku na sportovní výkon jsou ve sportu nežádoucí. Popis působení mnohých látek na organismus se mění podle prohlubujících se znalostí především subcelulárních struktur a jejich fyziologického významu. Elektrochemické metody (voltametrie aj.) se mohou do takovéto činnosti zapojit hned ve dvou směrech: jednak při analýze tělních tekutin, ve kterých mohou prokázat přítomnost nepovolených preparátů či jejich metabolitů, jednak při objasňování metabolických pochodů odehrávajících se po jejich aplikaci.

Mezi látky, jejichž metabolismus a možné dopady na lidský organismus nejsou přesně známy, patří exogenně suplementovaný kreatin, dusíkatá látka, jejímž hlavním úkolem je regenerace ATP. Zásahuje rovněž do energetického systému a do regulace nárazníkové kapacity svalových vláken, syntézy bílkovin a stabilizace membrán. Tato látka je suplementována především pro zlepšení energetického krytí organismu při fyzické zátěži, oddálení únavy a zlepšení následné regenerace. S tím jsou však spojeny některé otázky k objasnění, např.: Jak se liší individuální odpověď? Příčiny nárůstu tělesné hmotnosti? Změny v syntéze proteinů. Tedy: Jaké jsou důsledky kreatinové suplementace? Metabolismus kreatinu je sledován stanovením některých metabolitů: např. kyseliny thiodiglykolové, kreatinu a kreatininu v moči, homocysteinu, cholesterolu, kyseliny listové a močové, triacylglycerolů v krvi, aj. Bude prezentováno navržené schéma vstupu suplementovaného kreatinu do lidského metabolismu.

Tato práce vznikla za podpory projektu MPO ČR 1H-PK/42, výzkumnému záměru MSM 0021620807, grantu MSM č. 11510002 a IGA MZ ČR č. 8107-3/2004.

LITERATURA

1. Navrátil T., Petr M., Šenholdová Z., Přistoupilová K., Přistoupil T. I., Heyrovský M., Pelclová D., Kohlíková E.: *Physiol. Res.* 56, xxx (2007), v tisku.
2. Heyrovský M., Navrátil T., Šenholdová Z., Přistoupilová K., Přistoupil T. I., Petr M., Pelclová D., Kohlíková E.: *Collect. Czech. Chem. Commun.*, odesláno.

**1L-03
EXPERIMENTÁLNÍ DŮKAZ VZNIKU KARBINOL-
AMINU PŘI REAKCI BENZALDEHYDU
S HYDRAZINEM. ROVNOVÁHY A KINETIKA**

PETR ZUMAN a MELEK S. BAYMAK

*Department of Chemistry, Clarkson University, Potsdam, 136 99 – 5810 NY, USA.
zumanp@clarkson.edu*

Vznik karbinolaminů jako reakčních meziproductů při adicích aminů ke karbonylovým sloučeninám byl kvalitativně prokazován Jencksem na základě časové změny absorbance v oboru 250–270 nm a ze změny mechanismu při studiu vlivu substituentů. Kvantitativní stanovení jednotlivých složek ze spekter je zabráněno převahou absorpčních pásů individuálních komponent. Polarografie umožňuje současné stanovení výchozího benzaldehydu a vzniklého hydrazonu přímo v reakční směsi. Ze známé počáteční koncentrace benzaldehydu a součtu koncentrací benzaldehydu a hydrazonu v rovnováze nebo v průběhu reakce je možno stanovit kvantitativně koncentraci karbinolaminu. Ze stanovení rovnovážné koncentrace karbinolaminu v závislosti na pH bylo prokázáno, že stabilita karbinolaminu je závislá na dvou acidobazických rovnováhách. Byla též sledována závislost kinetiky vzniku karbinolaminu a jeho dehydratace na pH.

1L-04 ELEKTRODY MODIFIKOVANÉ JÍLOVÝMI MINERÁLY

ZUZANA NAVRÁTILOVÁ^{a,b} a LENKA VACULÍKOVÁ^b

^aDepartment of Chemistry, Faculty of Sciences, University of Ostrava, 30. dubna 22, Ostrava, 701 03, ^bInstitute of Geonics, CAS, Studentská 1768, Ostrava 708 08
zuzana.navratilova@osu.cz

Oblast elektrochemie, kterou lze nazvat „jílové elektrody“, se rozvinula na základě prvních prací o elektrodách modifikovaných jílovými minerály v počátcích 80. let minulého století. Tenká vrstva jílového minerálu nemá výrazné izolační vlastnosti a na takto pokryté elektrodě nadále probíhá přenos náboje¹. Je možné tedy i na elektrodě pokryté filmem jílového minerálu studovat elektrodové procesy a povrchy elektrod. Pomocí běžných elektrochemických technik lze rovněž studovat transport náboje vrstvou, sorpční a iontově výměnné procesy ve struktuře jílových minerálů^{2,3}. Tyto studie byly prováděny téměř výhradně na filmových jílových elektrodách.

Akumulace elektroaktivních látek do jílového minerálu lze úspěšně využít v elektroanalýze⁴. K tomuto účelu byly vyvíjeny a připravovány uhlíkové pastové elektrody modifikované jílovými minerály. Výjimečně byly modifikované uhlíkové pasty využity ke studiu iontové výměny nebo sorpce, případně ke studiu vlivů organických nebo huminových látek na tyto procesy.

Elektrody modifikované jílovými minerály lze použít jako podklad pro tvorbu kovových filmů pro rozpouštěcí anodickou voltametrii. Elektroda modifikovaná montmorillonitem a pokrytá filmem rtuť poskytuje možnost kombinovat sorpci stanovovaného kovu do montmorillonitu a elektrodepozici do filmu Hg (cit.⁵). Elektrodepozice rtuť na povrch elektrody byla prováděna *in situ* v roztoku kovů i předběžnou depozicí. V případě předběžné depozice rtuť lze použít bezproudovou sorpci kovů a jejich následnou detekci rozpouštěcí anodickou voltametrii.

Dosavadní výsledky potvrzují možnost využití takto připravené elektrody pro stanovení kovů s výhodou eliminace matrice vzorku. Předpokládá se i využití této elektrody ke studiu sorpčních vlastností jílových minerálů.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 205/05/0871.

LITERATURA

1. Ghosh P. K., Bard A. J.: *J. Am. Chem. Soc.* 105, 5691 (1983).
2. Macha S. M., Fitch A.: *Microchim. Acta* 128, 1 (1998).
3. Macha S., Baker S., Fitch A.: *CMS Workshop Lectures* 10, 1 (2002).
4. Navrátilová Z., Kula P.: *Electroanalysis* 15, 837 (2003).
5. Kula P., Navrátilová Z.: *Chem. Listy* 97, 860 (2003).

1L-05 STUDIE VLIVU GEOMETRIE ELEKTROD V CELE PRO PŘÍMOU ELEKTROCHEMICKOU DEZINFEKCI PITNÉ VODY NA CELKOVOU PROUDOVOU ÚČINNOST VÝVOJE AKTIVNÍHO CHLORU

ROMAN KODÝM^a, HENRY BERGMANN^b a KAREL BOUZEK^{a,*}

^aVysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav anorganické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6, ^bAnhalt University of Applied Sciences, Bernburger Str. 55, D-06366, Köthen/Germany
bouzekk@vscht.cz, roman.kodym@vscht.cz,
bergmann@et.hs-anhalt.de.

Princip elektrochemické dezinfekce pitné vody (DEWT – Direct Electrochemical Water Treatment) je založen na přímé elektrolyze zpracovávané vody. Tato metoda využívá přirozeného obsahu chloridů v pitné vodě. Na anodě dochází vlivem průchodu elektrického proudu ke vzniku chloru jako hlavního dezinfekčního činidla. Navzdory dlouholetému výzkumu nedoznala DEWT dosud širšího praktického uplatnění¹. Důvodem je především nízká porudová účinnost elektrolyzy vzhledem ke vzniku chloru. Hlavní faktory ovlivňující tuto veličinu představují koncentrace chloridů (v pitné vodě cca 100 mg dm⁻³) a uspořádání elektrod. Nezanedbatelné je rovněž riziko tvorby nežádoucích či dokonce zdraví škodlivých produktů, především pak ClO₂ (cit.²).

Cílem této práce bylo vytvořit matematický model pravoúhlé elektrolytické cely s deskovými elektrodami, popř. elektrodami vyrobenými z tahokovu, a pomocí výpočtu sekundárního rozložení proudových hustot vyhodnotit vliv geometrie elektrod a možných konstrukčních nepřesností na výslednou proudovou účinnost vývoje Cl₂. Kinetika elektrodových reakcí společně s vlivem anodické proudové hustoty a koncentrace chloridů na výtěžek vývoje Cl₂ byly pro modelovou pitnou vodu stanoveny experimentálně. Výsledný matematický model byl řešen metodou konečných prvků v programovém prostředí Femlab[®].

V první fázi výzkumu byla porovnána účinnost vlastní elektrolyzy při použití elektrod deskových a z tahokovu. Bylo zjištěno, že vzhledem k výskytu značných nerovnoměrností na hranách se tahokov jeví v porovnání s deskovými elektrodami jako nevýhodný. V dalším kroku se pozornost soustředila na vliv konstrukčních nepřesností, popř. úprav na průběh elektrolyzy. Mimo jiné bylo zjištěno, že negativní vliv hran na rovnoměrnost rozložení proudových hustot lze potlačit například jejich zaoblením. Další zrovnověnění lokálních neho-

mogenit může způsobit vývoj plynu. Matematický model zohledňující tvorbu plynu bude předmětem dalšího vývoje.

Tato práce vznikla za podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR, v rámci projektu CEZ: MSM6046137301.

LITERATURA

1. Bergmann H., Koparal S.: *Galvanotechnik* 95 (12), 3037 (2004).
2. Bergmann H., Koparal S.: *Electrochim. Acta* 50, 5218, (2005).

1L-06

AUTOMATIZACE ELEKTROCHEMICKÝCH MĚŘENÍ

TOMÁŠ NAVRÁTIL a BOGDAN YOSYPCHUK

*Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AV ČR, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Česká republika
Navratil@jh-inst.cas.cz*

Polarografie stejně jako voltametrie patří k metodám, ve kterých se Česká republika může pyšnit bohatou historií. Avšak současné užití těchto metod, ať již v oblasti vědecké, vzdělávací, ale hlavně praktické, již nevyznívá vůbec optimisticky. Hlavních příčin je hned několik: neopodstatněné obavy z toxicity kapalně rtuť, nedostatečná opora v legislativě a dále pak náročnost na kvalifikovanost obsluhy. Avšak jedním z největších nedostatků bránících většímu rozšíření uvedených metod do praktických laboratoří je relativně nízká produktivita práce. Poměrně značným přínosem v minulosti bylo zavedení počítačem řízených přístrojů (např.¹). Neujalo se ani připojení více pracovních stojanů k jednomu počítači. Bohužel, ani napojení karuselu či jiné techniky automatizace nejsou příliš rozšířené (např.²). Zavedení kompozitních³ a především pak pevných amalgamových elektrod (MeSAE)⁴ neobsahujících kapalnou rtuť, avšak zachovávajících její výhody (např. vysoké vodíkové přepětí), při možnosti elektrochemické obnovy jejich povrchu, otevřelo zcela nové možnosti, především pro biologické aplikace (modifikovatelnost povrchu).

Proto byl vyvinut počítačem řízený multikanálový přístroj, který umožňuje napojení až 8 stejných nebo různých čidel (amalgamových, tak kompozitních, screen printed či jiných). Vzorek na každém čidle může být analyzován zcela nezávisle, různou technikou (voltametricky, chronopotenciometricky či potenciometrickým stripingem), s různými parametry, rozlišením, v 2- či 3-elektrodovém zapojení atd., vyhodnocení může být prováděno metodou standardního přídatku nebo kalibrační křivky, podle výšky nebo plochy píku. V příspěvku budou prezentovány první výsledky získané tímto přístrojem. Výsledky byly získány jak při sekvenčním proměřování osmi různých vzorků osmi stejnými amalgamovými elektrodami, tak při užití sdruženého čidla o objemu 50 μL a průměru 0,8 cm, na němž bylo umístěno 8 různých měrných elektrod (o průměru 0,8 mm) (Au, Pt a grafitová elektroda a amalgamové: Ag-menisková, leštěná a filmová; Cu leštěná a menisková) a 1 pomocná Pt elektroda. Jako referentní byla použita amalgamová referentní elektroda. Díky 8 různým elektrodovým povrchům při napojení na 8 kanálový

přístroj může být proměřen komplexně vzorek „jedním stiskem tlačítka“.

Tato práce vznikla za podpory projektu MPO ČR IH-PK/42.

LITERATURA

1. Navrátil T., Novotný L.: *Chem. Listy* 90, 121 (1996).
2. Märkle W., Speiser B., Tittel C., Vollmer M.: *Electrochim. Acta* 50, 2753 (2005).
3. Navrátil T., Kopanica M.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 32, 153. (2002).
4. Yosypchuk B., Novotný L.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 32, 141 (2002).

1L-07

STUDIE ELEKTROCHEMICKÉ METHOXYLACE 4-METHYLANISOLU NA UHLÍKOVÉ ELEKTRODĚ

TOMÁŠ BYSTRONĚ^{a*}, KAREL BOUZEK^a a FRANÇOIS LAPICQUE^b

*^aÚstav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, Praha 6, 166 28, ČR, ^bLaboratoire des Sciences du Génie Chimique, CNRS-ENSIC, BP 451, F-54001 Nancy, France
tomas.bystron@vscht.cz*

4-Methoxybenzaldehyd (4-MBA) je důležitým mezi-produktem při syntéze polosyntetických antibiotik. 4-MBA může být syntetizován chemickou cestou. Tato syntéza však není příliš selektivní. Vhodnějším způsobem syntézy je anodická oxidace, při které může být dosaženo hodnoty selektivity blížící se 1. Tento způsob je založen na anodické methoxylaci 4-methylanisolu (4-MA). Meziproduktem oxidace je 4-methoxybenzylmethyl ether, který je dále methoxylován na 4-methoxybenzaldehyd dimethyl acetal (4-MBA DMA), jež posléze v kyselém prostředí podléhá hydrolyze a poskytuje 4-MBA.

Tato studie je součástí širšího projektu, jehož cílem je zvýšení efektivity procesu elektrochemické výroby 4-MBA. Inovace procesu spočívá ve využití mikrostrukturovaného reaktoru. V předkládané prezentaci jsou uvedeny výsledky studia mechanismu a kinetiky methoxylace 4-MA v prostředí methanolového roztoku s NaClO_4 jako základním elektrolytem. Výsledky experimentů budou následně využity jako vstupní data při návrhu a matematické optimalizaci designu nového mikrostrukturovaného reaktoru pro syntézu 4-MBA DMA.

Při experimentech bylo použito standardní tříelektrodové uspořádání s pracovní rotační diskovou elektrodou ze skelného uhlíku (GC). Jako protielektroda sloužil poplatinovaný Ti. Elektrodový potenciál byl měřen vzhledem k nasycené kalomelové elektrodě (SCE). Byla provedena korekce naměřených lineárních voltamogramů na ohmickou ztrátu potenciálu a na přítomnost paralelně probíhající reakce – oxidace methanolu. Na základě těchto dat byly vypočteny hodnoty Tafelových směrnic a rychlostních konstant pro jednotlivé reakce a hodnoty difuzních koeficientů 4-MBA a 4-MBA DMA. Z voltamogramů byly dále získány informace o mechanismu a reverzibilitě reakcí oxidace 4-MBA a 4-MBA DMA na GC elektrodovém povrchu.

1L-08**STUDIUM INTRAMOLEKULÁRNÍCH ELEKTRO-NICKÝCH INTERAKCÍ A DISTRIBUCE ELEKTRONŮ POMOCÍ „REDOXNÍCH SOND“ NA BÁZI FEROCENU****JIŘÍ LUDVÍK^a a PETR ŠTĚPNIČKA^b**^aÚstav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AV ČR, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, ^bKatedra anorganické chemie PrF UK, Albertov 6, 128 40 Praha 2
ludvik@jh-inst.cas.cz, stepnic@natur.cuni.cz

Mnoho organických nebo organometalických sloučenin (včetně polynukleárních komplexů, supramolekulárních systémů a molekul v biologických systémech) obsahuje dvě či více redox center. I když jednotlivé části molekuly mají své specifické elektronové vlastnosti, jejich intramolekulární interakce doprovázená změnou rozložení elektronové hustoty a navíc ovlivněná substitucí je rozhodujícím faktorem pro chemické vlastnosti takovéto molekuly.

Vhodné elektrochemické vlastnosti (reverzibilita a stabilita) ferocenových derivátů umožňují jejich použití jako tzv. „redoxní“ nebo „elektrochemické sondy“ např. při sledování míry vzájemné interakce různých částí molekuly, při lokalizaci oxidačního a redukčního centra, při studiu rozložení elektronové hustoty v molekule či při zjišťování míry elektronové delokalizace podél můstku spojujícího redox centra nebo při určování míry aromaticity u heterocyklů.

Bylo zjištěno, že elektrochemická oxidace P^{3+} na P^{5+} u hybridních fosfinových ligandů obsahujících ferocen probíhá prostřednictvím redoxního systému Fc/Fc^+ intramolekulárním elektronovým přenosem¹. Koordinace fosforového atomu u těchto ligandů zabrání oxidaci a současně blokuje elektronovou interakci mezi ferocenem a atomem kovu². V případě aminokarbenových komplexů s fosfinoferocenovým chelátujícím substituentem bylo zjištěno, že elektronická komunikace probíhá pouze přes karben³.

Ferrocenylalkyny jsou perspektivní stavební kameny např. pro tzv. molekulární dráty. A protože skupina $-C\equiv C-$ představuje vodivý můstek pro spojení redox center⁴, ferrocenylalkyny lze použít též jako reversibilní elektrochemické tzv. „redoxní sondy“ k experimentálnímu zjišťování rozložení elektronové hustoty v molekule: U biologicky aktivních derivátů purinu se předpokládalo, že pyrimidinová část molekuly je elektronově deficitní oproti imidazolovému kruhu. Pomocí ferrocenylalkynové redox sondy bylo experimentálně zjištěno, že je tomu naopak. Následné kvantově chemické výpočty pak tento poznatek potvrdily⁵.

Tento výzkum byl finančně podporován grantem GA ČR 203/04/0487, a je součástí širšího programu v rámci Výzkumného centra MŠMT číslo LC-510.

LITERATURA

1. Podlaha J., Štěpnička P., Ludvík J., Císařová I.: *Organometallics* 15, 543 (1996).
2. Lukešová L., Ludvík J., Císařová I., Štěpnička P.: *Coll. Czech. Chem. Commun.* 65, 1897 (2000).
3. Meca L., Dvořák D., Ludvík J., Císařová I., Štěpnička P.: *Organometallics* 23, 2541 (2004).
4. Štěpnička P., Trojan L., Kubišta J., Ludvík J.: *J. Organomet. Chem.* 637-639, 291 (2001).

5. Hocek M., Štěpnička P., Ludvík J., Císařová I., Votruba I., Řeha D., Hobza P.: *Chem. Eur. J.* 10, 2058 (2004).

1L-09**ELEKTROFORETICKÝ VÝZKUM POUŽITELNOSTI CYKLODEXTRINŮ PRO CHIRÁLNÍ SEPARACE NABITÝCH KLASTROVÝCH SLOUČENIN BORU****ALEŠ LANGAUF^{a,b}, HANA HORÁKOVÁ^{a,b} a RADIM VESPALEC^a**^aÚstav analytické chemie AV ČR, Veveří 97, 611 42 Brno, ^bKatedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Třída Svobody 8, 771 46 Olomouc
langauf@iach.cz

Klastrové sloučeniny boru (KSB) založené na třicentrových dvouelektronových vazbách jsou čistě syntetické. Obsahují čtyři a více atomů boru vázaných navzájem do trojrozměrného klastru, který na sobě nese další atomy nebo funkční skupiny. KSB jsou většinou hydrofobní a chirální. Jsou tak silnými kyselinami, že i v roztocích polárních organických rozpouštědel existují jen jako aniony. Mají-li *exo*-skeletální substituenty s bazickými skupinami, tvoří elektroforeticky nenabitě zwitterionty nebo kationty. Unikátnost struktury KSB je zvýrazněna sterickou aromaticitou vazebných elektronů klastru. Struktura KSB je příčinou jejich specifických vlastností, které jsou vždy příčinou praktického využívání vybraných sloučenin. Výzkum KSB je soustředěn na problematiku související se syntézou a identifikací nových klastrových sloučenin. Navazující studia, pokud existují, jsou příležitostná a zlomkovitá.

Problémy souvisejícími s využitím separačních technik k analýzám KSB se do roku 2002 zabývalo 17 časopiseckých sdělení. Z nich mimo jiné plyne, že kapalinová chromatografie s chemicky vázanými cyklodextriny je prakticky neschopná separovat stericky odlišné formy aniontových KSB, i když při chirálních separacích zwitteriontových sloučenin je velmi úspěšná. Chirálních separací aniontových KSB s β -cyklodextrinem jako selektorem se podařilo dosáhnout kapilární elektroforézou¹. Následný výzkum byl zaměřen na odstranění nedostatků těchto prvních separací aniontových KSB a na poznání aplikovatelnosti ostatních nativních cyklodextrinů. Ukázal, že elektroforetické chirální separace KSB s cyklodextriny vyžadují při fotometrické detekci jako rozpouštědlo vodné roztoky methanolu. Použitelné koncentrace methanolu jsou určeny zvoleným cyklodextrinem. Nejuniversálnější selektorem je β -cyklodextrin, γ -cyklodextrin je zcela nevhodný. Neobsahují-li separované sloučeniny *exo*-skeletální substituenty se slabě kyselými nebo slabě bazickými skupinami, není třeba základní elektrolyt pufovat. Společnou nevýhodou cyklodextrinů je jejich nestabilita v roztocích obsahujících vodu, která je známa ze separací organických iontů. Při chirálních separacích KSB je však její vliv mnohem výraznější. V závislosti na použitém cyklodextrinu a na složení vodně-organické fáze se může projevit již během jedné hodiny. Možným vysvětlením je nižší afinita KSB k cyklodextrinům než k jejich rozkladným produktům.

Vlastnosti a analytické chování KSB v roztocích se značně liší od vlastností a chování organických sloučenin a iontů. Poznatky získané s organickými sloučeninami a ionty i zákonitosti a vztahy z nich odvozené proto lze přenášet na KSB až po ověření jejich platnosti pro KSB.

Výzkum je podporován ústavním projektem Akademie věd České republiky AV0Z40310501 a grantem GA AV ČR A400310613.

LITERATURA

1. Slaviček V., Grüner B., Vespalec R.: J. Chromatogr., A 984, 121 (2003).

1L-10

ZESLABENÍ ULTRAFIALOVÉHO SVĚTLA ROZTOKY BIOLOGICKÝCH PUFRŮ

MIROSLAVA KRČMOVÁ^a a RADIM VESPALEC^b

^a Ústav fyzikální a spotřební chemie, Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno,

^b Ústav analytické chemie AV ČR, Veveří 97, 611 42 Brno
xkrcmova@fch.vutbr.cz; vespalec@iach.cz

Biologické pufrů jsou syntetické sloučeniny používané pro kontrolu a stabilizaci pH v rozmezí 5,5–11,4 (cit.^{1,2}). Tyto pufrů, které byly vyvinuty pro biochemické studie ve vodných roztocích, nejsou chemicky jednotnou skupinou sloučenin. S výjimkou několika málo pufrů s karboxylovou skupinou však mají jeden společný rys. Neobsahují chromofory, které absorbují UV světlo s vlnovou délkou od 200 nm. Struktura biologických pufrů² proto vede k očekávání, že jejich roztoky jsou od 200 nm pro jakékoliv světlo vždy transparentní. Fotometrická měření však ukázala, že toto očekávání je mylné³. Jak roztoky zwitterionových pufrů se sulfonovou skupinou, tak i roztoky bazických pufrů výrazně zeslabují procházející světelný paprsek, jehož vlnová délka je asi 240 nm a menší. S klesající vlnou délkou zeslabení paprsku výrazně roste⁴.

Zeslabení závisí také na pK_a rozpuštěného pufru a na pH jeho vodného roztoku. Např. roztoky zwitterionových pufrů se sulfoskupinou jsou transparentní jen tehdy, je-li pH jejich vodného roztoku alespoň o dvě jednotky nižší než pK_a rozpuštěného pufru. Při menším rozdílu $pH - pK_a$ roste zeslabení paprsku s rostoucím pH. Při $pH = pK_a$ zeslabení světelného paprsku o vlnové délce 200–210 nm, který prochází vrstvou roztoku 1 cm, obvykle odpovídá formální absorbanci kolem 2,5 jednotky, i když koncentrace pufru je pouze několik desítek milimolů. Při dalším zvyšování pH paprsek slábne až do $pH = pK_a + 2$. Roztok bazického pufru je transparentní v oblasti pH, v níž je pufr plně deprotonizován. Zeslabení paprsku lze vysvětlit rozptylem světla na agregátech chemické formy pufru, která nese elektroforetický náboj. Tento mechanismus zeslabení světelného paprsku přichází v úvahu jen, je-li velikost vznikajících agregátů alespoň srovnatelná s vlnovou délkou světelného paprsku. Vodivostní měření neprokázala tvorbu micel.

LITERATURA

1. Sigma-Aldrich: *Katalog čistých chemikálií 2000–2001 (Česká republika)*.
http://www.sigmaaldrich.com/Area_of_Interest/Biochemicals/Buffer_Explorer/Key_Resources/Buffer_Reference_Center.html#pH, staženo 29. dubna 2006.
2. Sigma-Aldrich:
<http://www.sigmaaldrich.com/catalog/search/TablePage/15077099>, staženo 29. dubna 2006.
3. Vespalec R., Vlčková M., Horáková H.: J. Chromatogr., A 1051, 75 (2004).
4. Krčmová M., Vespalec R.: Chem. Listy. 99, 587 (2005).

1L-11

CARBON NANOTUBES, GOLD NANOPARTICLES AND NANOHYBRIDS BASED DNA BIOSENSORS

RENÁTA OVÁDEKOVÁ* and JÁN LABUDA

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia

renata.ovadekova@stuba.sk

Electrochemical sensors are playing a growing role in various fields where an accurate, low cost, fast, on-line measuring system is required. Improvement of existing systems and the design of new concept requires continual upgrading of all steps of the electroanalytical process. The use of electrochemical biosensors is great importance in electroanalysis. Conducting composites and biocomposites based on carbon electrode or gold electrode mixed with multi-walled carbon nanotubes (MWNTs), gold nanoparticles (GNPs), nanohybrids (MWNTs/GNPs) and biological materials (e.g. DNA) are interesting alternatives for the construction of electrochemical biosensors.

MWNTs can be considered as a collection of concentric single-walled carbon nanotubes with different diameters. Special properties of carbon nanotubes are chemical reactivity, electrical conductivity, optical activity and mechanical strength. So far these properties have essentially enabled the MWNTs very useful for practical applications such as development of nanodevices and sensors. Nanoparticles of metals have been the subject of intense investigation due to their novel material properties. Gold nanoparticles display electronic, chemical and physical properties that may be employed in optical and electronic devices, catalysis and sensor technology. In the biological sciences the affinity of gold nanoparticles for DNA is used. The use of nanohybrid nanoparticles (MWNTs/GNPs) is very important for sensitivity enhancement.

The aim of this work is to prepare new DNA biosensors based on carbon nanotubes, gold nanoparticles and nanohybrids. Calf-thymus DNA was adsorbed on the MWNTs, GNPs or MWNTs/GNPs modified electrodes. The interaction between DNA and its redox indicator, $[Co(phen)_3]^{3+}$, studied by using differential pulse voltammetry shown an improvement in analytical parameters of the biosensors as well as a possibility of new detection ways.

The work was supported by the Research and Development Assistance Agency under the contract No. APVT-20-015904.

IL-12**TVORBA KOVOVÝCH NANOVRSTEV –
TECHNIKA UPD****OLDŘICH FISCHER a EVA FISCHEROVÁ**

Brno 613 00, Břenkova 25
ofischer@quick.cz

Upd – underpotential deposition - je vylučování kovů při potenciálech pozitivnějších než jsou jejich rovnovážné potenciály v daném prostředí. Vznikají tenké (monoatomární) vrstvy elektronegativních kovů (např. Pb, Tl, Bi) na elektro-pozitivnějším materiálu (drahých kovů jako Ag, Au, Pt). Studium velké řady systémů¹ ukázalo, že v případě polykrystalických substrátů lze korelovat *upd* posun potenciálů, ΔE_{upd} , s rozdílem výstupní práce elektronu z kovového podkladu (substrátu) Φ_S a tvořící se nanovrstvy (adsorbátu) Φ_A . Přibližně platí: $\Delta E_{\text{upd}} = 0,5 (\Phi_S - \Phi_A)$. Při respektování udávaných hodnot výstupní práce elektronů (viz² kap. 8) jsou v souladu s tímto aproximativním vztahem vysoké hodnoty ΔE_{upd} (1V a více) při vylučování alkalických kovů (lithia) na polykrystalické mědi, stříbrě a zlatě (viz³). V případě kombinace jiných substrátů a adsorbátů platí tato rovnice jen přibližně. Jednoznačné výsledky umožňuje elektrolyza na monokrystalech.

Spektrální metody a metoda STM při skenování vzniklých monovrstev dokazují, že se jedná o velmi uspořádané struktury. Předpokládá se, že vylučování elektronegativnějšího kovu na elektro-pozitivnějším podkladu umožňuje malá hodnota Gibbsovy energie vazby mezi adsorbátem a podkladem ve srovnání s ΔG_v adsorbátu na podkladu stejného složení. Např. vazebná energie atomů Pb na Ag je menší než energie vazby Pb–Pb. Použití monokrystalického substrátu umožňuje také určit rozsah pokrytí substrátu (stupeň pokrytí Θ) adsorbátem. Podle novější formulace⁴ je posun potenciálu *upd* dán rozdílem potenciálu elektrody tvořené kovem A a potenciálem elektrody tvořené substrátem S částečně pokrytým adsorbátem A ve společném elektrolytu obsahujícím ionty A^{z+} v dostatečné koncentraci. Hodnota ΔE_{upd} je dána rozdílem potenciálů kovu A na „mateřském“ substrátu A a téhož kovu na substrátu S při stupni pokrytí Θ .

Teorie vylučování kovů při pozitivnějších potenciálech než jsou standardní používá nejen termodynamické principy, ale i výpočty elektronových hustot na povrchu substrátů (DF) a termodynamickou statistiku pro rozložení adsorbátu na povrchu substrátu. Tvorba kódepozitů dvou nebo více kovů na jednom podkladu⁵ je lákavou aplikací pro praxi. Důležité je i zjištění katalytické aktivity vznikajících nanovrstev. Např. elektrooxidace glukosy v alkalickém vodném roztoku na monokrystalech zlata⁶ zčásti pokrytých různými adsorbáty (Ag, Cu, Cd, Ru).

LITERATURA

1. Bockris J. O' M. a j., v knize: *Modern Electrochemistry 2A*, 2. vyd. kap. Fundamental Electrodeics.
2. Fawcett W. R., v knize: *Liquids, Solutions and Interfaces*, kap. 8 a 10. Oxford Uni Press, 2004.
3. Budewski E. a j., v knize: *Electrochemical Phase Formation and Growth*, kap. 6. Wiley Ed., 1996.

4. Leiva E.: *Electrochim. Acta* 41, 2185 (1996).
5. Staikov G. a j.: *Electrochim. Acta* 39, 1019 (1994).
6. Aoun S.B. a j.: *J. Electroanal. Chem.* 567, 185 (2004).

IL-13**PREPARATION OF TiO₂ THIN FILMS USING SOL-GEL METHODS AND STUDY OF THEIR PHOTOCATALYTIC, HYDROPHILIC AND OPTICAL PROPERTIES****JANA CHOVANCOVÁ, CHANTAL GUILLARD, ERIC PUZENAT and MICHAL VESELÝ**

Institute of Physical and Applied Chemistry, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118, 612 00 Brno

*Laboratoire d'Application de la Chimie à l'Environnement (LACE), Université Claudie Bernard Lyon1, 43 bd du 11 nov. 1918, Bât Raulin, 69622 Villeurbanne Cedex, France
jana.chovancova@fch.vutbr.cz*

Nowadays, a great part of research in the field of titanium dioxide thin films application is focused to the preparation of self-cleaning windows. Two important phenomena contribute to the main required properties of these films: photocatalytic activity and superhydrophility.

Transparent TiO₂ layers were immobilised on pyrex plates by dip-coating using sol-gel methods with three different precursors: two organometallic (with acetic acid or acetylacetone) and one inorganic («Ti₈O₁₂»).

The thickness of prepared films was measured by ellipsometry. An excellent repeatability of coating method was observed. This measurement showed that the thickness of four TiO₂ layers is equal to twice the thickness of two layers. The index of refraction was determined as well. The layers prepared from inorganic precursor are thinner, more dense and they have a higher refractive index than layers from organometallic sol.

A solution of malic acid was chosen as a model compound for study of the photocatalytic activity. Malic acid is present as a product of partial oxidation in biomass and also of other different process of degradation^{1,2}. Kinetic parameters of malic acid degradation were calculated from HPLC analysis of reaction solution. They correspond to Langmuir-Hinshelwood model of kinetic behavior. It was observed, that the reaction rate constant depends only on the layer thickness in the case of precursor with acetyl acetone (ACAC) and for inorganic precursor, too. On the other hand, the absorption constants depend only on the type of precursor. It was found, that the experimental values of reaction rate correspond well with theoretical ones. The curves of reaction rate dependence on irradiation time are very close for precursor with ACAC and Ti₈O₁₂. For the layers of precursor with acetic acid (AA), the concentration of saturation wasn't observed even for malic acid reaction solution of 400 ppm.

Photoinduced hydrophilic properties were evaluated by water droplet contact angle measurements. Before UV irradiation, the layers from inorganic precursor exhibited higher contact angles (about 50°) compared with organometallic precursors (about 35°). After 30 minutes of irradiation, the

contact angle values decreased to approximately 10° for all types of precursor.

To characterize optical properties, the UV-VIS absorption spectra of each TiO_2 sample were taken and the average UV absorption was calculated. The absorption at λ_{max} corresponds to anatase phase. It was revealed, that there is a shift of λ_{max} value to higher wavelength and also increase in the absorbance with increasing number of TiO_2 layer.

It was established, that smaller photoactivity, smaller value of average UV absorption and smaller hydrophilicity of layers prepared from inorganic precursor are a consequence of their smaller thickness, higher density and therefore smaller porosity compared to layers from organometallic precursors.

REFERENCES

- Guillard C., Debayle D., Gagnaire A., Jaffrezic H., Herrmann J.-M.: *Mat. Res. Bull.* 39, 1445 (2004).
- Herrmann J.-M., Tahiri H., Guillard C., Pichat P.: *Catalysis Today* 54(1), 131 (1999).

1L-14

PREDIKČNÍ POSTUP STANOVENÍ KRITICKÝCH VELIČIN UVNITŘ HOMOLOGICKÝCH ŘAD

PAVEL CHUCHVALEC a JOSEF P. NOVÁK

*Ústav fyzikální chemie VŠCHT Praha, Technická 1905, 166 28 Praha 6
pavel.chuchvalec@vscht.cz*

Kritické veličiny představují důležité fyzikálně chemické parametry, které slouží k charakterizaci látek, indikují potenciální průmyslové využití látky a jejichž znalost umožňuje prostřednictvím teoremu korespondujících stavů (TKS) stanovení jiných látkových vlastností. V současné době nejúplnější kompendium experimentálních dat kritických veličin vzniklo na základě projektu IUPAC 121/10/87 (a jeho pokračování 2000-026-1-100) s názvem Critical Compilation of Vapour Liquid Critical Properties¹.

Většina dosavadních experimentálních metodik využívala vizuální pozorování, existují však i postupy založené na měření fyzikálních parametrů (index lomu, permitivita, rychlost zvuku). Experimentální problémy spojené se stanovením kritických veličin vyšších členů homologických řad (nestabilita za podmínek kritického stavu) vedly ke snaze určit tyto údaje extrapolací z korelačních vztahů využívajících data stanovená pro nižší členy těchto řad. Nejznámější postupy vycházejí z korelací kritických dat v závislosti na velikosti molekuly. Naším cílem bylo ověřit některé vybrané metody a navrhnout postup vedoucí ke spolehlivější extrapolaci.

Teja² navrhl na základě experimentálních dat korelační rovnice pro stanovení kritických veličin normálních uhlovdíků a alkoholů. Hodnota kritického kompresibilitního faktoru vypočtená z takto určených kritických veličin však pro sloučení s počtem uhlíků 18 a více stoupá s rostoucím počtem uhlíků – což je v rozporu s teorií. Původní Tejův postup tedy selhává, pokud se použije jako extrapolací metoda. Příčina spočívá v nevhodně zvoleném tvaru korelačního vztahu pro kritickou teplotu a kritický tlak, zatímco vztah pro

kritický objem, založený na Lydersenově příspěvkové metodě je pro extrapolaci přijatelný. Byly testovány i jiné korelační metody pro určení kritických veličin uvnitř homologických řad normálních uhlovdíků a alkoholů. Velmi dobré výsledky vykazala kombinace, kdy pro výpočet kritické teploty a kritického tlaku byla použita metoda Elhassana³ a pro stanovení kritického objemu původní postup dle Teji. Takto navržený kombinovaný postup předpovídá správně průběh kritického kompresibilitního faktoru i pro uhlovdíky s počtem atomů 20 a více.

Autoři tímto vyjadřují poděkování za finanční podporu této práce v rámci grantu MŠMT č. 6046137307.

LITERATURA

- Ambrose D., Young C. L.: *J. Chem. Eng. Data* 40, 345 (1995).
- Teja A. S., Lee R. J., Rosenthal D. J., Anselme M.: *Fluid Phase Equilib.* 56, 153 (1990).
- Elhassan A. E., Barrufet M. A., Eubank P. T.: *Fluid Phase Equilib.* 78, 139 (1992).

1L-15

TEPELNÉ KAPACITY: AKTUALIZACE A DOPLNĚK DATABÁZE KRITICKY ZHODNOCENÝCH A DOPORUČENÝCH DAT PRO ČISTÉ KAPALINY

**MILAN ZÁBRANSKÝ^a, ZDEŇKA KOLSKÁ^b
a VLASTIMIL RŮŽIČKA^a**

*^aÚstav fyzikální chemie, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha, ^bKatedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita J. E. Purkyně, České mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem
milan.zabransky@vscht.cz, vlastimil.ruzicka@vscht.cz, kolska@sci.ujep.cz*

Tento projekt si klade za cíl aktualizovat a doplnit dvě publikace obsahující doporučená data kalorimetricky měřených tepelných kapacit pro čisté kapalně látky s teplotou tání nižší než 573 K (cit.^{1,2}).

V současné době byly databáze obsahující údaje pro téměř 2000 látek rozšířeny o nová data tepelných kapacit, jež byla publikována v literatuře převážně v letech 2000 až 2006. Jde o experimentální údaje pro cca 500 čistých kapalných látek z více jak 200 literárních zdrojů. Nově byla databáze rozšířena o skupinu iontových kapalin, jejichž kalorimetrická měření jsou v poslední době stále častěji v odborné literatuře publikována.

Všechna sebraná data byla kriticky zhodnocena a z nich byly vypočteny doporučené hodnoty tepelných kapacit. Výsledky uvedené formou parametrů teplotní závislosti tepelných kapacit budou součástí zprávy k projektu IUPAC a budou publikovány v časopise *Journal of Physical and Chemical Reference Data*.

Nově vložené údaje budou sloužit také k určení parametrů příspěvkových metod^{3,4} vyvinutých pro odhad tepelných kapacit.

Tato práce je součástí projektu IUPAC č. 2004-010-3-100

a výzkumného záměru číslo MSM6046137307.

LITERATURA

1. Zábranský M., Růžička V., Majer V., Domalski E. S.: *Heat Capacity of Liquids. Critical Review and Recommended Values*, J. Phys. Chem. Ref. Data Monograph No. 6, Vol. I and II. American Chemical Society, Washington 1996.
2. Zábranský M., Růžička V., Domalski E. S.: J. Phys. Chem. Ref. Data 30, 1199 (2001).
3. Růžička V. Jr., Domalski E. S.: J. Phys. Chem. Ref. Data 22, 597 (1993) a 22, 619 (1993).
4. Zábranský M., Růžička V.: J. Phys. Chem. Ref. Data 33, 1071 (2004).

1L-16

FÁZOVÉ PŘECHODY V KANDYTECH

**ANEŽKA TRILČOVÁ^a, IRENA IMRICHOVÁ^b,
ANDRIY SYNYTSYA^b, MARTIN MARYŠKA^c a JANA
ČOPIKOVÁ^b**

^aCentrální laboratoře – laboratoř termické analýzy, ^bÚstav chemie a technologie sacharidů, ^cÚstav skla a keramiky, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
trilcová@vscht.cz

Kandyty jsou nečokoládové cukrovinky, kterou jsou vyráběny odpařováním roztoků sacharosy a škrobového nebo maltosového sirupu. Cukerná hmota s nízkým obsahem vody 3 až 5 % je ochucována vhodnými organickými kyselinami, aromaty a barvena. Kandytová hmota je amorfni hmota a tudíž při výrobě a skladování nesmí docházet ke krystalizaci cukrů, které tvoří kandytovou hmotu. Na kvalitu kandytů, tj. senzorické vlastnosti a skladovatelnost, má vliv jejich složení, které pak ovlivňuje složení tuhé fáze, teplotu skelného přechodu a hygroskopicitu.

Pomocí modelových pokusů byl sledován vliv složení kandytů na jejich teplotu skelného přechodu a hygroskopicitu. Kandytové hmoty se navzájem lišily svým složením, použitým sirupem a obsahem tohoto sirupu. Kandyty byly připraveny bez kyselin, s kyselinou citronovou a s kyselinou mléčnou. Pomocí polarizační mikroskopie, rentgenové difrakce a diferenciální skenovací kalorimetrie byla prokazována nežádoucí přítomnost krystalické fáze v cukrovinkářských hmotách. Diferenciální skenovací kalorimetrie sloužila rovněž ke stanovení teploty skelného přechodu a teploty tání přítomných krystalů. Teplota skelného přechodu se v souladu s teoretickým výpočtem pohybovala kolem 60 °C a byla silně ovlivňována přítomností nežádoucích krystalů sacharosy. Nežádoucí přítomnost krystalů sacharosy byla prokázána u téměř všech komerčních vzorků z rozsáhlého souboru.

Tato práce vznikla za podpory projektu MSM 6046137305.

1L-17

KVANTITATIVNÍ VZTAHY MEZI STRUKTUROU A BIOLOGICKOU AKTIVITOU (QSAR) POLUTANTU POMOCÍ BINÁRNÍCH (FINGER PRINT) DESKRIPTORŮ

**JOSEF TRÖGL^{a,c} JAROSLAVA HÁLOVÁ^b,
GABRIELA KUNCOVÁ^a, LENKA KUBICOVÁ^d,
PATRIK PAŘÍK^c, KATEŘINA DEMNEROVÁ^c,
STEVEN RIPP^f a GARRY S. SAYLER^f**

^aÚstav chemických procesů AV ČR, Rozvojová 135, 165 02 Praha 6, ^bÚstav anorganické chemie AV ČR, 250 68 Řež u Prahy 1001, ^cÚstav biochemie a mikrobiologie, Vysoká škola chemicko-technologická Praha, Technická 3, 166 28 Praha 6, ^dÚstav anorganické a organické chemie Univerzity Karlovy, Fakulta farmacie v Hradci Králové, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, ^eKatedra organické chemie, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, ^fCenter for Environmental Biotechnology, 676 Dabney Hall, University of Tennessee Knoxville, Tennessee 37996, USA
troglj@email.cz, halova@iic.cas.cz

Byla testována sada cca 100 substituovaných naftalenů a derivátů salicylové kyseliny pro učení selektivity biosenzoru založeného na bioluminiscenci geneticky modifikované bakterie *Pseudomonas fluorescens* HK44 (cit.¹), jejíž biologická aktivita byla popsána pomocí dvou binárních deskriptorů (Svítlí a Tox). Pro potřeby metody GUHA byla struktura polutantů popsána pomocí tzv. binárních (fingerprint) deskriptorů, nabývajících pouze hodnot 0 resp. 1, podle toho, zda testovaná látka má nebo nemá daný strukturální motiv. Použitím free-ware GUHA+ (www.cs.cas.cz) byly generovány hypotézy o souvislosti mezi jejich strukturou a bioluminiscenční odezvou.

Tato práce vznikla za podpory grantu 104/05/2637 Grantové agentury ČR a AV ČR – výzkumný záměr AV0Z40320502.

LITERATURA

1. King J. M. H., Digrazia P. M., Applegate B., Burlage R., Sanseverino J., Dunbar P., Larimer F., Sayler G. S.: Science 249, 778 (1990).

1L-18

MODERNÉ METÓDY PRIAMEJ (BEZROZKLADOVEJ) ATÓMOVEJ SPEKTROMETRIE: JE MOŽNÝ NÁVRAT OBLÚKOVÝCH VÝBOJOV DO SPEKTROCHEMICKÝCH LABORATÓRIÍ POPRI ETV-ICP-OES ?

**KAROL FLÓRIÁN, JÜRGEN HASSLER, SILVIA
RUŽIČKOVÁ a VLADISLAVA BOKOVÁ**

Katedra chémie Hutnickej fakulty Technickej univerzity v Košiciach, Letná 9, SK-042 00 Košice, Slovensko
Karol.Florian@tuke.sk

Postupy priamej, čiže bezrozkladovej atómovej spek-

troskopie sú tak staré, ako samotná táto metóda. Známe nedostatky kombinácie budenia v oblúku jednosmerného prúdu so spektrografickou vyhodnocovacou technikou – jednej z významných metód analýzy práškových nevodivých materiálov ešte v 70-tych rokoch minulého storočia viedli k jej postupnému zániku, a to aj v dôsledku prudkého rozvoja metód založených na moderných plazmatických zdrojoch budenia, prednostne ICP a výkonných spektrometroch. Spektrochemici sa v tomto období orientovali na rýchle a spoľahlivé metódy roztokovej analýzy, s jednoduchou analytickou kalibráciou.

Rastúci záujem o spoľahlivú analýzu materiálov, ktoré svojimi vlastnosťami nie sú najvhodnejšie pre roztokové metódy, priniesol jednak vývoj najrozmanitejších¹ tandemových techník (oddelené vyparenie vzorky a následné budenie po transporte do budiaceho média), z ktorých sa najviac presadila kombinácia elektrotermického vyparenia a budenia v indučne viazanej plazme (ETV-ICP)^{2,3}, jednak k oživeniu starej techniky budenia v oblúku jednosmerného prúdu za moderných podmienok⁴. Keďže pri ETV-ICP je maximálne dosiahnuteľná teplota okolo 2800 °C, je potrebné pri analýze väčšiny materiálov z oblasti modernej keramiky použitie aditív, alebo špeciálnej pracovnej atmosféry. V oblúkovom výboji oproti tomu je dosiahnuteľná teplota okolo 4000 °C a žiadna úprava vzorky nie je nutná. Z tohto faktu vznikla aj myšlienka tandemovej techniky⁵, kde sa vzorka vyparí v špeciálnej oblúkovvej cele a potom budí v jednoduchom plazmovom zdroji v tvare U – podľa Marinkoviča⁶.

Prednáška je venovaná porovnaniu týchto troch spektrochemických techník na základe konkrétnych metodík.

Táto práca vznikla za podpory grantu APVV SR č. 20-009404, grantu VEGA č 1/3149/06, ako aj projektu DAAD č. 11/2005.

LITERATURA

1. Broekaert J. A. C.: *Fres. Z. Anal. Chem.* 332, 825(1989).
2. Kurfürst U. (ed.): *Solid Sample Analysis*. Springer Verlag, Berlin-Heidelberg (1998).
3. Záray Gy., Kántor T.: *Spectrochim. Acta* 50 B, 489 (1995).
4. Hassler J., Perzl P.R.: *GIT Lab. Fachz.* 40, 989 (1996).
5. Ruzicková S., Koller L., Metherny M.: *Transactions of Košice Universities* 2004, 59.
6. Marinković M, Antonijević V. G.: *Spectrochim. Acta* 56 B, 129 (1980).

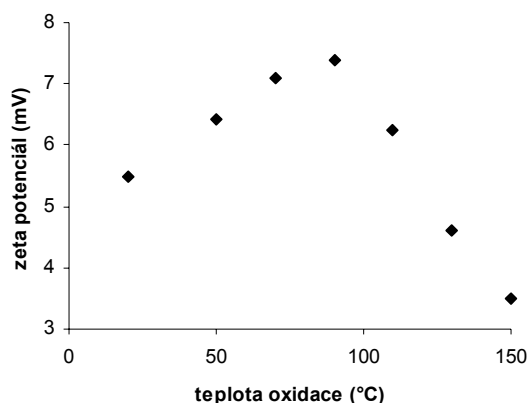
1L-19

ZMĚNY NA POVRCHU ČÁSTICE UHLÍ PŘI NÍZKOTEPLTNÍ OXIDACI

**VÁCLAV SLOVÁK, ROMAN MARŠÁLEK
a BOLESLAV TARABA**

*Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská Univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 33 Ostrava
vaclav.slovak@osu.cz*

Príspevek je zaměřen na nezávislé potvrzení zjištění, že při tzv. kritické teplotě samovznícení uhlí dochází ke změně



Obr 1. Závislost zeta potenciálu částice uhlí na teplotě jeho oxidace

chemismu interakce kyslíku s uhlím¹.

K experimentům bylo použito černé uhlí o zrnitosti < 0,06 mm. S uhlím byla nejprve provedena neizotermní termická analýza (TG/DTA) jeho oxidace v atmosféře se zvýšeným obsahem kyslíku (80 % O₂) v rozsahu teplot 30–170 °C s využitím metodiky korekce jiným vzorkem². Vyhodnocení Arrheniovských závislostí rychlosti změny hmotnosti i rychlosti uvolňování tepla ukázaly, že při kritické teplotě samovznícení (asi 110 °C) dochází ke změně kinetiky oxidace (zvýšení aktivační energie).

Pomocí izotermní termické analýzy byly připraveny vzorky oxidované po dobu 30 min při konstantní teplotě (50, 70, ..., 170 °C). I vyhodnocení rychlosti změny hmotnosti při izotermických experimentech ukázalo změnu kinetiky oxidace při teplotě 110 °C.

Pro připravené oxidované vzorky uhlí byl změněn zeta potenciál (ve vodné suspenzi pufované na pět různých hodnot pH v intervalu 1–4). Závislost průměrné hodnoty zeta potenciálu na teplotě oxidace ukazuje (obr. 1), že s rostoucí teplotou dochází nejprve ke zvýšení hodnoty tohoto parametru, ale od teploty 90–100 °C je zřetelný pokles zeta potenciálu. Tento pozorovaný zlom ve vlastnostech povrchu uhlí svědčí o tom, že při teplotách kolem 100 °C dochází ke změně povrchového náboje oxidovaného uhlí, což může být důsledkem změny v mechanismu interakce kyslíku s uhlím.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 105/06/0630.

LITERATURA

1. Taraba B., Peter R., Slovák V., Janek J.: *Uhlí – rudy – geologický průzkum* 53/12, 26 (2005).
2. Slovák V.: *ChemZi* 1/1, 152 (2005).

1L-20**ŠPEKTROSKOPIA A CHEMICKÁ VIZUALIZÁCIA
POVRCHOV BIOLOGICKÝCH VZORIEK**

**MONIKA ARANYOSIOVÁ^{a,b}, DUŠAN CHORVÁT^a,
ALŽBETA CHORVÁTOVÁ^c, CSABA BÍRÓ^d, MARTIN
KOPÁNI^e, JÁN JAKUBOVSKÝ^e, MIROSLAV
MICHÁLKA^a a DUŠAN VELIČ^{a,b}**

^a Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 01 Bratislava, Slovenská republika, ^b Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovenská republika, ^c Research Centre of Saine-Justine Hospital, Montreal, Canada, ^d Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovenská republika, ^e Lekárska fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovenská republika
aranyosiova@ilc.sk

Technika hmotnostnej spektrometrie sekundárných iónov, SIMS (secondary ion mass spectrometry), sa použila na analýzu biologických vzoriek ako je mozgové a srdcové tkanivo a srdcové bunky. Motiváciou je nájsť chemické rozdiely medzi zdravým a chorým tkanivom, resp. bunkami a predstaviť SIMS analýzu ako možný diagnostický nástroj na indikáciu chorôb.

Princípom SIMS analýzy je bombardovanie povrchu vzoriek vysoko energetickými iónmi. Z povrchu vzoriek sa emitujú atómy, klastre a molekuly vo forme sekundárných iónov. Analýza sa uskutočňuje na základe ich doby letu, podľa ktorej možno ióny s rovnakou kinetickou energiou separovať podľa ich hmotnosti¹. Experimenty sa uskutočnili na prístroji TOF-SIMS IV (ION-TOF, Muenster, Germany) a ako primárne ióny sa použili zlaté ióny Au⁺ a Au₃⁺ s energiou 25 keV. Výskum srdcových buniek a tkaniva bol zameraný na identifikáciu fosfolipidov, cholesterolu a iných biologicky relevantných molekúl a ich distribúciu na povrchu vzorky². V prípade mozgového tkaniva išlo o chemické rozlíšenie zdravého tkaniva a tkaniva postihnutého chorobou Behcet. Rozdiely sa našli najmä v obsahu a prítomnosti anorganických zlúčenín Al a Si³.

Technika SIMS má potenciál byť používaná aj pre medicínske účely na diagnostiku chorôb na základe nameraných chemických rozdielov vzoriek.

Práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/2447/05, VEGA 1/3577/06 a APVT-20-029804.

LITERATÚRA

1. Vickermann J., Briggs D.: *ToF-SIMS: Surface Analysis by Mass Spectrometry*. Surface Spectra & IM Publications, Chichester 2001.
2. Touboul D., Halgland F., Brunelle A., Kersting R., Tallarek E., Hagenhoff B., Laprevote O.: *Anal. Chem.* 76, 1550 (2004).
3. Dogan P., Dogan M., Klockenkamper R.: *Clin. Chem.* 39, 1037 (1993).

1L-21**MANAGEMENT JAKOSTI JAKO SOUČÁST VÝUKY
ANALYTICKÉ CHEMIE**

ZBYNĚK PLZÁK

Ústav anorganické chemie AV ČR, 250 68 Řež
plzak@ic.cas.cz

Analytické laboratoře jsou v současné době nuceny uplatňovat soubor opatření, kterými by dokumentovaly a prokazovaly správnost svých výsledků. Je tomu tak proto, že více než 60 % dat, na základě kterých jsou činěna rozhodnutí v obchodní sféře a v péči o životní prostředí a zdravotnictví, pochází z chemických analýz. Absolventi vysokoškolského studia by měli být vybaveni znalostmi, které jim pomohou se v praxi orientovat v této situaci, kdy laboratoře musí nejen produkovat správné výsledky, ale i být připraveny dokumentovat, jaká systematická opatření provádějí na zabezpečení kvality výsledků. Zkušenosti s úkolem vybavit absolventy specializace analytická chemie, chemie životního prostředí a specializace klinická a toxikologická analýza základními znalostmi a nástroji komplexního managementu jakosti (validace metod, akreditace, metrologická návaznost, odhady nejistot, systematická péče o instrumentaci a pod.) vedla k formulaci předmětu s tímto zaměřením, přednášeném autorem tohoto příspěvku v rozsahu 2 hodin týdně v rámci jednoho semestru na VŠCHT a UK. Optimalizace obsahu výuky dospěla k následující náplni, která je pro různé specializace modifikována jak zaměřením příkladů, tak hloubkou pojednání.

1. Koncepce, principy a nástroje managementu jakosti v analytické laboratoři
2. Národní a mezinárodní standardizace, zkoušení a certifikace výrobků, odpovědnost za výrobek
3. Systémy managementu jakosti - ISO 9000+, ISO 17025, ISO 15189, akreditace, OECD, Správná laboratorní praxe – jejich hlavní rysy, porovnání a uplatnění v analytické laboratoři
4. Český akreditační systém, zařazení do mezinárodního rámce, postup při akreditaci
5. Příručka jakosti, principy řízení dokumentace
6. Validace analytických postupů
7. Metrologie v chemii, legální metrologie, metrologická návaznost
8. Referenční materiály, jejich použití a příprava, databáze COMAR
9. Nejistoty měření, porovnání s limitními hodnotami
10. Způsoby odhadu nejistot měření u analytických stanovení
11. Řízení jakosti, statistická regulace, regulační diagramy
12. Mezilaboratorní studie, zkoušení způsobilosti, externí hodnocení kvality
13. Analytická instrumentace, validace, kvalifikace, validace softwaru
14. Úloha mezinárodních organizací v oblasti kvality analytických měření

1L-22**AKTUÁLNÍ ÚLOHY V ČINNOSTI DIVIZE ANALYTICKÉ CHEMIE EVROPSKÉ ASOCIACE PRO CHEMICKÉ A MOLEKULÁRNÍ VĚDY (DAC/ EUCHEMS – DIVISION OF ANALYTICAL CHEMISTRY OF THE EUROPEAN ASSOCIATION FOR MOLECULAR AND CHEMICAL SCIENCES) A DIVIZE ANALYTICKÉ CHEMIE IUPAC (ACD/IUPAC - ANALYTICAL CHEMISTRY DIVISION OF IUPAC)****JAN LABUDA^a a JIŘÍ BAREK^b**

^a Ústav analytickej chémie, Fakulta chemická a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, 812 37 Bratislava, ^b Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Albertov 6, 128 43 Praha 2
Barek@natur.cuni.cz

Cílem tohoto příspěvku je informovat české i slovenské účastníky sjezdu o aktivitách v názvu uvedených mezinárodních organizací v oblasti výuky analytické chemie, názvosloví, pořádání mezinárodních konferencí a koordinace mezinárodní spolupráce. DAC EuCheMS sdružuje zástupce více než 30 evropských chemických společností z oblasti analytické chemie a podílí se na organizaci řady konferencí, přípravě různých materiálů z oblasti analytické chemie a sladování výuky v této oblasti v rámci celé Evropy. Podrobnosti viz <http://www.dac-fecs.org/>.

Asi 1200 chemiků z celého světa se na volontierskom princípe podieľa na vedeckej práci organizácie International Union for Pure and Applied Chemistry, IUPAC, a to v rámci jej 8 divízií (vytvorených podľa chemických disciplín) a operačných výborov. Činnosti a novinkám IUPAC sa dvojmesačne venuje magazín Chemistry International. Divízia Analytickej Chémie, ACD (V), založená v r. 1949, katalyzuje interakcie medzi vedeckou komunitou a užívateľmi analytickej metodológie a údajov, medzinárodnými organizáciami (IAEA, OECD, WHO), akreditačnými orgánmi (ISO), orgánmi pre štandardizáciu (BIPM, NIST) a chemickými spoločnosťami. Bližšie viz <http://iupac.org/divisions/V/index.html>.

1L-23**VZTAH OBSAHU METALOTHIONEINU K PRŮBĚHU NÁDOROVÉHO ONEMOCNĚNÍ****ONDŘEJ BLAŠTÍK^a, MICHAL SVOBODA^a, HANA BINKOVÁ^b, ZUZANA HORÁKOVÁ^b, RICHARD SALZMAN^b, VOJTĚCH ADAM^{a,c}, DAVID POTĚŠIL^{a,c} a RENÉ KIZEK^a**

^a Ústav chemie a biochemie, AF Mendelovy zemědělské a lesnické univerzity v Brně, Zemědělská 1, 613 00 Brno,

^b Klinika otorinolaryngologie a chirurgie hlavy a krku, Fakultní nemocnice u sv. Anny v Brně, Pekařská 53, 656 91 Brno,

^c Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno
kizek@sci.muni.cz

Podle Světové zdravotnické organizace (WHO) je kaž-

dým rokem ve vyspělých zemích diagnostikováno asi 11 milionů případů onemocnění maligním nádorem. I v ČR byl vyhlášen program zaměřený na pokles výskytu zhoubných onemocnění, který se má, kromě jiného, zaměřit na zlepšení včasné diagnostiky. Nejnovější výzkumy naznačují, že existuje vztah mezi množstvím metalothioneinu a rychlostí rozvoje zhoubného nádoru. Metalothioneiny (MT) patří do skupiny intracelulárních, nízkomolekulárních na cystein bohatých proteinů o molekulové hmotnosti od 6–10 kDa (cit.^{1,2}). Cílem naší práce bylo objasnit, jaký vztah má hladina MT k průběhu nádorového onemocnění. U pacientů se zhoubnými nádory hlavy a krku není v současné době k dispozici žádný vhodný nádorový marker. Studovali jsme obsah metalothioneinu ve vzorcích plné krve a krevního séra u nemocných se zhoubnými nádory a zdravých dobrovolníků. Analýza byla provedena pomocí Brdičkovy reakce. Bylo analyzováno více jako 100 krevních sér a plné krve pacientů s různými druhy zhoubných nádorů (melanom, lymfoidní leukémie, zhoubný nádor prsu, plic, štítné žlázy, ledviny, jícnu a tlustého střeva, a nádory v oblasti hlavy a krku)^{3,4}. Naše výsledky ukazují, že hladina MT (od 1,5 do 3,5 $\mu\text{mol dm}^{-3}$) je u všech studovaných nádorových onemocněních zvýšená ve srovnání s kontrolním vzorkem (kolem 0,6 $\mu\text{mol dm}^{-3}$), v případě lymfoidní leukémie a zhoubného nádoru plic dokonce více jak pětkrát. Získané experimentální výsledky naznačují, že studium hladiny MT u onkologických pacientů je nejen zajímavé z hlediska obecného poznání, ale přináší i nové poznatky pro pochopení léčebné odpovědi.

Příspěvek vznikl za podpory grantu GA ČR 525/04/P132 a FRVŠ 699/F4a.

LITERATURA

1. Kizek R., Vacek J., Adam V., Vojtesek B.: Klin. Biochem. Metab. 12, 72 (2004).
2. Zelena J., Potesil D., Vacek J., Adam V., Hradecky J., Prusa R., Kizek R., Vojtesek B.: Klin. Onkol. 17, 190 (2004).
3. Petřelová J., Blastik O., Prusa R., Kukacka J., Mikelova R., Stiborova M., Vojtesek B., Adam V., Zitka O., Eckschlager T., Kizek R.: Klin. Onkol. 19, 58 (2006).
4. Petřelová J., Blastik O., Prusa R., Kukacka J., Potesil D., Mikelova R., Adam V., Zehnalek J., Kizek R.: Biomed. Papers 149, 485 (2005).

1L-24**PROCES VYTVÁŘENÍ REZISTENCE VŮČI PLATINOVÝM CYTOSTATIKŮM****ONDŘEJ BLAŠTÍK^a, MICHAL SVOBODA^a, HANA BINKOVÁ^b, ZUZANA HORÁKOVÁ^b, RICHARD SALZMAN^b, VOJTĚCH ADAM^{a,c} a RENÉ KIZEK^{a*}**

^a Ústav chemie a biochemie, Agronomická fakulta Mendelovy zemědělské a lesnické univerzity v Brně, Zemědělská 1,

613 00 Brno, ^b Klinika otorinolaryngologie a chirurgie hlavy a krku, Fakultní nemocnice u sv. Anny v Brně, Pekařská 53, 656 91 Brno, ^c Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno
kizek@sci.muni.cz

Z řady klinických studií je známo, že rezistence vůči cytostatikům je vážnou komplikací léčby nemocných se zhoubnými nádory. Rezistence nádorových buněk k cytostatikům vzniká různými mechanismy a celý proces je na úrovni buňky zcela jistě multifaktoriální. Obzvláště komplikovaná je terapie nádorového onemocnění v případech mnohočetné lékové rezistence (MDR; multidrug resistance). Naše práce se zaměřuje na studium úlohy metalothioneinu v procesu vzniku rezistence vůči protinádorovým léčivům především na bázi platiny. Byly použity neuroblastomové buněčné linie rezistentní a senzitivní k cisplatině. Linie jsme charakterizovali v závislosti na aktivitě intracelulárních esteraz a obsahu metalothioneinu. V experimentu byla testována detekce počtu živých buněk ve vzorcích pomocí sledování aktivity intracelulárních esteraz¹. Na základě známého počtu buněk, které byly homogenizovány v daném objemu, byly do reakční směsi pro stanovení intracelulárních esteraz vnášeny ekvivalenty počtu buněk. U senzitivních buněčných linií byla aktivita esteraz výrazně vyšší v porovnání s kulturou rezistentní buněčné linie. Detekovaná aktivita intracelulárních esteraz byla přímo úměrná počtu buněk a limit detekce se pohyboval asi kolem 600 buněk pro senzitivní neuroblastomové kultury a asi kolem 1000 buněk pro rezistentní buněčné kultury. Dále byla sledo-

vána změna hladiny metalothioneinu u těchto linií pomocí námi navrženého elektroanalytického stanovení². Z našich předešlých experimentálních prací je zřejmé, že interakce mezi platinovým léčivem a metalothioneinem je poměrně silná^{3,4}.

Příspěvek vznikl za podpory grantů RASO 8/2005, GA ČR 525/04/P132 a MSMT č.0021620813. Dále autoři děkují za pomoc při analýze esteraz Dr. Vítěčkovi, Dr. Petřekovi a prof. Eckschlagerovi za poskytnutí buněčných linií.

LITERATURA

1. Vítěcek J., Adam V., Petrek J., Babula P., Novotna P., Kizek R., Havel L.: Chem. Listy 99, 496 (2005).
2. Petrlova J., Blastik O., Prusa R., Kukacka J., Potesil D., Mikelova R., Adam V., Zehnalek J., Kizek R.: Biomed. Papers 149, 485 (2005).
3. Prusa R., Blastik O., Potesil D., Trnkova L., Zehnalek J., Adam V., Petrlova J., Jelen F., Kizek R.: Clin. Chem. 51, A56 (2005).
4. Prusa R., Blastik O., Kukacka J., Zehnalek J., Adam V., Petrlova J., Kizek R.: Toxicol. Lett. 158, S66 (2005).

1P-01**EXPLORATÓRNA ANALÝZA VÝBERU
SPEKTRÁLNYCH ČIAR TANDEMOVEJ METÓDY
KOMBINÁCIE ELEKTROTHERMICKEJ ATOMIZÁCIE
A BUDENIA V INDUKČNE VIAZANEJ PLAZME****VLADISLAVA BOKOVÁ^a, JÜRGEN HASSLER^b,
PETER BARTH^b, MIKULÁŠ MATHERNY^a
a KAROL FLÓRIÁN^a**^a *Katedra chémie, Hutnícka fakulta, Technická univerzita
v Košiciach, Letná 9, 042 00 Košice, Slovenská republika,*^b *Elektroschmelzwerk Ceramics GmbH & Co. KG, Ceradyne
Inc., P.O.Box 1526, 87405 Kempten, Germany
vladislava.bokova@tuke.sk*

Exploratórnej analýze výberu spektrálnych čiar sa podrobili výsledky rutinných kontrolných analýz keramikého štandardného materiálu bórnitridu tandemovou technikou ETV-ICP-OES. Analýzy boli vykonané v priemyselnom laboratóriu firmy ESK Ceramics GmbH & Co., Kempten, SRN, a uskutočnili sa za použitia spektrálneho zariadenia pozostávajúceho z automatického podávača vzoriek AWD-10/50, grafitovej piecky ETV 4000 a ICP spektrometra IRIS Intrepid II XSP. Kontroloval sa obsah znečisťujúcich prvkov (Al, Ca, Fe, Na, Si, Ti, Zr).

Z koncentračných hodnôt získaných opakovanými meraniami identickej vzorky v priebehu piatich mesiacov bol vytvorený súbor údajov, ktorý bol štatisticky vyhodnocovaný¹ programom QC Expert 2.5TM (Trilobyte)². Najskôr boli krabicovým grafom identifikované extrémne koncentračné hodnoty. Boli overené aj Q-Q grafom a následne vylúčené zo súboru dát. Q-Q graf sa opieral o diagnostiku normality rozdelenia intenzitných hodnôt a extrémnych bodov, ktoré v koncových hodnotách vybočujú z priamkového tvaru. Toto vylúčenie bolo kontrolované i diagramom rozptýlenia. Nakoniec bol redukovaný súbor komplexne štatisticky vyhodnotený. Ďalšia optimalizácia pôvodného súboru sa opierala o sledovanie identity aritmetického priemeru, mediánu, modusu a polosumu. Nakoniec bola hodnotená normalita a homogenita súboru.

Vylúčenie odľahlých hodnôt v prípade Al, Fe a Ti zlepšilo iba hodnoty RSD, ale významné zlepšenie ostatných základných hodnotiacich parametrov nenastalo. Na druhej strane v prípade Ca a Na vylúčenie viedlo k významnému zlepšeniu všetkých štatistických parametrov. V prípade Zr vylúčenie odľahlých hodnôt situáciu zhoršilo. Tento kuriózný prípad možno vysvetliť tým, že merania sa uskutočnili v oblasti hranice stanovenia zirkónu.

Táto práca vznikla za finančnej podpory grantového projektu VEGA č. 1/3149/06 ako aj projektu DAAD 11/2005.

LITERATÚRA

1. Meloun M., Militký J.: *Statistické zpracování experimentálních dat*. Ars magna, Praha 1996.
2. Kupka K.: *QC.ExpertTM Statistical software*. TriloByte, Pardubice 2002.

1P-02**VÝVOJ NOVEJ METÓDY NA PRIAMU ANALÝZU SiC
TECHNIKOU ETV-ICP-OES V PRIEMYSELNEJ
PRAXI****VLADISLAVA BOKOVÁ^a, JÜRGEN HASSLER^b,
PETER BARTH^b a KAROL FLÓRIÁN^a**^a *Katedra chémie, Hutnícka fakulta, Technická univerzita
v Košiciach, Letná 9, 042 00 Košice, Slovenská republika,*^b *Elektroschmelzwerk Ceramics GmbH & Co. KG, Ceradyne
Inc., P.O.Box 1526, 874 05 Kempten, Germany
vladislava.bokova@tuke.sk*

Keramiké materiály sú vďaka svojim vlastnostiam široko využívané v priemysle. Ich vlastnosti a špecifiká priemyselnej výroby (finančné a časové aspekty) však kladú vysoké nároky na spôsob analýzy týchto materiálov.

V priemyselnom laboratóriu firmy ESK Ceramics GmbH & Co., Kempten, preto vznikla potreba vývoja novej metódy na analýzu jedného z vyrábaných materiálov – SiC. V súčasnosti sa využíva technika DC-ARC-OES, ktorá poskytuje spoľahlivé výsledky, ale je časovo náročnejšia a nedá sa plne automatizovať na rozdiel od techniky ETV-ICP-OES, ktorá sa tu už úspešne využíva na analýzu materiálu BN a poskytuje vyššiu presnosť (RSD pre DC-ARC 5–15 %, RSD pre ETV-ICP 2–7 %).

Predbežné výskumy potvrdili možnosť stanovenia znečisťujúcich prvkov v SiC metódou ETV-ICP-OES a nasledujúcou úlohou bolo preveriť správnosť zvolených podmienok stanovenia.

Prvým krokom bola kontrola zvolených spektrálnych čiar žiadaných prvkov z hľadiska spektrálnych interferencií a správneho nastavenia meranej integračnej oblasti pík. V druhom kroku boli hodnotené rozdiely smerníc kalibračných priamok pri použití roztokových a tuhých štandardov v závislosti na zmene pôvodných experimentálnych podmienok (teploty vyparovania v grafitovej piecke, prietoku nosného a pomocného plynu, vzdialenosti medzi ústím „heating tube“ grafitovej piecky a transportnej trubice do ICP a teploty plazmy). Snahou bolo nájsť ideálne podmienky, pri ktorých by sa smernice zhodovali.

Výsledky ukázali, že pôvodné podmienky pre analýzu SiC a to výkon generátora plazmy 1150 W, prietok nosného plynu 0,385 l min⁻¹, prietok pomocného plynu 0,135 l min⁻¹, teplota elektrotermického vyparovania 2200 °C a vzdialenosť medzi ústím „heating tube“ grafitovej piecky a transportnou trubicou do ICP 0 mm ± 0,1 mm, boli najvyhovujúcejšie a rozdiely v smerniciach kalibračných priamok pre tuhé aj roztokové štandardy boli najmenšie.

Táto práca vznikla za finančnej podpory grantového projektu VEGA č. 1/3149/06 ako aj projektu DAAD 11/2005.

1P-03**STUDIE ELEKTROCHEMICKÉ METHOXYLACE
4-METHYLANISOLU V PROSTŘEDÍ METHANOLU
A 1-ETHYL-3-METHYLIMIDAZOLIUM
ETHYLSULFÁTU****TOMÁŠ BYSTRON^{*}** a **KAREL BOUZEK***Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5,
166 28 Praha 6**tomas.bystron@vscht.cz*

Elektrochemická syntéza představuje průmyslově etablovanou technologii výroby 4-methoxybenzaldehydu (4-MBA), důležitého meziprojektu při syntéze polosyntetických antibiotik. Vlastní syntéza je založena na anodické methoxylaci 4-methylanisolu (4-MA). Meziprojekt oxidace je 4-methoxybenzylmethyl ether, který je dále methoxylován na 4-methoxybenzaldehyd dimethyl acetal. Ten posléze v kyselém prostředí podléhá hydrolyze za vzniku 4-MBA.

V současnosti zavedená syntéza probíhá v prostředí methanolu představujícího jednu z reagujících komponent za použití KF jako nosného elektrolytu. Použití methanolu v sobě skrývá několik nevýhod. Mezi nejvýznamnější patří nákladná separace produktu ze syntézního roztoku a skutečnost, že methanol, který je přítomen v reakční směsi ve velkém přebytku, může podléhat nežádoucím elektrodoovým reakcím. Možné řešení tohoto problému představuje použití iontové kapaliny (IL) jako syntézního prostředí. IL je obecně označena pro sloučeniny iontového charakteru, jejichž teplota tání je nižší než 100 °C. IL jsou většinou tvořeny organickým kationtem a organickým nebo anorganickým aniontem. V poslední době roste zájem zejména o IL, které existují v kapalném stavu již za pokojové teploty (tzv. Room Temperature IL-RTIL) a jsou stabilní na vzduchu. Použití tohoto prostředí pro elektrochemickou syntézu v sobě skrývá několik výhod. IL mají dostatečnou iontovou vodivost a jejich použití tak obvykle vede ke snížení spotřeby elektrické energie, umožňuje dávkovat reakční složky ve stechiometrickém poměru a zvyšuje tak selektivitu reakce a především díky své charakteristické vlastnosti, tj. zanedbatelnému tlaku par nad hladinou, minimalizují náklady na separaci produktu. Zásadní nevýhoda použití IL spočívá v omezeném rozsahu elektrodoových potenciálů, ve kterém tyto látky zůstávají stabilní. Vzhledem k vysoké ceně těchto látek je nezbytná jejich dlouhodobá recyklace a případná postupná degradace v důsledku překročení potenciálových mezí stability by znamenala neúnosné provozní náklady procesu.

V rámci této práce byla provedena základní voltametrická studie anodické methoxylace 4-MA v prostředí methanolu s chloristanem lithným jako nosným elektrolytem. Paralelně byla charakterizována stejná anodová reakce v prostředí 1-ethyl-3-methylimidazolium ethylsulfátu (EMIM ES) jako zástupce RTIL. V rámci předkládané práce bude prezentováno vzájemné srovnání průběhu studované reakce v uvedených prostředích a vyhodnocení přínosu použití RTIL oproti klasickému rozpouštědлу.

1P-04**FLUORESCENCE HUMINOVÝCH KYSELIN
S OHLEDEM NA JEJICH SUPRAMOLEKULOVOU
STRUKTURU****HANA ČECHLOVSKÁ, NADĚŽDA FASUROVÁ, MI-
LOSLAV PEKAŘ a JIŘÍ KUČERÍK***Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova
118, 612 00 Brno**cechlovska@fch.vutbr.cz*

Tradiční pohled na strukturu huminových kyselin je založen na předpokladu, že se jedná o polydisperzní makromolekulární systém. Tento pohled byl a doposud také je základní premisou při tradičním vyhodnocování jejich fluorescenčních spekter. V poslední době jsou huminové kyseliny popisovány jako směs relativně malých (< 1000 Da) heterogenních molekul držících pohromadě slabými disperzními silami a vodíkovými vazbami.

Cílem této práce je sledovat vliv různých látek na synchronní fluorescenční spektra huminových kyselin a diskutovat indukované změny v souvislosti struktura-typ přidané látky. Tradiční interpretace fluorescenčních spekter byla založena na poznatku, že jednotlivé píky mohou být připisány superpozicím jednotlivých fluoroformních skupin či molekul. Např. píky v oblasti pod 480 nm byly připisovány strukturám hydroxychinolinu a derivátům kumarinu. U píků v oblasti nad 480 nm bylo usuzováno na přítomnost skupin polyaromatických sloučenin s počtem 5 a více cyklů. Předpokládala se i přítomnost perylenu, který poskytuje emise v oblasti kolem 480–500 nm (cit.¹).

Byl sledován vliv kyseliny propionové a kyseliny chlorovodíkové na synchronní spektra fluorescence huminové kyseliny izolované z jihomoravského lignitu. Je známo, že kyselina chlorovodíková zapříčiňuje protonizaci polárních skupin, což podporuje tvorbu vodíkových můstků a rekonformaci především polárních částí molekul. Kyselina propionová pak, díky přítomnosti hydrofobního uhlíkového řetězce, ovlivňuje kromě polárních částí i části nepolární a způsobuje i separaci hydrofobních (alifatických i aromatických) domén².

Výsledky naší práce naznačují, že emise tradičně přiřazované jednotlivým strukturám jsou spíše důsledkem agregačních vlastností menších huminových molekul tvořících vlivem hydrofobního efektu zdánlivě vysoce aromatické struktury; výsledný záznam je pak funkcí jak primární, tak i sekundární struktury huminových látek.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT 104/03/D135.***LITERATURA**

1. Sierra M. M. D., Giovanela M., Parlanti E., Soriano-Sierra E. J.: *Chemosphere* 58, 715 (2005).
2. Kučerík J., Conte P., Pekař M., Piccolo A.: *Fresenius Environ. Bull.* 12, 683 (2003).

1P-05**VYUŽITÍ RŮZNÝCH DRUHŮ UHLÍKOVÝCH ELEKTROD PRO STANOVENÍ STOPOVÝCH MNOŽSTVÍ 3-NITROFLUORANTHENU A 3-AMINOFUORANTHENU****KAREL ČÍŽEK^a, JIŘÍ BAREK^a, MUSTAFA ERSÖZ^b a JIŘÍ ZIMA^a**

^a UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Katedra analytické chemie, Karlova Univerzita v Praze, Albertov 6, 128 43 Praha 2, ^b Department of Chemistry, Selcuk University, Kampus, 120 31 Konya, Turkey
barek@natur.cuni.cz, karel.cizek@email.cz

Do skupin látek, které jsou zvláště nebezpečné životnímu prostředí z důvodu karcinogenních účinků, patří nitrované polycyklické aromatické uhlovodíky (NPAH) a jejich aminoanalogy (APAH). V tomto příspěvku bude věnována pozornost 3-nitrofluoranthenu (3-NF), jehož výskyt byl zaznamenán v nejrůznějších environmentálních matricích, zvláště pak v emisích spalovacích procesů¹, a 3-aminofluoranthenu (3-AF), který je hlavním metabolitem biotransformace 3-NF v živých organismech. 3-NF i 3-AF obsahují elektrochemicky snadno redukovatelnou resp. oxidovatelnou skupinu, a proto lze pro jejich stanovení s výhodou použít moderní elektrochemické metody jako diferenční pulsní voltametrii (DPV) či adsorpční rozpouštěcí voltametrii (AdSV).

Cílem této práce bylo nalézt optimální podmínky pro voltametrické stanovení 3-NF a 3-AF. K tomuto účelu byla použita pastová uhlíková elektroda (CPE) a elektroda ze skleněného uhlíku (GCE). Obě pracovní elektrody jsou běžné a široce užívané v současné elektrochemii a umožňují detekci oxidovatelných i redukovatelných látek ve vodném i nevodném prostředí².

Pro nalezení optimálního stanovení pH obou látek byly použity roztoky methanol – Brittonův-Robinsonův pufr o různém poměru. Dále byla věnována pozornost porovnání citlivosti, limitu stanovitelnosti, opakovatelnosti a jiných charakteristik stanovení 3-NF a 3-AF danými elektrodami. Pro 3-AF byl nalezen limit stanovitelnosti $2 \cdot 10^{-7}$ mol l⁻¹ pro DPV a $2 \cdot 10^{-8}$ mol l⁻¹ pro AdSV na CPE. Ostatní stanovení budou diskutována v příspěvku.

Tento výzkum byl finančně podporován MŠMT ČR (projekt LC 06035).

LITERATURA

- Jacob J., Karcher W., Blliaro J. J., Dumler R., Boenke A.: *Fresenius' J. Anal. Chem.* 340, 755 (1991).
- Švancara I., Vytřas K., Barek J., Zima J.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 31, 311 (2001).

1P-06**VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ VYBRANÝCH CHEMICKÝCH KARCINOGENŮ****ALEŠ DAÑHEL a JIŘÍ BAREK**

UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Albertov 6, 128 43 Praha 2
ales.danhel@seznam.cz, Barek@natur.cuni.cz

1,3-Dinitronaftalen (1,3-DNN), 1,5-dinitronaftalen (1,5-DNN) a 1,8-dinitronaftalen (1,8-DNN) patří do skupiny nitrovaných polycyklických aromatických uhlovodíků, které vznikají při spalovacích procesech fosilních paliv a svou genotoxicitou představují velké riziko pro životní prostředí¹.

Tato práce je zaměřena na optimalizaci podmínek stanovení již zmíněných dinitronaftalenů (DNN) pomocí diferenční pulsní voltametrie (DPV) na netoxické meniskem modifikované stříbrné pevné amalgámové elektrodě (m-AgSAE). Navazuje tímto na práci pojednávající o stanovení shodných DNN na visící rtuťové kapkové elektrodě (HMDE)². m-AgSAE, využívající netoxický stříbrný amalgám jako elektrodový materiál³, byla vyvinuta jako jedna z možných náhrad HMDE⁴. Pro všechny tři DNN jsme pro jejich stanovení našli stejné optimální podmínky: regenerační potenciály (součást elektrochemické předúpravy pevných elektrod) m-AgSAE $E_{in} - 100$ mV a $E_{in} - 1800$ mV v prostředí methanol (MeOH) a Brittonův – Robinsonův (BR) pufr pH 10,0 (1:1). Za těchto podmínek byly pro jednotlivé DNN pomocí DPV proměřeny kalibrační závislosti a vypočteny meze stanovitelnosti (3S/N) $2 \cdot 10^{-6}$ mol l⁻¹ pro 1,3-DNN, $1 \cdot 10^{-6}$ mol l⁻¹ pro 1,5-DNN a $5 \cdot 10^{-7}$ mol l⁻¹ pro 1,8-DNN. Dále byla nalezena metoda pro stanovení celkové koncentrace DNN ve směsi. Díky nelinearitě a velkému rozptylu dat nelze pro stanovení celkové koncentrace DNN ve směsi použít metodu DPV. Lze však použít DC voltametrii, kde výška celkového proudu je lineárně závislá na celkové koncentraci směsi DNN s mezí stanovitelnosti (3S/N) $2 \cdot 10^{-6}$ mol l⁻¹ v koncentračním rozpětí $2 - 18 \cdot 10^{-6}$ mol l⁻¹. Další aplikovatelnost metod byla ověřena stanovením DNN v modelových vzorcích pitné vody.

Pomocí m-AgSAE lze dosáhnout meze stanovitelnosti sice vyšší než hodnoty získané pomocí HMDE (kolem 10^{-7} mol l⁻¹), ale dostatečné k aplikaci m-AgSAE jako netoxické elektrody slučitelné s konceptem „zelené analytické chemie“ ke stanovení elektrochemicky aktivních látek.

Tento výzkum byl finančně podporován MŠMT ČR (projekt LC 06035).

LITERATURA

- Barek J., Cvačka J., Moreira J.C., Zima J.: *Chem. Listy* 90, 805 (1996).
- Kumaran Shanmugam: PhD Thesis, Faculty of Science, Charles University, Prague 2004.
- Yosypchuk B., Novotny L.: *CRC, Crit. Rev. Anal. Chem.* 32, 141 (2002).
- Yosypchuk B., Novotny L.: *Electroanalysis* 14, 1733 (2002).

1P-07
VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ
AMINONITROFENOLŮ NA UHLÍKOVÉ PASTOVÉ
ELEKTRODĚ

HANA DEJMKOVÁ^a, JIŘÍ ZIMA^a, MUSTAFA ERSÖZ^b
a JIŘÍ BAREK^a

^a UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Albertov 6, 128 43 Praha 2, ^b Department of Chemistry, Selcuk Universitesi, Kampus, 120 31 Konya, Turkey

Aminonitrofenoly patří mezi deriváty aromatických uhlovodíků, kterým je věnována pozornost pro jejich karcinogenní a mutagenní účinky¹. Studované látky jsou součástí barviv; sledovány jsou zejména v oxidačních barvách na vlasy², v této oblasti je možnost jejich použití regulována zákonem. Vzhledem k přítomnosti elektroaktivních skupin lze k jejich stanovení s výhodou využít elektrochemických metod.

Příspěvek se zabývá studiem elektrochemických vlastností 2-amino-4-nitrofenolu (2A4NF), 2-amino-5-nitrofenolu (2A5NF) a 4-amino-3-nitrofenolu (4A3NF) pomocí diferenční pulsní voltametrie na uhlíkové pastové elektrodě³. Měření byla prováděna v prostředí methanol – Britton-Robinsonův pufr v poměru 1:9. Jako optimální pH vodné složky bylo zvoleno pH 3 pro 2A4NF a pH 5 pro 2A5NF a 4A3NF. Dosažená mez stanovitelnosti byla $4 \cdot 10^{-7}$ mol l⁻¹ pro 2A4NF a $2 \cdot 10^{-7}$ mol l⁻¹ pro 2A5NF a 4A3NF.

Tato práce byla podporována GA ČR (grant č. 203/04/0136) a MŠMT ČR (projekt LC 06035).

LITERATURA

- Zahm S. D., Weisenburger D. D.: Am. J. Public Health 82, 990 (1992).
- Wang S. P., Chen H. J.: J. Chromatogr., A 979, 439 (2002).
- Švancara I., Vytřas K., Barek J., Zima J.: Crit. Rev. Anal. Chem. 31, 311 (2001).

1P-08
USING OF PYRENE AND PERYLENE
FLUORESCENT PROBES TO THE STUDY OF HUMIC
ACIDS

NADĚŽDA FASUROVÁ^{*} and IVANA NOVOTNÁ

Brno University of Technology, Faculty of Chemistry,
 Institute of Physical and Applied Chemistry, Purkyňova 118,
 612 00 Brno
 fasurova@fch.vutbr.cz

Measurement of pyrene or perylene fluorescence can be used to study the aggregation of humic acids. Humic acids (HAs) have similar behaviour as micelles, they have hydrophobic interior and hydrophilic exterior. Pyrene or perylene as fluorescent probe can be oriented between associates of HAs

or bind into hydrophobic domain in dependence on HAs concentration. Fluorescence spectroscopy allows investigate a behaviour of HAs or determine the presence of hydrophobic domain. For evaluation of emission spectra of pyrene and perylene in systems containing humic substances is used the ratio of relative intensity of fluorescence I_1/I_3 (pyrene) and I_1/I_2 (perylene) against molar concentration of probe or HAs.

Fluorescence quenching can be used for determination of partition coefficients of pyrene from aqueous phase into humic phase or equilibrium constant in organic pollutant-dissolved humic substance (humic as well as fulvic acids) systems¹. Fluorescence probe as pyrene, perylene, anthracene etc. can be used for finding of hydrophobic domain in amphiphilic molecules, micelles. Fluorescence is quenched by association process with HAs. Pyrene has hydrophobic properties and by interaction with HAs is oriented into hydrophobic domain of HAs. Decreasing of relative fluorescence intensity can be followed by ratio of two emission peaks of pyrene at 373 and 384 nm. This ratio is called I_1/I_3 . According to literature² hydrophobic domain are present if this ratio is lower than 1.2.

The aim of this study was finding of optimal concentration of pyrene and humate/humic acid while the value of I_1/I_3 is minimal. Influence of pH value of humate solutions on this ratio was studied. As a second probe was perylene used.

Experimental Section

Apparatus

Fluorescence measurements were made on a Aminco Bowman Series 2 spectrofluorimeter with slit widths set for band widths of 4 nm on both monochromators. Fluorescence was measured as a function of added humic material at fixed excitation wavelength. The excitation/emission wavelengths used for two humic acid and humate salt were 336/373 nm for pyrene and 410/443 nm for perylene. Spectra were corrected by the same voltage on detector and by subtraction of R. F. I. of humic material. Elemental composition was determined on Carlo Erba analyzer. Humic acids contained (ashfree) 57.5 % C, 35 % O, 2.5 % N, 5 % H and 15.5 % ash.

Material

Lignite humic acids were isolated from South Moravia lignite by alkaline extraction. Sodium salt of humic acid was prepared by automatic titration to pH 7. Sodium humate was lyophilised at -50 °C. Humic acid was dissolved in 0.5 M-NaOH and pH value was adjusted to 7 or 3.5. Sodium humate was dissolved in deionised water and pH value was adjusted by NaOH and HCl solutions. Pyrene (p.a.) and perylene (p.a.) were purchased from Sigma Aldrich. They were used without further purification. Stock solutions of pyrene 0.010 g dm⁻³ and perylene 0.012 g dm⁻³ in acetone were prepared. Exact volume of stock solution was transferred into vials and acetone evaporated. After then 5 mL of humate or humic acids solutions was added.

Results

Emission spectra of pyrene in the presence of humic substances were measured at excitation at 336 nm. Three main emission peaks were observed at 373, 384 and 393. Molar concentration of pyrene was in the interval from $7 \cdot 10^{-8}$ to $1 \cdot 10^{-5}$. Concentration of humic acids was in range from 0.01 to 0.1 g dm⁻³ and concentration of sodium humate was 0.01 g dm⁻³. Value of pH of humic substance solution were 3.5 and 7. Spectra were background corrected by subtracting

the spectrum of pure humic substance at the same detector voltage. I_1/I_3 ratio was calculated from peaks intensities at 373 and 384 nm respectively. Minimal value of $I_1/I_3=1.33$ was found at molar concentrations of $7 \cdot 10^{-8}$ pyrene and 10 mg L^{-1} humate at pH 3.5. With decreasing pH value decreases also ratio I_1/I_3 .

For study with perylene we used ratio I_1/I_2 . Emission spectra were measured at excitation at 410 nm. Three emission peaks were obtained at 443, 468 and 498 nm. I_1/I_2 ratio was calculated from peaks intensities at 443 and 468 nm. Corrected spectra were also obtained. Minimal value of $I_1/I_2=0.49$ was found at molar concentration of $1.6 \cdot 10^{-6}$ perylene and 0.1 g dm^{-3} humate at pH 7. We assume out of perylene experiments that hydrophobic domain in HAs is present. The experiments with pyrene are limited by the instrument configuration.

This study was supported by Grant Agency of Czech Republic 104/03/D135.

LITERATURA

1. Tanaka S., Oba K., Fukushima M., Nakayasu K., Hasebe K.: *Anal. Chim. Acta* 337, 351 (1997).
2. Ferreira J. A., Martin-Neto L., Nascimento O. R., Colnago L. A.: *Proceedings the International Humic Substances Society. 20th Anniversary Conference Humic Substances. Nature's most versatile materials. July 21-27, p. 388. Boston 2002.*

1P-09

VOLTAMPÉROMETRIA IMOBILIZOVANÝCH MIKROČASTÍC – Fe PRÁŠKY S MODIFIKOVANÝM POVRCHOM

ZUZANA FEČKOVÁ

*Technická Univerzita v Košiciach, Letná 9, 042 00 Košice
zuzana.feckova@tuke.sk*

Povrchová štruktúra a povrch materiálu hrajú dôležitú úlohu v determinovaní finálnych vlastností výrobkov. Cieľená modifikácia funkčných vlastností povrchov materiálov vytváraním vrstiev a povlakov umožňuje výrazne rozšíriť rozsah ich použitia.

Práškové železo predstavuje vstupnú surovinu v oblasti práškovej metalurgie. Povrch základného materiálu je možné modifikovať elektrochemickým vylučovaním kovového povlaku, čím sa získa vstupný materiál pre ďalšie spracovanie s požadovanými vlastnosťami ako je tvrdosť, oteruvzdornosť, korózná odolnosť. Elektrochemický proces na práškoch je možné realizovať v systéme fluidného lôžka, kde sú práškové častice udržiavané vo vznose kontinuálnym prúdením elektrolytu zdola nahor alebo intenzívnym cirkulárnym miešaním¹⁻².

Cieľom tejto práce bolo preštudovať korózne vlastnosti systému práškovej Fe/Ni-Co povlak. Korózne vlastnosti binárnych kovových povlakov vylúčených na práškových materiáloch je možné sledovať použitím voltampérometrie imobilizovaných mikročastíc (VIM). Táto metóda sa vyznačuje vysokou presnosťou ($\pm 0,5 \%$)³⁻⁵ nameraných hodnôt.

Pri stanovení korózných potenciálov cestou Tafelových

dotyčnic sa namerané polarizačné krivky pretransformujú do semilogaritmických súradníc, kedy závislosť $i = f(E)$ má priamkový charakter. Katodická a anodická vetva polarizačnej krivky sa pretnú v bode odpovedajúcom E_{kor} . Zmeny korózných potenciálov sa sledovali v elektrolýtoch obsahujúcich anióny, ktoré sa bežne označujú ako aktivátory korózie.

Táto práca vznikla za podpory grantu APVV č. 20-009404.

LITERATURA

1. Turňová A., Gálová M.: *J. Solid State Electrochem.* 7, 684 (2003).
2. Turoňová A., Gálová M.: *J. Solid State Electrochem.* 7, 689 (2003).
3. Žežula I., Gálová M.: *J. Sol. State Electrochem.* 3, 231 (1999).
4. Pikna L. et al.: *Acta Mechanica Slovaca* 6, 27 (2002).
5. Fečková Z. et al.: *CHEMZI* 1(1), 129 (2005).

1P-10

STRĚBRNÁ PEVNÁ AMALGAMOVÁ ELEKTRODA A JEJÍ VYUŽITÍ PRO VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ AGROCHEMIKÁLÍ

JAN FISCHER^a, LENKA VAŇOURKOVÁ^a, JIŘÍ BAREK^a, BOHDAN YOSYPCHUK^b a TOMÁŠ NAVRÁTIL^b

^a UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Albertov 6, 128 43 Praha 2, ^b Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského, Akademie věd České republiky, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8
jfisher@natur.cuni.cz

Netoxická stříbrná pevná amalgamová elektroda (AgSAE) – leštěná, nebo modifikovaná rtuťovým meniskem – je moderním senzorem, který zachovává výhodné vlastnosti klasických rtuťových elektrod, ale omezuje užití kapalně rtuť, jejíž používání je v poslední době omezovalo vzhledem k neopodstatněným obavám z její toxicity. Přípravky na ochranu rostlin a hnojiva se staly pevnou součástí technologie pěstování rostlin i v integrované rostlinné produkci. V souvislosti s tím rostou požadavky na analytické metody použitelné ke sledování různých biologicky aktivních účinných látek agrochemických přípravků v environmentálních matricích. V předloženém příspěvku bude věnována pozornost stanovení stimulatorů rostlinného růstu 2-nitrofenolu, 4-nitrofenolu a 2,4-dinitrofenolu pomocí diferenční pulsní voltametrie na AgSAE. V příspěvku bude popsána aktivace a regenerace povrchu elektrody a bude porovnána meniskem modifikovaná a leštěná AgSAE z hlediska parametrů příslušných kalibračních závislostí a stálosti signálu. Dále budou popsány optimální podmínky pro stanovení těchto látek pomocí diferenční pulsní voltametrie v koncentračním rozmezí $1 \cdot 10^{-4}$ až $1 \cdot 10^{-7}$ mol l^{-1} . Na závěr bude ukázána možnost současného stanovení strukturálních izomerů nitrofenolu.

Tento projekt byl finančně podporován Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (projekt 332/2005), MŠMT ČR (projekt LC06035) a MPO ČR (projekt 1H-PK/42).

1P-11**A REVIEW OF ANALYTICAL METHODS FOR THE DETERMINATION OF BENZENE IN ENVIRONMENTAL SAMPLES****ANNA ZYMELKA^a, MACIEJ LUKASZ GONIEWICZ^b, JAN CZOGALA^b, and BARTOSZ KOSZOWSKI^a**

^aStudents Science Society at Department of General and Analytical Chemistry, ^bDepartment of General and Analytical Chemistry, Faculty of Pharmacy, Medical University of Silesia, Jagiellonska St. 4, 41-200 Sosnowiec, Poland
mgoniewicz@wp.pl, janczogala@wp.pl

Benzene is classified as a human carcinogen by International Agency for Research on Cancer (IARC) (cit.¹). Chronic exposure results in depression of hematopoietic system and it is said to be associated with an increased incidence of leukemia². Because everyone is exposed to a small amount of benzene every day it is very important is to select a proper form of monitoring levels of benzene in human environment. In this work a comparison of known analytical methods in environmental samples is presented. The analysis include possibilities of use, sampling technique, availability, simplicity, sensitivity, detection limit and reliability. The methods used for the determination of benzene depend upon the media sampled and the level of sensitivity required. The choice between gas chromatography (GC) with flame ionization or photoionization detection and mass spectrometry (MS) depends upon the sensitivity required and levels of benzene expected.

The measurement of benzene in air (ambient and workplace) usually involves a preconcentration step in which the sample is passed through a solid adsorbent. Commonly used adsorbents are Tenax resin, silica gel, and activated carbon. Benzene in ambient air can be also collected in stainless steel canisters or Tedlar bags and can be analyzed with or without preconcentration. Preconcentration of benzene can also be accomplished by direct on-column cryogenic trapping or benzene can be analyzed directly. The limit of detection of the GC/FID or GC/PID techniques is in the low ppb ($\mu\text{g m}^{-3}$) to low ppt (ng m^{-3}) range whereas the GC/MS method has a limit of detection in the low ppb ($\mu\text{g m}^{-3}$) range. Although GC/FID and GC/PID provide greater sensitivity than GC/MS, the latter is generally considered more reliable for the measurement of benzene in samples containing multiple components with similar GC elution characteristics. Atomic line molecular spectrometry (ALMS) has been developed to monitor benzene compounds in ambient air samples. The detection limit is $800 \mu\text{g m}^{-3}$ (250 ppb). Methods for determining benzene in air are sensitive enough to measure background levels and levels at which health effects may occur. Benzene in the workplace can be measured by portable direct-reading instruments, real-time continuous monitoring systems and passive dosimeters having sensitivities in the ppm (mg m^{-3}) range.

Benzene in aqueous media is usually isolated by the purge-and-trap method followed by GC/MS, GC/FID or GC/PID analysis. An inert gas such as nitrogen is used to purge the sample, the benzene is trapped on an adsorbent such as Tenax or activated charcoal, and this is followed by thermal desorption. The sensitivity of these methods is in the low to sub $\mu\text{g liter}^{-1}$ range with good recoveries and precision for

most methods. Benzene in soil, sediment and food samples is usually determined by purge-and-trap methods, with headspace analysis and liquid extraction techniques being used less frequently. Detection limits as low as 1 ng kg^{-1} have been reported after GC/FID or GC/MS analysis, but recoveries and precision are frequently low.

REFERENCES

1. IARC Monographs 29, 93–148, 391–398, 1991.
2. Toxicological profile for benzene. Atlanta, Georgia, Agency for Toxic Substances and Disease Registry, 2000.

1P-12**CHROMATOGRAPHIC DETERMINATION OF BENZENE AFTER ITS DIRECT EXTRACTION TO SOLID PHASE FROM MAIN- AND SIDESTREAM TOBACCO SMOKE****ANNA ZYMELKA^a, MACIEJ LUKASZ GONIEWICZ^b, JAN CZOGALA^b, and BARTOSZ KOSZOWSKI^a**

^a Students Science Society at Department of General and Analytical Chemistry, ^b Department of General and Analytical Chemistry, Faculty of Pharmacy, Medical University of Silesia, Jagiellonska St. 4, 41-200 Sosnowiec, Poland
mgoniewicz@wp.pl, janczogala@wp.pl

Highly toxic and carcinogenic benzene is one of many ingredients of mainstream (MS) and sidestream tobacco smoke (SS). This substance poses a potential threat for passive smokers, especially those in long-term contact with the smoke. Developing an accurate method for determining benzene in the both fraction of tobacco smoke is an essential tool for assessment of active and passive smokers' exposure to this compound. The aim of this paper was to develop a method for benzene direct extraction from MS and SS to solid phase (SPE). The subjects of optimization were: selection of sorbent and its mass and selection of eluent and its volume.

The first optimization stage was the selection of a sorbent with maximum efficiency of benzene sorption. The following sorbents were examined: activated carbon, Chromosorb 101, Chromosorb 102, Chromosorb 105, Porapak P, Porapak PS, Porapak R, Porapak QS, Porapak S, Porapak N, Molecular Sieve 5A and Molecular Sieve 13X. Benzene vapour was generated quantitatively and passed through a cylindrical sorber with a diameter of 10mm containing a constant mass (2 g) of examined sorbents. The absorbed benzene was eluted by a constant volume of methanol (2 ml). Benzene concentration in the eluate was analyzed by GC-FID (Varian 3800; column: CP-SIL 8CB 25×0.25 ($1.2 \mu\text{m}$); carrier gas: helium (3.0 psi); detector and injector temp.: $250 \text{ }^\circ\text{C}$; programmed oven temp.: $40\text{--}220 \text{ }^\circ\text{C}$). The retention time of benzene was 3.202 min. The activated carbon was chosen as the sorbent with best efficiency of benzene sorption.

The next stage of the work consisted of selecting an optimal eluent. Nine solvents were examined (acetone, acetylacetone, methanol, carbon disulfide, 1,2-dichloroethane, cyclohexane, *n*-hexane, ethyl acetate and carbon tetrachloride). Acetone with benzene desorption efficiency from activated

carbon of 34.77 % was the most effective. In the third stage the optimal amount of activated carbon, using a constant amount of acetone, was specified. Efficiency of sorbents with a mass of 100 mg to 4 g was examined. Maximum efficiency was reached with carbon mass of 250 mg. In the final stage of the work, the optimal amount of acetone was specified. The smallest amount of acetone, guaranteeing full benzene extraction to solvent, was 3ml.

The evaluated method was applied in order to determine benzene levels in MS and SS of commercially available cigarettes in Poland. 3 cigarettes were smoked in a smoking machine in standard ISO conditions (puff volume 35 ml, puff duration 2 sec, intervals between puffs 60 sec). MS and SS were separately pumped through columns each packed with 250 mg of activated carbon and then eluted with 3 ml of acetone. 1 µl of the obtained extract injected into the chromatography column and analyzed in the above-mentioned conditions. The limit of detection was 0.75 µg/cigarette and a recovery rate of 83 %. The measured level of benzene in MS of Jan III Sobieski Full Flavour cigarettes was 28.49 and in SS 41.53 µg/cigarette.

1P-13

VPLYV pH PODMIENOK NA REDUKCIU DUSIČANOV POMOCO U ELEMENTÁRNEHO ŽELEZA

MÁRIA HEŽELOVÁ

Technická Univerzita v Košiciach, Letná 9, 042 00 Košice
maria.hezelova@tuke.sk

Znečistenie spodných vôd dusičnanmi je aktuálnym problémom mnohých lokalít. Napriek tomu, že pre odstránenie dusičnanov bolo navrhnutých niekoľko spôsobov, nové spôsoby ozdravenia *in situ* sú inovatívnym spôsobom dosiahnutia environmentálne uspokojivých výsledkov¹⁻³. Do tejto oblasti patrí aj použitie permeabilných reaktívnych membrán, ktoré predstavujú pasívne „filtre“ umiestené pod povrchom zeme. Nimi preteká kontaminovaná spodná voda. Reaktívny materiál tvoriaci aktívnu zložku permeabilnej membrány reaguje s kontaminantom, čím ho premieňa na environmentálne prijateľnú formu. Súčasný výskum indikuje vysoký potenciál použitia Fe⁰ ako redukčného činidla pre cieľový kontaminant⁴⁻⁵.

V našich laboratórnych podmienkach bola študovaná schopnosť elementárneho železa redukovať dusičnany pri rôznych podmienkach reakčnej sústavy s dôrazom na pH. Boli použité tri rôzne vzorky železného prášku, pre sériu hodnôt pH. Merania boli realizované elektrochemicky na ortuťovej elektróde v prítomnosti trojmocných kationov (Ce³⁺) v základnom elektrolyte⁶, kontinuálnym zaznamenávaním koncentrácie dusičnanej skupiny v priebehu niekoľkých hodín. Sledovaná závislosť koncentrácie dusičnanu na čase vplyvom redukčnej reakcie so železom bola závislá na hodnote pH, mala rozdielne priebehy pre rôzne druhy železného prášku a bola štatisticky vyhodnocovaná pre všetky typy sledovaných reakčných sústav.

Táto práca vznikla za podpory grantu APVV č. 20-009404.

LITERATÚRA

1. Permeable Reactive Barriers Action Team: Remediation Technology Development Forum (2000).
2. Biswas S., Bose P.: J. Envir. Engrg. 131, 1212 (2005).
3. Chen Y. M., Li C. W., Chen S. S.: Chemosphere 59, 753 (2005).
4. Westerhoff P.: J. Envir. Engrg. 129, 10 (2003).
5. Huang Y. H., Zhang T. C., Shea P. J., Comfort S. D.: J. Envir. Qual. 32, 1306 (2003).
6. Čákr M., v knihe: *Metódy a postupy elektrochemickej analýzy I*, kap. 12, str. 129. HSC Servis, Bratislava 1993.

1P-14

STABILITY OF PMMA TERNARY NANOCOMPOSITES

DAVID HYNEK^a and PETER ŠIMON^b

^a Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic, ^b Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia
hynek@fch.vutbr.cz

Introduction

The combination of oxygen as the reactant and heat as the energy source is a major factor in material degradation. In this paper, the stability of poly(methyl methacrylate)/silica/titania ternary nanocomposites is studied. The composites should exhibit greatly improved thermal and ultraviolet-shielding properties¹.

Kinetic analysis of reactions with induction period

For the treatment of experimental data, the method for obtaining kinetic parameters of induction periods from the oxidation onset temperatures (OOT) of DTG runs with linear temperature increase¹ was employed.

The temperature range of accelerated stability tests differs from the temperature range where the stability of PMMA should be predicted. The change of the temperature can lead to a change in the reaction mechanism, i.e. to a change of the conversion function. Thus, the extrapolation of absolute values of the lengths of induction periods can lead to non-realistic estimations. A better estimation can be obtained using the ratio of the lengths of induction periods of stabilized and unstabilized PMMA, since it is expectable that the same structural units are responsible for the degradation both in stabilized and unstabilized PMMA. This ratio is called the protection factor (*PF*):

$$PF = \frac{t_i(\text{PMMA} + \text{ISIT})}{t_i(\text{PMMA})} \quad (1)$$

if the value of *PF* is greater than one, the additive has a stabilizing effect on the polymer. Otherwise, the additive exhibits a destabilizing effect. The greater the value of *PF*, the higher is the antioxidant effectiveness of the additive.

The lengths of induction periods have been calculated for

various temperatures using the kinetic parameters A and B obtained from nonisothermal DTG measurements, using the formula¹:

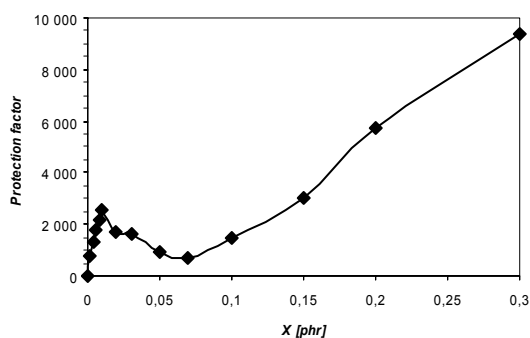
$$t_i = A \exp\left[\frac{B}{T}\right] \quad (2)$$

The parameters have been obtained from the dependence of oxidation onset temperature on the heating rate by the program KINPAR.

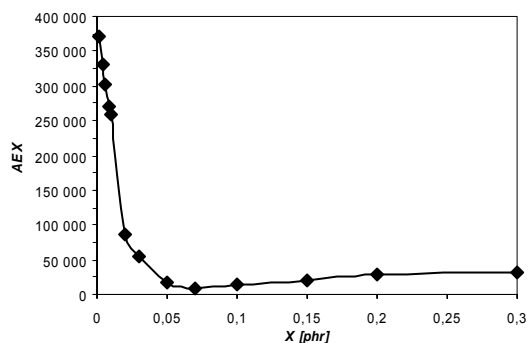
Experimental part

A Shimadzu TG/DTA 60 calorimeter was employed to study the thermo-oxidation stability of the samples. The temperature scale was calibrated using In, Sn and Zn. Samples of 2–5 mg were placed in crimped standard aluminium pans, where the lid of each pan was perforated by 10 pinholes. Heating rates were 1, 3, 5, 7, 10 and 15 K min⁻¹. The purge gas forming the reaction atmosphere was oxygen. The starting temperature of oxidation was determined as the onset temperature of the oxidation peak.

Results



Graph 1. Dependence of protection factor on the relative mass fraction of ISIT



Graph 2. Dependence of AEX (antioxidant effectiveness) on the relative mass fraction of ISIT

Conclusions

The antioxidant effectiveness of ISIT in PMMA matrix was studied. From Graph 1 we can see that the PF have maximum on 1 % of ISIT. For example PF at 1 and 15 % of ISIT have a similar value. AEX at 1 % is 10x higher than 15 %. It signifies that 1 and 15 % ISIT have the same effect on stability of material (PF).

REFERENCES

1. Wang H., Xu P., Meng S., Zhong W., Du W., Du O.: Polym. Degrad. Stab. 91, 1455 (2006).
2. Cibulková Z., Šimon P., Lehocký P., Balko J.: Polym. Degrad. Stab. 87, 479 (2005).
3. Šimon P.: J. Therm. Anal. Calorimetry 84, 263 (2006).

IP-15 NANÁŠENÍ TRASPARENTNÍCH VRSTEV TiO₂ A JEJICH FOTOKATALYTICKÉ VLASTNOSTI

**JANA CHOMOUCKÁ, LENKA BIERSKÁ, PETR DZIK
a MICHAL VESELÝ**

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Purkyňova
118, 612 00 Brno
chomoucka@fch.vutbr.cz

Fotokatalytické reakce na oxidu titaničitém se již delší dobu používají na degradaci organických sloučenin, zejména při dočišťování vody. Nově byl vysoce fotoaktivní film oxidu titaničitého nanesen na kachličky pro zkoumání antimikrobiálního efektu a samočisticích schopností. Tyto aplikace jsou založeny na oxidační síle způsobené fotoindukovanými aktivními formami kyslíku generovanými na povrchu oxidu titaničitého. I když jsou sodnovápenatá skla nejužívanější coby skleněný materiál v průmyslu a architektuře, během přípravy tenkých filmů oxidu titaničitého na těchto sklech dochází při kalcinačním procesu vlivem difuze sodíkových iontů ke tvorbě sloučeniny, která má za následek snížení fotoúčinnosti těchto filmů. Pro zamezení nežádoucí difuze sodíku se před přípravou tenkých filmů oxidu titaničitého aplikují na skla mezivrstvy různých oxidů kovů nebo se vyvaří v kyselině sírové.

Pro zhotovení tenkých, transparentních vrstev uvnitř skleněných trubiček byla použita imobilizace katalyzátoru oxidu titaničitého sol-gel procesem. Pro zamezení nežádoucí difuze sodíkových iontů do vrstvy TiO₂ během kalcinace a tvorbu fotokatalyticky neaktivních titanátů byly trubičky nejdříve vyvařeny v kyselině sírové. Trubičky byly ovrstčovány připraveným solem (titan-teraisopropoxidu v propanolu) metodou dip-coating a vypalovány při 450 °C.

Fotokatalytická účinnost připravených vrstev byla zkoumána na fotokatalytickém rozkladu fenolu a 2,6-dichlorindofenolu v trubkovém reaktoru, systém byl ozařován solární výbojkou. Spektrofotometricky byl stanovován úbytek koncentrace 2,6-DCIP, na HPLC byla sledována rychlost degradace fenolu. Byl zkoumán vliv rychlosti ovrstčování a počtu nanesených vrstev, spektrofotometrickou metodou bylo stanoveno množství imobilizovaného TiO₂ na skleněné trubičce.

LITERATURA

1. Chovancová J., Veselý M., Chomoucká J.: Chem Listy 99, 568 (2005).
2. Keller A.: Acc. Chem. Res. 28, 503 (1995).
3. Paz Y., Luo Z., Ragenberg L., Keller A., Mater J.: Res. 10, 2842 (1995).
4. V. Romeas, P. Pichat, C. Guillard, T. Chopin, C. Lehaut: New J. Chem. 23, 365 (1999).
5. A. Heller, Y. Paz: Self-cleaning and method of making thereof, WO 97/07069, 1997.

1P-16

TERMODYNAMICKÁ ANALÝZA FÁZOVÝCH DIAGRAMOV ŽELEZO-PRÍMES

DANA IVÁNOVÁ, JANA KAVULIČOVÁ a JOZEF ĐURIŠIN

Katedra chémie, Hutnícka fakulta, Technická univerzita v Košiciach, Letná 9, 042 00 Košice
Dana.Ivanova@tuke.sk

Práca sa zaoberá termodynamickou analýzou reálnych binárnych fázových diagramov železo-prímes pomocou Le Chatelier-Šrederovej rovnice v tvare:

a) pre čiaru likvidu rovnováhy tavenina \rightleftharpoons δ -ferit

$$\ln x_{\delta-Fe}^{I,id} = \frac{\Delta H_{\delta-Fe}^{TAV}}{R} \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{\delta-Fe}^{TAV}} \right] \quad (1)$$

kde $\Delta H_{\delta-Fe}^{TAV} = 13\,806 \text{ J mol}^{-1}$, $T_{\delta-Fe}^{TAV} = 1811 \text{ K}$

b) pre čiaru likvidu rovnováhy tavenina \rightleftharpoons austenit

$$\ln x_{\gamma-Fe}^{I,id} = \frac{\Delta H_{\gamma-Fe}^{TAV}}{R} \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{\gamma-Fe}^{TAV}} \right] \quad (2)$$

kde $\Delta H_{\gamma-Fe}^{TAV} = 14\,632 \text{ J mol}^{-1}$, $T_{\gamma-Fe}^{TAV} = 1802 \text{ K}$.

Pre zvolenú teplotu sa vypočíta podľa vzťahu (1) resp. (2) $x_{Fe}^{I,id}$.

Z binárneho diagramu sa odčíta alebo z experimentu určí $x_{Fe}^{I,real}$.

Z ich podielu sa vypočíta aktivitný koeficient:

$$\gamma_{Fe}^I = x_{Fe}^{I,id} / x_{Fe}^{I,real}$$

Z vypočítaných aktivitných koeficientov sa zistí teplotná závislosť a analyticky sa vyjadří teplota likvidu ako funkcia koncentrácie. Teplota likvidu a zníženie teploty tavenia železa sa určí podľa konkrétneho obsahu prímеси v sústave železo-prímes.

Z číselnej hodnoty aktivitných koeficientov sa odhaduje existencia tuhých roztokov.

Táto práca bola riešená v rámci grantového projektu

č. 1/3205/06 za finančnej podpory VEGA MŠ SR.

LITERATÚRA

1. Malinovský M.: *Termodynamická analýza rovnovážnych kondenzovaných heterogénnych sústav*, str. 191. Chémiko-technologická fakulta SVŠT, Bratislava 1974.
2. Dinsdale A. T.: SGTE Data for Pure Elements. Calphad 15(4), 319–427 (1991).

1P-17

PLAZMOVÁ SPEKTROMETRIE S VYUŽITÍM LASERU PRO PRVKOVOU ANALÝZU A CHEMICKÉ MAPOVÁNÍ

VIKTOR KANICKÝ, KAREL NOVOTNÝ, MARKÉTA HOLÁ, LINDA ZAORÁLKOVÁ, TEREZA ČTVRTNÍČKOVÁ, ALEŠ HRDLÍČKA, TOMÁŠ VACULOVÍČ, MARIE PIŠTĚKOVÁ, MICHAELA GALIOVÁ, VERONIKA MOŽNÁ, ALICE STAŇKOVÁ a VÍTĚZSLAV OTRUBA

Laboratoř atomové spektrochemie, Katedra analytické chemie, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno
viktork@chemi.muni.cz

Možnosti využití interakce laserového záření s pevnými látkami pro chemickou prvkovou analýzu jsou studovány již 4 desetiletí. Skupina metod označovaná jako „laser-assisted plasma spectroscopy, LAPS“ využívá vhodně zaostřeného paprsku pulsního laseru k uvolnění materiálu (laserové ablaci, LA), které je doprovázeno vznikem mikroplazmatu. Aerosol z povrchu či vrstvy vzorku se pak analyzuje metodami optické či hmotnostní spektrometrie v indukčně vázaném plazmovém výboji (LA-ICP-OES, LA-ICP-MS), do něž je aerosol vnášen proudem nosného plynu. Mikroplazma, v němž se excituje odpařený vzorek, je zdrojem záření pro techniku Laser Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS). Při době trvání laserového pulsu v řádech nanosekund až femtosekund a ozářených ploškách o průměru v jednotkách až stovkách mikrometrů se dosahuje hustoty zářivého výkonu v jednotkách až desítkách GW/cm^2 . Za těchto podmínek se lze přiblížit stavu, kdy ablatovaný materiál reprezentuje svým složením původní vzorek. Technika LA je dlouhodobě využívána ve fyzikálních a technických oborech pro depozici tenkých vrstev či obrábění a představuje tak standardní technologický postup. V chemické analýze však patří LA do kategorie metod, které jsou doposud ve vývoji směrem k dosažení parametrů kvantitativní analýzy. Zatímco LA-ICP-OES nedosahuje mezí detekce vhodných pro stopovou analýzu a lze ji využít spíše ke stanovení obsahů na úrovni 0,0X % až XX % s přesností přibližně 5 % RSD, LA-ICP-MS je vhodná pro stopovou analýzu a při použití simultánních spektrometrů také k přesnému určení izotopových poměrů. Technika LIBS co do lineárního kalibračního rozsahu a mezí detekce nedosahuje parametrů LA-ICP-MS, je však vhodná vzhledem k možnosti zaostření laserového paprsku na větší vzdálenosti k charakterizaci *in situ* materiálů (přímá analýza roztavených kovů v hutním provozu, dálková analýza deponovaných radioaktivních odpadů a pod.). Významnou společnou předností metod LAPS je možnost lokální analýzy a analýzy

elektricky vodivých i nevodivých materiálů. Skenování laserovým paprskem lze využít k chemickému prvkovému mapování povrchů, pořizování hloubkových profilů i stanovení průměrného složení takových materiálů, jejichž převod do roztoku je spojen s obtížemi, případně jej nelze realizovat kvantitativně. Možnosti metod LAPS budou demonstrovány na příkladech analýzy oceli, strusky a karbidů wolframu pomocí LA-ICP-OES a LIBS, pořizování hloubkových profilů kovových i keramických vrstev pomocí LA-ICP-OES, LA-ICP-MS a LIBS a mapování povrchů či řezů strukturovaných materiálů.

Tato práce vznikla za podpory projektu MSM0021622411.

1P-18 CHEMICKÉ POTENCIÁLY FÁZ ŽELEZA A ICH POUŽITIE V TERMODYNAMIKE BINÁRNÝCH SÚSTAV ŽELEZO-PRÍMES

**JANA KAVULIČOVÁ, DANA IVÁNOVÁ a JOZEF
ĐURIŠIN**

*Katedra chémie, Hutnícka fakulta, Technická univerzita
v Košiciach, Letná 9, 042 00 Košice
Jana.Kavulicova@tuke.sk*

Práce sa zaoberá výpočtom štandardných chemických potenciálov železa so štruktúrou bcc, fcc a kvapalného železa $\mu_{Fe}^{0,\alpha,\delta}$, $\mu_{Fe}^{0,\gamma}$, $\mu_{Fe}^{0,l}$.

Celkový štandardný chemický potenciál železa sa skladá z troch príspevkov. Príspevok závisiaci od teploty μ_T^0 , od tlaku μ_{press}^0 a magnetický príspevku μ_{mag}^0 a sú vyjadrené nasledovne:

$$\mu_T^0 = a + bT + cT \ln T + d_1 T^2 + d_2 T^3 + d_3 T^{-1}$$

pre stabilné fázy a predchádzajúci polynóm sa rozšíri:

$$\mu_T^0 = a + bT + cT \ln T + d_1 T^2 + d_2 T^3 + d_3 T^{-1} + d_4 T^7 + d_5 T^{-9}$$

pre metastabilnú oblasť. Magnetický príspevok je vyjadrený:

$$\mu_{mag}^0 = RT \ln(\beta + 1) g(\tau)$$

Príspevok od tlaku je vyjadrený zjednodušeným tvarom:

$$\mu_{press}^0 = AP \left(1 + a_0 T + a_1 T^2 / 2 + a_2 T^3 / 3 + a_3 T^{-1} \right)$$

Chemický potenciál príslušnej fázy železa je daný súčtom: $\mu_{Fe}^0 = \mu_T^0 + \mu_{mag}^0 + \mu_{press}^0$.

Pre vybrané teploty sú vypočítané chemické potenciály jednotlivých fáz železa. V práci sú uvedené príklady použitia chemických potenciálov pre niektoré prímesi binárnych sústav pri danej teplote.

Táto práca bola riešená v rámci grantového projektu č. 1/3205/06 za finančnej podpory VEGA MŠ SR.

LITERATÚRA

1. Dinsdale A. T.: *Calphad* 15(4), 319 (1991).
2. Chipman J.: *Metall. Trans.* 3, 55 (1972).
3. Gustafson P.: *Scand. J. Metallurgy* 14, 259 (1985).

1P-19 PLAZMOCHEMICKÁ ÚPRAVA HUMINOVÝCH KYSELIN A JEJICH KOMPLEXŮ

**MARTINA KLUČÁKOVÁ, FRANTIŠEK KRČMA
a JITKA VRAJOVÁ**

*Ústav fyzikální a spotřební chemie, Fakulta chemická,
VUT v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Česká republika
klucakova@fch.vutbr.cz*

Lignitické huminové kyseliny a jejich komplexy s měďnatými ionty byly připraveny ve formě tenkých vrstev na skleněných podložkách a upraveny v plazma reaktoru UPS 100 W (cit.¹) na vzduchu po dobu pěti a šedesáti sekund. Tenké vrstvy byly připraveny několika různými způsoby. Jednak byly připraveny vrstvy odpařováním vrstvy roztoku huminových kyselin v DMSO a odpařováním vrstvy gelu huminových kyselin nebo jejich komplexů, jednak byly plazmochemické úpravě podrobeny také gelové vrstvy, k jejichž částečnému sušení docházelo až během plazmochemického opracování. Upravené vzorky, stejně jako původní neupravené huminové kyseliny a jejich komplexy, byly charakterizovány úhlem smáčení (SEE System, cit.²) a FT-IR spektrometrií (Nicolet Impact 400). Experimentálně bylo zjištěno, že úhel smáčení plazmochemicky upravených vzorků je vždy nižší než u vzorků bez úpravy. Největší pokles byl zaznamenán u tenkých vrstev připravených sušením gelů huminových kyselin a jejich komplexů. Výsledky FT-IR spektrometrie prokázaly změny ve struktuře u vrstev připravených ze všech typů gelů. Plazmochemická úprava zřejmě způsobuje degradaci vodíkových vazeb mezi skupinami OH a případně vznik násobných vazeb u alifatických řetězců, což se projevilo rozštěpením pásu mezi 3500 a 3000 cm⁻¹. Změny byly výraznější u předem vysušených vrstev huminových kyselin a komplexů v důsledku sušení mokřích gelových vrstev až během plazmochemické úpravy. V FT-IR spektrech vrstev připravených z roztoků DMSO nebyly žádné změny pozorovány.

Projekt byl realizován za finanční podpory ze státních prostředků prostřednictvím Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy, projekt č. MSM0021630501.

LITERATURA

1. www.pst-systems.cz
2. www.seesystems.wz.cz

1P-20 CHIRÁLNÍ SEPARACE KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZOU S VYUŽITÍM BEZKONTAKTNÍ VODIVOSTNÍ DETEKCE

**RADIM KNOB, VÍTĚZSLAV MAIER, JAN PETR,
JANA HORÁKOVÁ a JURAJ ŠEVČÍK**

*Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc
rknob@seznam.cz*

Kapilární elektroforéza (CE) představuje moderní sepa-

rační techniku úspěšně používanou pro separace nejen fyziologicky aktivních látek. Díky své vysoké účinnosti, rychlosti, variabilitě a jednoduchosti nalézá uplatnění obzvláště v oblasti chirálních separací. Minimální spotřeba chemikálií dovoluje použití méně běžných či nových a nákladných chirálních selektorů.

Využití bezkontaktního vodivostního detektoru (CCD) umožňuje detekci látek, které neabsorbují v UV-Vis oblasti. Nepřímá detekce použitím UV absorpčního detektoru je sice možná, ale složitá volba pracovních elektrolytů nedovoluje takové možnosti jako právě bezkontaktní vodivostní detekce. Vodivostní detekci je možné využít při detekci jakýchkoli analytů, které se svou vodivostí odlišují od vodivosti základního elektrolytu.

D,L-Mléčná kyselina byla zvolena jako modelový analyt vhodný pro vodivostní detekci bez derivatizace. Pro chirální separaci D,L-mléčné kyseliny byl zvolen vankomycin chlorid jako chirální selektor. Byla studována možnost elektrokinetického částečného plnění kapiláry vancomycinem, která poskytuje nižší detekční limity pro stanovení D,L-mléčné kyseliny a výrazně lepší stabilitu základní linie oproti běžně užívané technice hydrodynamického částečného plnění.

Separace D- a L-enantiomerů kyseliny mléčné jako modelového analytu s karboxylovou skupinou je prezentovaným způsobem dosaženo do 5 minut. Vyvinutá metoda chirální separace D,L-mléčné kyseliny byla aplikována na stanovení enantiomerů mléčné kyseliny ve vzorku jogurtu.

Bezkontaktní vodivostní detekci je možné s výhodou využít i v případě, kdy chirální selektor obsahuje funkční skupiny, které absorbují v UV-Vis oblasti. Lze tak pro chirální separace využít i méně tradiční deriváty cyklodextrinů, jako jsou např. 3,5-Dimethylfenyl- β -cyklodextrin a *R*- nebo *S*-naftylethylkarbamoyl- β -cyklodextrin. Bezkontaktní vodivostní detekce tak představuje rozšíření aplikačních možností CE pro chirální separace.

Autoři děkují za finanční podporu výzkumným záměrům Ministerstva školství č. 619895921 a České společnosti chemické za poskytnutí finančních prostředků na účast.

1P-21

STUDIE ROZLOŽENÍ LOKÁLNÍCH HODNOT POTENCIÁLŮ A PROUDOVÝCH HUSTOT PODÉL BIPOLÁRNÍ ELEKTRODY

KODÝM ROMAN^a, BOUZEK KAREL^{a*}, ŠNITA DALIMIL^b a THONSTADT JOMAR^c

^a Ústav anorganické technologie, ^b Ústav chemického inženýrství, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6; ^c Norwegian University of Science and Technology, Department of Materials Science and Engineering, N-7034 Trondheim, Norway
bouzekk@vscht.cz, roman.kodym@vscht.cz

Zvýšený zájem o výzkum bipolárních elektrod (BE) pozorovatelný v posledních desetiletích je způsoben zejména rostoucími požadavky na kompaktní a výkoná průmyslová elektrochemická zařízení. Přejít z monopolárního na bipolární uspořádání představuje výrazné zjednodušení elektrické

ho obvodu. Vysoké napětí a relativně nízké proudové zatížení typické pro bipolární systémy je výhodné vzhledem k ohmickým ztrátám v přivaděčích proudů a k výkonovým charakteristikám usměrňovačů. Významnou komplikací při průmyslovém použití BE však představují tzv. zkratové proudy, které mohou snížit proudovou účinnost procesu. Pouze pochopením podstaty uvedeného problému lze zamezit nejvýznamnějším komplikacím a zvýšit efektivitu procesů založených na bipolárním uspořádání elektrod. Vývoj a ověření matematických modelů BE je významným příspěvkem k dosažení tohoto cíle.

Tato práce si kládla za cíl vývoj matematického modelu umožňujícího výpočet sekundárního rozložení lokálních proudových hustot v modelovém elektrolyzáru s BE. Realizovaný model využívá k řešení Laplaceovy rovnice metodu konečných objemů. Paralelně s výpočtem byla realizována experimentální část práce. V modelovém elektrolyzáru byla stanovena závislost lokálních hodnot elektrodového potenciálu a proudů tekoucího tělem BE na proudovém zatížení. Stanovena byla rovněž kinetika sledované elektrodové reakce, jež představovala elektrolyza roztoku HCl.

Bylo dosaženo uspokojivé kvalitativní shody mezi experimentálními daty a výsledky matematického modelu. Odchyly byly pozorovány zejména v oblasti vysokých proudových hustot na okrajích BE. Příčinou je učiněný zjednodušující předpoklad plně přístupného povrchu elektrody a homogenního pole vodivosti v celém objemu elektrolyzáru. Jak bylo pozorováno vizuálně v průběhu experimentu, nezanedbatelná část povrchu okrajů BE byla blokována ulpívajícími bublinkami vznikajícími plynů. Rovněž elektrolyt obsahoval v těchto oblastech jistý podíl plynné fáze, v důsledku čehož docházelo k poklesu jeho vodivosti. Tento zjednodušující předpoklad vedl ve svém důsledku k nerealisticky vysokým proudovým hustotám vypočteným modelem a k zúžení aktivních zón BE. Výsledky této práce lze považovat za významný pokrok ve výzkumu BE.

Tato práce vznikla za podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR v rámci projektu CEZ: MSM6046137301.

1P-22

CARBON NANOTUBES BASED DNA BIOSENSOR FOR THE DETECTION OF DNA DAMAGE CAUSED BY QUINAZOLINES

RENÁTA OVÁDEKOVÁ^a, SOŇA JANTOVÁ^b, KATARÍNA ŠPIRKOVÁ^c, ŠTEFAN STANKOVSKÝ^c, and JÁN LABUDA^{a*}

^a Institute of Analytical Chemistry, ^b Institute of Biochemistry, Nutrition and Health Protection, ^c Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, 812 37 Bratislava, Slovakia
jan.labuda@stuba.sk

Interactions of deoxyribonucleic acid, DNA, with low molecular weight compounds represent a fundamental issue in life science. They are, therefore, also a subject of wide investigations done with the DNA-based biosensors. Evaluation of

such interactions helps to understand action mechanisms of drugs, to develop compounds of desired biological activity and, on the other hand, to predict unwanted toxic effects of health risk chemicals and damage to DNA. Different, particularly electrochemical DNA-based biosensors are used advantageously for rapid screening of various compounds.

Quinazoline derivatives are known for a long time and used in the pharmaceutical industry and agriculture due to their wide biological effects. They can act also as anticancer active agents. In our labs, for instance, an inhibition of tumor cell growth by selected quinazolines has been found.

Carbon nanotubes (CNTs) have attracted great attention during the past decade due to their unique mechanical, chemical and electrical properties. Therefore, numerous applications of CNTs have been reported, including the use as field emitters, quantum wires, batteries, ultra-strength engineering fibers and nanoelectronic devices. Their utilization in voltammetric sensors and biosensors is known and rapidly developing as well.

In this work, we report the results obtained with a screen-printed carbon paste electrode chemically modified by a deposit of multiwalled carbon nanotubes and double stranded calf thymus DNA at the investigation of some quinazoline derivatives. Effects of these compounds on integrity of the surface attached DNA regarding both the DNA damage and protection against DNA damage is the aim of the study. Voltammetric and impedance measurements are compared with conventional agarose gel electrophoresis.

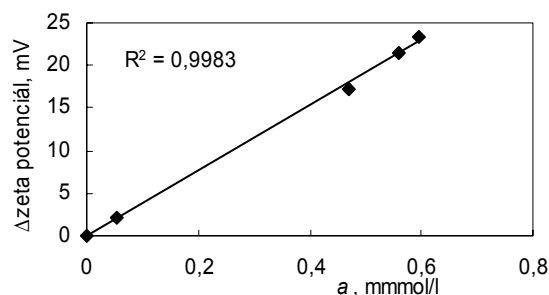
This work was supported by the Grant Agency VEGA, projects No. 1/2462/05 and 2/5002/5.

1P-23 ZETA POTENCIÁL JÍLOVÝCH MINERÁLŮ

ROMAN MARŠÁLEK

*Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta OU, 30. dubna 22,
701 03 Ostrava
roman.marsalek@osu.cz*

Problematicke zeta potenciálu jílových minerálů a studiu faktorů, které ho ovlivňují, je věnována značná pozornost^{1–3}. V této práci byla pozornost zaměřena na adsorpci mědi (II) na jílovém minerálu montmorillonitu. K dispozici byly informace o jeho složení, distribuci velikosti částic, analýzy IR a RTG, známá byla jeho intovyměnná kapacita^{4–6}. Adsorpce proběhla ve vsádkovém uspořádání pro různé koncentrace měďnatých kationtů. Po ustanovení rovnováhy (24 hodin), byly suspence zfiltrvány a obsah mědi byl analyzován (AES-ICP). Byly sestaveny adsorpční isotermy, které byly posléze linearizovány. S výsledku vyplývá dobrá shoda s modelem Langmuirovy isotermy ($R^2 \approx 1$). Bylo vypočteno adsorpční maximum ($a_m = 0,599 \text{ mmol g}^{-1}$), tato hodnota je blízká kationtovyměnné kapacitě daného jílu. Dále byl stanoven zeta potenciál montmorillonitu v závislosti na pH suspenze. Se zvyšujícím se pH hodnota zeta potenciálu klesala. Hodnoty zeta potenciálu nabyly záporných hodnot v rozmezí 16–28 mV, isoelektrický bod tedy nebyl stanoven. Nakonec byl stanoven zeta potenciál v roztocích měďnatých iontů. Se vzrůsta-



Obr. 1. Změna zeta potenciálu vztahovaná na naadsorbované množství mědi

jící koncentraci mědi (II) se zvyšovala hodnota zeta potenciálu. Průběh této změny byl dán do korelace s naadsorbovaným množstvím měďnatých kationtů. Výsledkem je závislost mezi změnou zeta potenciálu a naadsorbovaným množstvím mědi (obr. 1).

Změny způsobené adsorpcí mědi se odráží v hodnotách zeta potenciálu. Tím by tato veličina mohla být v budoucnu dalším nástrojem napomáhajícím k objasnění mechanismu adsorpce, obecně k poznání jevů probíhajících na mezifázových rozhraních.

LITERATURA

1. Lv L., Tsoi G., Zhao X. S.: *Ind. Eng. Chem. Res.* 43, (2004).
2. Sondi I. a kol.: *J. Colloid Interface Sci.* 178, (1996).
3. Zhuang, J., Yu, G.R.: *Chemosphere* 2002, 49.
4. Navrátilová Z., Kula P.: *J. Solid State Electrochem.* 4, 34 (2000).
5. Navrátilová Z., Vaculíková L.: *Chem. Listy* 98, 704 (2003).
6. Vaculíková L., Plevová E.: *Acta Geodynamica et Geomaterialia* 2, 138 (2005).

1P-24 STUDIUM CHITIN-GLUKANOVÉHO KOMPLEXU MYCELIA *ASPERGILLUS NIGER* METODAMI TERMICKÉ ANALÝZY

**KATEŘINA MÍČKOVÁ^a, ANEŽKA TRILČOVÁ^b,
ANDRIY SYNYTSYA^a, PETRA BLAFKOVÁ^a, JANA
EDEROVÁ^b a JANA ČOPÍKOVÁ^a**

^a Ústav chemie a technologie sacharidů, ^b Centrální laboratoře – laboratoř termické analýzy, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 - Dejvice
katerina.mickova@vscht.cz

Mycelium plísně *Aspergillus niger* je běžně používáno pro biotechnologickou výrobu kyseliny citrónové. Odpad mycelia je zajímavý jako zdroj biologicky aktivních polysacharidů pro farmaceutický a potravinářský průmysl. Glukany

izolované z *A. niger* jsou vázány na chitin ve formě nerozpustného chitin-glukanového komplexu. Prvním krokem v postupu izolace tohoto komplexu je alkalická deproteinizace mycelia, pak následuje promytí vodou a ethanolom. Kyselá nebo alkalická deacetylace vede ke vzniku nerozpustného chitosan-glukanového komplexu, který lze využít jako sorbent kationtů těžkých kovů. Cílem této práce bylo sledování strukturních změn mycelia *A. niger* během alkalické deproteinizace a následující deacetylace pomocí termochemické analýzy (DSC a TG). Výrazné rozdíly DSC a TG křivek chitinu, chitosanu a β -glukanu potvrdily, že termický rozklad těchto polysacharidů probíhá různým způsobem. Příčinou odlišností je přítomnost volných aminoskupin u chitosanu. Tuto skutečnost lze využít pro sledování účinnosti deacetylace chitin-glukanového komplexu a strukturního uspořádání jednotlivých polysacharidů. Pomocí DSC a TG byla potvrzena proměna chitinu na chitosan po alkalické deacetylaci komplexu. Charakteristickým znakem chitosanu je exotermický pík s maximem ~ 300 °C, který není přítomen u DSC křivek chitinu a chitin-glukanového komplexu. Výrazné rozdíly mezi průběhem termického rozkladu komplexů a čistého chitinu či chitosanu lze vysvětlit přítomností β -glukanu a strukturní integrací polysacharidových komponent buněčných stěn mycelia.

Tato práce vznikla za podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR (MSM 6046137305).

IP-25 OSCILAČNÝ SYSTÉM ASPIRÍN – BROMIČNAN A HYDROLÝZA ASPIRÍNU

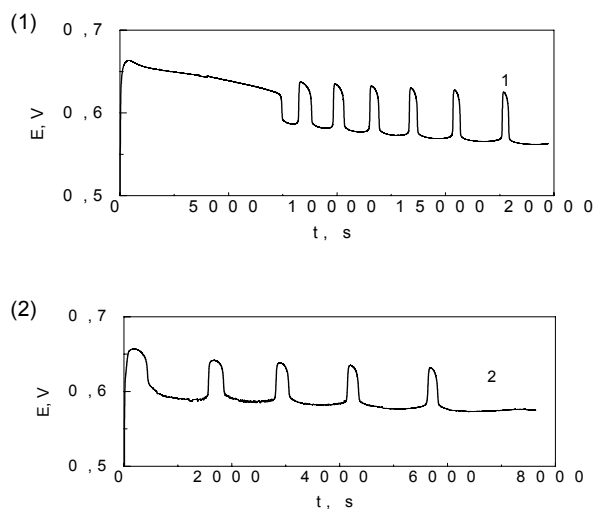
DANIEL MIŠČÍK, PETER ŠEVČÍK a EUBICA
ADAMČÍKOVÁ*

Katedra fyzikální a teoretické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava

misicak@fns.uniba.sk

Klasickým příkladem katalyzovaného oscilátora je Belousovova-Žabotinského (BŽ) reakce¹. Pozoruhodnou podskupinou BŽ reakce sú nekatalyzované bromičnanové oscilátory. V těchto systémech organické substráty prevezmú niektoré funkcie katalyzátora^{2,3} a ľahko sa aj oxidujú. Nedávno sme popísali nový nekatalyzovaný bromičnanový oscilátor so substrátom aspirínom (kyselina acetylsalicylová)⁴. Inšpiráciou ďalšieho štúdia tohto oscilátora bol fakt, že aspirín je svetoznámy liekom a má rozsiahle využitie. Okrem antipyretických a analgetických účinkov je aj dobrým antikoagulantom, čo sa využíva na prevenciu voči infarktu myokardu.

Obr. 1(1) nám zobrazuje potenciometrické zmeny namerané v nekatalyzovanom systéme aspirín - bromičnan za reakčných podmienok: 0,05 M NaBrO₃, 7,6·10⁻³ M aspirín, 1 M H₂SO₄, t = 40 °C a miešanie 100 RPM. Len čerstvo pripravený vodný roztok aspirínu generoval takýto priebeh reakcie. Indukčná perióda (IP) je ~ 120 min. IP je čas, ktorý uplynie od zmiešania reaktantov až po prvé maximum elektródového potenciálu. Obr. 1(2) nám znázorňuje ten istý systém za tých istých podmienok, len merania boli uskutočnené s rozto-

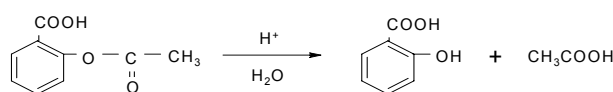


Obr. 1. Časová závislosť potenciálu Pt elektródy v systéme NaBrO₃ - aspirín - H₂SO₄

kom aspirínu, ktorý bol starý 13 dní. V tomto prípade sa nemerala žiadna IP, systém začal hneď oscilovať. IP sa skracovala exponenciálne s časom, počas ktorého bol zásobný roztok aspirínu skladovaný v laboratóriu. Hydrolyza aspirínu môže byť hlavnou príčinou nestálosti roztokov aspirínu.

Hydrolyza aspirínu bola detailne preštudovaná Edwardsom⁵. Proces môže byť katalyzovaný kyselinou alebo zásadou alebo nekatalyzovaný (spontánny). Marrs⁶ nameril rýchlostnú konštantu hydrolyzy aspirínu $k = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ pri $t = 40$ °C a pH 2,8. Prevedením na dni^{-1} a znížením teploty na 22 °C, $k = 0,08 \text{ dni}^{-1}$. Reakčné produkty hydrolyzy aspirínu sú kyselina salicylová a kyselina octová (obr. 2). Kyselina salicylová môže hrať úlohu aktívneho substrátu. Predpokladáme, že IP našej oscilačnej reakcie zodpovedá času, počas ktorého bol aspirín v zásobnom vodnom roztoku pri laboratórnej teplote $t = 22$ °C, alebo inými slovami, IP je čas potrebný na nahromadenie postačujúceho množstva kyseliny salicylovej na naštartovanie oscilácií. Pripravili sme si rôzne staré vodné roztoky aspirínu a s nimi sme merali oscilačné záznamy. IP klesala exponenciálne s časom. Platí kinetická rovnica pseudo-prvého poriadku $-d[\text{aspirín}]/dt = k_{\text{exp}} [\text{aspirín}]$. Zo závislosti $\ln IP$ od času sme metódou najmenších štvorcov určili $k_{\text{exp}} = 0,149 \text{ dni}^{-1}$ pri $t = 22$ °C.

Boli sme schopní nájsť koncentračné podmienky za ktorých aj systém NaBrO₃ - kyselina salicylová - H₂SO₄ osciloval. Počet oscilácií narastal s prídavkom katalyzátora (Mn(II), Ce(IV) alebo feroínu). Napríklad, systém 0,01 M kyselina salicylová, 0,04 M NaBrO₃ a 1,5 M H₂SO₄ nám vykazuje 3 oscilácie po IP ~ 7 minút v uzavretej sklenej nádobke s miešaním a teplotou 40 °C. Ak sme do systému pridal 2,5·10⁻⁵



Obr. 2. Hydrolyza aspirínu

M feroin, IP sa predĺžila na 12 minút a počet oscilácií narástol na 18.

Kyselina acetylsalicylová môže byť nahradená lekárskeym aspirínom. Použili sme aspirín od firiem Bayer AG a Zentiva Hlohovec. Taktiež v tomto prípade, IP klesala s časom, počas ktorého tabletky aspirínu boli v kontakte s vodou.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA MŠ SR č. 1/3570/06 a grantu UK 153/2006.

LITERATÚRA

1. Field R. J., Burger M.: *Oscillation and Traveling Waves in Chemical Systems*. Wiley – Interscience, New York (1985).
2. Körös E., Orban M.: *Nature* 273, 371 (1978).
3. Adamčíková L., Färbulová Z., Ševčík P.: *New J. Chem.* 25, 487 (2001).
4. Adamčíková L., Mišicák D., Ševčík P.: *React. Kinet. Catal. Lett.* 85, No. 2, 215 (2005).
5. Edwards L. J.: *Trans. Faraday Soc.* 46, 723 (1950).
6. Marrs P. S.: *J. Chem. Educ.* 81, 870 (2004).

1P-26

DETERMINATION OF P-ORG SPECIES IN FUNGUS *XEROCOMUS BADIUS* BY ^{31}P NMR SPECTROSCOPY

FRANTIŠEK NOVÁK^a, ONDŘEJ KOUKOL^b,
RICHARD HRABAL^c, IVANA BARTOŠOVÁ^c,
and JIŘÍ KALČÍK^a

^a Biological Centre AS CR, Inst. Soil Biology, Na Sádkách 7, 370 05 České Budějovice, ^b Institute of Botany, AS CR, 252 43 Průhonice, ^c NMR laboratory, ICT Prague, Technická 1905, 166 28 Prague
novakf@upb.cas.cz

^{31}P NMR spectroscopy is an irreplaceable analytical method for direct identification of phosphorus species in natural samples, e.g. humic substances or plant extracts¹. We used this method to determine P species in mycelium and sporocarps of ectomycorrhizal fungus *Xerocomus badius* (Fr.) Kühn. ex Gilb.

Undamaged sporocarps of the fungus *X. badius* and spruce litter colonized with mycelium evidently originating from the same sporocarps were sampled in mountain spruce forest (Kleť Mt., Southern Bohemia, 900 m a.s.l., exposition E) in October 2005. Stipes and pilei were sliced and air dried. Dry slices and litter colonized with mycelium were homogenized in a laboratory grinder. Alkaline extracts from pilei and litter (0.1 M NaOH) were prepared after powdered samples decalcification by 0.1 M HCl. Extracts were immediately concentrated in ultrafiltration cell Amicon with membrane YM1, and freeze-dried. The ^{31}P NMR spectra of extracts diluted in 0.1 M NaOD were recorded on Bruker Avance DRX 500 spectrometer operating at frequency of 202.45 MHz using the following parameters: recycle delay of 2 s, number of scans 10 000, broad-band decoupling and temperature of 298 K. The FID was processed with line broadening of 10 Hz, chemical shifts were measured relative to an external standard (85%

Table I

Content of individual P species in extracts from *X. badius* sporocarp and litter colonized with *X. badius* mycelium

P type	sporocarp	litter + mycelium
	[mg kg ⁻¹]	[mg kg ⁻¹]
Phosphonates	14	39
<i>o</i> -Phosphate	384	105
Phosphate monoesters	6478	459
Unresolv. phosphate esters	45	103
Phosphate diesters	2122	659
Diphosphate + Polyphosph.	1670	311
Total P	10713 ± 102	1676 ± 35

H₃PO₄). Signal assignment was made according to our previous work¹. Quantitative analysis was achieved by instrumental integration of NMR peaks, content of individual phosphorus species was expressed relatively to the total phosphorus (P_t) content.

^{31}P NMR spectrum of the *X. badius* sporocarp extract is shown in Fig. 1, main results are summarized in Table I. High content of P_t in sporocarp (10.7 g kg⁻¹) demonstrates the important role of studied fungus in phosphorus transformations. Surprisingly, high concentration of phosphate monoesters in sporocarp (60.5 %) contrasted with 27.4 % of P_t in litter colonized with fungal mycelium. Phosphate diesters, represented namely by DNA with its signal around 0 ppm, were the second most abundant P species. Synthesis of diphosphates and polyphosphates, characteristic for fungi², resulted in their accumulation in both sporocarp (15.6 %) and colonized litter (18.6 %). Orthophosphate contents in both extracts were low,

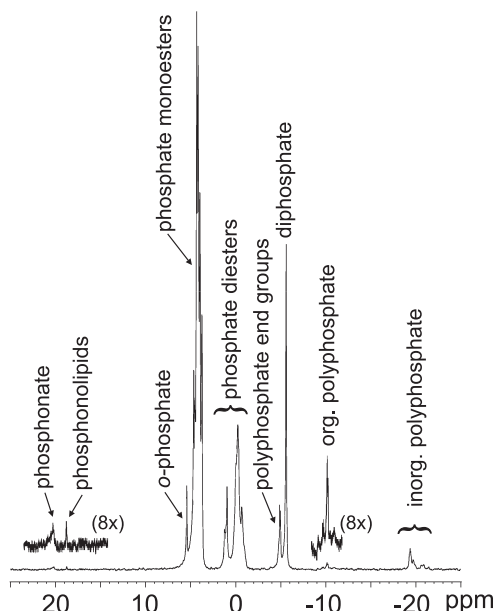


Fig. 1. ^{31}P NMR spectrum of *X. badius* sporocarp extract. Areas on inserted charts are magnified vertically by 8

indicating high degree of inorganic P conversion by fungal activity. Moreover, part of detected *o*-phosphates probably originated from hydrolysis of phosphate esters in alkaline solution. Phosphonates, reported once to be products of protozoan metabolism³ and irregularly found in acid soils or peat, were present in higher concentration in colonized litter (2.3 %). Traces of phosphonates were detected also in sporocarp (Fig. 1). In view of our results, we concluded that apart from saprotrophic macrofungi², mycorrhizal fungi produce phosphonates (phosphonolipids) in their mycelia as well. This original finding can explicate the presence of phosphonates in acid forest soils, so far explained as a consequence of restricted mineralization⁴ without adequate identification of their origin.

This work was supported by Grant Agency of the Czech Republic (Project no. 206/05/0269).

REFERENCES

1. Novák F., Hrabal R., Bartošová I., Kalčík J.: Chem. Listy 99, 236 (2005).
2. Novák F., Hrabal R., Koukol O., Bartošová I., Kalčík J., in: *Humic Subst. Ecosyst. 6*, Zaujec A. (ed.), p. 122 (2005).
3. Kittredge J. S., Roberts E.: *Science* 164, 37 (1969).
4. Turner B. L., Baxter R., Mahieu N., Sjögersten S., Whitton B. A.: *Soil Biol. Biochem.* 36, 815 (2004).

1P-27

ANALÝZA FOSFOLIPIDOVÝCH BIOMARKERŮ PLYNOVOU CHROMATOGRÁFIÍ

STANISLAV OPLUŠTIL^a, PETR BARTÁK^a, MARTIN RULÍK^b, DAVID CHRÁSTINA^a a LUBOMÍR ČÁP^a

^a Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Třída Svobody 8, 771 46 Olomouc, ^b Katedra Ekologie a životního prostředí, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc
s.oplustil@post.cz

Biologické membrány jsou předmětem zájmu badatelů, protože je s nimi spojeno mnoho životně důležitých procesů. K popisu mikrobiálních společenstev se používá analýza fosfolipidových mastných kyselin (PLFA)¹. Metoda je založena na extrakci lipidů, izolaci fosfolipidové frakce, methanolýze a plynově chromatografickým stanovení methylesterů mastných kyselin.

Archaeobaktérie se liší od ostatních bakterií obsahem tzv. etherových lipidů, kde jsou kyseliny spojeny s glycerolem etherovou vazbou místo esterové². Hlavními lipidy jsou diethery či tetraethery. Polární etherové lipidy tvoří 80–95 % membránových lipidů archaeobakterií. Zbývajících 5–20 % tvoří převážně neutrální skvalény (C₃₀) a jiné izoprenoidy³. Studium biochemické, genetické a molekulárně-biologické podstaty Archaea může pomoci porozumět procesu evoluce a má význam i při biotechnologické aplikaci.

Postup analýzy etherových lipidů spočívá v extrakci směsí methanol : chloroform : pufr (2 : 1 : 0,8). Po extrakci se

esterové lipidy hydrolyzují směsí hydroxidu draselného, vody a methanolu. Po ukončení hydrolyzy se etherové lipidy extrahují směsí hexan : chloroform (4 : 1). Volná hydroxylová skupina etherových lipidů se silyluje bis(trimethylsilyl) trifluoroacetamidem (BSTFA). Po odpaření se vzorek rozpuští v hexanu a nanáší do plynového chromatografu s hmotnostním spektrometrem.

Plakátové sdělení je věnováno možnostem charakterizace mikrobiálních společenstev v přírodních sedimentech. Ve vyhřívacím kalu z čistírny odpadních vod byly vedle bohatého spektra esterově vázaných mastných kyselin detegovány též dva zástupci etherových biomarkerů archaeobakterií (*O,O'*-bis(3,7,11-trimethyl)dodecyl-glycerolether a *O,O'*-bis(3,7,11,15-tetramethyl)hexadecyl-glycerolether) v množství 0,12 resp. 0,023 mg kg⁻¹.

Autoři děkují Ministerstvu školství mládeže a tělovýchovy za finanční podporu (Grant č. MSM 6198959216) a České společnosti chemické za poskytnutí cestovního grantu.

LITERATURA

1. Kaneda T.: *Mikrobiol. Rev.* 55, 288 (1991).
2. Chan M., Himes R. H. Akai J. M.: *J. Bacteriol.* 106, 876 (1971).
3. Kates M.: *The Biochemistry of Archaea*. kap 9. Elsevier Science Publisher B. V., Ottawa 1993.

1P-28

SIMS CHARAKTERIZÁCIA: HYDROFOBIZÁCIA A KARBONIZÁCIA ZEOLITOV

JANA OSLANSKÁ^a, MONIKA ARANYOSIOVÁ^b, EVA CHMIELEWSKA^a, DUŠAN CHORVÁT^b a DUŠAN VELIČ^{a,b}

^a Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovenská republika; ^b Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovenská republika
oslanska@post.sk

Zeolity tvoria v prírode pomerne rozšírenú skupinu hydratovaných hlinitokremičitanov. Ich základnou štruktúrnou jednotkou sú tetraédre SiO₄⁴⁻ a AlO₄⁵⁻. Záporný náboj aluminosilikátovej kostry je kompenzovaný kationmi alkalických kovov a kovov alkalických zemín^{1,2}. Zeolity vďaka svojej stavbe vykazujú veľmi dobré selektívne a sorpčné vlastnosti, ktoré tvoria základ pre ich využitie v molekulovej adsorpcii a nachádzajú tak praktické využitie hlavne v oblasti ochrany životného prostredia. V rámci možností ich využitia v praxi je možné meniť ich povrch, čím je možné ovplyvniť aj ich fyzikálne – chemické vlastnosti. Na zlepšenie sorpčných a katalytických vlastností sa zeolity termicky alebo chemicky aktivujú. Chemicky je možné povrch zeolitov modifikovať naviazaním rôznych funkčných skupín. V závislosti od vlastností a zloženia týchto skupín sa menia vlastnosti zeolitov od hydrofilných až po hydrofóbné.

Táto práca poskytuje modifikáciu prírodného zeolitu hydrofóbnym oktadecylamínom (ODA), následnú karbonizáciu kontrolovanou pyrolýzou a analýzu takto modifikovaného

zeolitu technikou SIMS (hmotnostná spektrometria sekundárných iónov) vo forme hmotnostných spektier a dvojdimenzionálnych zobrazení. Hydrofobizovaný zeolit sa pripravil adsorpciou molekuly ODA na povrchu prírodného zeolitu. Prítomnosť hydrofóbnej molekuly $C_{18}H_{39}N$ v chemicky modifikovanom hydrofobizovanom zeolite potvrdila analýza hmotnostného spektra, ktoré obsahuje okrem maximálnych základných prvkov štruktúry zeolitu najmä molekulový ión pri $m/z = 270$. Kontrolovanou termálnou analýzou sa pripravila séria špecifických kompozitov. Teplota neprekročila limit $600\text{ }^{\circ}\text{C}$, preto neboli úplne skarbonizované fragmenty hydrofóbnej molekuly, ktorých prítomnosť sa potvrdila tak v spektrách ako aj v 2D prvkovej mape. Intenzita molekuly ODA ale so vzrastajúcou teplotou vykazovala klesajúci trend a po termickej úprave bola minimálna.

Zmena povrchu zeolitu sa prejavila v rôznych intenzitách identických prvkov a pomery fragmentov sa menili.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/2447/05, 1/3577/06, APVT – 20 – 029804.

LITERATÚRA

1. Bowman R. S., Hunter D. B., Sullivan E. J.: *Clays Clay Miner.* 45, 42 (1997).
2. Voltolini M., Artioli G., Morget M.: *Microp. Mesop. Mater.* 61, 79 (2003).

1P-29

EXTRAKČNĚ-VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ NITROVANÝCH DERIVÁTŮ NAFTALENU

KAROLINA PECKOVÁ, JIŘÍ ZIMA a JIŘÍ BAREK

*UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Albertov 6, 128 43 Praha 2
kpeckova@natur.cuni.cz*

Nitrované polycyklické aromatické uhlovodíky (NPAH) patří mezi nejvýznamnější polutanty životního a pracovního prostředí. Vzhledem k jejich genotoxickým a/nebo karcinogenním účinkům je monitorování jejich výskytu věnována mimořádná pozornost¹. Nitrované deriváty naftalenu jsou typickými reprezentanty NPAH, jejichž toxicita je závislá na poloze a počtu nitroskupin².

V této studii jsme se zaměřili na stanovení genotoxických derivátů naftalenu, konkrétně 1-nitronaftalenu (1-NN) a 2-nitronaftalenu (2-NN) v modelových vzorcích pitné a říční vody. Pro přímé stanovení obou analytů ve zmíněných maticích do koncentrací $\sim 3 \cdot 10^{-8} \text{ mol L}^{-1}$ je možné využít metodu diferenční pulsní voltametrie na visící rtuťové kapkové elektrodě (DPV na HMDE). Pro stanovení nižších koncentrací byla ověřena možnost předběžné separace a prekoncentrace analytů pomocí kapalinové extrakce (voda - hexan) a extrakce na tuhé fázi. Při použití první metody sice docházelo k extrakci obou látek do organického rozpouštědla, ale v důsledku strhávání těchto látek do plynné fáze při jeho odpařování byly získávány nereprodukovatelné výtěžky, zejména v případě 1-NN. Tato technika byla proto použita pouze pro 2-NN a jeho extrakci z pitné vody. Jako vhodnější se ukázala ex-

trakce tuhou fází, kdy bylo možno analyt zachycený v kolonce (RP-select B (RP18 fáze), Merck) eluovat přímo methanolem mísitelným s vodnou složkou základního elektrolytu, a proto nebyl odpařovací krok nutný. Výtěžky těchto extrakcí z pitné a říční vody se pohybovaly v rozmezí 70–95 % a meze stanovitelnosti při použití DPV na HMDE dosáhly hodnoty $2 \cdot 10^{-10} \text{ mol L}^{-1}$ (1-NN) a $3 \cdot 10^{-10} \text{ mol L}^{-1}$ (2-NN) pro pitnou vodu a $2 \cdot 10^{-9} \text{ mol L}^{-1}$ (1-NN) a $3 \cdot 10^{-9} \text{ mol L}^{-1}$ (2-NN) pro říční vodu. Dále byla ověřena možnost nahradit rtuť jakožto nejrozšířenější elektrodový materiál netradiční stříbrnou tuhou amalgamovou elektrodou modifikovanou rtuťovým meniskem (m-AgSAE) (cit.³) k voltametrickému stanovení analytů po extrakčním kroku.

Tento výzkum byl finančně podporován MŠMT ČR (projekt LC 06035).

1. Barek J., Mejstřík V., Muck A., Zima J.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 30, 37 (2000).
2. Iwata N., Fukuhara K., Suzuki K., Miyata N., Takawashi A.: *Chem. Biol. Interact.* 85, 187 (1992).
3. Yosypchuk B., Novotný L.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 32, 141 (2002).

1P-30

ACIDOBAZICKÉ VLASTNOSTI JIHOMORAVSKÉHO LIGNITU

MILOSLAV PEKAŘ^a, PETRA ZEDNÍČKOVÁ^a a IVAN KOUTNÍK^b

*^a Ústav fyzikální a spotřební chemie, Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno,
^b Katedra chemie, Fakulta metalurgie a materiálového inženýrství, Vysoká škola báňská-Technická univerzita Ostrava, 17.listopadu 15/2172, 708 33 Ostrava-Poruba
pekar@fch.vutbr.cz; ivan.koutnik@vsb.cz*

Lignit dosud představuje zejména palivářskou surovinu. Vzhledem k jeho složení a fyzikálně-chemickým vlastnostem je však mnohem racionálnější pohlízet na něj jako na chemickou surovinu, která může být využitelná v různých oborech i přímo v přírodním stavu¹. Jako příklad lze uvést aplikace lignitu do půd v širokém slova smyslu – od aplikace povrchové po hloubkovou. Zde lignit může sloužit jako podpůrný prostředek výživy rostlin prostřednictvím regulace transportu živin a života půdní mikroflóry, jako imobilizátor anorganických i organických polutantů a bariéra jejich průniku např. do spodních vod, jako preparát zlepšující strukturu půdy a její vodní režim. Při takovýchto ekologických a zemědělských aplikacích jsou pochopitelně důležité znalosti o chování a stabilitě samotného lignitu v přírodním prostředí. Tento příspěvek se věnuje zkoumání acidobazických vlastností lignitu za modelových laboratorních podmínek. Smyslem studií je získat podklady pro posouzení vlivu lignitu na půdní reakci (pH půdy), která představuje jednu ze základních charakteristik půd a informace o chování lignitu ve vodě, resp. vodných prostředích o různém pH.

Příspěvek uvádí výsledky měření pH výluhů lignitu ve vodě a roztoku KCl, vývoje pH suspenze lignit-puf

s kyselým, neutrálným a zásaditým výchozím pH a titraci vodných suspenzií lignitu roztokem NaOH a HCl.

Lignit vykazuje v neutrálném vodném prostředí mírné kyselé chování (pH výluhů 5–6), jak lze očekávat vzhledem k vysokému obsahu huminových kyselin². V alkalickém prostředí dochází k částečnému rozpouštění lignitu – uvolňování huminových kyselin. Lignit však vykazuje výraznou pufrací schopnost, a to nejen v alkalické oblasti, kde ji lze očekávat opět z důvodů obsahu huminových kyselin, ale i v oblasti kyselé, byť ve znatelně menší míře. Acidobazické vlastnosti lignitu tak zřejmě nebudou důsledkem pouze disociačních reakcí a jejich rovnováh, ale budou k nim přispívat i procesy sorpčního charakteru, prostřednictvím fyzikálních interakcí povrchu lignitu–H⁺, popř. OH⁻ ionty.

Projekt byl realizován za finanční podpory ze státních prostředků prostřednictvím Grantové Agentury České republiky, č. 105/05/0404.

LITERATURA

1. Pekař M., Klučáková M.: CHEMagazín 13, 8 (2003).
2. Kučerík J., Pekař M., Klučáková M.: Petrol. Coal 45, 58 (2003).

1P-31

ELIMINAČNÁ VOLTAMPÉROMETRIA – SLEDOVANIE VPLYVU KONCENTRÁCIE CHLORIDOVÝCH IÓNOV A pH ELEKTROLYTU NA ANODICKÉ ROZPŮŠŤANIE Fe PRÁŠKU

EUBOMÍR PIKNA^a a LIBUŠE TRNKOVÁ^b

^a Katedra chémie, Hutnícka fakulta TU Košice, Letná 9, 042 00 Košice, Slovenská republika, ^b Katedra teoretické a fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Česká republika
Lubomir.Pikna@tuke.sk, libuse@chemi.muni.cz

Z nameraných prúdovo-napät'ových kriviek získaných v CV alebo LSV je eliminačná voltampérometria (Elimination Voltammetry with Linear Scan – EVLS) schopná eliminovať vybraný čiastkový prúd (kapacitný, difúzny, kinetický), a to vytvorením novej prúdovej funkcie v podobe lineárnej kombinácie celkových prúdov meraných pri rôznych rýchlostiach polarizácie¹⁻³. Okrem použitia EVLS pri roztokovej analýze¹ sa táto metóda uplatnila aj pri charakterizácii vlastností vylúčeného povlaku niklu na tuhej parafinovej impregnovanej grafitovej elektróde⁴.

My sme túto metódu využili pri skúmaní zmien v mechanizme anodického rozpúšťania imobilizovaného Fe prášku vplyvom zmeny pH octanového elektrolytu. Zmena pH elektrolytu výrazne ovplyvnila proces anodickej oxidácie Fe prášku, čo sa prejavilo aj na eliminačnej funkcii, ktorá eliminuje kapacitný a kinetický prúd a zachováva prúd difúzny. Na základe EVLS výsledkov bolo zistené, že zmena pH elektrolytu v rozsahu 4–6 ovplyvňuje hlavne procesy odhrávajúce sa v adsorbovanom stave prvého anodického píku, zatiaľ čo zvyšovanie pH sa výrazne neprejavilo na procesoch charakterizovaných druhým anodickým píkom.

V ďalšej časti sme sa zamerali na preskúmanie vplyvu

chloridových iónov ako aktivátorov korózie v octanovom elektrolyte na voltampérometrické záznamy a hlavne, ako sa tento vplyv odzrkadlí na eliminačných funkciách.

Príspevok vznikol s podporou GA SR VEGA č. 1/1108/04 a agentúry APVT- grant č. 20-009404, GA AV ČR – grant č. A100040602 a výskumného projektu INCHEMBIOL (MSM 0021622412) poskytnutý od MŠMT ČR.

LITERATÚRA

1. Trnková L., Dračka O.: J. Electroanal. Chem. 413, 123 (1996).
2. Trnková L.: Chem. Listy 95, 518 (2001).
3. Trnková L.: J. Electroanal. Chem. 582, 258 (2005).
4. Oriňáková R., Trnková L., Gálová M., Šupicová M.: Electrochim. Acta 49, 3587 (2004).

1P-32

SUPRAMOLEKULOVÉ KOMPLEXY KUMARÍNU S CYKLODEXTRÍNMI ŠTUDOVANÉ FLUORESCENČNOU SPEKTROSKOPIOU A HMOTNOSTNOU SPEKTROMETRIOU

LADISLAV RÁBARA^a a DUŠAN VELIČ^{a,b}

^a Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Mlynská dolina CH1-329, 841 04 Bratislava 4, ^b Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava 4
rabara@fns.uniba.sk

Fluorescenčné vlastnosti látok sú závislé od prostredia, pričom najvýznamnejší vplyv na fluorescenciu má polarita prostredia. Táto skutočnosť je využitá pri charakterizácii matrice vytvorenej z cyklodextrínov (CD) alebo chemicky modifikovaných CD.

Na vyšetrovanie komplexačných vlastností v roztoku bol použitý 7-dietylamo-4-metylkumarín (C1; C₁₄H₁₇NO₂, M = 231,29). Pomocou statickej fluorescenčnej spektroskopie boli pozorované vlnové dĺžky maxima excitácie 375 nm a maxima fluorescencie 467 nm vodného roztoku C1. V prostredí β-CD sa pozoroval posun vlnovej dĺžky maxima fluorescencie C1 na 447 nm, pričom s klesajúcou koncentraciou β-CD vzrastala vlnová dĺžka maxima fluorescencie až na 467 nm prislúchajúcej fluorescenčnému maximu C1 vo vodnom roztoku, ktoré sa dosiahlo pri vyrovnanom pomere látkových množstiev β-CD : C1. Posun vlnovej dĺžky maxima excitácie C1 v prostredí β-CD nebol pozorovaný. Prostredie vodného roztoku α-CD nemalo vplyv na vlnovú dĺžku maxima excitácie ani maxima fluorescencie C1.

Na podporu tvorby komplexov bola použitá i technika hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov (Secondary Ion Mass Spectrometry, SIMS). Princíp tejto metódy spočíva v bombardovaní povrchu vzorky prúdom vysokoenergetických primárnych iónov vo forme Au⁺ resp. Au₃⁺. Z povrchu vzorky sú vyrazené častice nabité i elektricky neutrálne v podobe atómov, fragmentov a molekúl¹. V hmotnostných spektrách boli pozorované píky pri m/z 231 pre C1, 1157 pre β-CD kationizovaný sodíkom a 1366 pre komplex β-CD s C1 v pomere 1:1 so zodpovedajúcou izotopovou distribúciou.

V prípade α -CD sa pozorovali píky pri m/z 995 pre α -CD bez predpokladaného komplexu α -CD s C1.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/2447/05, VEGA 1/3577/06 a APVT-20-029804.

LITERATÚRA

- Vickermann J., Briggs D.: *ToF-SIMS: Surface Analysis by Mass Spectrometry*. Surface Spectra & IM Publications, Chichester 2001.

1P-33

ŠTÚDIUM MOŽNOSTI VYUŽITIA ULTRAZVUKU VO FRAKČIONAČNEJ ANALÝZE PRAŠNÝCH SPADOV

DAGMAR REMETEIOVÁ, EMÍLIA SMINČÁKOVÁ
a RADOSLAV RUSNÁK

Katedra chémie, Hutnícka Fakulta, Technická Univerzita Košice, Letná 9, 042 00 Košice, Slovenská republika
dagmar.remeteiova@tuke.sk

Frakcionačná analýza je akýkoľvek izolačno-separačný postup, prípadne sekvenčne zoradené postupy, vedúci ku klasifikácii analytov alebo skupiny analytov do frakcií na základe podobných fyzikálnych alebo chemických vlastností¹. Jednou z metód, ktorá je vo frakcionačnej analýze používaná na izoláciu rôznych fyzikálno-chemických prvkových foriem (frakcií) na základe ich rozdielnych rozpustností v definovaných extrakčných činidlách je jednorázová extrakcia².

Na štúdium bola použitá vzorka spadu pochádzajúca z oblasti zaťaženej prednostne spadam z hutníckeho priemyslu. Klasická extrakcia bola realizovaná vytrepávaním vzorky a extrakčného činidla (0,05 M Na₂EDTA) v polyetylénových nádobách po dobu 1 hodiny, postupom používaným na vzorky pôd a sedimentov² a optimalizovaným na vzorky spadov³. Ak do suspenzie vzorky a extrakčného činidla zavedieme ultrazvuk, dochádza k podobnému javu ako pri vytrepávaní. Nastáva čiastočná, resp. úplná extrakcia prvkov zo vzorky a zároveň znižovanie veľkosti častíc vzorky, čo má za následok zväčšenie povrchu častíc, ako aj plochy kontaktu vzorky a extrakčného činidla. V takomto experimentálnom usporiadaní je možné predpokladať, že dôjde k urýchleniu extrakcie a teda k skráteniu extrakčnej doby potrebnej na úplné vyextrahovanie prvkov v zodpovedajúcich formách zo vzorky.

Na extrakciu ultrazvukom bol použitý ultrazvukový dezintegrátor UZD 500 a v tejto etape štúdia bol sledovaný vplyv doby extrakcie a výkonu ultrazvuku, pri konštantnej hĺbke ponoru čela ultrazvukovej sondy (1,5 cm), na výťažnosti vybraných prvkov v extraktoch. Pomer hmotnosti vzorky k objemu extrakčného činidla (0,5 g / 75 cm³) bol rovnaký ako pri použití klasickej extrakcie.

Po skončení extrakcií boli extrakty prefiltrované cez vhodne upravené filtračné papiere s najjemnejšími pórnami a obsahy Cu, Pb a Zn vo filtrátoch stanovené metódou atómovej absorpčnej spektrometrie s plameňovou atomizáciou na prístroji PERKIN ELMER 3030.

Tabuľka I

Vplyv výkonu generátora ultrazvuku na výťažnosť Cu, Pb a Zn v extraktoch pri konštantnej dobe extrakcie = 3 minúty

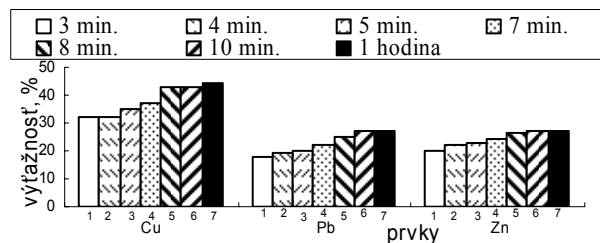
Výkon generátora [%]	Výťažnosť [%]		
	Cu	Pb	Zn
70	20,0	10,2	10,5
80	25,8	11,7	15,0
90	31,8	18,2	19,8
100	25,7	14,7	17,8

Štatistickým vyhodnotením jednotlivých krokov frakcionačnej analýzy uskutočnenej klasickou extrakciou bolo zistené, že najväčším zdrojom neistôt v celom frakcionačnom postupe je samotná extrakcia. Hodnotené prvky boli vybrané tak, aby sa ich obsahy v extrakte nachádzali na rôznych koncentračných hladinách.

V prvej sérii experimentov ultrazvukovej extrakcie bol sledovaný vplyv výkonu generátora ultrazvuku na výťažnosť prvkov v extraktoch po 3 minútach extrakcie. Výsledky týchto experimentov sú uvedené v tabuľke I. Z výsledkov vyplýva, že najvyššia výťažnosť všetkých sledovaných prvkov bola dosiahnutá pri 90 % výkone generátora. Zvýšením výkonu na 100 % došlo k poklesu výťažnosti.

Ďalšia séria experimentov bola zameraná na sledovanie vplyvu doby extrakcie na výťažnosť prvkov pri konštantnom výkone generátora (90 %). Získané výťažnosti Cu, Pb a Zn z tejto série experimentov spolu s výťažnosťami získanými klasickou extrakciou sú znázornené na obr. 1.

Zo zistených výťažností je možné usúdiť, že po 8 minútach ultrazvukovej extrakcie (stĺpec 5) pri výkone generátora 90 % dochádza k vyextrahovaniu viac ako 97 % prvku z jeho obsahu vyextrahovaného použitím klasickej extrakcie. Tieto výsledky potvrdzujú predpoklad, že pôsobením ultrazvuku dochádza k urýchleniu procesu extrakcie oproti klasickejmu postupu vytrepávaním. Rýchlosť ultrazvukovej extrakcie, okrem týchto sledovaných parametrov, môže ovplyvňovať aj hĺbka ponoru čela ultrazvukovej sondy, ktorej vplyv bude sledovaný v ďalšej sérii experimentov.



Obr. 1. Vplyv doby ultrazvukovej extrakcie na výťažnosť Cu, Pb a Zn v extrakte EDTA (stĺpce 1–6) a výťažnosť týchto prvkov v extrakte hodinovej klasickej extrakcie (stĺpec 7)

Autori ďakujú grantovej agentúre SR za podporu. Táto práca vznikla s podporou APVT č. 20-0094-04.

LITERATÚRA

1. Templeton D. M., Ariese F., Cornelis R., Danielsson L. G., Muntau H., Leeuwen H. P. van, Łobiński R.: IUPAC Recommendations 2000, Pure Appl. Chem. 72 (8), 1453, (2000).
2. Ure A. M., Davidson C. M., Thomas R. P., v knihe: *Quality Assurance for Environmental Analysis*, kap. 20, str. 505. Elsevier Science B. V., 1995.
3. Remeteiová D., Krakovská E., Tomko J., Sminčáková E.: *Mikroelementy 2002*, 124 (2002).

1P-34

KALIBRAČNÝ POSTUP PRI OPTIMALIZÁCIÍ NOVEJ SPEKTROMETRICKEJ TANDEMOVEJ TECHNIKY

SILVIA RUŽIČKOVÁ a **MIKULÁŠ MATHERNY**

*Katedra chémie, Hutnícka fakulta, Technická univerzita v Košiciach, Letná 9, 042 00 Košice, Slovenská republika
silvia.ruzickova@tuke.sk*

Navrhovaná tandemová technika je založená na vyparovaní práškovej vzorky vo vysokoenergetickom riadenom oblúku jednosmerného prúdu (DC) v cele pre tvorbu pár a následnom transportovaní vzniknutého aerosólu vzorky do Marinkovičovho plazmového zdroja. Samotnému štúdiu kalibračných závislostí predchádzala prieskumová štatistická analýza jednorozmerných vstupných údajov, ktorej cieľom bolo zistenie výkonnosti novej tandemovej techniky. Získané súbory intenzít, spracované a štatisticky vyhodnotené softverom QC. ExpertTM 2.5 (cit.¹), potvrdili v prevažnej väčšine prípadov (Al, Fe, Mg, Ni, V) normálny a homogénny charakter rozloženia intenzít vybraných spektrálnych čiar a boli použité pre optimalizáciu analytickej kalibrácie. Analytická priamka sa konštruovala metódou najmenších štvorcov uvedeným softverom a v súlade s údajmi v literatúre² najskôr z pôvodného počtu kalibrujúcich intenzitných hodnôt a potom z „očisteného“ súboru, v ktorom sa už nenachádzali extrémne a vybočujúce hodnoty. Vylúčením týchto hodnôt sa zúžili hranice dôvery a zvýšila sa presnosť kalibrácie³, preto sa v ďalších prípadoch postupovalo obdobne. V snahe zvýšiť efektivitu vyparovania a teda intenzitu signálov, ďalšie štúdium bolo zamerané na sledovanie možností kalibrácie bez použitia a s použitím spektrochemicky aktívnych prímiesí v modelových vzorkách oxidov prvkov (Al, B, Ca, Cr, Fe, Mg, Ni, V) v grafitickom matricke. Kvôli zamedzeniu komplikácií s prípravou vzoriek (miešanie so spektrálnymi puframi) sa prišlo k štúdiu vplyvu AgCl a AgF pripravených z roztokov AgNO₃ a HF, resp. HCl. Do každej prázdnej elektródy bolo pridaných 10 ml AgNO₃ ($c = 927,77 \text{ mg cm}^{-3}$) a 10 μl koncentrovanej HF, resp. HCl. Po vysušení (100 °C / 1 h) boli elektródy naplnené 10 mg 0,06% zmesi vzorky a sledoval sa vplyv prídavkov na signál analytov. Zo získaných výsledkov bol zrejmy výrazný vplyv obidvoch typov prídavkov na nárast signálov, avšak najvýraznejší je vplyv AgCl. Slabší vplyv AgF na signály je možné odvodniť vysokou rozpustnosťou AgF, presnejšie skutočnosťou, že praktic-

Tabuľka I

Porovnanie niektorých hodnotiacich parametrov pri kalibrácii

Parameter	Kalibrácia		
	bez prídavku	s prídavkom	s prídavkom
Prídavok AgCl		AgCl	AgCl
Δc , %	(0,01; 0,1)	(0,001; 0,04)	(0,005; 0,1)
Model	lineárny	lineárny	lineárny
c_L , %	(0,009; 0,08)	(0,0009; 0,01)	(0,001; 0,005)
R, %	(82; 86)	(96; 98)	(96; 98)

ky takáto zlúčenina ani nevznikla a značná časť HF sa už v priebehu sušenia odparila. Preto ďalšie experimenty boli vykonávané s prídavkom AgCl.

Analytická kalibrácia bola vykonaná pre koncentračný rozsah $\Delta c \in (0,001; 0,04) \%$ a $\Delta c \in (0,005; 0,06) \%$. Porovnanie niektorých hodnotiacich parametrov (c_L – hranica dôkazu, R – koeficient determinácie) pri vyhodnotení konštrukcie analytickej priamky bez prídavku a s použitím prídavku je uvedené v tabuľke I.

Použitie spektrochemicky aktívneho prídavku výrazne vylepšilo hodnoty c_L ako aj hodnoty koeficienta determinácie, čo znamená, že všetky vstupné údaje sú z hľadiska aplikovaného softvéru platné a nie je potrebné z nich nič vylúčiť.

Pásma vymedzené hranicami dôvery bolo pri analytickej priamke v obidvoch koncentračných rozsahoch za použitia prídavku veľmi úzke, čo zaručovalo vysokú presnosť koncentračného stanovenia. U väčšiny prvkov sa dosiahol lineárny priebeh kalibračných priamok okrem Ni a V, kde bol potvrdený kvadratický model.

Táto práca vznikla za finančnej podpory grantového projektu 1/3149/06 a projektu APVV 20-009404.

LITERATÚRA

1. Kupka K.: *QC.ExpertTM Statistical Software*. TriloByte, Pardubice 2002.
2. Meloun M., Militký J.: *Statistické zpracování experimentálních dat*. Ars magna, Praha 1996.
3. Ružičková S.: Dizertačná práca, Košice 2005.

1P-35

ŠTATISTICKÉ HODNOTENIE ANALYTICKÝCH VÝSLEDKOV PRI SPEKTROMETRICKEJ OPTIMALIZÁCIÍ

SILVIA RUŽIČKOVÁ, **MIKULÁŠ MATHERNY** a **DAGMAR REMETEIOVÁ**

*Katedra chémie, Hutnícka fakulta, Technická univerzita v Košiciach, Letná 9, 042 00 Košice, Slovenská republika
silvia.ruzickova@tuke.sk*

Určenie optimálnych experimentálnych podmienok pre sledovanie vyparovacích pomerov emisného budenia spektier si v prvom rade vyžaduje prieskumovú štatistickú analýzu jednorozmerných vstupných údajov. Za účelom zistenia vý-

Tabuľka I

Výsledky štatistickej analýzy jednorozmerných vstupných dát

Parameter	Prvok	
	Mg	Ca
Vln. dĺžka, nm	280,27	393,36
Počet údajov	25	25
Aritm. priem.	24,53	40,29
RSD, %	10,23	6,95
Medián, ppm	24,42	40,68
Modus, ppm	24,21	41,37
Polosuma, ppm	24,20	39,97
Box-Cox. tranf.	1	1

konnosti novej tandemovej metódy, založenej na separátnom budení práškovej vzorky v riadenom oblúku jednosmerného prúdu v cele pre tvorbu pár a následnom transportovaní vzniknutých pár vzorky nosným argónom do plazmového zdroja, bolo uskutočnené 25 násobné opakovanie merania intenzít spektrálnych čiar 8 zvolených prvkov 1% zmesi oxidov (Al, B, Ca, Cr, Fe, Mg, Ni a V) v grafitovom matrice pri 20 A už za optimalizovaných podmienok ($r = 4$ mm, SW-380, SU-206, $t_{\text{exp}} = 60$ s, $A_{\text{prim}} = 2,2$ dm³ min⁻¹, $A_{\text{sek}} = 3,9$ dm³ min⁻¹) (cit.¹). Získané súbory hodôt intenzít sa podrobili programom QC. Expert 2.5 (cit.²) kompletnej prieskumovej štatistickej analýze jednorozmerných vstupných dát³. Presnosť stanovenia intenzít analytických spektrálnych čiar je daná dosiahnutými hodnotami relatívnej štandardnej odchýlky (RSD). Tieto hodnoty pre aritmetický priemer, až na jeden prípad (Mg), sú nižšie ako 10 %, ale vždy vyššie ako 6 %. Túto skutočnosť možno pripísať hlavne komplikovanému prívodu pár analytu do budenej plazmy. Sledovali sa také základné hodnotiace štatistické parametre ako aritmetický priemer, medián, modus a polosuma (tab. I) pre typické príklady. Pre kontrolu normálneho rozloženia dát sa uskutočnila i Boxova-Coxova transformácia. Dokázalo sa, že hodnota 0 sa ani v jednom prípade nenachádzala v testovanom intervale, čím sa vylúčil výskyt lognormálneho rozloženia.

Súhrne však možno konštatovať, že získané výsledky potvrdili normálny a homogénny charakter rozloženia intenzít vybraných spektrálnych čiar, čo znamená, že tieto čiary sú relevantné a preto je prípustné zo štatistického hľadiska ich použiť pre ďalšie výskumy, menovite pre sledovanie procesu vyparovania ako aj pre analytickú kalibráciu a stanovenie návratnosti.

Táto práca vznikla za finančnej podpory grantového projektu I/3149/06 a projektu APVV 20-009404.

LITERATÚRA

1. Ružičková S., Bajuszová J., Koller L., Matherny M., Flórián K.: *Microchim. Acta* (2006) – v tlači.
2. Kupka K.: *QC.Expert™ Statistical Software*. TriloByte, Pardubice 2002.
3. Meloun M., Militký J.: *Statistické zpracování experimentálních dat*. Ars magna, Praha 1996.

IP-36

STUDY OF SILVER NANOPARTICLE STABILITY

JANA ŠOUKUPOVÁ, LIBOR KVÍTEK, and ALEŠ PANÁČEK

Univerzita Palackého Olomouc, Třída Svobody 26, Olomouc 771 46

j_soukupova@post.cz

This study presents an approach to the testing of the silver nanoparticle stability in aqueous medium. The silver nanoparticles were prepared by the reduction of the complex cation $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ by D(+)-maltose and stabilized by a variety of surfactants (Tween 80, SDS, Brij 35, Brij 58, Brij 97, and Brij 98) and polymer substances (PEG of molecular weights 1500, 4000, 10000, 35000) that were added to the system after the reduction in 1 weight percentage. The restabilization process was conducted by addition of acetic acid and therefore by consequential change of pH of the above mentioned system from approx. 11,8 of the original system down to 4.5. The stability was examined throughout the measurements of the silver nanoparticle sizes. All the gained results were judged with regard to the conducted experiments with the uninfluenced system which remained stable in the basic range but being neutralized there was observed a growth in 10 nm and even in the acid range up to 53 nm in size in contrast to the original value of 30 nm.

Exceptional results were gained by non-ionic surfactant Tween 80 and anionic surfactant SDS. The size of the silver nanoparticles remained in all pH ranges almost the same, i.e. approx. 30 nm. Although measurements showed that Brij 98 conveys destabilizing effect on the performed system the results gained from the experiments involving Brij 35, Brij 58, and Brij 97 have shown comparable results with the results conducted with the system uninfluenced by any modifier. PEG 1 500, PEG 4 000, PVP 10, PVP 40 did not prove any significant influence on the system and the gained values of silver nanoparticle sizes were comparable with the sizes measured in the unmodified system in all pH ranges. On the other hand PEG 4 000, PEG 35 000 and PVP 360 showed destabilizing effect especially in the acid range where the growth of the silver nanoparticle sizes was remarkable (in the case of PVP 360 the final size of the silver nanoparticles was 162 nm).

The financial support of the MSM6198959218 grant from the Ministry of Education of the Czech Republic is gratefully acknowledged.

REFERENCES

1. Evans D. E., Wennerstrom, H.: *The Colloidal Domain*. Wiley, New York 1994.
2. Hunter R.J.: *Foundations of Colloid Science*. Oxford University Press, Oxford 2001.
3. Velikov K. P., Zegers G. E., Blaaderen A.: *Langmuir* 19, 1384 (2003).
4. Wang W., Gu B., Liang L., Hamilton W. A.: *J. Phys. Chem. B* 108, 17477 (2004).

1P-37

STUDIUM FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÝCH VLASTNOSTÍ POVRCHOVĚ AKTIVNÍCH LÁTEK V ROZTOCÍCH POLYMERŮ ZA RŮZNÝCH PODMÍNEK**HANA STRNADOVÁ a LIBOR KVÍTEK***Katedra fyzikální chemie, Univerzita Palackého, Tř. Svobody 8, 771 47 Olomouc
hana.strnadova@atlas.cz*

Směsné systémy obsahující povrchově aktivní látku (PAL) a neionický polymer nachází široké aplikační využití v průmyslové i výzkumné praxi. Podrobné studium fyzikálně-chemických vlastností takových soustav objasňuje děje, které v takových systémech probíhají.

Pokud je k vodnému roztoku PAL přidán neionický polymer, v našem případě polyethylenglykol (PEG) různé průměrné molekulové hmotnosti (M_w), dochází ve většině případů, za předpokladu vzniku komplexních útvarů mezi polymerními řetězci a PAL, ke snížení původní hodnoty kritické micelární koncentrace (cmc) samotné PAL ve vodném roztoku na kritickou agregační koncentraci (cac). Druhým významným zlomovým bodem na experimentálních křivkách je koncentrace (cmc*), při níž dochází k nasycení polymerního řetězce a tento již není schopen vázat další micely. Interakce mezi molekulami polymeru a molekulami surfaktantu jsou řízeny rovnováhou mezi hydrofóbními a elektrostatickými interakcemi¹. Schopnost tvorby takových komplexů je ovlivněna různými faktory; typem PAL, resp. nábojem polární části jeho molekuly, délkou uhlovodíkového řetězce polymeru atd. Pokud není tento řetězec dostatečně dlouhý (dostatečně vysoká M_w) a tedy dostatečně hydrofóbní, nemůže dojít k procesu komplexace s micelami pomocí hydrofóbních interakcí a žádné komplexy v roztoku nevznikají. Za dostatečně dlouhý řetězec pro tvorbu komplexů je v literatuře uváděna nejnižší hodnota $M_w=352$, získaná na základě ITC měření². Samotná tvorba komplexních útvarů může být pro určitou oblast M_w považována za adsorpci micel na polymerním řetězci a pro jinou oblast za solubilizaci polymerních řetězců micelami PAL (cit.³).

Na základě měření vodivosti, povrchového napětí, viskozity, statického a dynamického rozptylu světla byly studovány výše uvedené směsné soustavy. Povrchově aktivní látky byly zastoupeny ionickými (SDS, CTAB) i neionickými látkami (Triton X-100). Experimenty byly prováděny za konstantní teploty, tlaku a koncentrace polymeru a s měněním se koncentrací PAL v roztoku.

Studie vymezuje oblast molekulových hmotností polymeru, které jsou schopny tvořit s PAL komplexní útvary. Zajímavé výsledky poskytují viskozimetrická měření směsných systémů, jejichž průběh silně závisí na náboji polární části PAL. Stanovení cac, která signalizuje počátek komplexace, je pro nižší hodnoty koncentrace polymeru v roztoku obtížněji stanovitelná. Navíc, každá z výše uvedených metod je schopná detekce vzniku komplexu v jiné fázi agregace. Cílem této práce je tedy také srovnání citlivosti jednotlivých experimentálních metod v jednotlivých krocích agregace či komplexace.

LITERATURA

1. Capalbi A., La Mesa C.: J. Therm. Anal. Cal. 66, 233 (2001).
2. Bernazzani, L., Borsacchi, S., Catalano, D.: J. Phys. Chem. B 108, 8960 (2004).
3. Mészáros R., Varga I., Gilányi T.: J. Phys. Chem., B 109, 13538 (2005).

1P-38

MATRICOVÝ EFEKT V SYSTÉME 1,6-DIFENYL-1,3,5-HEXATRIÉN- β -CYKLODEXTRÍN / FULERÉN**MONIKA STUPAVSKÁ^a, MONIKA ARANYOSIOVÁ^{a,b}, DUŠAN VELIČ^{a,b} a DUŠAN CHORVÁT^b***^a Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, ^b Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava
stupavska@pobox.sk*

Hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov (Secondary Ion Mass Spectrometry, SIMS) je metóda na analýzu chemického zloženia materiálov. Hlavnými prednosťami SIMS analýzy sú vysoká citlivosť s hodnotou až ppb a schopnosť detekcie všetkých prvkov¹.

V tejto metóde je povrch vzorky bombardovaný primárnymi iónmi, ktoré prenikajú vzorkou a dochádza k zrážkam s časticami vo vnútri vzorky. Časť energie sa vracia späť – dochádza k emíсии častíc z povrchu. Väčšina z týchto častíc je nábojovo neutrálna, pre SIMS analýzu sú dôležité tie v ionizovanej forme – sekundárne ióny, ktoré sú analyzované na základe doby letu (Time of Flight, Tof).

Množstvo sekundárnych iónov, ktoré je vyrazené z povrchu, teda iónový výťažok, je závislý na chemickom prostredí – matici. Matricový efekt je teda závislosť vzniku a druhu sekundárnych iónov od chemického prostredia, z ktorého sú tieto ióny vyrazené².

Študovaný je systém β -cyklodextrín a 1,6-difeny-1,3,5-hexatrién, ktorý vytvára supramolekulový host-guest komplex. Cieľom je určiť, ako sa prejaví matricový efekt, ak je komplex nanášaný na kremík a na fullerén, ktorým sa modifikuje chemické prostredie. Snahou je dosiahnuť takú modifikáciu, ktorá by zvýšila emisiu celého ionizovaného supramolekulového komplexu. Ďalšou úlohou je sledovať zmenu hrúbky analyzovanej vrstvy, ktorá taktiež predstavuje zmenu matrice.

Vplyv fullerénu predstavuje pozitívnu modifikáciu chemického prostredia, došlo k účinnému zvýšeniu iónového výťažku, vyrazeniu ionizovaného β -cyklodextrínu, aj dimérov. Efekt hrúbky vykazuje podobný trend. So zväčšujúcou sa hrúbkou vrstvy rástol aj iónový výťažok, dosiahla sa emisia celého supramolekulového host-guest komplexu. Obidva efekty zabezpečili aj výrazné zníženie fragmentácie emitovaných častíc.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/2447/05 a APVT-20-029804.

LITERATÚRA

1. Frank L., Král J., v knihe: *Metody analýzy povrchů*, str. 147. Academia, Praha 2002.
2. Briggs D., v knihe: *Surface Analysis of Polymers by XPS and Static SIMS*. str. 93. Cambridge University Press 1998.

1P-39

APLIKÁCIA MIKROBIÁLNEHO BIOSENZORA NA STANOVENIE ETANOLU VO SYSTÉME FIA

MILAN VALACH a **JAROSLAV KATRLÍK**

*Katedra farmaceutickej analýzy a nukleárnej farmácie, Farmaceutická fakulta, Univerzita Komenského, Odbojárov 10, 832 32 Bratislava
valach@fpharm.uniba.sk*

Biosenzory ako analytické zariadenia poskytujú rýchlu a relatívne špecifickú odozvu bez potreby náročnej predúpravy vzoriek, preto majú potenciál uplatnenia sa v on-line monitoringu fermentačných procesov. Variabilita konštrukčných možností umožňuje pripraviť senzory „šité na mieru“ pre konkrétne aplikácie. Vyvinutý biosenzor bol postavený na báze ampérometrickeho spôsobu merania pretože táto metóda detekcie umožňuje za optimálnych podmienok sledovať koncentrácie analytov 10^{-8} až 10^{-9} M a dynamický rozsah stanovenia môže dosahovať až tri poriadky. Ampérometrické senzory sú tiež konštrukčne jednoduché a lacné. V úlohe biologického komponenta boli použité intaktné bunky *Gluconobacter oxydans* CCM 1783, ktoré obsahujú prirodzene viazanú alkoholdehydrogenázu na vonkajšej strane periplazmatickej membrány. Pripravené bunky boli jednoducho nanosené na povrch uhlíkovej elektródy a prekryté dialyzačnou membránou. Použité boli pritom rôzne mediátory elektrónového transportu rozpustné vo vode voľne prenikajúce dialyzačnou membránou, takže sa nachádzali jednoducho rozptýlené v celom objeme tlmivého roztoku používaného pri meraní. Pomocou metódy cyklickej voltampérometrie charakterizujúcej priebeh redoxných dejov na povrchu elektródy bol spomedzi testovaných vybraný ako najvhodnejší mediátor ferikyanid. Počas prípravy biosenzora boli optimalizované podmienky merania, a to: koncentrácia mediátora, množstvo použitej biomasy a spôsob jej prípravy, pH tlmivého roztoku. Keďže bunky použité na prípravu senzora obsahovali okrem požadovanej alkoholdehydrogenázy aj iné membránovo viazané enzýmy bola testovaná odozva senzora na glukózu ako najpotenciálnejší interferent pri analýze vzoriek odobraných počas fermentačných procesov. Porovnaním kalibračných závislostí na etanol a glukózu vnesených v rovnakých koncentračných jednotkách bolo na základe pomeru smerníc týchto závislostí zistené, že mikrobiálny senzor dosahoval 26 násobne vyššiu citlivosť na etanol ako na glukózu. Mikrobiálny senzor aplikovaný do úlohy detektora vo systéme FIA vykazoval výbornú operačnú stabilitu, keď sa počas nepretržitého 72 hodinového merania jeho odozva takmer nezmenila. Pri porovnaní výsledkov analýz reálnych vzoriek pomocou FIA (detekcia biosenzorom) s referenčnou metódou GC bol rozdiel stanovení do 7 %.

Táto práca vznikla s podporou grantu MŠ SR VEGA (projekt č. 1/1196/04) a projekt UK/273/2006.

1P-40

ANALÝZA DIMETHYL A DIETHYL ESTERU KYSELINY 2,3-PENTADIENDIOVÉ POMOCÍ GC A GC-MS

KATEŘINA VÍTKOVÁ^a, **JANKA MYDLOVÁ^b**, **IVAN SKAČÁNÍ^b**, **LUBOMÍR ČÁP^a**, **PETR BARTÁK^a** a **JÁN KRUPČÍK^b**

*^aKatedra analytické chemie, Univerzita Palackého, Třída Svobody 8, 771 46 Olomouc; ^bInstitut analytické chemie, Slovenská Technická Univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
kacavit@centrum.cz*

Dimethyl a diethyl ester kyseliny 2,3-pentadiendiovej patrí medzi allenické sloučeniny, ktoré poskytujú jednoduchý príklad celkovo chirálnej štruktúry. Chiralita allenických sloučenin není způsobena přítomností asymetrického chirálního atomu, ale díky existenci axiální chirální osy¹. Identifikace esterů byla provedena pomocí plynové chromatografie s hmotnostní detekcí s využitím ionizace elektronem a chemické ionizace.

Stabilita enantiomerů je spojená s energetickými bariérami enantiomerizace², při kterých se jednotlivé sloučeniny mění interkonverzí. Za účelem sledování procesu interkonverze byla použita tzv. on-flow metoda³, jejíž podstatou je přímá enantiomerizace sloučenin v nechirální koloně v proudu toku nosného plynu a stanovení původních a enantiomerů nově vzniklých interkonverzí. Všechny experimenty byly realizovány v tříkolonovém GC systému, umístěném ve dvou nezávisle vyhřívaných termostatech. Po nadávkování racemické směsi a po separaci enantiomerů v první chirální koloně byl effluent transportován do druhé nechirální kolony, ve které proběhla interkonverze. Z nechirální kolony byl effluent transportován do třetí kolony s obsahem chirální stacionární fáze, kde došlo k separaci původních a nově vzniklých enantiomerů. Odpovídající plochy píků, teplota a retenční čas interkonverze byly použity k výpočtu rychlostních konstant, energetických bariér $\Delta G(T)$ a aktivačních parametrů a to Entropie (ΔH^\ddagger) a entalpie (ΔS^\ddagger).

Tato práce vznikla za podpory MŠMT (MSM 6198959216).

LITERATURA

1. Ahuja S., v knize: *Chiral Separation by Chromatography*, kap. 3, str. 38. Oxford University Press, New York 2000.
2. Krupcik J., Oswald P., Majek P., Sandra P., Armstrong D. W.: *J. Chromatogr., A* 1000, 779 (2003).
3. Mydlová J., Benická E., Krupcik J., Sandra P., Armstrong D. W.: *J. Chromatogr. Sci.* 42, 516 (2004).

1P-41**STUDIUM SMÁČENÍ A POVRCHOVÉ ENERGIE Si/SiO₂ METODOU DYNAMICKÉHO KONTAKTNÍHO ÚHLU****JANA VOJTĚCHOVSKÁ a LIBOR KVÍTEK***Katedra fyzikální chemie PřF UP Olomouc, Třída Svobody 8, 771 46 Olomouc**jvojttechovska@volny.cz*

Znalost povrchových vlastností materiálů a chování látek ve fázových rozhraních má velký význam jak v různých technologických procesech (tvorba pěn a emulzí, rozprašování, micelární katalýza, smáčení materiálů), tak i pro běžnou laboratorní praxi (přenos látek přes fázová rozhraní – separační procesy). Si je významným materiálem pro elektrotechnický průmysl a jeho povrchové vlastnosti byly studovány v rámci vylepšení mycího procesu Si desek. Kontaktní úhel je jednou z mála přímo měřitelných vlastností rozhraní pevná látka/kapalina/plyn, díky které lze sledovat vzájemné interakce mezi materiály.

Smáčení drsného (produkt výroby) a hladkého (pro porovnání) povrchu Si/SiO₂ bylo studováno Wilhelmyho dynamickou metodou měření kont. úhlu. Hodnoty naměřených kontaktních úhlů řady vybraných kapalin (dest. voda, diiodo-methan, glycerol, ethylenglykol, formamid, 1-bromnaftalen atd.) jsou základem pro výpočet povrchové energie a jejich složek, které jsou dány mezifázovými interakcemi (dispersní, polární, acido-bazické) studovaného povrchu a kapaliny. Pro určení povrchové energie γ_{sv} byly použity různé metody (metoda Owens-Wendt, metoda acid-base a Chibowského metoda). Vzájemným porovnáním výsledků bylo zjištěno, že se jednotlivé metody shodují ve výsledné celkové hodnotě povrchové energie, a že pro drsný povrch Si je tato hodnota vyšší (42,6 mN m⁻¹) než pro povrch hladký (36,7 mN m⁻¹). Odlišné výsledky se ale vyskytují u jednotlivých příspěvků mezifázových interakcí (polární, disperzní, elektron-donorové, elektron-akceptorové) k povrchové energii, jejichž hodnoty jsou významně závislé na typu použitých kapalin a jejich vzájemné kombinaci. Drsnost povrchu je významný fyzikální faktorem, který ovlivňuje výslednou hodnotu kont. úhlu a charakter smáčení vůbec. Na základě Wenzelovy rovnice, která jednoduše vyjadřuje vliv povrchové nerovnosti na hodnotu kont. úhlu bylo zjištěno, že skutečný povrch drsného Si je asi o 17 % větší než povrch hladký. Výpočet tepel smáčení (jsou lineárně závislá na velikosti povrchu) pro drsný a hladký povrch Si udává povrch drsného Si o 15 % větší. Nezávislé měření velikosti povrchu metodou AFM ukázalo zvětšení drsného povrchu o 11,5 %. Rozdíl je patrně způsoben tím, že kromě drsnosti ovlivňují kvalitu smáčení i specifické interakce, v tomto případě především Si/dimethylsulfoxid, Si/ethylendiamin a Si/2-aminoethanol, které nelze metodou AFM zaznamenat.

Díky znalosti povrchové energie, která není přímo měřitelná jako v případě kapalin, lze poté snadno určit i adhezní energii mezi daným povrchem a používanými kapalinami, a předvídat tak jejich vzájemné povrchové interakce, což má široké využití v praxi.

1P-42**PŘÍPRAVA METODY STANOVENÍ VOLNÝCH PLAZMATICKÝCH METANEFŘINŮ VYSOKOÚČINNOU KAPALINOVOU CHROMATOGRAPHIÍ S ELEKTROCHEMICKOU DETEKČÍ****ALICE VRÁNKOVÁ*, ZDENA JŮZOVÁ, JIŘÍ WIDIMSKÝ JR., TOMÁŠ ZELINKA a JAN ŠKRHA***Laboratoř endokrinologie a metabolismu ÚKBLD a III. interní kliniky 1. lékařská fakulta UK, Kateřinská 32, 128 08 Praha 2**alice.vrankova@vfjn.cz*

Kvantitativní stanovení katecholaminů a jejich *O*-methyl metabolitů, zejména metanefrinu (MN) a normetanefrinu (NMN), je užitečné v diagnostice tumoru chromafinních buněk feochromocytomu. Tento typ nádoru sekretuje katecholaminy, proto je možné zvýšenou koncentraci katecholaminů a jejich metabolických produktů v moči a v plazmě využít jako diagnostické markery tohoto typu nádoru.

Vědecké studie z poslední doby zabývající se touto problematikou hovoří o vysoké senzitivitě testu stanovení volných metanefrinů v plazmě vzhledem k diagnóze feochromocytomu^{1,2}.

Pro stanovení metanefrinů v plazmě metodou vysokoúčinné kapalinové chromatografie (HPLC) s elektrochemickou detekcí je zapotřebí analyty nejdříve extrahovat z plazmatické matrice. K tomuto účelu jsme použili SPE extrakci na silném katexu. Analyty jsme z ionexu eluovali amoniakálním methanolem, který jsme následně odpařili pomocí vakuové odparky. Po odpaření elučního činidla jsme analyty rozpustili ve vhodném mediu a aplikovali na kolonu HPLC s reverzní fází^{3,4}.

Optimum detekce jsme stanovili na základě hydrodynamického voltamogramu.

*Práce vznikla za podpory grantu MSM 0021620807.***LITERATURA**

1. Lenders J. W. M., Pacák K., McClellan Walther M., Linehan W. M., et al.: *J. Amer. Med. Assoc.* 28, 1427 (2002).
2. Goldstein D., Eisenhofer G., Flynn J. A., Wand G., Pacák K.: *Hypertension* 43, 907 (2004).
3. Roden M., Rafflesberg W., Raber W., et al.: *Clin. Chem.* 47, 1061 (2001).
4. Lenders J. W. M., Eisenhofer G., Armando I., Keiser H., et al.: *Clin. Chem.* 39/1, 97 (1993).

1P-43

**POLAROGRAFICKÉ A VOLTAMETRICKÉ
STANOVENÍ STOPOVÝCH MNOŽSTVÍ
2,7-DINITRO-9-FLUORENONU****VLASTIMIL VYSKOČIL, JIŘÍ BAREK a JIŘÍ ZIMA**

UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Albertov 6, 128 43 Praha 2
 vyskocil@natur.cuni.cz, barek@natur.cuni.cz

2,7-Dinitro-9-fluorenon (2,7-DNFN) patří mezi deriváty genotoxických nitrovaných polycyklických aromatických uhlovodíků (NPAH)¹. NPAH se vyskytují v nejrůznějších složkách životního prostředí². 2,7-DNFN je podezřelý z karcinogenity a genotoxicity³.

Tato práce je zaměřena na optimalizaci podmínek stanovení 2,7-DNFN pomocí rozšířených polarografických a voltametrických metod. Navazuje tímto na práci pojednávající o stanovení nitroderivátů fluorenu⁴. Pro stanovení 2,7-DNFN byla použita DC tast polarografie (DCTP) na klasické rtuťové kapkové elektrodě (DME), diferenční pulsní polarografie (DPP) na DME, diferenční pulsní voltametrie (DPV) na visící rtuťové kapkové elektrodě (HMDE) a adsorpční rozpouštěcí voltametrie (AdSV) na HMDE.

Pro polarografické a voltametrické stanovení 2,7-DNFN byly nalezeny optimální podmínky v prostředí methanol (MeOH) a Brittonův-Robinsonův (BR) pufr (1:1). Za těchto podmínek byly pro 2,7-DNFN pomocí DCTP, DPP, DPV a AdSV proměřeny kalibrační závislosti a vypočteny meze stanovitelnosti $1 \cdot 10^{-6}$ mol L⁻¹ pro DCTP, $1 \cdot 10^{-7}$ mol L⁻¹ pro DPP, $2 \cdot 10^{-8}$ mol L⁻¹ pro DPV a $4 \cdot 10^{-9}$ mol L⁻¹ pro AdSV. Na základě změřených DCT polarogramů byl navrhnut mechanismus elektrochemické redukce 2,7-DNFN, který byl následně ověřen pomocí cyklické voltametrie a potenciostatické coulometrie.

Dále byla vypracována metoda stanovení 2,7-DNFN po extrakci tuhou fází (SPE) ve vzorcích pitné a říční vody po předchozí optimalizaci SPE na modelové matici deionizované vody. 2,7-DNFN byl po extrakci a eluci methanolem stanovován technikou DPV na HMDE v koncentračním rozmezí $2 \cdot 10^{-9}$ až $1 \cdot 10^{-8}$ mol L⁻¹ v pitné vodě a $2 \cdot 10^{-9}$ až $1 \cdot 10^{-7}$ mol L⁻¹ v říční vodě. Pomocí této prekoncentrace se podařilo dosáhnout meze stanovitelnosti $4 \cdot 10^{-9}$ mol L⁻¹ v říční vodě a $2 \cdot 10^{-9}$ mol L⁻¹ v pitné vodě. Přímé stanovení 2,7-DNFN v pitné vodě bylo možné v koncentračním rozmezí $2 \cdot 10^{-8}$ až $1 \cdot 10^{-7}$ mol L⁻¹ s dosažením meze stanovitelnosti $2 \cdot 10^{-8}$ mol L⁻¹.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR (projekt LC 06035).

LITERATURA

1. Moreira J. C., Barek J.: *Quimica Nova* 18, 362 (1995).
2. Barek J., Cvačka J., Moreira J. C., Zima J.: *Chem. Listy* 90, 805 (1996).
3. Rafii F., Selby A. L., Newton R. K., Cerniglia C. E.: *Appl. Environ. Microbiol.* 60, 4263 (1994).
4. Barek J., Pumera M., Muck A., Kaderabkova M., Zima J.: *Anal. Chim. Acta* 393, 141 (1999).

1P-44

**CHEMICAL DEGRADATION OF PAINTFILMS
AND SOLUBILITY PARAMETERS OF POLYMERS****LUCIE WOLFOVÁ**

Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Purkyněova 118, Brno 612 00 Czech republic
 wolfova@fch.vutbr.cz

Chemical degradation of paint films could be defined as physical and chemical interactions between film-forming components of the paint and chemical surroundings, which leads to changes in paint qualities and in paint film losing its visual appearance and original qualities upon the exposure to organic solvents.

From the thermodynamic point of view, a degree of solvent affinity to polymer is given by the Gibb's energy change, which is determined by the interaction between solvent molecules and macromolecular chain elements.
 $\Delta G_{\text{mix}} = \Delta H_{\text{mix}} - T\Delta S_{\text{mix}} < 0$.

The more negative is value of $\Delta G_{\text{směs}}$ the better is solubility of polymer in solvent. Then the dissolving of polymers is mainly a question of value ΔH_{mix} because during swelling or dissolving always increase system's disorderliness. According to thermodynamic conditions than is necessary that $\Delta H_{\text{mix}} < T\Delta S_{\text{mix}}$.

Therefore, the solubility is mainly determined by the enthalpy value ΔH_{mix} , which therethrough relates a change of internal energy during evaporation ΔH_{evap} .

$$\Delta H_{\text{mix}} = (V_1 n_1 + V_2 n_2) \cdot \left[\left(\frac{\Delta H_{\text{evap},1}}{V_1} \right)^{0.5} \left(\frac{\Delta H_{\text{evap},2}}{V_2} \right)^{0.5} \right]^2 \cdot \varphi_1 \varphi_2$$

For solubility behaviour of amorphous polymers („liquid-like“) these can be treated by the methods used for liquid-liquid mixtures which are made assuming that one of the components is made up of very long molecules and the other of small ones.

Considering with these is value ΔH_{evap} related to unit volume $\Delta H_{\text{evap}}/V$ corresponding to the density of cohesive energy $\Delta \epsilon$. A root of this formula is mentioned as the solubility parameter δ [$\text{J}^{1/2}/\text{cm}^3/2$]. (Formally, the cohesive energy E_{coh} is divided into three parts, corresponding to three types of interaction forces $E_{\text{coh}} = E_d + E_p + E_h$ (contribution of dispersion forces E_d , polar forces E_p and hydrogen-bonding E_h). The correspondent equation for total solubility parameter δ then is $\delta_{\text{total}} = \delta_d^2 + \delta_p^2 + \delta_h^2$).

The solubility parameter of the solvents could be calculated from general equations: $\Delta H_{\text{mix}} = V_s(\delta_1 - \delta_2) \cdot \varphi_1 \varphi_2$. By this is predicted that if $\delta_1 = \delta_2$ the ethalpy of mixing $\Delta H_{\text{mix}} = 0$ and $\Delta G_{\text{mix}} = \Delta H_{\text{mix}} - T\Delta S_{\text{mix}} < 0$ and this is in accordance with the general rule for thermodynamic view of solubility and mixing. The smaller is the difference δ of solvent and polymer, the better is dissolution.

The polymers should be mostly soluble in that solvents, which their $\langle \delta \rangle$ correspond to the middle of the interval of polymer solubility or approximately plus or minus two units.

(Also, the solubility parameter concept is directly applicable only to amorphous polymers. When considering crystal-

line polymers it is necessary to calculate the activity of the crystalline solid).

The cohesive pressures of polymers can be evaluated directly by thermodynamics means only for vaporizable materials. Therefore most oftenly the solubility parameters are determined by their behavior in interaction with solvents with known properties and value of δ .

For example it could be calculated by the coefficients of swelling: $Q_1 = Q_{\max} \cdot \exp[-KV_1 \cdot (\delta_1 - \delta_2)^2]$ or by viscometric measurements according to equation: $[\eta] = [\eta]_{\max} \cdot \exp[-KV_1 \cdot (\delta_1 - \delta_2)^2]$. The solubility parameters can be determined for example from calculation of the free enthalpy of their particular components or by the internal pressure too.

REFERENCES

1. Barton A. F. M.: *Handbook of Solubility Parameters and other Cohesion Parameters*, London 1991.
2. Van Krevelen D. W., Hoftyzer P. J.: *Properties of Polymers – their Estimation and Correlation with Chemical Structure*, Amsterdam 1976.

1P-45

STANOVENÍ FENOLŮ V PEVNÝCH MATRICÍCH METODOU GC/MS

MICHAL ZAPADLO, JITKA DRÁBKOVÁ, KATEŘINA VÍTKOVÁ, LUBOMÍR ČÁP a PETR BARTÁK

Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc mikzap@sendme.cz

Některé halogenované sloučeniny, zejména pak 2,4,6-trichloranizol, 2,4,6-trichlorfenol, 2,4,6-tribromanizol a 2,4,6-trichlorfenol, jsou odpovědné za nepříjemné organoleptické vlastnosti celé řady potravin¹. Tato senzorická vada je známá zejména ve vinařském průmyslu a běžně se označuje jako „korková vada“ (cit.²). V posledních letech se rozšířila i do ostatních odvětví potravinářského průmyslu.

Obalové materiály sloužící pro skladování a přepravu surovin, meziproduktů i finálních produktů jsou primárně považovány za hlavní zdroj zatuchlého, plesnivého zápachu uchovávaných produktů³.

Bez ohledu na nepříznivé organoleptické vlastnosti jsou tyto sloučeniny vysoce toxické a potenciálně karcinogenní. Proto je jejich stanovení velice důležité.

V této práci jsme se zaměřili na stanovení 2,4,6-trichloranizolu (TCA), 2,4,6-trichlorfenolu (TCP), 2,4,6-tribromanizolu (TBA) a 2,4,6-tribromfenolu (TBP) ve dřevě a korku metodou GC/MS s využitím vysokotlaké extrakce rozpouštědlem.

Vysokotlaká extrakce rozpouštědlem (PSE) (cit.⁴) je alternativou Soxhletovy extrakce. Využitím zvýšené teploty a tlaku se oproti Soxhletově extrakci podstatně zkrátila délka extrakčního kroku a objem extrakčního činidla se minimalizoval. Obě metody vykazují vysoké výtěžnosti analytů z nejrůznějších typů pevných matic a jsou dostatečně robustní⁵.

Vzorky dřeva a korku byly extrahovány acetonem při 150 °C a 15 MPa. Analýza byla provedena plynovou chromatografií s hmotnostní detekcí v režimu SIM.

Výtěžnosti jednotlivých analytů se pohybují v rozmezí 70–95 % a meze detekce jsou v rozmezí 6–12 $\mu\text{g kg}^{-1}$.

Tato práce vznikla za podpory MŠMT ČR (grant MSM 6198959216).

LITERATURA

1. Gomez-Ariza J. L., Garcia-Barrera T., Lorenzo F., Gonzalez A. G.: *Anal. Chim. Acta* 540, 17 (2005).
2. Ezguero O., Garrido-Lopez A., Tena M. T.: *J. Chromatogr., A* 1102, 18 (2006).
3. Martinez-Urnuela A., Gonzales-Saiz J. M., Pizarro C.: *J. Chromatogr., A* 1089, 31 (2005).
4. Giergielewicz-Mozajska H., Dabrowski L., Namiesnik J.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 31, 149 (2001).
5. Carabiaz-Martinez R., Rodriguez-Gonzalo E., Revilla-Ruiz P., Hernandez-Mendez J.: *J. Chromatogr., A* 1089, 1 (2005).

1P-46

DETERMINATION OF URINARY COTININE AND 1-HYDROXYPYRENE AND BLOOD CARBOXYHEMOGLOBINE AS THE BIOMARKERS OF TOBACCO SMOKE EXPOSURE

WIOLETA ZIELIŃSKA-DANCH, WŁADYSŁAW WARDAS, ANDRZEJ SOBCZAK, and IZABELA SZOLTYSEK-BOLDYS

Medical University of Silesia, Department of General and Analytical Chemistry, 41-200 Sosnowiec, Jagiellońska 4, Poland wzdanch@slam.katowice.pl

Cotinine is the best biomarker to estimate tobacco smoke exposure. The other biomarkers, e.g. 1-hydroxypyrene (1-OHP) and carboxyhemoglobine (HbCO), were also used as the indicators of this exposure. In our study the HbCO was determined in blood samples with GC-FID with methanization, and urinary 1-OHP and cotinine was determined by HPLC-UV. The aim of our study was to determine the validity of tobacco questionnaires the analysis of three biomarkers connected in proper pairs. The following pairs were taken into consideration: cotinine and 1-OHP; cotinine and HbCO. The correlations between cotinine and the second biomarker were tested in the groups of: nonexposure nonsmokers; passive smokers; active smokers (as declared by examined population). It was found that the self-reported smoking status, which is said to reflect the extent of tobacco smoke exposure, is not reliable indicator compared to urinary cotinine measurements. The measured levels of urinary cotinine in case of some persons do not corresponded with the declared exposure status. Therefore, new differentiation of the by examined population was done and new three groups were made. People, whose concentration of urinary cotinine was higher than 500 $\mu\text{g l}^{-1}$, should be included to the active smokers group, whereas passive smokers should exhibit the concentration from the range of 50–500 $\mu\text{g l}^{-1}$. In the case of nonexposed nonsmokers, the concentration of urinary cotinine was found to be less than 50 $\mu\text{g l}^{-1}$.

IP-47

STANOVENÍ STREPTAVIDINU POMOCÍ
VOLTAMETRICKÝCH METOD

ONDŘEJ ŽITKA^{a,c}, JITKA PETRLOVÁ^a, VERONIKA BEŇOVÁ^{a,b}, LIBUŠE TRNKOVÁ^c, RADKA MIKELOVÁ^c, VOJTĚCH ADAM^{a,d}, LADISLAV HAVEL^b a RENÉ KIZEK^a

^a Ústav chemie a biochemie a ^b Ústav biologie rostlin, Agromická fakulta Mendelovy zemědělské a lesnické univerzity v Brně, Zemědělská 1, 613 00 Brno, ^c Katedra teoretické a fyzikální chemie, ^d Katedra analytické chemie a ^e Katedra biochemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno

Streptavidin se skládá (stejně jako avidin) ze čtyř podjednotek, ale neobsahuje ve své molekule žádné sacharidy. Streptavidin je obecně více používaný než-li avidin, protože nedochází k nespecifickým vazbám, jak tomu je u avidinu. Navíc byla prokázána vysoká afinita biotinu (vitamin H) k streptavidinu (disociační konstanta 10^{-15} M). Těto interakce je využito v mnoha typech avidin-biotinových technologií, jako je imunohistochemie, elektronová mikroskopie, ELISA, DNA hybridizace a konstrukce biosenzorů. V aplikaci využívající spojení avidin-biotin, je nezbytné zavést nové metody pro snadnou detekci interakce. Nejběžněji používanou metodou pro detekci avidin-biotin interakce je ELISA, fluorimetrické a elektrochemické metody. Velmi vhodným nástrojem využívající této interakce mohou být elektrochemické senzory a biosenzory založené na modifikaci pracovního povrchu elektrody¹⁻³. V našich experimentech byla modifikovaná uhlíková pastová elektroda (tvořená z uhlíkového prášku a oleje v poměru 70/30) využita pro rychlé a senzitivní stanovení streptavidinu. Streptavidin byl analyzován jednak přímo v roztoku základního elektrolytu a dále pomocí adsorptivní přenosové techniky ve spojení s SWV. Na základě získaných experimentálních výsledků bylo možné se již zaměřit na velmi nízká množství streptavidinu (3 až 1660 zmol). Analýza všech vzorků probíhala v 5 μ l kapce vodného roztoku streptavidinu. Získané závislosti vykazovaly podobný průběh jako při studiu streptavidinu v elektrochemické nádobce. V rozmezí 3 až 60 zmol byla závislost množství streptavidinu na výšce elektrochemické odpovědi lineární ($y = 1,7351x + 18,695$; $R^2 = 0,9906$). Uhlíkové pastové elektrody představují vhodný senzor pro detekci biotechnologicky významných látek. Znovu jsme zopakovali naše experimenty detekující avidin a ověřili limity detekce. Navíc se nám při pečlivém měření podařilo dále snížit detekci avidinu. Avšak ukázalo se, že streptavidin je výhodnějším proteinem pro avidin-biotinovou technologii s elektrochemickou detekcí.

Príspevek vznikl za podpory grantu INCHEMBIOL 0021622412 a Výzkumného centra M06030.

LITERATURA

1. Kizek R., Vacek J., Trnkova L., Klejdus B., Kuban V.: Chem. Listy 97, 1003 (2003).
2. Kizek R., et al.: Anal. Bioanal. Chem. 381, 1167 (2005).
3. Masarik M., et al.: Anal. Chem. 75, 2663 (2003).

IP-48

FLUORESCENCE DYNAMICS OF COUMARIN IN
MONTMORILLONITE STRUCTURE

MICHAL ŽITŇAN^a, JURAJ BDŽOCH^a, IGNÁC BUGÁR^b, VOJTECH SZOCS^a, TIBOR PÁLSZEGI^c, MARIÁN JANEK^a, DUŠAN CHORVÁT^b, and DUŠAN VELIČ^{a,b}

^a Department of Physical and Theoretical Chemistry, Faculty of Natural Science, Comenius University, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovakia; ^b International Laser Center, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovakia; ^c Slovak Technical University, Radlinského 9, 842 37 Bratislava, Slovakia
zitnan@fns.uniba.sk

Fluorescence dynamics of coumarin in montmorillonite structure is measured by using femtosecond time-resolved fluorescence spectroscopy. Molecule of coumarin C522 represents a probe in investigation of the interaction between coumarin and dispersions containing fully delaminated layered clay mineral of montmorillonite. The negative layer charge of montmorillonite is chemically modified by the fixation of various amount of lithium cations to adjust the layer charge and to provide fully hydrated layers¹. A focus is on changes in fluorescence dynamics in the presence of clay mineral dispersions representing a restricting environment for a dye². Coumarin has a hydrophobic character with low solubility in water and it is adsorbed on the montmorillonite surface. The lithium content changes the adsorption of coumarin due different surface charge of montmorillonite. The increase of lithium content in montmorillonite cause the shift of excitation and emission maxima. Time-resolved fluorescence spectroscopy is a useful tool in determination of solvent-solute interactions³. Analyzing of decay curves shows a tendency of increasing the fluorescence life times as a function of lithium concentration.

The financial supports of APVT-20-029804, VEGA 1/2447/05 and VEGA 1/3577/06 grants are appreciated.

REFERENCES

1. Zemanova M., Link G., Takayama S., Nuesch R., Janek M.: Appl. Clay Science, in press.
2. Douhal A.: Chem. Rev. 104, 1955 (2004).
3. Chapman C.F. and Maroncelli M.: J. Phys. Chem. 95, 9095 (1991).

1P-49

PLATNOST INTERAKČNÍHO MODELU 1:1 PRO KOMPLEXACI α -CYKLODEXTRINU A CHIRÁLNÍCH ANIONTŮ S JEDNÍM *nido*-7,8-DIKARBAUN-DEKAKARBORÁTOVÝM KLASTREM**ALEŠ LANGAUF^{a,b} a RADIM VESPALEC^a**^a Ústav analytické chemie AV ČR, Veveří 97, 611 42 Brno,^b Katedra analytické chemie, Přírodovědecká Fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Třída Svobody 8, 771 46 Olomouc
langauf@iach.cz

Přímá chirální separace stericky rozdílných forem racemického analytu je založena na tvorbě jejich kineticky labilních komplexů s chirálním selektorem. Při separacích organických sloučenin navzájem interagují složky komplexu až na výjimky v poměru 1:1. Tvar závislosti efektivních mobilit atropoizomerů klastrových aniontů boru na koncentraci α -cyklodextrinu ve vodně-alkoholickém základním elektrolytu se však poněkud liší od tvaru, který je standardní pro dělení stericky rozdílných forem organických sloučenin ve vodě. Mírně odlišný tvar má i závislost rozdílů efektivních mobilit atropoizomerů klastrových aniontů boru na koncentraci chirálního selektoru od tvaru obdobné závislosti pro enantiomery organických sloučenin nebo jejich iontů. Pochybnosti o aplikovatelnosti klasického modelu 1:1 pro komplexace α -cyklodextrinu s klastrovými anionty boru posílil

neúspěšný pokus vypočítat z dříve naměřených mobilitních dat podle tohoto modelu konstanty stability vznikajících komplexů. Proto byla platnost modelu 1:1 pro tvorbu komplexů α -cyklodextrinu s klastrovými anionty boru podrobněji zkoumána.

Nejprve jsme zjistili, že jednou z možných příčin selhání modelu mohly být systematické chyby mobilitních dat z předchozí studie způsobené neočekávanou nestabilitou α -cyklodextrinu. Chyby způsobené touto nestabilitou odstranilo používání základního elektrolytu nejvýše dvě hodiny od rozpuštění α -cyklodextrinu. Zpoždění poklesu efektivních mobilit studovaných aniontů boru vůči rostoucí koncentraci α -cyklodextrinu se tím však nepodařilo odstranit stejně, jako zpoždění nárůstu mobilitních diferencí separovaných atropoizomerů. Také nemožnost linearizovat přesná mobilitní data podle rovnice platné pro model 1:1 nebyla odstraněna. Tato fakta naznačují, že mechanismus tvorby komplexů α -cyklodextrinu s atropoizomery studovaných klastrových aniontů boru nesouhlasí s mechanismem komplexace uvažovaným v klasickém modelu interakce 1:1. Tento nesouhlas naznačuje, že mechanismus komplexace α -cyklodextrinu se studovanými klastrovými anionty boru je jiný než mechanismus tvorby komplexů α -cyklodextrinu s organickými sloučeninami nebo ionty.

Výzkum je podporován ústavním projektem Akademie věd České republiky AV0Z40310501 a grantem GA AV ČR A400310613.

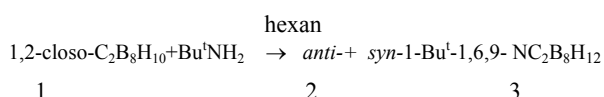
2L-01

AZADIKARBABORAN *arachno*-1,6,9-NC₂B₈H₁₃
A JEHO *N*-ALKYL A *C*-HALO DERIVÁTY

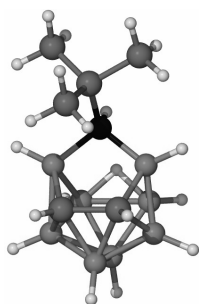
ZBYNĚK JANOUŠEK*, RADIM DOSTÁL, JAN
MACHÁČEK, DRAHOMÍR HNYK a BOHUMIL ŠTÍBR

Ústav anorganické chemie AV ČR, 250 68 Řež u Prahy
janousek@iic.cas.cz

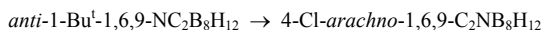
Před několika lety¹ jsme popsali reakci Bu^tNH₂ s closo-1,2-C₂B₈H₁₀ (1) která vede ke směsi dvou isomerů, anti- (2) a syn-11 Bu^t-1,6,9-NC₂B₈H₁₂ (3) v poměru 9:1.



V našem příspěvku nyní publikujeme X-ray strukturu anti-isomeru (2), která potvrzuje strukturu intuitivně navrženou v našem předběžném sdělení¹ na základě dvoudimenzionální [¹¹B-¹¹B] a [¹H-¹H] NMR korelační spektroskopie, kombinované s měřením ¹H-¹¹B(selective)} NMR spekter.



Na základě DFT výpočtu (B3LYP/6-311G*) jsme zjistili, že anti-isomer (2) je o 8 kJ mol⁻¹ stabilnější. Oba isomery (2) a (3) reagují s NaH za vzniku jediného aniontu, 1-Bu^t-1,6,9-NC₂B₈H₁₁⁻ (4), ze kterého po oksygenaci vzniká pouze jediný isomer; více stabilní anti-isomer (2). Tato reakce je příkladem přímé expanse klastru z closo- na arachno- uspořádání a je obecná pro primární a sekundární aminy, jak jsem zjistili reakcí closo-karboranu (1) s CH₃NH₂ a Et₂NH. Matečný karboran 1,6,9-NC₂B₈H₁₃ (5) byl připraven v nízkém výtěžku reakcí karbotanu (1) v hexanu nasyceném amoniakem. Jeho chloro derivát (4), byl izolován ve vysokém výtěžku při reakci anti-isomeru (2) s bezvodým AlCl₃ v benzenu při teplotě refluxu.



Tato práce vznikla za podpory MŠMT (projekt LC523).

LITERATURA

- Janoušek Z., Fusek J., Štíbr B.: J. Chem. Soc. Dalton. Trans. 1992, 2694.

2L-02

CHARACTERIZATION OF Zr⁴⁺-DOPED TiO₂
PREPARED BY HOMOGENOUS CO-PRECIPI-TATION
METHOD WITH EMPHASIS ON PHOTOCATALYTIC
DEGRADATION OF 4-CP

JOZEF LUKÁČ*, MARIANA KLEMENTOVÁ, JAN
ŠUBRT, SNEJANA BAKARDJIEVA, LÓRANT
SZATMÁRY, VÁCLAV ŠTENGL, and P. BEZDIČKA

Institute of Inorganic Chemistry AS CR, 250 68 Řež u Prahy
lukacj@iic.cas.cz

The mixtures from Zr⁴⁺-doped TiO₂ were prepared by the homogenous co-precipitation method of the aqueous solutions containing TiOSO₄ and ZrCl₄ using urea as the precipitation agent. Titanium dioxide has a wide range of applications due to its excellent physical and chemical properties, for example as white pigment, in cosmetics or catalyst carrier. Furthermore, it is used as semiconductor with photocatalytic activities with applications in environmental purification, decomposition of carbon dioxide or hydrogen generation. Preparation of Zr⁴⁺-doped TiO₂ from TiCl₄ by sol-gel method or controlled precipitation from TiCl₄, belong to the most widely used methods of synthesis materials. However, these methods are rather expensive and potentially environmentally harmful¹. Homogeneous precipitation of acid aqueous solutions of TiOSO₄ with urea is a cheap and ecologically safe method to synthesise nanocrystalline titanium oxide nanoparticles^{2,3}. In the present study, we used this method to synthesis of TiO₂ nanoparticles doped with different Zr⁴⁺ contents (0–8 wt.%). Therefore, relationship between conditions of synthesis (concentration of reactants, temperature) and the crystallite size, specific surface area, pore size distribution, morphology of porous titanium dioxide doped with zirconium is investigated with emphasis on photocatalytic degradation of 4-chlorophenol (4-CP). Degradation of 4-CP as a model material for decomposition of organic compounds was used. A lot of analysis was realization, such as X-Ray powder diffractions by Siemens D5005, the SEM studies by XL30 Philips CP microscope equipped with EDX. Transmission electron micrographs was acquired by JEOL JEM 3010 microscope and a measurement of the specific surface area was performed by the Coulter SA 3100. Formation of colloid nanoparticles of mixed Ti⁴⁺-Zr⁴⁺ oxides assembled into 1–2 μm porous spherical clusters was observed; the clusters consist of small oxide particles with 4–7 nm size. All of the doped samples exhibit the high specific surface areas. The precipitates do not contain impurities of SO₄²⁻ or Cl⁻. We have found, the best results on the degradation of 4-CP for all tested samples showed the sample with the small content of Zr⁴⁺ in TiO₂. Moreover, Degussa P25 which is used as the standard material has the rate constant $k = 1.23 \text{ hrs}^{-1}$. On the second side, in the our case the quickest sample has the constant $k = 1.76 \text{ hrs}^{-1}$. The rate constants was expressed by pseudo-first-order. This method is an adequate way to preparation of Zr⁴⁺-doped TiO₂ mixed oxides with better photocatalysts efficiency than the self TiO₂ and at the appropriate condition of preparation even better than Degussa P-25.

This work was supported by the Academy of Sciences of the

Czech Republic (Project No. AV OZ 40320502) and by the Ministry of Education of the Czech Republic (Project No. 1M4531477201).

REFERENCES

1. Lukáč J., Klementová M., Bakardjieva S., Šubrt J., Szatmáry L., Štengl V., Grusková A.: J. Mat. Science, in press.
2. Stengl V., Subrt J., Bezdička P., Marikova M., Bakardjieva S., in: *Diffusion and Defect Data, Solid State Data – Part B: Solid State Phenomena*, p. 121. Scitec Publications, Switzerland 2003.
3. Bakardjieva S., Subrt J., Stengl V., Vecernikova E., bezdička P., in: *Diffusion and Defect Data, Solid State Data – Part B: Solid State Phenomena*, p. 7. Scitec Publications, Switzerland 2003.

2L-03

BOROFOSFÁTOVÁ SKLA HOŘEČNATÁ

**PETR MOŠNER, JAROSLAV POSPÍŠIL
a LADISLAV KOUDELKA**

*Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám.Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, Česká republika
petr.mosner@upce.cz*

Zvláštní skupinou oxidických sloučenin na bázi fosforu a boru, které obsahují jak fosforečnanové, tak boritanové skupiny vzájemně spojené vazbou P-O-B jsou borofosforečnanů. Jednou z perspektivních oblastí pro využití borofosforečnanů jsou skla. Mnohé z těchto skel se vyznačují některými unikátními vlastnostmi, jako jsou vysoké hodnoty koeficientu teplotní roztažnosti, nízké teploty měknutí, relativně nízké teploty syntézy těchto skel atp. Vlastnosti borofosfátových skel mohou být pozitivně ovlivněny přidávkou iontů s malým iontovým poloměrem a vysokým nábojem, jako je např. kation Ti^{4+} .

V rámci práce byl studován vliv přidávku oxidu titaničitého na strukturu, fyzikálně-chemické vlastnosti a termické chování borofosfátových skel hořečnatých připravených v kompoziční řadě $50MgO-10B_2O_3-40P_2O_5+xTiO_2$, kde $x = 0$ až 56 mol.% TiO_2 . Skla byla připravena postupnou dehydratací a tavením výchozí směsi v korundovém kelímku při teplotách 1280–1380 °C. Vzniklá tavenina byla prudce ochlazená mezi dvěma měděnými bloky.

Z Ramanových spekter vyplynulo, že oxid titaničitý se do strukturní sítě skel vestavuje ve formě oktaedru TiO_6 , což vede k postupné přeměně metafosfátových strukturních jednotek se dvěma můstkovými kyslíky na difosfátové jednotky s jedním můstkovým kyslíkem a orthofosfátové jednotky bez můstkového kyslíku. Studium fyzikálně-chemických vlastností ukázalo, že s rostoucím obsahem oxidu titaničitého klesá měrná hmotnost, vzrůstá molární objem a výrazně se zvyšuje chemická odolnost skel. Z křivek DSC vyplynulo, že všechna studovaná skla při zahřívání krystalizují v rozmezí teplot od 650 °C do 737 °C. Produktem krystalizace skel jsou zejména sloučeniny $Mg(PO_3)_2$, $Mg_2P_2O_7$, BPO_4 , TiP_2O_7 a $Mg_{0.5}Ti_2(PO_4)_3$. Zjištěné teploty skelné transformace T_g se

pohybovaly v rozmezí 60–170 °C pod hodnotami krystalizačních teplot. S rostoucím přidávkem oxidu titaničitého hodnoty T_g klesají, což svědčí o poklesu vazebných sil ve struktuře skel.

Tato práce vznikla za finanční podpory projektu MŠMT ČR 0021627501.

2L-04

TESTING THE CATALYSTS OF THE GROWTH OF CARBON NANOTUBES USING HF CVD TECHNOLOGY

**MAGDA KADLEČÍKOVÁ^a, ANNA VOJAČKOVÁ^a,
KAROL JESENÁK^b, JURAJ BREZA^a, VIERA
LUPTÁKOVÁ^b, and PETER SZABÓ^a**

*^a Department of Microelectronics, Faculty of Electrical Engineering and Information Technology, Slovak University of Technology, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, ^b Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina CH-2, 842 15 Bratislava
kadlecikova@stuba.sk, jesenak@stuba.sk*

In the synthesis and deposition of carbon nanotubes (CNTs), particles of the catalysts present reaction centres with an enhanced probability of the growth of CNTs. It is well known that the most efficient catalysts used in the synthesis of CNTs employ the first-row transition metals of the 4th column of the periodic chart of elements, Fe, Co and Ni. Our experimental work concerns with preparation of catalyst and subsequent evaluation of the deposits of CNTs by SEM, TEM and Raman spectroscopy. Carbon nanotubes were prepared using Hot Filament Chemical Vapour Deposition. The deposition of CNTs was carried out in a HF CVD reactor, where a precursor is activated by five tungsten filaments heated up to 2200 °C. A pressure of 3 kPa was found to be suitable for deposition of CNTs, while the other parameters remain constant. Using the pressure of 3 kPa the density of CNTs film was much higher than the density in other samples. By testing some catalysts we found that the best catalyst for the HF CVD method of preparation of CNTs was the mixture of $Fe(NO_3)_3$ and $Al(NO_3)_3$. Another catalyst is the Fe-containing clay montmorillonit (MMT).

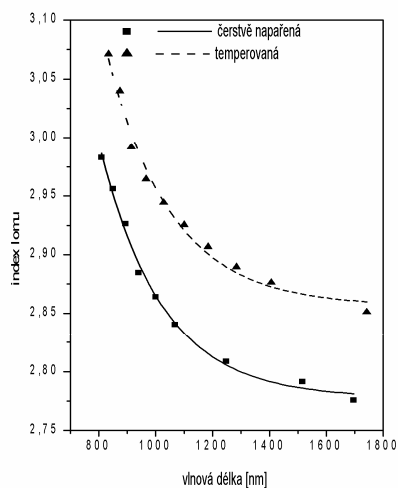
This work has been supported by grants VEGA 1/3034/06, 1/2040/05 and 1/2061/05 of the Ministry of Education of the Slovak Republic.

2L-05

OPTICKÉ VLASTNOSTI TENKÝCH VRSTEV
SYSTÉMU $(\text{As}_2\text{Se}_3)_{80-x}(\text{As}_2\text{Te}_3)_x(\text{SnTe})_{20}$ VÁCLAV PARCHANSKÍ^a, BOŽENA FRUMAROVÁ^b
a MILOSLAV FRUMAR^a

^a Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, ^b Společná laboratoř chemie pevných látek Ústavu makromolekulární chemie Akademie věd České republiky a Univerzity Pardubice, Studentská 84, 532 10 Pardubice
Vaclav.Parchanski@upce.cz

Objemová skla kvaternárního systému $(\text{As}_2\text{Se}_3)_{80-x}(\text{As}_2\text{Te}_3)_x(\text{SnTe})_{20}$ ($x = 0, 5, 10, 15, 20$) byla připravena přímou syntézou z prvků polovodičové čistoty. Amorfni tenké vrstvy byly připraveny metodou vakuového napařování objemových vzorků na substráty z podložních mikroskel. Z transmisních spekter byly Swanepoelovou¹ a Wemple-DiDomenicovou² metodou určeny základní parametry tenkých vrstev (tloušťka, index lomu n_0 , závislost indexu lomu na vlnové délce (obr. 1), relativní permitivita ϵ_0 , energie lineárního oscilátoru E_0 , disperzní energie E_d). Hodnoty indexu lomu se pohybují v rozsahu $n_0 = 2,5$ – $2,9$. Relativní permitivita ϵ_0 je v rozmezí 6,3–8,9. Krátkovlnná absorpční hrana leží v okolí 650 nm. Byly studovány změny optických parametrů a struktury tenkých vrstev v důsledku expozice zářením a teplotou pod teplotou skelného přechodu. Bylo zjištěno,



Obr. 1. Spektrální závislost indexu lomu tenké vrstvy $(\text{As}_2\text{Se}_3)_{80-x}(\text{As}_2\text{Te}_3)_x(\text{SnTe})_{20}$

že temperací tenkých vrstev dochází k posunu krátkovlnné absorpční hrany k delším vlnovým délkám, růstu hodnoty indexu lomu n_0 a růstu hodnoty relativní permitivity ϵ_0 a ke změnám struktury tenkých vrstev.

LITERATURA

- Swanepoel R.: J. Phys. E: Sci. Instrum. 16, 1214 (1983).
- Wemple S. H., DiDomenico M.: Phys. Review, B 3, 1338 (1971).

2L-06

SENSORIC STRUCTURES BASED ON TiO_2 FILMS
PREPARED BY SOL-GEL METHODSKAROL JESENÁK^a, LUBOMÍR KUČTA^a, GUSTÁV
PLESCH^a, BOŽENA KOZLOVSKÁ^a, ANDREJ
PLECENÍK^b, and PETER KÚŠ^b

^a Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, 842 15 Bratislava, ^b Department of Experimental Physics, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Comenius University, 842 15 Bratislava
jesenak@fns.uniba.sk

Titanium dioxide based thin films are highly promising for application in automotive industry as lambda sensors. The both best known phases of titanium dioxide – rutile and anatase show good sensing properties. For preparation of thin semiconducting films mostly sol-gel deposition and r.f. sputtering have been used. Thick films have been frequently prepared by screen printing of nanopowders. The sol-gel method allows a relatively simple non-vacuum preparation of nanosized films with well controlled and tailored properties. This technique leads to layers of high homogeneity and purity. A chemical doping of the active film, which is necessary for a fine tuning of the energy gap and introduction of catalytic metals, is mostly relatively easy. In this contribution a fabrication of simple sensoric structures by combination of physical deposition techniques and a sol-gel preparation of titanium dioxide are presented. Sensoric structures and the necessary buffer layers were deposited by dc and r.f. magnetron sputtering, thermal deposition and electron gun deposition. The optical lithography and physical vacuum deposition techniques allows the fabrication of these microstructures with high precision. On the other hand, the sensoric active TiO_2 films were deposited by sol-gel method based on hydrolysis of titanium alkoxide. The use of chemical way of preparation of the sensoric layer leads to films with improved control of the phase composition. The microstructure and topography of the layers was controlled by scanning electron microscopy and AFM. The basic electrical characteristics of prepared sensoric structures were performed.

The authors wish to thank to Science and Technology Assistance Agency Slovakia (APVV) – project APVT-20-0011804 for financial support.

2L-07

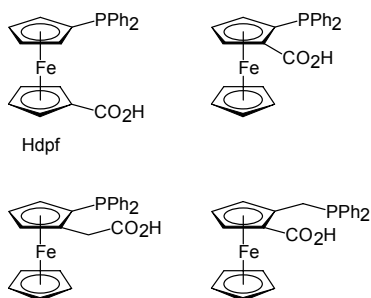
FERROCENOVÉ FOSFINKARBOXYLOVÉ LIGANDY

PETR ŠTĚPNIČKA

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze, Hlavova 2030, 128 40 Praha
stepnic@natur.cuni.cz

Ferrocenové ligandy se těší badatelskému zájmu i po více než padesáti letech od objevu jejich mateřské sloučeniny, tj. ferrocenu samotného. Stálý zájem je stimulován především širokými možnostmi jejich následného využití. Prakticky nejúspěšnější oblast, ve které se ferrocenové ligandy prosadily, představují aplikace v katalýze organických reakcí komplexů přechodných kovů. I přes značný rozvoj a pozornost se však chemie takových ferrocenových ligandů omezuje především na sloučeniny, které obsahují obvyklé *N*- a *P*-donorové skupiny¹.

V roce 1996 jsme popsali vůbec první ferrocenový fosfin-karboxylový ligand, 1'-(difenylfosfino)ferrocenkarboxylovou kyselinu (Hdpcf)². Od té doby se řada námi připravených a studovaných sloučenin podstatně rozšířila (viz Schéma)³.



Schéma

Tento příspěvek je věnován stručnému popisu cesty od přípravy a charakterizace Hdpcf jako nejjednoduššího zástupce této třídy donorů a jejich vybraných koordinačních sloučenin až k následnému využití jako organokovové syntony a složky různých katalytických systémů³.

Tato práce vznikla s finanční podporou Grantové agentury České republiky.

LITERATURA

1. Vybrané reference: (a) *Ferrocenes - Homogeneous Catalysis, Organic Synthesis, Materials Science*, (Togni A., Hayashi T., ed.), VCH, Weinheim 1995. (b) Togni A.: *New Chiral Ferrocenyl Ligands for Asymmetric Catalysis*, v knize: *Metallocenes - Synthesis, Reactivity, Applications*, (Togni A., Halterman R. L., ed.), díl 2, kapitola 11, 685-721. Wiley-VCH, Weinheim 1998. (c) Atkinson R. C. J., Gibson V. C., Long N. J.: *Chem. Soc. Rev.* 33, 313 (2004).
2. Podlaha J., Štěpnička P., Císařová I., Ludvík J.: *Organometallics* 15, 543 (1996).
3. Štěpnička P.: *Eur. J. Inorg. Chem.* 3787 (2006).

2L-08

NOVEL RUTHENIUM(III)-BASED COMPOUNDS INVOLVING CYTOKININ DERIVATIVES: SYNTHESIS, CHARACTERISATION AND CYTOTOXICITY

MIROSLAVA MALAROVÁ^a, KAMILA ŠTĚPÁNKOVÁ^a, IGOR POPA^b, and ZDENĚK TRÁVNÍČEK^{a,b}

^a Department of Inorganic Chemistry, Palacký University, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc, ^b Laboratory of Growth Regulators, Faculty of Science, Palacký University & Institute of Experimental Botany ASCR, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc
malarova@yahoo.com

Some of ruthenium complexes involving aromatic *N*-donor heterocycles have attracted attention for their potential application as chemotherapeutic agents¹. As an example of a novel and promising ruthenium anticancer agents with selective antitumor activity, the complexes of the (X)[*trans*-RuCl₄(dms_oS)(L)] type {X= HL or Na; dms_o= dimethyl sulfoxide; L= imidazol}, named NAMI and NAMI-A, respectively^{2,3}, can be mentioned. Although many Ru-complexes with aromatic *N*-donor heterocycles, e.g. pyridine⁴, 2,2'-bipyridine, 1,10-phenanthroline, and their derivatives⁵, have been synthesized and described in the literature up to now, there exist a few Ru-complexes involving purine-like ligands only.

Herein, we present the first Ru(III)-complexes with cytokinin-derivatives. Cytokinins, i.e. N6-substituted adenine derivatives, are an important class of plant growth hormones which affect variety physiological processes such e.g. cell

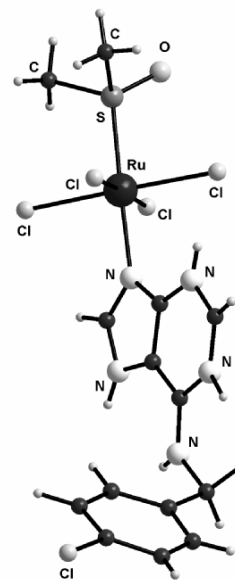


Figure 1. The molecular structure of III

division and differentiation. The Ru(III)-complexes of the composition $[\text{Ru}(\text{H}^+\text{L})(\text{dms}_2\text{S})\text{Cl}_4]$ {where L = e.g. 6-(2-chlorobenzylamino)purine (2Cl-Bap) **I**, 6-(3-chlorobenzylamino)purine (3Cl-Bap) **II** or 6-(4-chlorobenzylamino)purine (4Cl-Bap) **III** } have been prepared by the reaction between $(\text{dms}_2\text{H})[\text{trans-RuCl}_4(\text{dms}_2\text{S})_2]$ and the appropriate cytokinin in dms₂O, ethanol or acetone solution. All compounds were characterized by suitable physical techniques (i.e. elemental analysis, IR, VIS, NMR, EI+ MS spectroscopies, TGA/DSC, conductivity and magnetic measurements). The molecular structure of $[\text{Ru}(\text{3Cl-Bap H}^+)(\text{dms}_2\text{S})\text{Cl}_4]$ and $[\text{Ru}(\text{4Cl-Bap H}^+)(\text{dms}_2\text{S})\text{Cl}_4]$ were determined by single crystal X-ray analysis. In both structures, Ru(III) ions are coordinated by one protonated cytokinin derivative, four chloride ligands and one molecule of dms₂O in a distorted octahedral geometry (Figure 1). The cytotoxicity of the complexes against selected human cancer cell lines (K-562, MCF-7, G-361 and HOS) was also tested and the results will be discussed within the framework of the presentation.

This work was supported by a grant MSM6198959218.

REFERENCES

1. Sava G., Bergamo A.: *Int. J. Oncol.* 17, 353 (2000).
2. Mestroni G., Alessio E., Sava G., Pacor S., Coluccia M.: *Metal Complex in Cancer Chemotherapy*, (Keppler B. K., ed.), p. 157. VCH, Weinheim 1993.
3. Rademakher-Lakhai J. M., Van den Bonghard D., Pluim D., Beijnen B. H., Schellens J. H. M.: *Clin. Cancer Research* 10, 3717 (2004).
4. Aird R. E., Cummings J., Ritchie A. A., Muir M., Morfia R. E., Chen H., Adler P. J.: *Br. J. Cancer* 86, 1652 (2002).
5. Hotze A. C. G., Bacac M., Velders A. H., Jansen B. A. J., Koojiman H., Spek A. L., Haasnoot J. G., Reedijk J.: *J. Med. Chem.* 46, 1743 (2003).

2L-09

PŘÍPRAVA A STRUKTURA POLOSENDVIČOVÝCH TITANIČITÝCH KOMPLEXŮ S HALOGENOSILYLOVÝMI SUBSTITUENTY NA CYKLOPENTADIENYLOVÉM KRUHU

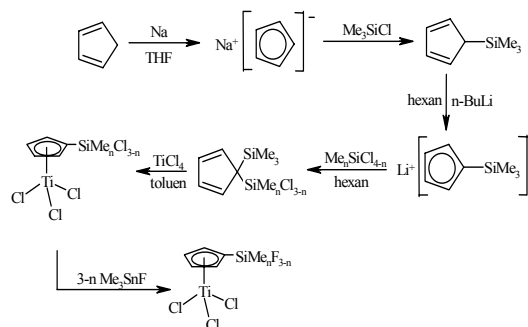
MICHAL DUŠEK^a, MILAN ERBEN^a a JAN MERNA^b

^a Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice; ^b Ústav polymerů, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 1903, 166 28 Praha 6 milan.erben@upce.cz

Polosendvičové komplexy typu $\text{Cp}'\text{TiCl}_3$ (Cp' = substituovaný nebo nesubstituovaný cyklopentadienylový kruh) jsou hojně studovány pro jejich katalytickou aktivitu při polymeracích olefinů. Modifikovat katalytické vlastnosti daných komplexů lze zejména substitucí na Cp kruhu¹, přičemž nejčastěji používanými substituenty jsou alkylové skupiny, jež vykazují elektronově donorové vlastnosti. Obecným předpokladem je, že katalytická aktivita vzrůstá spolu s poklesem elektronové hustoty na centrálním atomu titanu, tedy s přítomností substi-

tuentů, jež jsou schopny elektrony z centrálního atomu do jisté míry odtahovat.

Cílem této práce byla příprava sloučenin s halogenosilylovými substituenty, které by mohly vykazovat elektronově akceptorové vlastnosti. Byly připraveny metallocenové sloučeniny typu $[\text{SiMe}_{(3-x)}\text{Cl}_x]\text{CpTiCl}_3$ a $[\text{SiMe}_{(3-x)}\text{F}_x]\text{CpTiCl}_3$ ($x = 0, 1, 2, 3$) (obr. 1) a ty byly studovány spektroskopickými metodami. Pro jejich syntézu byla využita reakce odpovídajícího chloridového derivátu s Me_3SnF jakožto fluoračním činidlem.



Obr. 1. Syntéza polosendvičových komplexů; ($n = 0, 1, 2, 3$)

Vliv elektronových vlastností halogenosilylových substituentů byl studován pomocí multinukleární NMR a elektronové spektroskopie. Na základě zjištěných údajů byl objektivně posouzen vliv substituentu na Cp kruhu na elektronové okolí centrálního kovu a bylo zjištěno, že elektronově akceptorové vlastnosti jeví oba trihalogenosilylové substituenty ($-\text{SiCl}_3$ a $-\text{SiF}_3$).

U připravených sloučenin byla též testována jejich katalytická aktivita pro polymeraci styrenu.

Tato práce byla financována v rámci výzkumného záměru MSM 0021627501 Ministerstva školství mládeže a tělovýchovy a interního grantu Univerzity Pardubice FG 360011.

LITERATURA

1. Deck P. A.: *Coord. Chem. Rev.*, v tisku

2L-10

PŘÍPRAVA CYKLOPENTADIENYLOVÝCH KOMPLEXŮ TITANU S ELEKTRONOVĚ AKCEPTOROVÝMI SUBSTITUENTY

MILAN ERBEN a MICHAL DUŠEK

Katedra obecné anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice milan.erben@upce.cz

Cyklopentadienylové komplexy s kovy skupiny 4 vykazují katalytickou aktivitu pro homogenní polymerace α -alkenů za vzniku polymerů s přesně definovanou strukturou.

Typickými představiteli těchto sloučenin jsou sloučeniny obecného vzorce Cp^*TiX_3 , (X je acidoligand, alkyl, aryl apod., Cp^* je ligand obsahující C_5 -kruh η^5 -vázaný ke kovu, např. cyklopentadienyl, indenyl, fluorenyl). Do dnešní doby byla připravena celá řada takovýchto sloučenin a stále jsou hledány nové látky, jež budou mít vlastnosti vhodné pro průmyslovou výrobu polyolefinů. V současné době jsou již používány katalyzátory s aktivitou přesahující výtěžky 25 tun polymeru na gram katalyzátoru za hodinu.

Hlavním způsobem modifikace metallocenového katalyzátoru Cp^*TiX_3 je vnesení jednoho či více substituentů na cyklopentadienylový kruh a v literatuře je popsáno velké množství takto odvozených látek. Nejčastěji jsou jako substituenty používány alkylové či arylové skupiny případně skupiny organokřemičité. Tyto substituenty však zvyšují elektronovou hustotu na centrálním atomu kovu, což může v konečném důsledku vést k snížení katalytické aktivity. Proto jsou intenzivně hledány cesty jak připravit metallocenové komplexy kovů skupiny 4, jež by na Cp kruhu nesly substituenty s výraznými elektronově akceptorovými (EA) vlastnostmi.

Tento příspěvek se zabývá přípravou a vlastnostmi titaničitých metallocenových sloučenin, kde je na pětičlenném kruhu vázána EA skupina karboalkoxylová, perfluoroalkylová, pentafluorofenylová atp. Na připravených sloučeninách bude demonstrován vliv redistribuce elektronové hustoty na jejich stabilitu a spektroskopické vlastnosti. Stejně tak budou diskutovány i faktory limitující přípravu těchto látek jakož i komplexů s jinými EA substituenty, jako jsou např. skupiny $-COR$, $-CN$ či $-NO_2$.

2L-11

Cu(II) KOMPLEXY S PURINOVÝMI DERIVÁTY, VLASTNOSTI A ANTIRADIKÁLOVÁ AKTIVITA

ALENA KLANICOVÁ^a, ZDENĚK TRÁVNÍČEK^{a,b}, IGOR POPA^b, JÁN VANČO^c a ZDENĚK ŠINDELÁŘ^a

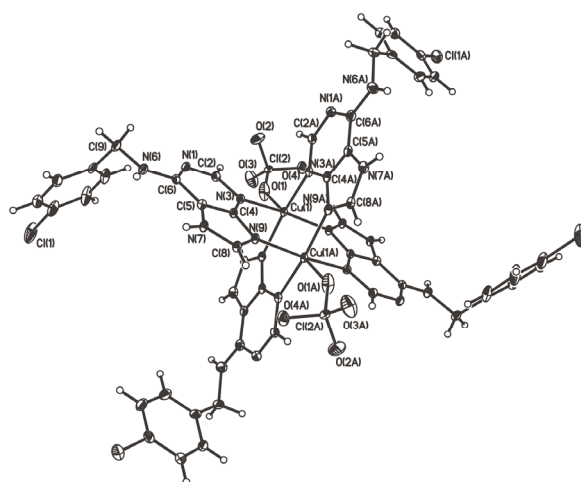
^a Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc,

^b Laboratoř růstových regulátorů, Univerzita Palackého & Ústav experimentální botaniky AVČR, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, ^c Ústav chemických léčiv, Farmaceutická fakulta, Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, Palackého 1-3, 612 42 Brno

klanicova@prfholnt.upol.cz, trav@aix.upol.cz

Deriváty 6-benzylaminopurinu jsou známé řadou svých biologických účinků. V rostlinných tkáních, kde se přirozeně vyskytují jako fytohormony stimulující růst a dělení buněk¹. Na druhou stranu mohou vyvolat zastavení růstu buněk živočišných tumorů. Kancerostatický účinek může být umocněn tvorbou komplexu s vhodným přechodným kovem (Pt, Pd, Co, Fe, Cu)^{2,3}.

Reakcí $Cu(ClO_4)_2 \cdot 6 H_2O$ s deriváty 6-benzylaminopurinu byly připraveny dvojjaderné komplexy o složení $[Cu_2(\mu-L^{1-8})_4(ClO_4)_2](ClO_4)_2 \cdot n$ solv, kde L^{1-8} = různě substituované deriváty adeninu, $n = 0-4$, solv = EtOH, MeOH nebo



Obr. 1. Molekulová struktura komplexu $[Cu_2(\mu-L^6)_4(ClO_4)_2](ClO_4)_2 \cdot 4 EtOH \cdot H_2O$

H_2O . Komplexy byly charakterizovány pomocí chemické analýzy prvků, IR, UV-Vis, 1H a ^{13}C NMR spektroskopie, magnetochemických a vodivostních měření. Struktura komplexu $[Cu_2(\mu-L^6)_4(ClO_4)_2](ClO_4)_2 \cdot 4 EtOH \cdot H_2O$ (obr. 1) byla vyřešena pomocí monokrystalové rentgenostrukturní analýzy.

Koordinace sféra centrálních atomů připravených dvojjaderných $Cu(II)$ komplexů se podobá aktivnímu místu enzymu $Cu,Zn-SOD$ (superoxid dismutasy), který je znám jako jeden z nejdůležitějších savčích intracelulárních antioxidantů⁴. Proto byly studované komplexy podrobeny také testování *in vitro* antiradikálové aktivity. Ze získaných hodnot IC_{50} vyplývá, že testované komplexy mědi vykazují až stonásobně vyšší antiradikálový účinek než výchozí látky.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR 6198959218 a GA ČR 203/04/1168.

LITERATURA

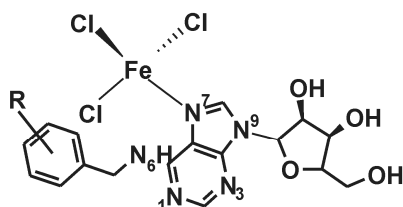
1. Miller C. O., Skoog M. H., Von Saltza M. H., Strong F. M.: J. Am. Chem. Soc. 78, 1392 (1955).
2. Maloň M., Trávníček Z., Maryško M., Marek J., Doležal K., Holub J., Rolčík J.: Transition Met. Chem. 27, 580 (2002).
3. Klanicová A., Trávníček Z., Popa I., Čajan M., Doležal K.: Polyhedron 25, 1421 (2006).
4. Johnson F., Giulivi C.: Mol. Aspects. Med. 26, 340 (2005).

2L-12

KOMPLEXY Fe^{III} S N⁶-SUBSTITUOVANÝMI DERIVÁTY ADENOSINU: PŘÍPRAVA, SPEKTRÁLNÍ A MAGNETICKÉ VLASTNOSTI, CYTOTOXICITAJIŘÍ MIKULÍK^a, ZDENĚK TRÁVNÍČEK^{a,b,*}, IGOR POPA^b, RADEK ZBOŘIL^c a VLADIMÍR KRYŠTOF^b

^a Katedra anorganické chemie, PřF UP, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc, ^b Laboratoř Růstových Regulátorů, PřF UP & Institut Experimentální Botaniky AS CR, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, ^c Katedra Fyzikální Chemie, PřF UP, Tr. Svobody 8, 771 46 Olomouc
trav@risc.upol.cz

V naší práci jsou prezentovány zcela nové Fe^{III} komplexy (I–7) s N⁶-benzylsubstituovanými deriváty adenosinu obecného složení [Fe(L_n)Cl₃] · H₂O (n = 1–7). Připravené komplexy byly studovány elementární analýzou, ⁵⁷Fe Mössbauerovou, EPR, ES+ MS, IR, ¹H a ¹³C NMR spektroskopii, magnetochemickými a vodivostními měřeními, a termickou analýzou (TGA a DSC). Z výsledků metod bylo zjištěno, že molekula krystalové vody ovlivňuje magnetické a spektrální vlastnosti komplexů. Hodnoty efektivních magnetických momentů u všech připravených sloučenin jsou značně nižší (5,32–5,56 μ_{eff}/μ_B) než je hodnota čistě vysokospinového stavu d⁵ (S = 5/2; 5,90 μ_{eff}/μ_B), a pravděpodobně tak spadají do kategorie S = 5/2–3/2 *spin-admixed* sloučenin s procentuálním zastoupením 75–85 % (S = 5/2) a 15–25 % (S = 3/2). Chemické posuny v ¹H a ¹³C NMR spektrech naznačují koordinaci ligandu přes N⁷ atom.

R = Cl, F, CF₃, OCF₃Obr. 1. Předpokládaná struktura komplexů typu [Fe(L_n)Cl₃] · H₂O

U všech připravených látek byla testována také cytotoxicita na čtyřech lidských nádorových liniích (maligní melanom (G-361), maligní kostní nádor (HOS), myeloidní leukémie (K-562) a prsní adenokarcinom (MCF-7)). Zvýšená selektivní cytotoxicita byla zaznamenána u komplexu [Fe(L₂)Cl₃] · H₂O (2), {L₂ = N⁶-(4-fluorobenzyl)adenosin; IC₅₀ hodnoty 8–16 μM u linií HOS, K-562 a MCF-7} a u komplexu [Fe(L₆)Cl₃] · H₂O (6), {L₆ = N⁶-(4-trifluoromethoxybenzyl)adenosin; IC₅₀ = 4 μM u linie MCF-7}. Zbývající sloučeniny jsou necytotoxické a vykazují hodnoty IC₅₀ > 50 μM.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru MSM 6198959218.

2L-13

SYNTÉZA A CHARAKTERIZACE Fe(III)-KOMPLEXŮ SE SCHIFFOVÝMI BÁZEMI OBECNÉHO SLOŽENÍ [Fe(salen)(L')] a [Fe(saloph)(L')]

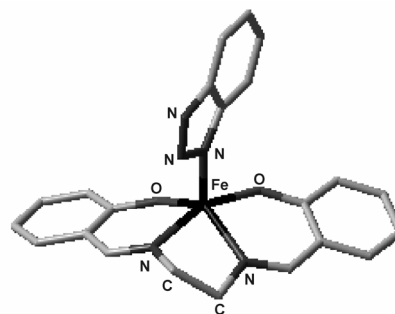
ZDENĚK ŠINDELÁŘ^a, MICHAL ČAJAN^a, RADEK ZBOŘIL^b a ZDENĚK TRÁVNÍČEK^a

^a Katedra anorganické chemie, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc, ^b Katedra fyzikální chemie, Tr. Svobody 26, Olomouc
trav@aix.upol.cz, Zdenek.Sindelar@upol.cz

Jednojaderné komplexní sloučeniny Fe(III) obsahující Schiffovy báze typu salen²⁻ a saloph²⁻ v kombinaci s N-heterocyklickými ligandy obsahujícími více atomů dusíku v cyklu byly popsány dříve a jsou pro svoje zajímavé magnetické vlastnosti stále v popředí zájmu¹. Jejich složení však dosud vždy odpovídalo obecnému vzorci [Fe(L)(HL')]A resp. [Fe(L)(HL')]A, kde L představuje Schiffovu bázi odvozenou od derivátů salicylaldehydu a ethylendiaminu, případně 1,2-diaminobenzenu, HL' elektroneutrální N-heterocyklický ligand (př. imidazol, pyrazol) a A anion (nejčastěji BPh₄⁻, ClO₄⁻, PF₆⁻, BF₄⁻). Některé z těchto sloučenin vykazují tzv. *spin-crossover* chování, případně jsou charakteristické vznikem přechodných spinových stavů nebo tzv. *spin-admixed* stavů.

V této práci je popsáno celkem osm nových penta-koordinovaných Fe(III)-komplexů obecného složení [Fe(salen)(L')], resp. [Fe(saloph)(L')] (kde L' = deprotonizovaný heterocyklus, tj. 1H-imidazol (imzH), 1H-benzimidazol (bimzH), 1H-1,2,4-triazol (trizH) resp. 1H-benzotriazol (btrizH), 5-aminotetrazol (atzH) a 5-methyltetrazol (mtzH), a právě tyto elektroneutrální sloučeniny představují nový typ Fe-salen a Fe-saloph komplexů. Strukturně nejbližší popsaný typ sloučenin představují metaloporfyrinové systémy obsahující tzv. σ-vázané axiální N-ligandy^{2,3}. Elektroneutrální jednojaderné Fe(III)-komplexy výše uvedeného složení byly získány reakcí μ-oxokomplexu Fe(III) obsahujícího Schiffovu bázi s příslušným heterocyklem v bezvodém n-butanolu.

Syntetizované komplexy byly studovány pomocí FT-IR, EI+ MS, UV-VIS a Mössbauerovy spektroskopie, měření teplotních závislostí magnetické susceptibilita a pomocí tech-

Obr. 1. Pravděpodobná geometrie molekuly komplexu [Fe^{III}(salen)(btriz)] (optimalizováno B3LYP/6-311+G*)

nik termické analýzy (TG/DTA/DSC). U vybraných komplexů byla rovněž provedena kvantově chemická analýza struktury a spektrálních vlastností na HF a DFT úrovních (obr. 1). U komplexů byla sledována jejich *SOD-like* aktivita (antisuperoxidázová) a cytotoxicita na vybraných lidských nádorových liniích.

Tato práce vznikla za podpory grantu MSM6198959218.

LITERATURA

1. Kennedy B. J., McGrath A. C., Murray S. K., Skelton, B. W., White A. H.: *Inorg. Chem.* 26, 483 (1987).
2. Guillard N., Jagerovic N., Tabard A., Richard P., Courthaudon L., Louati A., Lecomte C., Kadish K. M.: *Inorg. Chem.* 30, 16 (1991).
3. Guillard N., Perrot I., Tabard A., Richard P., Lecomte C., Liu Y. H., Kadish K. M.: *Inorg. Chem.* 30, 27 (1991).

2L-14

EFFECT OF ORGANIC FLUOROLIGAND AND/OR FLUORIDE ON PHOTOREDOX STABILITY OF IRON (III) COMPLEXES

RASTISLAV ŠÍPOŠ, MÁRIO IZAKOVIČ, and JOZEF ŠÍMA*

*Department of Inorganic Chemistry, Slovak Technical University, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
rasto.sipos@gmail.com*

Photochemical behaviour of iron(III) complexes [Fe(4-R-benacen)X(CH₃OH)] and [Fe(3-R-salen)X(CH₃OH)], where R = H, Cl or F; X = Cl or F; 4-R-benacen(2-) and 3-R-salen(2-) are *N,N'*-ethylenebis(4-R-benzoylacetoneiminato) and *N,N'*-ethylenebis(3-R-salicylaldiminato) ligands, respectively, was investigated in methanolic solutions by steady-state photolysis at four different wavelengths. The course of photoredox processes was followed by UV-VIS spectrophotometry and spin-trapping EPR. It was shown that the coordination of fluoride anion to the central atom significantly increased the photoredox stability of the iron(III) central atom in cases of complexes with both benacen and salen-type ligands. On the other hand, the presence of fluorine atom on the benacen ligand had no significant effect on the photoredox behaviour of the complexes when compared with analogous unsubstituted or chloro-containing tetradentate ligands. Integral quantum yield of Fe(II) formation decreased with increasing wavelength of the incident radiation. Spin-trapping EPR documented the presence of [•]CH₂OH radicals in irradiated systems. As final products of photoredox processes, Fe(II) and CH₂O were determined. ¹⁹F-NMR showed that fluorine atoms of the 4-F-benacen ligand did not interact with the central atom. The mechanism of photophysical and photochemical deactivation steps is proposed.

This work was supported by the VEGA grant 1/2452/05 and Science and Technology Assistance Agency under the contract No. APVT-20-005504.

REFERENCE

1. Šíma J., Izakovič M., Šípoš R., Švorec J.: *J. Fluorine Chem.*, *submitted*.

2L-15

VLIV POMĚRU Na⁺ A K⁺ V SILNĚ ALKALICKÉM ELEKTROLYTU NA KINETIKU ROZPOUŠTĚNÍ Fe ANODY

ZUZANA MÁCOVÁ a KAREL BOUZEK

*ÚAT, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha
zuzana.macova@vscht*

Železany jsou díky neobvykle vysokému oxidačním stavu centrálního atomu železa (+VI) nestabilní a v neutrálním a především kyselém prostředí podléhají rychlému rozkladu. To komplikuje nejen přípravu, ale zvláště separaci vzniklého produktu z roztoku. Řešení tohoto problému představuje přímá syntéza pevného železnanu. V poslední době bylo navrženo několik postupů, jež jsou vesměs založeny na rozdílné rozpustnosti železnanů v různých směsných elektrolytech^{1,2}. Přístup založený na přidavku kationtu, jehož součin rozpustnosti s železnanem je dostatečně nízký, je však spojen s nebezpečím inhibice povrchu anody precipitátem omezeně rozpustného produktu. Cílem této práce je stanovit vliv složení anolytu na vlastnosti vrstev pokrývajících povrch anody a tím na kinetiku jejího rozpouštění.

K tomu byla využita metoda elektrochemické impedanční spektroskopie (EIS). EIS umožňuje stanovit *in situ* odpor, který kladou vrstvy vznikající během anodické polarizace na povrchu elektrody přenosu náboje. Hodnota tohoto odporu je přímo úměrná inhibičním vlastnostem povrchové vrstvy.

Byla změřena řada impedančních spekter anody vyrobené z oceli s vysokým obsahem křemíku v 14 M roztocích hydroxidu alkalických kovů s různým poměrem Na⁺: K⁺ jako kationtu v pasivní a transpasivní potenciálové oblasti. Výsledky těchto experimentů umožnily identifikovat oblast experimentálních podmínek, které zabezpečují intenzivní rozpouštění anody.

Kinetika rozpouštění však představuje pouze jeden z hlavních parametrů určujících konečný výtěžek syntézy. Druhým rozhodujícím parametrem je stabilita produktu. V oblasti experimentálních podmínek zabezpečujících dostatečnou účinnost rozpouštění anody byla realizována série vsádkových elektrolyzů, která umožnila kvantifikovat podíl rozpuštěného železa přítomného v anolytu v oxidačním stupni +VI a +III. Výsledky těchto experimentů přispěly k bližšímu pochopení mechanismu inhibice povrchu anody v prostředí silně alkalického anolytu a vlivu přítomného kationtu na něj. Zároveň umožnily optimalizovat podmínky elektrochemické syntézy železnanu.

Tato práce vznikla za podpory Grantovou agenturou ČR projektu č. 104/05/0066.

LITERATURA

1. Licht S.: Electrolytic production of solid Fe(VI) salts; U. S. Patent PCT/IL00/00588, 29 March 2001.
2. Maxey J., Nelson C., Minevski Z., Taylor D.: Electrochemical method for producing ferrate(VI) compounds; U.S. patent No. 2003159942, 28 August 2003.

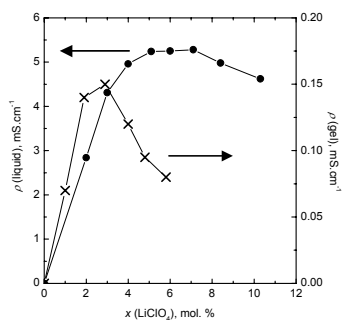
2L-16

IONTOVÁ VODIVOST LITHNÝCH SOLÍ V PMMA POLYMERNÍCH GELOVÝCH ELEKTROLYTECH

MARTINA NÁDHERNÁ, JAKUB REITER* a JIŘÍ VONDRÁK

Ústav anorganické chemie AV ČR, 250 68 Řež
reiter@iic.cas.cz

Polymerní elektrolyty na bázi aprotických systémů vykazují vysokou elektrochemickou stabilitu a dobrou iontovou vodivost^{1,2}. Pro jejich přípravu byla vyvinuta metoda radikálové polymerizace^{2–4}. Jejich použití v sekundárních lithno-iontových bateriích a elektrochromních prvcích vyžaduje vysokou koncentraci lithných solí (LiClO₄, LiBF₄, LiPF₆, LiCF₃SO₃). Vzhledem k aplikaci byly tyto elektrolyty na bázi poly(methylmethakrylátu) a propylen-karbonátu zkoumány s důrazem na studium transportních, především difuzních procesů a interakcí ion-rozpouštědlo³.



Obr. 1. Vliv koncentrace LiClO₄ na vodivost kapalného (PC-LiClO₄) a polymerního (PMMA-PC-LiClO₄) elektrolytu (teplota 22 °C)

Lithné soli vykazují v nevodných rozpouštědlech vysokou míru asociace, což se projevuje nižší vodivostí ve srovnání např. se solemi sodnými. Tento efekt byl pozorován rovněž v PMMA-PC polymerních elektrolytech⁴. Obr. 1 ukazuje výrazné maximum vodivosti u kapalného i polymerního elektrolytu, kdy je míra disociace LiClO₄ nejvyšší. Tato studie ukazuje, že kromě vysokého obsahu lithné soli je nutné optimalizovat také poměr sůl-rozpouštědlo. Byl také sledován vliv teploty na vodivost a asociaci iontů a byly stanoveny zdánlivé aktivační energie připravených elektrolytů s různými lithnými solemi.

Tato práce vznikla za podpory Akademie věd ČR (AV0Z40320502), Grantové agentury ČR (104-06-1471) a Grantové agentury AV ČR (B208130604).

LITERATURA

- Vondrák J., Reiter J., Velická J., Klápště B., Sedlaříková M., Dvořák J.: J. Power Sources 146, 436 (2005).
- Reiter J., Vondrák J., Velická J., Mička Z.: Chem. Listy 100, 133 (2006).
- Reiter J., Vondrák J., Velická J., Mička Z.: Electrochim.

Acta 50, 4469 (2005).

- Reiter J., Michálek J., Vondrák J.: J. Power Sources, v tisku.

2L-17

POROVNÁNÍ Vlivu KŘEMÍKU A UHLÍKU PŘÍTOMNÉHO VE STRUKTUŘE ŽELEZNÉ ANODY NA ÚČINNOST ELEKTROCHEMICKÉ PŘÍPRAVY ŽELEZANU

ZUZANA MÁCOVÁ a KAREL BOUZEK

ÚAT, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha
zuzana.macova@vscht

Železany (FeO₄²⁻) jsou díky neobvyklému oxidačním stavu železa (+VI) velmi silným oxidačním činidlem. Díky tomu našly uplatnění např. v technologii čištění odpadních vod či při konstrukci tzv. vysokokapacitních baterií. Na druhé straně je tato jejich vlastnost příčinou jejich obtížné přípravy a ředeším pak stabilizace a dlouhodobého uchování.

Jedním ze způsobů přípravy železanu je anodická oxidace železných elektrod v koncentrovaném roztoku alkalického hydroxidu. Podle dřívějších výsledků¹ klesá při použití čisté železné anody účinnost procesu s dobou elektrolýzy. Za příčinu deaktivace během ustálené anodické polarizace je považována postupná přeměna vrstvy FeOOH pokrývajících povrch anody na Fe₃O₄. Jako možný způsob eliminace tohoto efektu byla navržena katodická polarizace pracovní elektrody či střídavá modulace vloženého proudu. Optimálním řešením se ukázal být i výběr vhodného materiálu anody^{1,2}. Výsledky¹ ukázaly, že přítomnost karbidu železa Fe₃C ve slitině anody mění porozitu a soudržnost pasivační vrstvy na povrchu. Přednostním rozpouštěním této fáze dochází k lokálnímu narušení povrchové vrstvy, které umožňuje kontinuální rozpouštění materiálu anody. Podobných výsledků dosáhl též Lapique² ovšem s materiálem s vysokým obsahem křemíku. Obě složky tj. Fe₃C a Si zřejmě plní při rozpouštění anody shodnou funkci. Ověření této teorie bylo cílem předkládané práce.

Byly vybrány dva elektrodové materiály – bílá litina (3,16 hm.% C ve formě Fe₃C) a křemíkatá ocel (3,17 hm.% Si). Byly změřeny potenciodynamické polarizační křivky obou materiálů, které umožnily porovnat stabilitu jejich pasivních vrstev a náchylnost k aktivnímu anodovému rozpouštění. Následně byla provedena série vsádkových elektrolýz. Byla stanovena proudová účinnost syntézy železanů v prostředí 14 M NaOH v závislosti na proudové hustotě a teplotě elektrolytu. Byla rovněž provedena metalografická analýza vzorků výše zmíněných anodových materiálů před a po krátkodobé anodické polarizaci. Změny struktury povrchu vzorku způsobené expozicí povrchu vzorku alkalickému elektrolytu v průběhu anodické polarizace umožnily posoudit, která fáze je zodpovědná za aktivaci povrchu anody.

Tato práce vznikla za podpory Grantovou agenturou ČR projektu č. 104/05/0066.

LITERATURA

1. Bouzek K., Roušar I.: J. Appl. Electrochem. 27, 679 (1997).
2. Lescuras-Darrou V., Lopicque F., Valentin G.: J. Appl. Electrochem. 32, 57 (2002).

2L-18

CHARACTERIZATION OF MIXED-LAYER CLAY MINERALS USING FTIR SPECTROSCOPY AND THERMAL ANALYSIS (TG/DTA)

**LENKA VACULÍKOVÁ^a, EVA PLEVOVÁ^a,
and ZUZANA NAVRÁTILOVÁ^b**

^aInstitute of Geonics, AS CR, Studentska 1768, 708 00 Ostrava - Poruba, ^bOstrava University, Department of Chemistry, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava
vaculikova@ugn.cas.cz, plevova@ugn.cas.cz,
zuzana.navratilova@osu.cz

Mixed-layer clay minerals are materials in which different kinds of clay layers alternate with each other. The mixing or interstratification in vertical stacking can be regular (ordered), segregate regular, or random. Commonly occur mixed-layer clays are illite-smectite, chlorite-smectite, kaolinite-smectite, illite-chlorite, kaolinite-chlorite¹. Real possibilities of FTIR spectroscopy application along with thermal analysis (TG/DTA) for examining mixed-layer clay minerals are presented. These methods have been used to examine synthetic and natural clay mineral mixtures. Synthetic clay mineral mixtures with various ratios of the individual components were prepared by grinding into agate mortar. Standards of minerals were obtained from The Source Clays Repository of The Clay Minerals Society (CMS). The infrared spectra were recorded on Nicolet Avatar 320 FTIR spectrometer in 4000–400 cm⁻¹ spectral region. The KBr pressed-disc technique was used for preparing a solid sample for routine scanning of the spectra². Discs for the 4000–3000 cm⁻¹ region were heated in the furnace overnight at 150 °C to minimize the water adsorbed on KBr and clay sample³. TG/DTA curves were obtained on thermal instrument Setsys 12, Setaram. In order to provide an adequate characterization of clay mineral composition, X-ray diffraction was also utilized. The position and intensity of absorption bands which characterize individ-

ual clay mineral components were observed in measured IR spectra for the purpose of finding the detection limits for individual clay minerals in synthetic and natural mixtures. Obtained results were compared with the results of the above mentioned analytical techniques.

This work was supported by Czech Science Foundation, grant No. 105/03/D079 and grant No. 205/05/0871.

REFERENCES

1. Weiss Z., Kužvart M., in: *Jílové minerály – jejich nanostruktura a využití*, kap. 8, p. 203. Karolinum, Praha 2005.
2. Farmer V. C.: *The Infrared Spectra of Minerals*. Mineral. Soc., London 1974.
3. Russell J. D., Fraser A. R., in: *Clay Mineralogy: Spectroscopic and Chemical Determinative Methods*, p. 11. M. J. Wilson., Aberdeen 1994.

2L-19

PRÍPRAVA TETRAOKTYLAMÓNÍUM-MONTMORILLONITU

VLADIMÍR ŠTEFAN FAJNOR a MARTINA ČÁKYOVÁ

*Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina CH-2, 842 15 Bratislava
fajnor@fns.uniba.sk*

V práci sa skúmali možnosti interakcie tetraoktylamónnych iónov s kryštálkami montmorillonitu, izolovaného z bentonitu lokality Jelšovský Potok, Stredné Slovensko. Cieľom práce bolo zistiť optimálne podmienky prípravy tetraoktylamónium-montmorillonitu, teda prípravy organoílu, v ktorom by boli anorganické kationy kompletne vymenené za objemné organické ióny. Výsledky niekoľkých sérii experimentov vedú k záveru, že vhodné podmienky prípravy sú: vodný roztok bromidu tetraoktylamónia s koncentráciou 0,12 mol dm⁻³, teplota 65 °C, doba interakcie 3 h a záverečné premytie organoílu desaťnásobkom horúcej destilovanej vody. Takto pripravený organomontmorillonit neobsahuje zvyšky organického prekursoru zistiteľné metódami termickej analýzy [DTA-TG], resp. röntgenovej difrakčnou práškovou analýzou.

2P-01

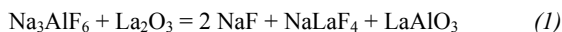
**ELEKTROCHEMICKÉ VLASTNOSTI
FLUORIDOVÝCH SÚSTAV OBSAHUJÚCICH La_2O_3** **MARTA AMBROVÁ, JANA JURISOVÁ a VLADIMÍR
DANIELIK***Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov,
Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU,
Radlinského 9, 812 37 Bratislava
marta.ambrova@stuba.sk*

Problematica vyhoreného jadrového paliva (VJP) a najmä otázky spojené s jeho bezpečnou likvidáciou pri prevádzke jadrového reaktora (JR) sa v súčasnosti stávajú veľmi aktuálnymi ako pre odborníkov, tak pre laickú verejnosť. Definitívne riešenie problému rádioaktívnych látok s dlhým polčasom rozpadu kontaminujúcich VJP z JR je kritickým bodom pre budúcnosť ďalšieho rozvoja jadrovej energetiky.

Používané separačné procesy pri prepracovaní VJP delíme na procesy vo vodnom a procesy v nevodnom prostredí. Separačné procesy v nevodnom prostredí majú niekoľko výhod oproti metódam vo vodnom prostredí. Separačné procesy v taveninových systémoch sú založené na predstave elektrosepáracie. Elektrolytickým vylučovaním by sa separovali zložky VJP. Aktinoidy (U, Pu, Cm...) je potrebné odseparovať od ostatných kovových zložiek, najmä od lantanoíдов. Z tohto dôvodu sa v tejto práci zvolila modelová predstava elektrolytického vylučovania lantánu, pričom zložkou obsahujúcou lantán je oxid lantanitý (La_2O_3).

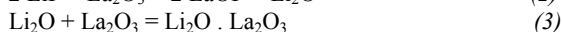
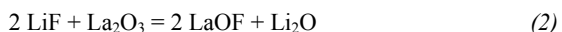
Skúmali sa systavy, ktorých základom boli: Na_3AlF_6 , LiF a eutektické zmesi LiF – CaF_2 (80,5 mol.% LiF; 766 °C) a LiF – NaF – KF (46,5 mol.% LiF; 11,5 mol.% NaF; 454 °C).

Podľa práce ¹, pri rozpúšťaní oxidu lantanitého v kryolite prebieha chemická reakcia:



Elektrolytické vylučovanie z kryolitu sa testovalo pri použití hliníkovej a medenej katódy. Anódou bol grafit. Z nameraných výsledkov vyplýva, že pri použití medenej katódy sa zo sústavy elektrolyticky vylučuje hliník, v prípade použitia roztavenej hliníkovej katódy sa vylučuje zmes hliníka a lantánu s prevahou hliníka. Dôvodom je fakt, že pri použití hliníkovej katódy je aktivita vylučovaného hliníka blízka 1, kým aktivita lantánu je oveľa menšia ako 1. To spôsobuje priblíženie vylučovacích potenciálov hliníka a lantánu. V prípade použitia medenej katódy k opísanému javu nedochádza, pretože oba kovy sa vylučujú s depolarizáciou.

Analýzou rýchlo ochladenej taveniny sústavy LiF – La_2O_3 sa zistilo, že tavenina obsahuje okrem základných zložiek LiF, La_2O_3 aj LaOF a LiLaO₂. Je pravdepodobné, že lantanitany, podobne ako hlinitanity, v skutočnosti neexistujú, ale ide o podvojné oxidy typu $\text{M}_2\text{O} \cdot \text{La}_2\text{O}_3$. Z toho vyplýva, že v tavenine LiF pri rozpúšťaní La_2O_3 prebiehajú nasledovné reakcie:



Podobné správanie sa zaznamenalo pri analýze vzoriek zatuhnutých tavenín $(\text{LiF} + \text{NaF} + \text{KF})_{\text{eut}} - \text{La}_2\text{O}_3$ a $(\text{LiF} + \text{CaF}_2)_{\text{eut}} - \text{La}_2\text{O}_3$, kde sa zaznamenala aj existencia CaO.

Pri elektrolýze taveniny LiF – La_2O_3 (900 °C) sa na medenej katóde vylučoval lantán s katódovou prúdovou účinnosťou 35,1 %. Na medi sa lantán vylučuje s depolarizáciou, pretože pri podmienkach elektrolýzy lantán s meďou tvorí kvapalnú zmes². Obdobný experiment sa zrealizoval aj na niklovej katóde. Katódová prúdová účinnosť vylučovania lantánu bola za týchto podmienok oveľa nižšia.

Rozkladné potenciály La_2O_3 a Li_2O pri teplote 900 °C sú³:

$$E_{\text{rozkl}}(\text{La}_2\text{O}_3, 900 \text{ °C}) = -2,52 \text{ V}$$

$$E_{\text{rozkl}}(\text{Li}_2\text{O}, 900 \text{ °C}) = -2,29 \text{ V}$$

Z daných údajov vyplýva, že na niklovej elektróde sa prednostne vylučuje lítium, pretože lantán na niklovej katóde sa nevylučuje s depolarizáciou².

Podobný záver vyplýva aj z meraní v sústave $(\text{LiF} + \text{NaF} + \text{KF})_{\text{eut}} - \text{La}_2\text{O}_3$. Experiment sa realizoval pri teplote 500 °C. Pri tejto teplote už nevzniká kvapalná zliatina medi s lantanom, čím sa stráca výhoda medenej katódy.

Ako ďalší elektrolyt sa použila eutektická zmes sústavy LiF – CaF_2 . Elektrolýza sa realizovala pri teplote 800 °C. Ako vyplýva fázového diagramu La – Cu², vzniká v prípade použitia medenej katódy za týchto podmienok kvapalná zliatina. Z výsledkov vyplynulo, že pri daných podmienkach sa prednostne vylučuje vápnik.

Pri teplote 800 °C sú rozkladné potenciály³:

$$E_{\text{rozkl}}(\text{La}_2\text{O}_3, 800 \text{ °C}) = -2,57 \text{ V}$$

$$E_{\text{rozkl}}(\text{CaO}, 800 \text{ °C}) = -2,71 \text{ V}$$

$$E_{\text{rozkl}}(\text{Li}_2\text{O}, 800 \text{ °C}) = -2,36 \text{ V}$$

Pretože aj lantán aj vápnik tvoria pri danej teplote s meďou kvapalnú zliatinu $(\text{Cu-La}, \text{Ca-La})^2$, vylučujú sa oba kovy s depolarizáciou, čo by malo spôsobiť prednostné vylučovanie týchto kovov pred litiom. Ako vyplýva z rozkladných potenciálov, vylučovacie potenciály vápnika a lantánu sa líšia len o 0,14 V. Rozdielne aktivity vápnika a lantánu v kvapalnej zliatine môžu ešte priblížiť vylučovacie potenciály, čím dochádza k spoločnému vylučovaniu týchto kovov, alebo prípadne aj k prednostnému vylučovaniu vápnika.

Z experimentálnych výsledkov vyplýva, že za súčasného stavu poznatkov je najvýhodnejším elektrolytom na vylučovanie lantánu fluorid lítny pri použití medených katód.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu vedy a techniky na základe Zmluvy č. APVT-20-000204.

LITERATÚRA

1. Ambrová M., Jurišová J.: *Thermochim. Acta* 443, 105 (2006).
2. Massalski T. B.: *Binary Alloy Phase Diagrams*. 2. vyd., ASM Int.: Materials Park, OH, 1990.
3. Chase M.: *NIST-JANAF, Thermochemical Tables – Fourth Edition*, J. Phys. Chem. Ref. Data, Monograph No. 9, 1998.

2P-02

**CARBABORANE CHEMISTRY
THE PREPARATION OF SOME HALOGEN DERIVATIVES OF *arachno*-4-CB₈H₁₄**
**MARIO BAKARDJIEV, JOSEF HOLUB,
and BOHUMIL ŠTÍBR**
*Institute of Inorganic Chemistry, Academy of Science of the
Czech Republic, 250 68 Řež u Prahy
mario@iic.cas.cz*

The reaction between *arachno*-4-CB₈H₁₄ (ref.¹) and elemental iodine in benzene, using AlCl₃ as catalyst, led to the formation of 2-I-*arachno*-4-CB₈H₁₃. The bromination method (Br₂/CH₂Cl₂) gave a mixture of 2-Br-*arachno*-4-CB₈H₁₃ and 1,2-Br₂-*arachno*-4-CB₈H₁₂. The reaction of *arachno*-4-CB₈H₁₄ with elemental Cl₂ in CH₂Cl₂ at room temperature led to a mixture of mono- and disubstituted derivatives; 1-Cl-*arachno*-4-CB₈H₁₃, 2-Cl-*arachno*-4-CB₈H₁₃ and 1,2-Cl₂-*arachno*-4-CB₈H₁₂. These compounds can be used for the development of monocarbaborane chemistry.

The mixtures of the halogen derivatives were separated by column chromatography on silica gel. Individual compounds were characterized by mass spectroscopy and multi-nuclear (¹¹B, ¹H and ¹³C) spectroscopy combined with two-dimensional [¹¹B-¹¹B]-COSY NMR techniques.

This work was supported by the Grant Agency of the Czech Republic (project 203/05/2646) and Ministry of Education of the Czech Republic (project LC523).

REFERENCE

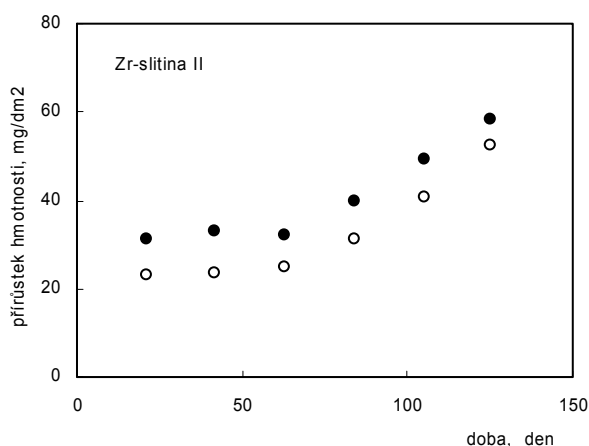
1. Wille A. E., Plešek J., Holub J., Štíbr B., Carroll P. J., Sneddon L. G.: *Inorg. Chem.* 35, 5342 (1996).

2P-03

**KOROZE ZIRKONIOVÝCH SLITIN – VLASTNOSTI
KOROZNÍ VRSTVY ZrO₂**
**ZUZANA WEISHAUPTOVÁ^{a,*}, VĚRA VRTÍLKOVÁ^b,
VLADIMÍR MACHOVIČ^a a LENKA BORECKÁ^a**

^a Ústav struktury a mechaniky hornin AVČR, V Holešovičkách 41, 182 09 Praha 8; ^b ÚJP Praha a.s., Nad Kaminkou 1345, 156 10 Praha 5 – Zbraslav
weishauptova@irms.cas.cz, borecka@irms.cas.cz

Byly sledovány vlastnosti korozních vrstev na dvou komerčních Zr-slitinách (I, II) vzniklých po dlouhodobé expozici ve statickém autoklávu v prostředí H₂O při teplotě 360 °C a tlaku ~ 19 MPa, které simuluje termodynamické podmínky jaderného reaktoru¹. Pro zjištění vlastností a chování hydratovaného ZrO₂, jehož vznik lze očekávat na vnějším povrchu korozní vrstvy, byly vytvořeny modelové srovnávací vzorky ve formě gelových povlakových vrstev². Vznik hydratovaného ZrO₂ na korozních vrstevkách byl potvrzen identifikací pásů skupin OH FTIR spektroskopii a interpretace sorpčních izoterm H₂O potvrdila chemisorpční interakci molekul vody s povrchem vrstvy³. Gelová vrstva zpomaluje kinetiku koroze



Obr. 1. Vliv gelové vrstvy na kinetiku koroze; ● – bez gel. vrstvy, ○ – s gel. vrstvou

(obr. 1), což je v souladu s předpokladem, že porézní hydratovaná vrstva jako gel bobtná a všesměrným zvětšováním objemu své tuhé fáze zužuje průřez pórů a tím i jejich průchodnost. Hydratovaná vrstva ovlivňuje rovněž absorpci H₂, kdy z hodnocení jeho obsahu ve slitině vyplynulo, že absolutní množství je větší u vzorků bez gelové vrstvy.

Hydratovaná vrstva podle metody silové spektrometrie (AFM) výrazně zvyšuje adhezní síly. Z hlediska polovodičových vlastností se vzorky s gelem i bez gelu po korozní expozici chovaly stejně, přičemž u slitiny II se vliv gelu projevil na transportních parametrech. Pomocí uvedených metod byly rovněž identifikovány rozdíly mezi slitinami I a II.

Tato studie vznikla za podpory grantu GA ČR 106/04/0043.

LITERATURA

1. Brenier R., Gagnaire A.: *Thin Solid Films* 392, 142 (2001).
2. Vrtílková V.: *Int. Topical Meeting on LWR Fuel Performance*, ANS, Park City, UT, 401 (2000).
3. Weishauptová Z.: *Mater. Chem. Phys.*, odesláno do tisku.

2P-04

**DIAGNOASTIKA TEPLNOTNÍCH POLÍ VE VODOU
STABILIZOVANÉM PLAZMATU**
**VLASTIMIL BROŽEK^a, MIROSLAV MATUŠEK^b,
MIROSLAV LIŠKA^c**

^a Ústav fyziky plazmatu AVČR, Za Slovankou 3, 182 00 Praha, ^b MirMat, Budovatelů 4, 466 01 Jablonec nad Nisou, ^c Saint Gobain Advanced Ceramics s.r.o., Přepěšská 1302, 511 01 Turnov
brozek@ipp.cas.cz, mirmat@mirmat.cz

Plazmochemické syntézy nebo plazmotermické rozklady persistentních látek probíhají v různých typech zařízení, ozna-

čovaných jako plazmochemické reaktory. Komerční zařízení s dosud nejvyšší pracovní teplotou plazmatu 30 000 K, generátor WSP®, je vhodné k syntéze vysokotavitelných sloučenin v práškovém stavu od nanometrických do mikrometrických rozměrů a k jejich následnému zpracování do kompaktních forem nebo povlaků i složitých geometrických tvarů¹. Nevýhodou generátoru s vodou stabilizovaným plazmatem je supersonická výtoková rychlost plazmatu a s tím související vysoká turbulence, která způsobuje obtížně definovanou změnu trajektorií vnášených reaktantů. Teplota a kinetická energie částic, kterou získají při průchodu a interakci s plazmatem, rozhoduje jak o následném průběhu chemických reakcí, tak i o fyzikálně-mechanických vlastnostech připravených kompaktních materiálů. Podchycení některých parametrů interakce vnášených reaktantů s plazmatem pomocí termovize nebo superrychlých videokamer je z větší míry znemožňováno emisí doprovodného světelného a především UV záření o intenzitě dosahující téměř 50 kW. Zařízením DPV-2000 Tecnar, vyvinutém ve spolupráci s Univerzitou Montreal, máme ze světelné emise možnost sledovat teplotu a rychlost vybraných jednotlivých částic pouze v jednotlivých bodech prostoru reaktoru. Zvolili jsme proto způsob, založený na vyhodnocení milisekundové reakční doby a teploty přeměny tetragonální β -modifikace ZrO_2 na kubickou γ -modifikaci za přítomnosti Y_2O_3 jako stabilizátoru. Ze směsi (85/15) práškového ZrO_2 a Y_2O_3 byly metodou „freeze granulation“ pomocí pojiva na bázi PVA připraveny sferoidní hrubozrné prášky průměru 20–63 μm a vnášeny do plazmatu pomocí tlakově regulovaného nosného plynu trubici ukončenou tryskou průměru 3 mm tak, aby bylo možno měnit superpozici prostorového úhlu plazmatu s vrcholovým úhlem 30°–45° a úhlem rozptylu etalonového prášku. Ve vzdálenosti 500 mm byly vzniklé produkty, procházející pod definovanými úhly plazmatem, zachycovány do kapalného dusíku. Sferoidní práškový produkt byl granulometricky rozříděn a jednotlivé frakce vyhodnoceny rtg. difrakční analýzou, která prokázala vznik jednofázové struktury yttriem stabilizované kubické fáze oxidu zirkoničitého nebo naopak taveninu obou nezreagovaných komponent. Rychlost reakce byla charakterizována „poločasem transformace“. Z velikosti jednotlivých mikročástic, jejich tepelných vlastností, délky trajektorie a doby prodlevy v plazmatu bylo možno získat informace o tepelných vlastnostech plazmatu v jednotlivých segmentech plazmochemického reaktoru.

Práce vznikla v rámci projektu GA ČR 104/05/0540.

LITERATURA

1. Chráška P., Hrabovský M.: Proc. ITSC 92, Orlando Fl. June 1992, p. 81, Orlando 1992.

2P-05

WOLFRAMOVÉ A WOLFRAMKARBIDOVÉ FILTRY A MEMBRÁNY

VLASTIMIL BROŽEK, JIŘÍ MATĚJČEK a KAREL NEUFUSS

Ústav fyziky plazmatu AV ČR, Za Slovankou 3, 182 00 Praha 8
brozek@ipp.cas.cz

Vývoj kovových filtrů a membrán historicky souvisí s prvními roky rozvoje práškové metalurgie. Priorita snad může být připisána anglickému patentu č. 25909 z roku 1909 na výrobu poréznicích kovových předmětů, následuje výroba poréznicích ložisek a kolem roku 1938 se již vyráběly kovové filtry nejen k odstraňování nečistot z tekutin, ale i k řízení výtokových rychlostí a tlaků, v Dieslových motorech, v hořácích, k filtraci rtuti i k odstraňování námrazy z nosných ploch letadel. Dnes řada firem produkuje široký sortiment filtrů a membrán z nejrůznějších kovů a slitin, dokonce i ze slinitých karbidů. Pokusili jsme se rozšířit tento sortiment o filtry a membrány z wolframu a karbidu wolframu, neboť jsme úspěšně zvládli techniku sferoidizace kovových a keramických materiálů pomocí plazmového hořáku WSP®. Wolframový prášek produkce Osram Sylvania Towanda a práškový karbid wolframu produkce Osram Bruntál s.r.o. byl vytříděn na sítěch a k experimentům vybrány granulometrické třídy 20–40 μm . Tyto prášky byly sferoidizovány¹ v plazmatu s počáteční teplotou 28 000 K. Jejich slinutí na plošné nebo válcové filtry s vyhovující mechanickou pevností bylo ověřeno při teplotách 1750 °C a 1950 °C. Poměr slinovací teploty a lisovacího tlaku, které mohou významně ovlivnit distribuci porů ve finálních výrobcích, byl optimalizován zvýšením tvrdosti wolframových částic vytvořením tzv. nezreagovaného jádra WC nebo ještě tvrdší fáze W_2C , takže při primárním lisování tvarovek před slinutím nedochází k významné deformaci kulových částic a velikost porů se pak řídí především geometrickými pravidly. Jádro z karbidu W_2C vzniká fázovým rozkladem monokarbidu při teplotě 2785 °C za současného vzniku elementárního wolframu, který zůstává v povrchové části². Pórovitost filtrů slinitých metodou HIP a BELT z prášku zrnitosti 20–40 μm , stanovená rtuťovou porozimetrií, je charakterizována středním poloměrem porů v rozmezí 6000–7000 nm v závislosti na použitém výpočtovém modelu z parametrů velikosti povrchu nebo intruze. Skeletální hustota wolframových filtrů (teoret. hustota $W = 19,3 \text{ g cm}^{-3}$) dosahuje $15,51 \text{ g cm}^{-3}$, bulková hustota $8,77 \text{ g cm}^{-3}$. Celková pórovitost je tedy 43 %. Permeabilita vodných roztoků byla sledována HCl-testem a pohybuje se v hodnotách 10^{-6} až $10^{-7} \text{ mol m}^{-2}\text{sec}^{-1}$. Aplikace se však předpokládají při vysokoteplotní filtraci kovů a tavenin anorganických látek.

Experimentální práce byly podporovány projektem č. 104/05/0540 Grantové agentury ČR.

LITERATURA

1. Brožek V., Dufek V., Šarman L.: Materials Week & Exhibition MATERIALICA, October 1–4, 2001 Munich, CD-G5-918.
2. Brožek V., Matějček J., Neufuss K.: Proc. 17th ISPC, August 7–12, 2005, Toronto, p. 944–945, CD-ROM ID 88.

2P-06

STRUKTURA A SPEKTRÁLNÍ VLASTNOSTI KOMPLEXŮ Fe(III) S DERIVÁTY 6-(BENZYLAMINO)PURINU: DFT ANALÝZA**MICHAL ČAJAN, LENKA ŠTAJGEROVÁ a ZDENĚK TRÁVNÍČEK***Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Palackého Univerzita v Olomouci, Křížkovského 10, 771 41 Olomouc
cajan@chemi.muni.cz*

Heterocyklické sloučeniny obecně představují skupinu sloučenin s rozsáhlou škálou nejrůznějších fyziologických účinků. *N*6-substituované deriváty adeninu mohou mimo jiné významným způsobem ovlivňovat procesy související s regulací buněčného cyklu, čímž je také dána jejich schopnost více či méně inhibovat růst rakovinných buněk^{1,2}. V průběhu studia těchto jejich vlastností bylo zjištěno, že koordinace heterocyklu na ionty přechodných kovů vede v některých případech k výraznému zlepšení cytotoxických vlastností³.

K pochopení mechanismu působení těchto komplexních sloučenin je mimo jiné nezbytné získat správné informace o jejich struktuře, distribuci elektronové hustoty a souvisejících vlastnostech. Velmi vhodný nástroj pro tuto analýzu představují teoretická chemie a molekulové modelování, zvláště pak ve spojení s experimentálními metodami strukturální analýzy.

V prezentované práci se zabýváme schopností Fe(III) iontů vytvářet komplexní sloučeniny s deriváty 6-(benzylamino)purinu různě substituovanými na fenylovém i purinovém jádře. Kromě analýzy struktury, resp. způsobu koordinace purinového jádra na ion přechodného kovu, je kladen zvláštní důraz na kvantitativní posouzení stability zmíněných komplexních sloučenin v prostředích s různými acidobazickými vlastnostmi. Studován je rovněž vztah mezi spinovým stavem centrálního iontu a stereochemií komplexu. Strukturální a spektroskopická data získaná na úrovni teorie funkcionálu hustoty (DFT) jsou v příspěvku konfrontována s experimentálními výsledky, především infračervené, NMR a Mössbauerovy spektroskopie.

LITERATURA

1. Miller C. O., Skoog F., Von Saltza M. H., Strong F. M.: *J. Am. Chem. Soc.* 78, 1392 (1955).
2. Veselý J., Havlíček M., Strnad M., Blow J. J., Donella-Deana A., Pinna L., Leatham D. S., Kato J. Y., Detivaud L., Leclerc S., Meijer L.: *Eur. J. Biochem.* 224, 771 (1994).
3. *Např.:* Trávníček Z., Maloň M., Zatloukal M., Doležal K., Strnad M., Marek J.: *J. Inorg. Biochem.* 94, 307 (2003). Klanicová A., Trávníček Z., Popa I., Čajan M., Doležal K.: *Polyhedron* 25, 1421 (2006).

2P-07

FÁZOVÉ ROVNOVÁHY V EKOLOGICKÝCH HNOJIVÁCH**VLADIMÍR DANIELIK, JANA GABČOVÁ a VLADIMÍR KHANDL***Ústav anorganické chemie, technológie a materiálov, Fakulta chemické a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
vladimir.danielik@stuba.sk*

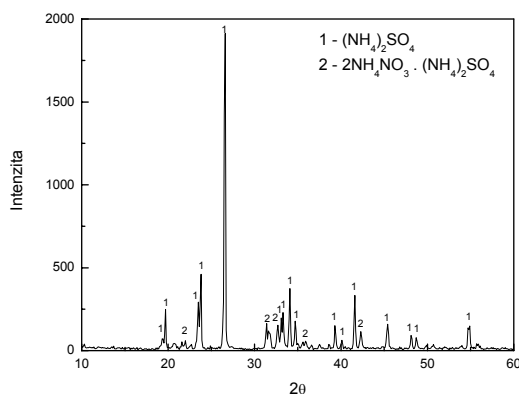
Koncom minulého storočia sa realizovali rôzne ekologické opatrenia (odsírovanie komínov, likvidácia mnohých zastaralých tovární) na zníženie množstva síry v ovzduší. Avšak tieto opatrenia spolu s celkovým poklesom používania organických a priemyselných hnojív a zvlášť hnojív s obsahom síry spôsobili výrazný pokles prísunu síry na poľnohospodársku pôdu. Problém deficitu síry pri výžive rastlín nie je špecifický pre Slovensko, signalizujú ho všetky poľnohospodárske vyspelé krajiny, najmä krajiny Európskej únie.

K novším typom priemyselných hnojív s obsahom síry, ktoré sú v súčasnosti k dispozícii na trhu (podľa pravidiel Európskej únie) patria hnojivo DASA, ktoré vyrába Duslo Šaľa, s obsahom 26 % dusíka, 13 % síry a hnojivo Duslofert 15:15:15:3S, určené na plodiny náročné na síru. Ďalším hnojivom, ktoré Duslo Šaľa zavádza na trh je Duslofert Extra 14:10:20:7S. Je to bezchloridové hnojivo s obsahom K₂SO₄. Pre poľnohospodárov sú tiež zaujímavé tuhé rozpustné hnojivá s obsahom dusíka, síry a horčíka v približnom zastúpení: 26 % N, 6 % S, 5 % Mg. Ich prípravu je možné realizovať zo surovín NH₄NO₃ (DA), (NH₄)₂SO₄ (SA) a MgNO₃ (DH), ktoré sú k dispozícii v podniku Duslo a.s., Šaľa. Prvým krokom realizácie ich vývoja je znalosť fázových rovnováh v danej sústave, t.j. Mg²⁺, NH₄⁺, // SO₄²⁻ – H₂O.

Obdobným spôsobom sú zaujímavé hnojivá obsahujúce draslík a určité množstvo dusičnanov zo sústavy K⁺, NH₄⁺ // SO₄²⁻, NO₃⁻ – H₂O. Táto práca je súčasťou projektu zaoberajúceho sa vyššie uvedenou recipročnou sústavou. Prvým krokom bolo určenie fázových rovnováh v sústave NH₄⁺ // SO₄²⁻, NO₃⁻ – H₂O.

Fázové rovnováhy v bezvodom systéme (NH₄)₂SO₄ – NH₄NO₃ sú dobre známe^{1,2}. V danom systéme existujú dve zlúčeniny – kongruentne sa topiaca 3 NH₄NO₃. (NH₄)₂SO₄ a inkongruentne sa topiaca 2 NH₄NO₃. (NH₄)₂SO₄. V kompendiu³ boli uverejnené rozpustnosti síranu amónneho a dusičnanu amónneho vo vode pri teplotách 0 °C, 25 °C a 40 °C. Z výsledkov vyplýva, že v sústave neexistujú hydratované podoby zlúčenín 3 NH₄NO₃. (NH₄)₂SO₄ a 2 NH₄NO₃. (NH₄)₂SO₄. Oblasti kryštalizácie jednotlivých zlúčenín však nie sú v kompendiu³ dobre definované. Cieľom tejto práce bolo overiť pri teplote 40 °C oblasti kryštalizácie jednotlivých zlúčenín, najmä 2 NH₄NO₃. (NH₄)₂SO₄.

Experimentálne merania sa realizovali metódou rozpustenia posledného kryštálu. Experimentálna banka sa udržiavala pri teplote 40 °C a priebežne pri prídavkoch vody sa merala elektrická vodivosť roztoku. Pri rozpustení posledného kryštálu sa na záznamoch ukázal zlom. Po zistení rozpustnosti sa pri 40 °C odparilo definované množstvo vody a vykryštalizovaná tuhá fáza sa analyzovala RTG práškovou difrakčnou analýzou.



Obr. 1. RTG záznam vykryštalizované tuhé fázy v systému $\text{NH}_4\text{NO}_3 - (\text{NH}_4)_2\text{SO}_4 - \text{H}_2\text{O}$; 46,3 hm.% NH_4NO_3 ; 15,3 hm.% $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$; 38,4 hm.% H_2O

Z výsledkov vyplýva, že údaje v kompendiu³ týkajúce sa kryštalizácie zlúčeniny $2 \text{NH}_4\text{NO}_3 \cdot (\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ nie sú presné. Experimentálnymi meraniami sa nepodarilo identifikovať oblasť kryštalizácie čistého $2 \text{NH}_4\text{NO}_3 \cdot (\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$, ani v oblasti prezentovanej v kompendiu³. V danej oblasti spolu kryštalizovali $2 \text{NH}_4\text{NO}_3 \cdot (\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ a síran amónny (obr. 1), prípadne malé množstvo $3 \text{NH}_4\text{NO}_3 \cdot (\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$.

V danej sústave sa merali aj tlaky pár nad vodným roztokom pri teplote 40°C . Získané výsledky priamo korešpondujú s aktivitou vody v roztoku, čo umožní výpočet fázového diagramu sústavy $\text{NH}_4\text{NO}_3 - (\text{NH}_4)_2\text{SO}_4 - \text{H}_2\text{O}$. Štúdium tejto sústavy ešte nie je ukončené.

Tato práce vznikla za podpory grantu komisie VEGA pre strojárstvo, hutníctvo a materiálové inžinierstvo 1/2108/05.

LITERATÚRA

1. Nikonova I. N., Bergman A. G.: Zh. Prikl. Khim. (Leningrad) 15(6), 437 (1942).
2. Meyer R. J., Peters F., Gmelin L., Pietsch E. H. E., Becke-Goehring M.: *Gmelins Handbuch der anorganischen Chemie, Ammonium*, Lief.2, System Nr. 23. s. 283–284. Verlag Chemie, Berlin, 1936.
3. Landolt – Börnstein, II. Band, 2. Teil, Bandteil b, s. 387–388. Verlinm Springer Verlag 1962.

2P-08

VYUŽITÍ PLAZMOVÉHO EMITORU UV-ZÁŘENÍ PŘI FOTOKATALÝZE SMĚSÍ WO_3 - MoO_3

JIRÍ DOMLÁTIL a VLASTIMIL BROŽEK

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

V současnosti je známo několik materiálů, které při oza-

řování blízkým UV zářením vykazují specifickou fotoaktivitu, využitelnou např. k destrukci organických polutantů. Sledování fotokatalytické aktivity oxidů wolframu různé stechiometrie a oxidu molybdenového při expozici UV zářením dominantní vlnové délky 365 nm emitovaném rtuťovou výbojkou HQE 40 OSRAM vedlo ke zjištění, že tyto materiály fotokatalyzují degradaci Oranži II ve vodné suspenzi. Zajímavý synergický efekt se projevil u směsi obou oxidů, kdy se fotoaktivita výrazně zvýšila¹. Sledovací metodou byla degradace Oranži II měřená spektrofotometricky a změna indexu celkové barevnosti DE* tenkého filmu pasty glycerolu, fotokatalyticky aktivního prášku a 2-nitroso-1-naftolu. Jelikož šíře zakázaného pásu WO_3 je 2,8 eV, lze k fotokatalytickým reakcím využít i viditelné části spektra do cca 480 nm. Pokrytí této oblasti zářením rtuťové výbojky je ovšem slabší. Při odstínění části UV záření sklem Simax došlo k trojnásobnému snížení fotokatalytické aktivity. Současné práce se zaměřují na využití spektra ve viditelné a blízké UV oblasti. V příspěvku sledujeme změny fotokatalytické aktivity při expozici látek unikátním světelným zdrojem – vodou stabilizovaným plazmatem. Jeho zdrojem je generátor WSP(®), který při maximálním provozním příkonu 160 kW emituje záření o intenzitě 40 až 50 kW (cit.²). V emisním spektru, odpovídajícím teplotě 24 000 K, jsou nejvýraznějšími útvary čáry Balmerovy serie. V UV oblasti se objevují i vibrační pásy elektronového přechodu $A^2\Sigma - X^2\Pi$ radikálu OH, hlava nejintenzivnějšího pásu má vlnovou délku 306,4 nm (cit.³). První výsledky ukazují, že záření emitované vodou stabilizovaným plazmatem by mohlo být v budoucnu využito k řadě chemických syntéz pomocí polovodičových fotokatalyzátorů se širokým zakázaným pásem.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 104/05/0540 a výzkumného záměru MSM 6046137302.

LITERATURA

1. Domlátil J., Šrank Z., Mastný L., Brožek V.: Sborník APROCHEM 2006, s. 2239.
2. Jeništa J., Bartlová M., Aubrecht V.: J. High Temp. Mat. Processes 8(2), 195 (2004).
3. Sember V.: High Temp. Mater. Process. 7 (1), 17 (2003).

2P-09

POTENTIAL OF PORTLAND CEMENTS FOR SPECIFIC (MDF) COMPOSITES

MILAN DRÁBIK, SVETOZÁR BALKOVIC, and EUBICA GÁLIKOVÁ

Institute of Inorganic Chemistry Slovak Academy of Sciences,
845 36 Bratislava, Slovakia
uachmdra@savba.sk

The detailed understanding of materials chemistry and science investigations are often limiting preconditions of the technological success. Materials chemistry; a combination of noun and adjective that had not previously formed part of the chemists' vocabulary (as quoted in preambula of the IUPAC project "Towards defining materials chemistry", <http://www.iupac.org/projects/2005/2005-001-1-200.html>), has grown

to a distinct discipline during the last 10–15 years.

One aspect of the “success story” of materials chemistry is presented by the latest complex studies postulating the reactivity of inorganic-polymer networks and cross-links in a choice of cement-based materials and attempts to define at the nano- and atomic levels the polymer grafting at the interfaces. MDF materials and technologies have been originally studied in systems of high alumina cements with polyvinylalcohol/acetate or Portland cement with polyacrylamide, the high alumina system being reported the promising one but exerting an economical disadvantage.

Our continuous effort is to look for a useful MDF related systems based on Portland cement and a variety of polymeric additives. The latest knowledge about the potentials and limitations of Portland cement-based MDF materials will be comprehensively given in the paper. The topic is discussed from aspects of chemistry of the system (including the mechanism of the grafting of polymeric chains at the surface of cement grains) and aspects of technological relevance, especially the reinforcing agents/effects and the moisture resistance of formed MDF material. Comprehensive and detailed reading on the topic can be found in: M. Drábik, R.C.T. Slade: *Interface Sci.* 12, 375 (2004) and M. Drábik, E. Gáliková, K. G. Varshney, M. A. Quraishi: *J. Therm. Anal. Calor.* 76, 91 (2004).

Táto práca vznikla za podpory grantovej agentúry VEGA, projekt č. 5011.

2P-10

MECHANOCHEMICKÉ PREMENY MONTMORILLONITU

**VLADIMÍR ŠTEFAN FAJNOR^a, JANA HRACHOVÁ^b
a PETER BILLIK^a**

^a *Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina CH-2, 842 15 Bratislava*

^b *Ústav anorganickej chémie, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava
fajnor@fns.uniba.sk; billik@fns.uniba.sk;
uachjana@savba.sk*

Ílový minerál montmorillonit (MMT) vystavený intenzívnemu mechanickému pôsobeniu, napríklad pri mletí, podlieha amorfizácii pri súčasnej degradácii jeho vlastností. Avšak vhodná modifikácia MMT môže mať výrazný vplyv na štruktúrnú stabilitu počas mletia. Proces intenzívneho mletia modifikovaného a tiež prírodného minerálu môže slúžiť ako vhodná simulácia správania sa materiálu pri vystavení mechanickej záťaži. Vyhodnotením mechanochemických efektov možno objasniť vplyv mletia na vlastnosti materiálu v reálnych podmienkach pri spracovávaní a využití v priemysle.

Ca-MMT (Jelšový Potok) bol organicky modifikovaný oktadecyltrimetylamónnymi (ODTMA) kationmi. Prírodný aj organický MMT s hmotnosťou 5 g bol mletý počas 30 s, 1, 2, 5 a 10 min vo vysoko energetickom planetárnom mlyne. Z rŕg analýzy mletých vzoriek vyplýva, že štruktúra Ca-MMT podlieha výraznej zmene už v priebehu 1 min mletia (pokles

intenzity difrakcií d_{001} a d_{060}). Po 5 min mletia obe difrakcie zanikajú a nastáva úplná amorfizácia materiálu. Výrazný rozdiel bol pozorovaný v prípade organoílu. Hodnota medzirotinnej vzdialenosti $d_{001}=2,08$ nm poukazuje na usporiadanie ODTMA kationov v medzivrstvovom priestore MMT do pseudotrimolekulových vrstiev. Intenzita difrakcie d_{001} klesá po 2 min a zaniká po 5 min mletia, ale difrakcia d_{060} zostáva zachovaná aj po 10 min mletia. Analýza IČ spektier ukázala, že vplyvom mletia dochádza v Ca-MMT k rozrušeniu väzieb spájajúcich oktaedrickú (OE) sieť s tetraedrickou (TE) a k následnej deštrukcii jednotlivých oktaédrov (uvoľňovanie centrálnych atómov). Väzby medzi OE a TE sieťou v MMT najlepšie reprezentuje pás deformačnej vibrácie SiOAl skupín s maximom pri vlnočte 520 cm^{-1} . Jeho intenzita postupne klesá, v prípade Ca-MMT zaniká už po 5 min mletia. Pri mletí organoílu klesá intenzita tohto pásu veľmi nepatrne a pás zostáva zachovaný aj po 10 min mletia. Pásky deformačných vibrácií AlAlOH (914 cm^{-1}) a AlMgOH (845 cm^{-1}) skupín v Ca-MMT zanikajú po 5 min mletia, čo poukazuje na výraznú dehydroxyláciu minerálu. V organoíle síce klesá intenzita týchto pásov, ale zostávajú zachované aj po 10 min mletia. Pás Si-O vibrácií (1035 cm^{-1} pre Ca-MMT, 1039 cm^{-1} pre ODTMA-MMT), charakteristický pre TE sieť, sa postupným mletím síce posúva k vyšším vlnočtom (1059 cm^{-1} pre Ca-MMT, 1040 cm^{-1} pre ODTMA-MMT) a stáva sa difúznym, ale nedochádza k jeho zániku. Záverom možno zdôrazniť, že organoíl bol v rovnako intenzívnych mlecích podmienkach niekoľkonásobne odolnejší voči mechanochemickej amorfizácii ako nemodifikovaný prírodný MMT.

2P-11

TVORBA DIFRAKČNÍCH PRVKŮ V TENKÝCH VRSTVÁCH AMORFNÍCH CHALKOGENIDŮ

ALENA FIŠEROVÁ a MIROSLAV VLČEK

Katedra obecné a anorganické chemie, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice

alena.fiserova@seznam.cz

V této práci byla studována možnost tvorby difrakčních prvků (amplitudo-fázové a reliéfní fázové mřížky, mikroočková pole) v tenkých vrstvách amorfních chalkogenidů systému As-S, As-S-Ge a Ge-S s využitím jevu fotoindukované změny jejich chemické odolnosti vůči alkalickým leptacím lázním.

Objemové vzorky (bulky) byly připraveny přímou syntézou z prvků polovodičové čistoty a z nich byly získány metodou vakuového napařování tenké vrstvy. Obvyklá tloušťka byla 300–1000 nm. Tyto vrstvy byly exponovány širokospektrální halogenovou lampou na vzduchu přes IR-cut off filtr. Intenzita použitého zdroje byla 10 mW cm^{-2} (po odfiltrování IČ složky záření). Expozicí docházelo k fotostrukturálním změnám ve vrstvách chalkogenidů, které měly za následek změny v optické šířce zakázaného pásu E_g^{opt} a ve spektrální závislosti indexu lomu. Změny ΔE_g^{opt} byly až do 0,2 eV a změny Δn ve VIS a blízké IČ oblasti až do 0,1. Tohoto jevu bylo využito pro tvorbu amplitudo-fázových difrakčních mřížek expoziací tímto zdrojem přes Cr masku. Vzhledem k vysoké propustnosti chalkogenidů v IČ oblasti lze takto

připravené difrakční prvky využít pro aplikace v této spektrální oblasti. Tyto difrakční prvky však mohou při následné expozici světlem z viditelné části spektra částečně měnit své optické parametry v důsledku proběhlých fotostrukturálních změn i v původně neexponovaných částech vrstev.

Expozicí halogenovou lampou indukované změny struktury čerstvě napařených vrstev měly za následek rovněž výrazné změny v chemické reaktivitě vrstev. Z hlediska námi sledované možnosti aplikace jevu bylo zajímavé zejména zjištění, že expozicí lze výrazně měnit rychlost rozpouštění tenkých vrstev amorfních chalkogenidů v alkalických leptacích lázních. Bylo prokázáno, že lze dosáhnout vysoce selektivního pozitivního i negativního leptání vrstev. V práci jsou diskutovány faktory ovlivňující výsledek leptání (složení vrstev, složení a koncentrace leptací lázně, prehistorie vrstvy atd.). Touto metodou byly transformovány původně amplitudo-fázové mřížky získané pouhou expozicí přes Cr masku na reliéfní fázové difrakční mřížky. Na rozdíl od amplitudo-fázových mřížek jsou tyto reliéfní mřížky již zcela stabilní. U připravených difrakčních prvků byla zjišťována jejich difrakční účinnost.

Pro lepší pochopení mechanismu selektivního leptání jsme pomocí Ramanovy spektroskopie studovali podstatu fotostrukturálních změn. Bylo prokázáno, že ty jsou výrazné zejména v tenkých vrstvách na bázi arsenu. Expozicí se struktura vrstev všech studovaných složení přibližovala struktuře výchozího objemového vzorku. U vrstev systémů obsahujících As byl pozorován největší rozdíl v koncentracích jednotlivých typů vazeb ve struktuře čerstvě napařené vrstvy a odpovídajícího výchozího bulkového složení. Proto byly pozorovány i nejvýraznější fotoindukované změny struktury a tím i vlastností ve vrstvách na bázi As. Změny v koncentraci jednotlivých strukturálních jednotek společně se změnou stupně polymerizace se proto zdají být zdrojem selektivního leptání vrstev chalkogenidů v alkalických roztocích.

Tato práce byla provedena za finanční podpory projektu MŠMT ČR 0021627501.

2P-12 EKOLOGICKÉ HNOJIVÁ S OBSAHOM SÍRY

**JANA GABČOVÁ, VLADIMÍR DANIELIK,
PAVEL FELLNER a VLADIMÍR KHANDL**

*Ústav anorganické chémie, technológie a materiálov,
Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU,
Radlinského 9, 812 37 Bratislava
jana.gabcova@stuba.sk*

Ekologické opatrenia realizované koncom minulého storočia spôsobili významné zníženie prísunu síry do poľnohospodárskej pôdy. Problém deficitu síry pri výžive rastlín nie je špecifický len pre Slovensko, signalizujú ho všetky poľnohospodársky vyspelé krajiny, najmä krajiny Európskej únie.

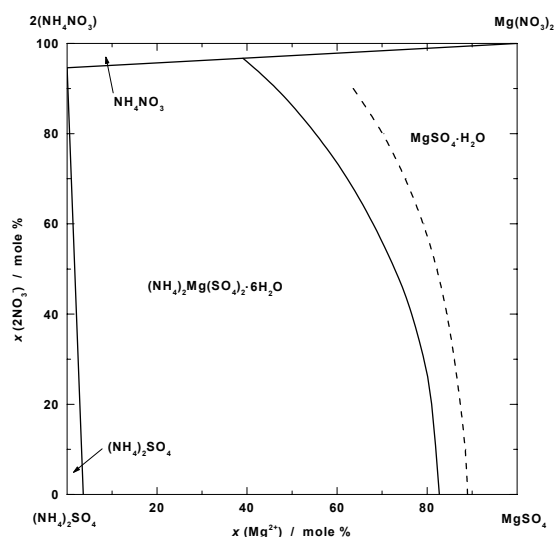
Z hľadiska nových typov kombinovaných hnojív s obsahom síry sú zaujímavé tuhé rozpustné priemyselné hnojivá, ktoré obsahujú aj dusík a horčík v približnom zastúpení 26 % N, 6 % S, 5 % Mg. Prípravu takéhoto hnojiva je možné realizovať zo surovín NH_4NO_3 , $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ a MgNO_3 . Che-

mickú podstatu takýchto hnojív môžu tvoriť sírany horečnatomónne, a to boussingaultit – $(\text{NH}_4)_2\text{Mg}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$ a jeferemovit – $(\text{NH}_4)_2\text{Mg}_2(\text{SO}_4)_3$.

Teoretickým základom pre určenie vlastností priemyselného hnojiva, jeho stability, podmienok jeho skladovania a aplikácie, je znalosť vlastností východiskových látok (dusičnan amónny, síran amónny, dusičnan horečnatý), aj uvádzaných minerálov (boussingaultit, jeferemovit), najmä znalosť fáz vo fázovom diagrame recipročnej sústavy 2NH_4^+ , $\text{Mg}^{2+} // 2 \text{NO}_3^-$, $\text{SO}_4^{2-} - \text{H}_2\text{O}$, ktorá je zaujímavá ako prekursor na výrobu priemyselných hnojív s obsahom horčíka a síry vo forme akceptovateľnej rastlinami.

Rozpusťnosť čistých látok, dvojzložkových sústav a čiastkových trojzložkových sústav je známa z literatúry¹⁻⁴. Fázový diagram celej recipročnej sústavy sme v dostupnej literatúre nenašli. Boussingaultit $(\text{NH}_4)_2\text{Mg}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$ sa dá pripraviť kryštalizáciou z vodných roztokov pri laboratórnej teplote. Jeferemovit je však stabilný pri vyšších teplotách. Sú známe pokusy pripraviť jeferemovit zohrievaním boussingaultitu. Táto reakcia je však veľmi pomalá a zdá sa, že boussingaultit stráca kryštalickú vodu bez zjavných zmien na röntgenogramoch. Preto sa pozornosť v tejto práci sústredila na určenie teploty, nad ktorou je jeferemovit stabilnou fázou v uvedenom recipročnom systéme.

Použili sme chemikálie čistoty p.a. Zloženie jednotlivých vzoriek sme určili chelatometricky (obsah horčíka a síranov) a formaldehydovou metódou (obsah amoniaku). Hlavnou časťou aparatúry na meranie fázovej rovnováhy solidus – likvidus je magnetická miešačka (Heidolph, typ MR 3003) s elektronickou reguláciou teploty ($\pm 1 \text{ }^\circ\text{C}$). Na miešačke je umiestnená kadička o objeme 800 ml s glycerínom ako médiom kúpeľa. V glycerínovom kúpeli je umiestnená Erlenmayerova banka o objeme 200 ml, v ktorej je skúmaná vzorka. Pri meraní je kolísanie teploty v banke menšie než $\pm 0,5 \text{ }^\circ\text{C}$. Na oddelenie tuhej fázy sa použili frity S1, resp. S3.



Obr. 1. Fázový diagram recipročnej sústavy 2NH_4^+ , $\text{Mg}^{2+} // \text{SO}_4^{2-}$, $2\text{NO}_3^- - \text{H}_2\text{O}$; plná čiara: $\theta = 90 \text{ }^\circ\text{C}$; prerušovaná čiara: $\theta = 70 \text{ }^\circ\text{C}$

Celý systém na filtráciu bol umiestnený v sušiaroch. Pri meraní sa do banky navážia vypočítané množstvá jednotlivých zložiek a pridá sa toľko destilovanej vody, aby sa pri zvýšenej teplote sústava úplne rozpustila. Banka sa potom vloží do glycerínového kúpeľa. Po vykryštalizovaní tuhej fázy sa do sústavy pridávajú malé objemy destilovanej vody, kým sa nedosiahne úplné rozpustenie sústavy. Po rozpustení tuhej fázy sa banka odváži. Z rozdielu hmotností sa určí množstvo pridanej vody a rovnovážne zloženie kvapalnej fázy. Banka sa vloží späť do kúpeľa a izotermicky sa odparuje voda, kým nevykryštalizuje tuhú fázu. Potom sa banka vyberie a odváži. Po vysušení sa tuhá fáza oddelí na filtračnom zariadení.

Fázové rovnováhy v recipročnej sústave 2NH_4^+ , Mg^{2+} // SO_4^{2-} , $2\text{NO}_3^- - \text{H}_2\text{O}$ sme určovali pri teplotách 70 °C, 90 °C a 115 °C. Fázové rovnováhy v tomto systéme pri teplotách 70 °C a 90 °C sú na obr. 1. Vidieť, že pri týchto teplotách kryštalizuje ako tuhá fáza boussigaultit. Pri teplote 115 °C je rovnovážnou tuhú fázou jefremovit.

Táto práca bola podporovaná agentúrou VEGA, č. grantu 1/2108/05.

LITERATÚRA

- Silcock H. L., (ed.): *Solubility of Inorganic and Organic Compounds*, Vol. 3. Part 1. Pergamon Press, Oxford 1979.
- Spravochnik experimentalnykh dannykh po rastvorimosti solennykh sistem*, Tom I – IV. Publishing House GKHI, Leningrad 1954 – 1962.
- Gmelins' Handbuch der Anorganischen Chemie*, System Nummer 27, Magnesium, Teil B. Verlag Chemie, GmbH, Weinheim/Bergstr. und Berlin 1937, (Nachdruck 1953).
- Landolt-Börnstein, Lösungsgleichgewichte*, II. Band, 2. Teil. Springer Verlag, Berlin 1962.

2P-13

PRÍPRAVA A ŠTÚDIUM VLASTNOSTÍ IZOTIOKYANÁTOŽELEZITÝCH KOMPLEXOV S DERIVÁTMÍ PYRIDÍNU

SILVIA GALKOVÁ a **IVETA ONDREJKOVIČOVÁ**

*Oddelenie anorganickej chémie, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika
silvia.galkova@stuba.sk*

Je známe, že zlúčeniny železa, deriváty pyridínu a tiokyanatanové anióny sú súčasťou veľkého počtu prírodných látok. V rôznych biosystémoch prebiehajú interakcie medzi týmito zlúčeninami, a preto je zaujímavé študovať ich priebeh a produkty. V súčasnosti je málo prác zaoberajúcich sa prípravou a štúdiom vlastností izotokynátoželezítých komplexov s derivátmi pyridínu. Cieľom našej práce je pripraviť a preštudovať vlastnosti nových komplexov železa s derivátmi pyridínu (L) ako sú nikotínamid (nia), 2-pyridylmetanol (2-pm), 3-pyridylmetanol (3-pm) a metyl-3-pyridylkarbamát (mpc).

Reakciu tiokyanatanu železitého s uvedenými derivátmi pyridínu za vhodne zvolených reakčných podmienok sme pri-

pravili štyri nové komplexné zlúčeniny nasledujúceho zloženia $[\text{Fe}(\text{NCS})_3(\text{nia})_3] \cdot \text{CH}_3\text{CN}$ (I), červený, $[\text{Fe}(\text{NCS})_3(2\text{-pm})_3] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (II), červený, $[3\text{-pmH-3-pm}][\text{Fe}(\text{NCS})_4(3\text{-pm})_2]$ (III), tmavočervený a $[\text{Fe}(\text{NCS})_3(\text{mpc})_3]$ (IV), tmavofialový.

Komplex I bol pripravený reakciou acetónitrilového roztoku tiokyanatanu železitého s nia. Komplexy II–IV boli pripravené reakciou etanolového roztoku tiokyanatanu železitého s 2-pm, 3-pm a mpc. Pomer látkových množstiev $\text{Fe}(\text{NCS})_3$ a príslušného derivátu pyridínu bol 1 : 3. Rekryštalizáciou komplexu III zo zriedeného etanolového roztoku sme získali kryštalickú látku.

Pripravené komplexné zlúčeniny I–IV boli charakterizované pomocou elementárnej analýzy, infračervenej spektroskopie a zlúčenina III tiež pomocou röntgenovej štruktúrnej analýzy.

Zo štúdia infračervených spektier pripravených komplexných zlúčenín I–IV vyplýva, že na centrálny atóm Fe sú ligandy nia, 2-pm, 3-pm a mpc viazané atómom dusíka pyridínového kruhu a tiokyanatanové skupiny atómom dusíka.

Predpokladáme, že zlúčeniny I, II a IV sú neutrálne komplexy zloženia $[\text{Fe}(\text{NCS})_3\text{L}_3]$. V literatúre sú známe dva železité komplexy s derivátmi pyridínu, ktoré majú podobné zloženie. Komplex III je zložený z kationu $[3\text{-pmH-3-pm}]^+$ a aniónu $[\text{Fe}(\text{NCS})_4(3\text{-pm})_2]^-$. V anióne je atóm Fe oktaedricky obklopený 6 atómami N; dvomi atómami N pyridínového kruhu z dvoch molekúl 3-pm a štyrmi atómami N z aniónov NCS^- . Kation obsahuje 3-pm a protonizovaný 3-pmH.

2P-14

THE PREPARATION AND MOLECULAR STRUCTURE OF NEW AZACARBORANE *arachno-7-^tBu-7,1,5,12-NC₃B₈H₁₂*

JOSEF HOLUB^a, **MARIO BAKARDJIEV^a**, **DRAHOMÍR HNYK^a**, **IVANA CÍSAŘOVÁ^b**, and **BOHUMIL ŠTÍBR^a**

^a *Institute of Inorganic Chemistry, Academy of Science of the Czech Republic, 250 68 Řež u Prahy*, ^b *Charles University, Faculty of Natural Sciences, Hlavova 2030, 128 42 Prague 2, Czech Republic
holub@iic.cas.cz, cisarova@natur.cuni.cz*

Reaction between *nido-5,6-C₂B₈H₁₂* (ref.¹) and ^tBuNC in CH_2Cl_2 in the presence of PS (PS = "Proton Sponge" = 1,8-bis-(dimethylamino)-naphthalene) at room temperature, followed by treatment with CF_3COOH , resulted in the isolation of new azacarbaborane *arachno-7-^tBu-7,1,5,12-NC₃B₈H₁₂*.

This compound reacts with PS to give new anion $9\text{-}^t\text{BuNH-}nido\text{-5,6,9-C}_3\text{B}_7\text{H}_9^{(-)}$ as a $\text{PSH}^{(+)}$ salt.

Individual compounds were characterized by mass spectroscopy and multinuclear (¹¹B, ¹H and ¹³C) spectroscopy combined with two-dimensional [¹¹B-¹¹B]-COSY NMR techniques. Both structures were determined by an X-ray diffraction analysis and confirmed on the basis of *ab initio*/GIAO/NMR calculations.

This work was supported by the Grant Agency of the Czech Republic (project 203/05/2646) and Ministry of Education of the Czech Republic (project LC523).

REFERENCE

1. Štíbr B., Holub J., Jelínek T., Grüner B., Fusek J., Plzák Z., Teixidor F., Viñas C., Kennedy J. D.: Collect. Czech. Chem. Commun. 62, 1229 (1997).

2P-15

PŘÍPRAVA A VLASTNOSTI MONOKRYSTALŮ
(Bi₂Te₃)_{1-x}(As₂Se₃)_x

ANETA HOVORKOVÁ, DAVID BACHAN,
ČESTMÍR DRAŠAR a PETR LOŠŤÁK

Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice,
nám. Čs. legií 56, 532 10 Pardubice
Aneta.Hovorkova@student.upce.cz

Tellurid bismutitý Bi₂Te₃ patří do skupiny úzkopásových vrstevnatých polovodičů tetradymitové struktury. Jako krystaly tetradymitového typu, jejichž název je odvozen od názvu minerálu tetradymitu Bi₂Te₂S, jsou označovány krystaly polovodičů složení A₂^VB₃^{VI} (kde A = Bi, Sb a B = Se, Te) prostorové grupy D_{3d}⁵. Zájem o materiály tohoto typu, jak v základním, tak aplikovaném výzkumu, je vyvolán skutečností, že Bi₂Te₃, Sb₂Te₃ a Bi₂Se₃ jsou základními složkami materiálů, nacházejících uplatnění v termoelektrických aplikacích (chladicí články a termogenerátory), pracujících v intervalu teplot blízkých 300 K (cit.¹). Vzhledem k tomu, že v těchto aplikacích jsou používány tuhé roztoky složení Bi_{2-x}Sb_xTe₃, Bi₂₄Sb₆₈Te₁₄₂Se₆, (Sb₂Te₃)₅(Bi₂Te₃)₉₀(Sb₂Se₃)₅ (cit.²), je příprava a charakterizace tuhých roztoků na bázi sloučenin tetradymitového typu stále aktuální problematikou. Přes značnou pozornost, která byla studiu Bi₂Te₃ v literatuře věnována, nebyly zatím popsány vlastnosti monokrystalů tuhých roztoků (Bi₂Te₃)_{1-x}(As₂Se₃)_x.

Předmětem předkládaného sdělení je proto popis přípravy monokrystalů těchto tuhých roztoků a výsledky jejich charakterizace měřením teplotních závislostí Hallova koeficientu a elektrické vodivosti.

Monokrystaly (Bi₂Te₃)_{1-x}(As₂Se₃)_x pro x = 0; 0,025 a 0,05 byly připraveny z prvků polovodičové čistoty 5N modifikovanou Bridgmanovou metodou. Vzorky těchto krystalů byly charakterizovány měřením Hallova koeficientu R_H a elektrické vodivosti σ v intervalu teplot 90–400 K. Bylo zjištěno, že zabudování atomů As a Se v atomárním poměru 2:3 do krystalové struktury Bi₂Te₃ má za následek zvýšení hodnot R_H a snížení hodnot σ. Znamená to tedy, že tvorba tuhého roztoku (Bi₂Te₃)_{1-x}(As₂Se₃)_x způsobuje v krystalové struktuře výchozího Bi₂Te₃ potlačení koncentrace volných nositelů proudu. Hodnoty součinu R_Hσ, který je úměrný pohyblivosti volných nositelů proudu, s rostoucím obsahem příměsí překvapivě vzrůstá.

Skutečností, že tvorba tuhého roztoku (Bi₂Te₃)_{1-x}(As₂Se₃)_x způsobuje v krystalové struktuře Bi₂Te₃ snížení koncentrace volných nositelů proudu – děr a zvýšení jejich pohyblivosti je v práci vysvětlena modelem bodových poruch v krystalové struktuře studovaných tuhých roztoků.

Tato práce vznikla za finanční podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR v rámci projektu MSM 0021627501.

LITERATURA

1. Nolas G. S., Sharp J., Goldsmid H. J.: *Thermoelectrics, Basic Principles and New Materials Developments*. Springer, Berlin, Heidelberg, New York 2001.
2. Mahan G. D.: *Solid State Physics 51*. Acad. Press, San Diego 1998.

2P-16

PŘÍPRAVA A VLASTNOSTI ANORGANICKÝCH
AEROGÉLOV

KAROL JESENÁK, EUBOMÍR KUČHTA a VLADIMÍR
ŠTEFAN FAJNOR

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská dolina CH-2, 842 15 Bratislava
jesenak@fns.uniba.sk

Skupina látok označovaná ako „aerogély“ predstavuje najväčší úspech chémie v jej úsilí o zvyšovanie pórovitosti anorganických látok. Termínom „aerogél“ sa obvykle označujú vysokopórovité amorfné látky rôzneho zloženia pripravované sól-gélovými metódami a ich následným superkritickým sušením. Ich charakteristickými vlastnosťami sú najmä nízka hustota, vysoký špecifický povrch a pórovitá štruktúra s vysokým podielom pórov s veľkosťou 10 až 150 nm. Uvedené vlastnosti sú primárnou príčinou ich unikátnych optických, akustických, elektrických a tepelnoizolačných vlastností. Tieto vlastnosti ich z hľadiska vedeckého aj praktického použitia zaraďujú medzi látky mimoriadneho významu.

Anorganické aerogély sú zastúpené jednak skupinou jednozložkových a jednak skupinou viaczložkových aerogélov. Jednozložkové aerogély sú z hľadiska chemického zloženia reprezentované oxidmi kovov, prechodných prvkov a polokovov (Al₂O₃, SiO₂, ZrO₂, Cr₂O₃, Fe₂O₃, MnO₂, V₂O₅, NiO, CuO, PbO). Skupinu viaczložkových aerogélov reprezentujú najmä binárne aerogély (PbO-SiO₂, NiO-SiO₂, CuO-SiO₂, Cr₂O₃-SiO₂, Fe₂O₃-SiO₂, Fe₂O₃-Al₂O₃, SiO₂-Al₂O₃, NiO-Al₂O₃, CuO-Al₂O₃) a ternárne aerogély (NiO-Al₂O₃-MgO, NiO-SiO₂-MgO, NiO-V₂O₅-MgO, NiO-Fe₂O₃-Al₂O₃).

Z hľadiska možnosti využitia má medzi týmito látkami zvláštne postavenie SiO₂-aerogél. Horná hranica pórovitosti tejto látky sa pohybuje na úrovni 99,9 obj.%; najnižšia dosiahnutá hustota je 0,003 g cm⁻³. Špecifický povrch je obvykle v hraniciach 600 až 1000 m² g⁻¹. Indexy lomu SiO₂-aerogélu dosahujú najnižšie hodnoty v celej skupine doteraz známych tuhých látok. Aerogély našli vedecké využitie najmä vo fyzike, chémii a kozmickej technike; priemyselne aplikácie sa sústreďujú do oblasti zvukovo- a tepelno-izolačnej techniky, katalýzy a elektroniky. Z hľadiska objemu výroby sú najdôležitejším využitím SiO₂-aerogélu tepelnoizolačné materiály. Významnú úlohu tu hrajú nízke hodnoty tepelných vodivosti v kombinácii s transparentnosťou, dobrými zvukovoizolačnými vlastnosťami, vysokou termickou a chemickou stabilitou spolu s hygienickou nezávadnosťou.

História výskumu aerogélov je zaujímavá. Prvýkrát bol aerogél pripravený v roku 1931 (cit.¹). Napriek tomu, že autor prvej syntézy tejto látky (SiO₂-aerogélu) predpovedal veľmi presne perspektívy jej použitia, takmer štyridsať rokov bol záujem o túto látku mizivý. Prelom v metodike prípravy zna-

menal rok 1968, kedy bol navrhnutý zjednodušený postup prípravy vychádzajúci z organických prekurzorov². Prvé vedecké aplikácie využívali najmä optické a katalytické vlastnosti anorganických aerogélov.

Výskum aerogélov na Slovensku bol od počiatku sústredený na Katedre anorganickej chémie Prírodovedeckej fakulty Univerzity Komenského v Bratislave. Prvé syntézy boli zahájené v roku 1990 a ich hlavným cieľom bolo v laboratórnych podmienkach navrhnuť metódu použiteľnú pre produkciu veľkoobjemových blokov aerogélov stredných hustôt, použiteľných pre detektory Čerenkovovho žiarenia. Tieto detektory boli využívané pri detekcii subatomárnych častíc v úrychľovači v Spojených ústavoch jadrového výskumu v Dubne. Výskum bol zameraný jednak na zistenie vzťahu medzi podmienkami sól-gélovej fázy prípravy a výslednými vlastnosťami SiO₂-aerogélu a jednak na optimalizáciu podmienok inkorporácie organických fluorescenčných látok do aerogélov. V súčasnosti je výskum na autorskom pracovisku zameraný najmä na zistenie možností využitia aerogélov v mikroelektronike.

Táto práca vznikla s podporou grantu APVT-20-0011804.

LITERATÚRA

1. Kistler S. S.: Nature 127, 741 (1931).
2. Nicolaou G. A., Teichner S. J.: Bull. Soc. Chim. France 5, 1990 (1968).

2P-17

STUDIUM SKEL SYSTÉMU ZnO-Bi₂O₃-P₂O₅

JOSEF JIRÁK, LADISLAV KOUDELKA a PETR MOŠNER

Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice josef.jirak@upce.cz

Byly studovány vzorky skel systému ZnO-Bi₂O₃-P₂O₅ připravené reakcí ZnO, Bi₂O₃ a H₃PO₄ ve dvou kompozičních řadách 50ZnO-xBi₂O₃-(50-x)P₂O₅ a (50-x)ZnO-xBi₂O₃-50P₂O₅. Připravená skla byla charakterizována měřením měrné hmotnosti, molárního objemu a teploty skelné transformace stanovené metodami TMA a DTA. Struktura skel byla studována pomocí Ramanovy spektroskopie. Při zahřívání všechna skla krystalizují v rozmezí teplot 454–551 °C. Hodnoty teploty transformace u skel řady (50-x)ZnO-xBi₂O₃-50P₂O₅ se změnou složení se mění jen málo rozmezí 400–380 °C, u skel řady 50ZnO-xBi₂O₃-(50-x)P₂O₅ hodnoty T_g u skel s vysokým obsahem Bi₂O₃ (25–35 mol.%) jsou výrazně vyšší (450–480 °C) než u skel s malým obsahem Bi₂O₃ (425–420 °C).

Ramanova spektra potvrdila vestavování Bi₂O₃ do strukturní sítě, které se projevuje posuvem vibračního pásu PO₄ celků k nižším vlnovým délkám, což je způsobeno depolymerizací fosfátových řetězců a postupnou transformací celků Q² na celky Q¹ a při vysokých obsazích Bi₂O₃ až na celky Q⁰. Atomy bismutu se pravděpodobně vestavují do strukturní sítě ve formě oktaedru BiO₆, které pak v Ramanových spektrech se projevují vibračními pásy v oblasti 565–620 cm⁻¹.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury ČR (grant č. 104/04/0711) a za finanční podpory Ministerstva školství ČR (výzkumný projekt č. 002162750).

2P-18

OPTICKÉ VLASTNOSTI SKEL SYSTÉMU 15ZnO-xPbO-(85-x)P₂O₅

KATEŘINA KOTKOVÁ a HELENA TICHÁ

Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice katerina.kotkova@student.upce.cz

Byla studována skla systému 15ZnO-xPbO-(85-x)P₂O₅, kde 15 ≤ x (mol.%) ≤ 50 (Δx = 5 mol.%). Připravených 8 vzorků pokrývaly svým složením celou možnou oblast fosfátových skel. Syntéza vzorků byla provedena tavěním v platinovém kelímku při teplotě ~ 1000 °C. Vzhledově čiré vzorky byly charakterizovány kompoziční závislostí např. teploty skelné transformace (T_g), molárního objemu a optických vlastností, zejména chování krátkovlnné absorpční hrany. Změna struktury skel byla sledována pomocí infračervené a Ramanovy spektroskopie.

Získané kompoziční závislosti vlastností byly spíše nemonotónní, což naznačovalo změnu ve struktuře skla¹. Záměnou P₂O₅ za PbO v rozmezí x = 15–25 mol.% PbO, dochází k lineárnímu růstu T_g, což zřejmě souvisí s transformací trojrozměrné fosfátové sítě na spíše dvojrozměrnou. U metafosfátového složení² (35 mol.% PbO) je struktura tvořena pouze dlouhými řetězci tetraedrů PO₄. Další zvýšení koncentrace PbO má za následek jejich postupné zkracování, u středních/vnitřních atomů fosforu fosfátových řetězců jsou lokalizovány Pb²⁺ a tvoří se příčné můstky P-O-Pb. Tyto můstky jsou pak základem vzniku nových strukturních entit typu PbO₆ nebo až PbO₄.

Zcela konzistentní s výše uvedeným je u studovaných skel chování krátkovlnné absorpční hrany (KAH), kde její směrnice vypovídá o „uspořádanosti/neuspořádanosti“ skla³.

Z kompozičního chování této vlastnosti studovaných skel vyplývá, že směrnice KAH dosahuje minima při ~ 35 mol.% PbO; při tomto složení je struktura tvořena dlouhými řetězci, což pro studovaný systém představuje nejvíce uspořádaný systém. Další přídavek PbO má za následek ostrý růst směrnice; takové chování směrnice je v souladu s chováním T_g(PbO) a naznačuje, že se struktura stává podstatně méně uspořádanou.

Ramanova i infračervená spektra prokázala fragmentaci fosfátové sítě. S rostoucím obsahem PbO na úkor P₂O₅ dochází k posunu a nebo zvýraznění: pás ~ 680 cm⁻¹ se posouvá směrem k vyšším frekvencím (~ 742 cm⁻¹), což souvisí se vznikem P-O-Pb příčných můstků.

Z kompozičních závislostí všech vlastností studovaných u těchto skel lze navrhnout představení, že zejména vysoká polarizační schopnost PbO bude determinovat/vyvolávat změny fyzikálních vlastností. Sledování chování směrnice KAH k podpoře dominantního chování PbO nebylo u fosfátových skel dosud nikdy použito.

Tato práce vznikla za finanční podpory Ministerstva školství,

mládeže a tělovýchovy ČR v rámci projektu MSM 002162750.

LITERATURA

- Schwarz J., Tichá H., Tichý L.: J. Opt. Adv. Mater. 6, 737 (2004).
- Brow R. K.: J. Non-Cryst. Solids 263, 1 (2000).
- Tauc J., Menth A.: J. Non-Cryst. Solids 8, 569 (1972).

2P-19

KONTINUÁLNÍ ČEDIČOVÁ VLÁKNA

VLADIMÍR KOVAČIČ, JIŘÍ MILITKÝ a JAN GRÉGR

Technická Univerzita v Liberci, Hálkova 6, 461 17 Liberec
vladimir.kovacic@tul

Kontinuální čedičová vlákna jsou novým vyztužujícím materiálem pro přípravu kompozitů. Proměřili jsme několik typů komerčních i experimentálních čedičových vláken a porovnali jejich parametry s vlákny skleněnými. V chemickém složení čedičových vláken je zřetelně více železnatých a hořečnatých iontů oproti E-sklu. Naopak obsah vápenatých iontů je nižší. Čedičová vlákna mají proto podstatně lepší odolnost v alkalickém prostředí než E-skló¹. Současně s vyšší hustotou (+8 %) jsou vyšší i hodnoty tepelné vodivosti, tepelné kapacity a tepelné odolnosti. Mechanické vlastnosti, tedy E-modul, pevnost v tahu a tažnost se zřetelně neliší³. Degradace mechanických vlastností po tepelné expozici je nižší než byla pozorována u vláken skleněných.

Studovali jsme fragmentaci čedičových vláken při obrušování textilií. Zjistili jsme, že vlákna se při poškozování neštípou podélně na tenčí úločky². Měření ohybové křehkosti a stanovení rozpustnosti vláken v Gambleho roztoku potvrdily bezpečnost jejich použití, obdobně jako *in vivo* experimenty expozice čedičového prachu³ u krysu.

Velikost geometrického povrchu vyplývá ze střední hodnoty průměru vláken (12 mm) a činí cca 0,15 m² g⁻¹, velikost mikropovrchu metodou BET je 0,27 m² g⁻¹. Kritická povrchová energie vzplývacím testem je cca 46 mJ m⁻², vyhodnocením úhlu smáčení kapek na vlákněch 53 mJ m⁻². Vytvořili jsme molekulární model povrchové struktury vláken a navrhli jsme vhodné silanové lubrikace pro zlepšení vazby s polyesterovými a epoxidovými pojivy.

Kontinuální čedičová vlákna jsou zajímavým materiálem pro vyztužené kompozity. Dostupnost a lacinost jejich surovin může pomoci jejich širšímu uplatnění a tím i snížení jejich současné ceny.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 106/05/0817.

LITERATURA

- Militký J., Zeisbergerová J., Kovačič V.: Chemical degradation of basalt fibers, Pro. Of The Textile Institute 83rd World Conference (83rd TIWC), May 23-27, 2004, Shanghai, China, p. 386-390.
- Grégr J., Kovačič V., Militký J.: Chem. Listy 99, 460 (2005), (3rd Meeting on Chemistry and Life, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Sept. 20-22, 2005).
- Kovačič, V., Grégr J., Militký J.: Properties of two types

basalt fibers, *Strutex 12th Int. Conf., Structure and Structural Mechanics of Textile*, Nov. 28-29, 2005, Liberec, Proc. p. 361.

- Kogan F. M., Nikitina O. V.: Environ. Health Perspect. Supplements 102, 5 (1994).

2P-20

CHARACTERIZATION OF "SMART" MEDIA FOR INKJET PRINTING INDUSTRY

IVA KRÁLOVÁ and MICHAL VESELÝ

Department of Physical and Applied chemistry, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118, 612 00 Brno
kralova@fch.vutbr.cz

High quality inkjet paper ideally would be precoated with a film that keeps the ink close to the paper surface to give a printed image of enhanced optical density, while permitting the aqueous medium or carrier to be absorbed further into the body of the paper to accelerate setting and drying of the ink. A significant increase in inkjet print quality was achieved by the introduction of "smart" media for inkjet printing. These media consist of inert base, which is completely water resistant. The base is usually made of paper double-sided laminated by PE. If extreme demands on size stability are required, opaque, translucent or transparent polyester films can be used as the base materials. The ink receiving layer consists of a thin layer of hydrophilic, water-swelling polymer (PVAI, gelatine and their derivatives). When an ink drop is deposited on the surface, the ink is absorbed by the polymer layer. The polymer swells and as the solvent evaporates, it eventually dries within several minutes. This design clearly brings major improvement compared to paper: the media surface can be manufactured to high smoothness and gloss, so that surface defects are not present and do not interfere with ink deposition. Excellent resolution and sharpness is thus obtained. Ink is fixed within a thin transparent layer, resulting in excellent colour saturation and very high optical density¹. We performed numerous experiments with PVAI modified by glycidylmethacrylate (GMA), methacrylic acids (MAA), methacryloyl-aminoacetaldehyde dimethyl acetal (MA-MAA-DA) and its derivatives². These compounds are essentially hydrophobic, leading to lower surface energy and hydrophobization. On the other hand they are highly susceptible to photoinitiated cross-polymerization. We evaluated surface properties by dynamic contact angle measurement, conversion degree of modified polymers, photoresist speed and sensitivity to UV curing. We also applied FTIR analysis and microscopic methods onto these layers and last not least was evaluated mechanical and water resistivity, archival and light stability.

REFERENCES

- Králová I., Veselý M., Dzik P.: Chem. Listy 98, 8, 721 (2004).
- Mühlebach A., Müller B., Pharisa C., Hofmann M., Guerry D.: J. Polym. Sci., Part A: Polym. Chem. 35 (1997).

2P-21

WASTE PROTEIN MATERIALS LIKE BINDERS OF FOUNDRY SANDS

**DANIELA KRAMÁŘOVÁ, JIŘÍ BRANDŠTETR,
and KAREL RUSÍN**

*Department of Food Engineering, Faculty of Technology,
Tomas Bata University in Zlín, 275 Nám. T.G.Masaryka,
762 72 Zlín
kramarova@ft.utb.cz*

The aim of this study was to research and develop a new foundry moulding mixture with new binder systems based on proteins. At present, these moulds and cores containing resins, bentonite, cement or soluble glasses as binders of foundry sands are used. Water-soluble proteins form bonds with inorganic matrix, even though no chemical reactions take place. As a protein binder waste materials from pharmaceutical industry were used.

Character and behaviour of proteins are derived from the content of individual amino acids, the determination of amino acids was made by automatic analyser AAA T 339. The protein-based binder system was dissolved in hot water (about 75 °C) during mixing. Then, the solution was mixed into the hot foundry quartz sand (fraction 0.3 to 0.8 mm) until dry in the mixer. The coating process was analyzed using SEM. After blowing the sand into the core box, a drying cycle gives rise to the core strength due to the dehydration of the binder. The dehydration occurs between amido and hydroxy groups of the protein heated. Casting trials were performed using a core made with the new binder in the low-pressure hot box to evaluate shakeout and dimensional accuracy. Dimensional accuracy was verified and did not show any thermoplastic deformation. The surface of the cast was excellent despite of 60 % lower binder content proposed for furan resin binder for hot box core. If additional strength is necessary, the cores can be redried and regain full strength.

One of the most important features of the binder is its water solubility. This allows the bonding mechanism to be reversed if water is added back to the protein.

The preliminary results show that suitable protein binders of foundry sands can be based on supporting tissues. Laboratory tests exhibited flexural strengths required for molding materials and can be used only 0,75 or 1 % binder based on sand weight, dimensional accuracy was excellent.

This work was supported by The Grant Agency of The Czech Republic (No.106/01/1277).

REFERENCES

1. Tackes G.: Modern casting, p. 24–27, October (2001).
2. Shi J., Huang T., Shi H., He Y.: *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, p. 488–491, August (2001).
3. Eastman J.: Modern casting, p. 32–34, October (2000).

2P-22

Cu(en)₂Cu₂Cd(CN)₆ AND Cu(men)₂Cu₂Cd₂C₁₂(CN)₆: TWO ORGANIC-INORGANIC HYBRID MATERIALS BASED ON CYANO LIGANDS

JURAJ KUCHÁR^a, JURAJ ČERNÁK^a, and WERNER MASSA^b

*^a Department of Inorganic Chemistry, Institute of Chemistry, P.J. Šafárik University, 041 54 Košice, Slovakia, ^b Fachbereich Chemie der Philipps Universität, Hans-Meerwein-Str., D-35043 Marburg, Germany
juraj.kuchar@upjs.sk*

At present organic-inorganic hybrid materials based on cyanocomplexes are intensively studied due to their interesting magnetic properties^{1,2}. Previously, we have isolated from the aqueous systems Cu²⁺-L_N-[M(CN)₄]²⁻ (M=Ni, Pd) several compounds exhibiting composition Cu(L_N)₂M(CN)₄ (L_N = N-methylethylenediamine (*men*), N,N-dimethylethylenediamine (*dmen*))^{3,4}. The dominant feature of their structures is the chain [-Cu(L_N)₂-NC-M(CN)₂-CN-]_n of the 2,2-TT type. As a following step we have replaced square cyanocomplex anions with tetrahedral one [Cd(CN)₄]²⁻. From reaction mixtures we have isolated two new compounds Cu(en)₂Cu₂Cd(CN)₆ (**1**) and Cu(men)₂Cu₂Cd₂C₁₂(CN)₆ (**2**), respectively.

The crystal structure of **1** is formed of 3D anionic skeleton built up of Cu(I) and Cd(II) atoms connected by \square_2 -bridging cyano ligands. In the cavities of the skeleton the [Cu(en)₂]²⁺ cations are placed. The strongly elongated octahedron around the Cu(II) atom is completed by two nitrogen atoms from bridging cyano ligands. The cyanometallate framework in the structure **2** comprises beside both Cu(I) and Cd(II) central atoms, bridging cyano ligands also chloro ligands which link in \square_3 -fashion two Cd(II) and one Cu(II) atoms. The elongated octahedral coordination of Cu(II) is completed by two chelate *men* ligands placed in the equatorial plane yielding chromophore CuN₄Cl₂. Properties and crystal structures will be discussed.

REFERENCES

1. Bernhardt P. V., Bozoglian F., Macpherson B. P., Martinez M.: *Coord. Chem. Rev.* 249, 1902 (2005).
2. Ohba M., Okawa H.: *Coord. Chem. Rev.* 198, 313 (2000).
3. Kuchár J., Černák J., Mayerová Z., Kubáček P., Žák Z.: *Solid State Phenomena* 90-91, 328 (2003).
4. Čížmár E., Orendáčová A., Orendáč M., Kuchár J., Vavra M., Potočňák I., Černák J., Casini E., Feher A.: *Phys. Status Solidi B* 243, 268 (2006).

2P-23
NANOČÁSTICE STŘÍBRA - OD KATALÝZY
PO BAKTERIE

**LIBOR KVÍTEK^a, ALEŠ PANÁČEK^a, ROBERT PRU-
 CEK^a, JANA SOUKUPOVÁ^a, RADKO NOVOTNÝ^b**
a MILAN KOLÁŘ^c

^a Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Svobody 26, 771 46 Olomouc, ^b Laboratoř mikroskopických metod, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého, I.P.Pavlova 35, 771 26 Olomouc, ^c Ústav mikrobiologie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého, I.P.Pavlova 35, 771 26 Olomouc
 kvitek@aix.upol.cz

Nanočástice stříbra, stejně jako nanočástice jiných ušlechtilých kovů, oplývají unikátními optickými a katalytickými vlastnostmi, které je činí mimořádně zajímavé nejen ve výzkumné, ale i technologické praxi. Pestrá minulost jejich využití v praxi má významný mezník v 80. letech minulého století, kdy díky objevu povrchem zesíleného Ramanova rozptylu se nanočástice stříbra staly jedním z nejdůležitějších systémů kovových nanočástic. Ovšem aplikační možnosti nanočástic stříbra sahají dále než u jiných kovů kvůli jejich silné antimikrobiální aktivitě, díky níž pojem Nanosilver vyrostl z výzkumných laboratoří přímo do běžného života.

V současnosti nejpoužívanější metody přípravy nanočástic stříbra vycházejí z redukce stříbrné soli vhodným redukčním činidlem za přítomnosti dalších látek, umožňujících změnu morfologie, velikosti či stability připravovaných částic. Ovšem řízená příprava nanočástic určité velikosti stále představuje nejen technologický, ale i výzkumný problém. Dosáhnout variace této průměrné velikosti v rozsahu násobků této základní velikosti se daří realizovat jen ve speciálních případech¹. Metoda, vyvinutá na našem pracovišti, využívající řízení průběhu redukce stříbrných iontů jejich vazbou do komplexního kationtu $[Ag(NH_3)_2]^+$ při redukci cukry, poskytuje nanočástice stříbra průměrných velikostí rozměrů od 25 nm až po 400 nm.

Připravené částice byly testovány z hlediska možnosti jejich využití jak v povrchem zesílené Ramanově spektroskopii², tak i z hlediska jejich antimikrobiální aktivity. Obzvláště v této oblasti byly dosaženy velmi zajímavé výsledky, kdy vůči některým bakteriím vykazovaly nanočástice stříbra baktericidní aktivitu i vůči bakteriálním kmenům rezistentních vůči běžným antibiotikům a v některých případech dosahovaly účinku i v koncentraci pod $1\ \mu\text{g ml}^{-1}$.

Tato práce vznikla za podpory grantu číslo MSM 6198959218 financovaném MŠMT ČR..

LITERATURA

- Schneider S., Halbig P., Grau H., Nickel U.: Photochem. Photobiol. 60, 605 (1994).
- Kvítek L., Pucek R., Panáček A., Novotný R., Hrbáč J., Zbořil R.: J. Mat. Chem. 15, 1099 (2005).

2P-24
PŘÍPRAVA, CHARAKTERIZACE A KOORDINAČNÍ
VLASTNOSTI NOVÝCH FERROCENOVÝCH
FOSFINKARBOXYLOVÝCH KYSELIN

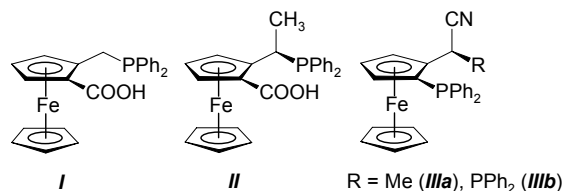
MARTIN LAMAČ, IVANA CÍSAŘOVÁ
a PETR ŠTĚPNIČKA

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Hlavova 2030, 128 40 Praha 2
 lamacm@volny.cz

Fosfinové ligandy obsahující ferrocenový skelet se úspěšně využívají v katalýze organických reakcí a další rozvoj aplikací této skupiny látek lze ještě očekávat^{1,2}. V našem výzkumu jsme se zaměřili na studium chemie ferrocenových fosfinkarboxylových kyselin³. Aktuálním výsledkem, který prezentujeme, je příprava racemické 2-[(difenyfosfino)-methyl]ferrocenkarboxylové kyseliny (**I**), jež je isomerem dříve připravené racemické [2-(difenyfosfino)ferrocenyl]-octové kyseliny (Hpfa)⁴. Dále byly připraveny modelové komplexy rhodia, jmenovitě $[RhCl(\eta^5-C_5Me_5)(RL-\kappa P)]$ (R = H, Me), kde HL označuje kyselinu **I** a MeL její methylester a dále $[Rh(CO)(L-\kappa O,P)(PCy_3)]$, kde se příslušný fosfinkarboxy-lát L^- koordinuje jako *O,P*-chelataující ligand⁵.

V současné době je naším cílem syntéza příbuzných, opticky čistých chirálních ferrocenových fosfinkarboxylových kyselin. Podobným syntetickým postupem jako v případě **I** tak byla připravena (*R,R*)-2-[1-(difenyfosfino)ethyl]-ferrocenkarboxylová kyselina (**II**). Studium koordinační chemie tohoto ligandu v komplexech rhodia stále probíhá.

Pokusy o přípravu isomeru kyseliny **II** postupem popsaným pro Hpfa⁴ nebyly úspěšné, proto jsme zvolili odlišný přístup, spočívající v α -deprotonaci racemického meziprojektu [2-(difenyfosfino)ferrocenyl]acetonitrilu a následné reakci karbaniontu s elektrofilními činidly. Zjistili jsme, že tato reakce probíhá s vysokou diastereoselektivitou a otevírá cestu k substituovaným produktům typu **III** (cit.⁶).



Tato práce vznikla za finanční podpory GA UK, č. grantu 318/2005/BCH/PrF a projektu MŠMT ČR č. LC 06070.

LITERATURA

- Barbaro P., Bianchini C., Giambastiani G., Parisel S. L.: Coord. Chem. Rev. 248, 2131 (2004).
- Colacot T. J.: Chem. Rev. 103, 3101 (2003).
- Štěpnička P.: Eur. J. Inorg. Chem. 2005, 3787.
- Štěpnička P., Císařová I.: Organometallics 22, 1728 (2003).
- Lamač M., Císařová I., Štěpnička P.: J. Organomet. Chem. 690, 4285 (2005).
- Lamač M., Štěpnička P.: Inorg. Chem. Commun. 9, 319 (2006).

2P-25**KOROZNĚ-INHIBIČNÍ VLASTNOSTI PEROVSKITOVÝCH SLOUČENIN ABO₃****JANA LUXOVÁ, PETRA ŠULCOVÁ a MIROSLAV TROJAN**

*Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice
jana.luxova@upce.cz*

Hledáním nových ekologických antikoročních sloučenin se naše pracoviště zabývá po dlouhou řadu let. Naším cílem je nalezení nových materiálů, které by buď nahradily nebo překonaly dosavadní komerčně vyráběné antikoroční materiály, a to jak z hlediska jejich vlastností, tak i ekonomické stránky. Jednou z možností může být použití perovskitových sloučenin typu BaTiO₃ a SrTiO₃.

Tyto sloučeniny jsou ve světě používány jako keramické materiály s velmi atraktivními ferroelektrickými a piezoelektrickými vlastnostmi¹ a sledování především těchto vlastností se věnuje velká pozornost. Naše pozornost je soustředěna na stanovení inhibičních vlastností těchto materiálů, neboť obsah Ba či Sr v těchto sloučeninách by mohly tvořit bazické antikoroční pigmenty, jenž by mohly být z hlediska korozní ochrany velmi nadějně².

V rámci této práce byly připraveny perovskitové sloučeniny ABO₃, kde A = Ba, Sr, Ca, atd. a B = Ti. Příprava byla ověřována jednak klasickou kalcinací³, ale také oxidačně alkalickým tavením¹. Jako výchozí suroviny byly použity v případě prvku A např. uhličitany a dusičnany příslušných kovů a v případě prvku B oxid titaničitý, titanyl sulfát, atd.

U připravených sloučenin byly stanoveny jejich základní fyzikálně-chemické vlastnosti jako např. měrná hmotnost⁴, spotřeba oleje⁵, pH⁶ a rezistivita vodných výluhů pigmentů⁷, atd. Hlavní důraz byl však kladen na posouzení inhibičního chování těchto sloučenin. Z tohoto důvodu byly testované sloučeniny podrobeny základnímu testu, který může naznačit, zda testovaná látka vykazuje inhibiční chování. K tomuto účelu bylo využito gravimetrické stanovení úbytku ocelových plíšků⁸, které byly vystaveny působení prostředí tvořeného 10% suspenzí připravených pigmentů v redestilované vodě.

Tato práce byla podporována projektem MSM č. 0021627501.

LITERATURA

1. Gorokhovskiy A. V.: *Materials Letters* 58, 2227 (2004).
2. Trojan M., Šolc Z., Novotný M.: *Pigments, Kirk-Othmer Encyclopedia of Inorganic Technology*, Vol. 19. J. Wiley and Sons, New York 1996.
3. Li Z. C., Bergman B.: *J. Eur. Ceram. Soc.* 25, 441 (2005).
4. ČSN EN ISO 787-10.
5. ČSN EN ISO 787-5.
6. ČSN EN ISO 787-9.
7. ČSN EN ISO 787-14.
8. ČSN 03 8102.

2P-26**INDEX LOMU TENKÝCH POLYMERNÍCH FILMŮ****OLEKSIY LYUTAKOV, IVAN HUTTEL a VÁCLAV ŠVORČÍK**

*Katedra inženýrství pevných látek, Fakulta chemické technologie VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha 6
lyutakoo@vscht.cz*

V technologii přípravy optických prvků pro integrovanou optiku mají stále větší význam i polymerní látky. Výhodou je možnost modifikace jejich vlastností, což může být uskutečněno pomocí copolymerizace, dotování, orientace. Pro naši práci byly zvoleny PMMA a PS jako materiály, které jeví výborné optické vlastnosti a byla studována depozice polymerních filmů z roztoku metodou spin-coating bez a v přítomnosti vnějšího elektrického pole. Bylo ukázáno, že elektrické pole díky natočení dipólů zvyšuje hodnotu indexu lomu v případě PMMA. Lze tak připravit polymerní vrstvy s vyšší hodnotou indexu lomu a tím zajistit požadovaný rozdíl indexů lomu planárních optických vlnovodů a dalších prvků a součástek integrované optiky a fotoniky. Tímto postupem, který je v závislosti na odpařování rozpouštědla velmi rychlý, byly připraveny v jednom technologickém cyklu dvouvrstvy na bázi PMMA, které vykazují vlnovodné vlastnosti.

Na jiné straně nevýhodou polymerních materiálů může být jejich nestabilita. Pro zlepšení životnosti natočených dipólů byla použita směs PMMA a PS. Poměr látek byl omezen separací PMMA a PS během odpařování rozpouštědla. Ukázalo se, že elektrické pole mění hodnotu indexu lomu i při docela malé koncentraci PMMA v deponovaném filmu.

Tyto vrstvy byly především studovány s cílem připravit polymerní optické vlnovody s gradientním profilem indexu lomu, které by vykazovaly dostatečnou životnost, provozní stabilitu a minimální optický útlum.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR, č. 10206 0424

2P-27**STUDIUM VLASTNOSTÍ KOMPOZITU CEMENT-POLYETYLENTEREFTALÁTOVÁ VLÁKNA RAMANOVOU SPEKTROSKOPIÍ A ELEKTRONOVOU MIKROSONDOU****VLADIMÍR MACHOVIČ^a, LUBOMÍR KOPECKÝ^b, FRANTIŠEK KOLÁŘ^c a JAROSLAVA SVÍTILOVÁ^c**

*^a Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6, ^b Fakulta stavební ČVUT, Thakurova 7, 166 29 Praha 6, ^c Ústav struktury a mechaniky hornin AV ČR, V Holešovičkách 41, 182 09 Praha 8
machoviv@vscht.cz*

Celosvětovým ekologickým problémem se stává rostoucí množství odpadních polyetylen-tereftalátových (PET) láhví, s produkovaným objemem 13·10⁶ t r⁻¹ (cit.¹). PET vlákna z lahví použitých pro potravinářské účely byly využity jako mikrovýztuž v kompozitním systému beton – PET. Kontaktní zóna (ITZ – Interfacial Transition Zone) mezi mikrovýztuží

a cementovou maticí představuje kritické místo rozhodující o výsledné pevnosti kompozitu². Mikrostruktura, chemické a ineralogické složení této přechodové zóny a okolní matrix se významně liší. Práce byla zaměřena na využití Ramanovy spektroskopie, elektronové mikroskopie a elektronové mikrosondy (ESEM/EDX) pro stanovení rozměrů a chemického složení přechodové zóny.

Ramanovou spektroskopií bylo provedeno mapování strukturních změn v přechodové zóně v blízkosti PET vlákna mapovacím krokem o velikosti 5 μm . V přechodové zóně byla stanovena vysoká koncentrace hydroxidu vápenatého (portlanditu) – jednoho z hlavních produktů hydratace cementu. Obsah portlanditu byl analyzován na základě intenzity pásu při 357 cm^{-1} . Velikost přechodové zóny byla určena cca 25 μm s nejvyšší koncentrací portlanditu ve vzdálenosti 2,5 μm od ložiska mikrovýztuže; s rostoucí vzdáleností koncentrace portlanditu prudce klesala. Další významný stanovený produkt hydratace představuje ettringit – $\text{Ca}_6\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3(\text{OH})_{12} \cdot 26 \cdot \text{H}_2\text{O}$. Na základě vyhodnocení mapy intenzit pásu ettringitu při 988 cm^{-1} byl potvrzen pokles hmotnostní koncentrace s rostoucí vzdáleností od PET vlákna.

Mikrostrukturu i chemická odlišnost ITZ zóny ve vzdálenosti 25 μm od ložiska mikrovýztuže byla potvrzena metodou elektronové mikroskopie a mikrosondy (ESEM/EDX). Kontaktní zóna vykazovala zvýšený obsah nově vzniklých minerálních fází – portlanditu, karbonátu, ettringitu a C-H-S gelu a vyšší hodnotu pórovitosti. Mikroporézní struktura byla tvořena dvěma druhy pórů. Okrouhlé póry o průměru desítek mikrometrů byly vyplněny vzduchem a tvarově nepravidelné póry obsahovaly vodou bohaté fáze. Tyto fáze obsahovaly ionty Ca^{2+} na bázi agregátů, resp. mikrokystalů portlanditu, ettringitu a C-H-S gelu.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 106/05/2618.

LITERATURA

1. Viksne A., Kalnins M., Rence L., Berzina R.: *The Arabian J. Sci. Eng.* 27, 33 (2002).
2. Balagru P. N., Shah S. P.: *Fiber Reinforced Cement Composites*. McGraw-Hill, New York 1992.

2P-28

SPECTRAL AND STRUCTURAL STUDY OF COPPER(II) 2,6-PYRIDINEDICARBOXYLATES

JOZEF MALO, PETER SEGĽA, DUŠAN MIKLOŠ, and MILAN MELNÍK

*Department of Inorganic Chemistry, Slovak Technical University, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia
jozef.malo@stuba.sk*

As copper and pyridinecarboxylic acids and their derivatives play an important role in widely differing biological processes, elucidation of structure-property relations for this class of coordination compounds is aimed at. Synthesis, spectral, magnetic properties and crystal structures of various copper(II) pyridinecarboxylates have been reported¹.

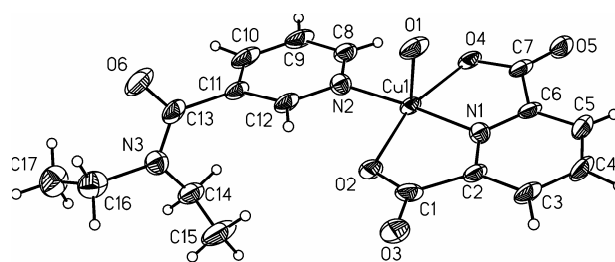


Fig. 1. An ORTEP drawing of the crystal structure of XI

2,6-Pyridinedicarboxylic acid (2,6-pydc₂H₂) and its deprotonated forms are known to exhibit especially multifarious coordination modes to a number of central atoms.

In this contribution we present an overview of our results obtained in synthesis, spectral and structural characterization of copper(II) 2,6-pyridinedicarboxylate complexes, namely $[\text{Cu}(2,6\text{-pydca})(\text{H}_2\text{O})_2]$ (*I*)², $\{\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_2\}[\text{Cu}(2,6\text{-pydca})(2,6\text{-pydcaH}) \cdot \text{H}_2\text{O}]_n$ (*II*), $[\text{Cu}(\text{en})_2][\text{Cu}(2,6\text{-pydca})_2] \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ (en – ethylenediamine, *III*), $\{[\text{Cu}(\text{en})_2(\text{H}_2\text{O})_2][\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_5]_2[\text{Cu}(2,6\text{-pydca})_2]_2\}$ (*IV*)³, $\{[\text{Cu}(\text{bipy})_2][\text{Cu}(2,6\text{-pydca})_2]_2\}$ (bipy – bipyridine, *V*), $[\text{Cu}(\text{bipy})_2][\text{Cu}(2,6\text{-pydcaH})_2(\text{NO}_3)_2] \cdot 4 \text{H}_2\text{O}$ (*VI*), $[\text{Cu}(2,6\text{-pydca})(\text{dien})] \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$ (dien – diethylenetriamine, *VII*), $[\text{Cu}(2,6\text{-pydca})(3\text{-CH}_2\text{OHpy})]$ (3-CH₂OHpy – 3-hydroxy-methylpyridine, *VIII*), $[\text{Cu}(2,6\text{-pydca})(4\text{-CH}_2\text{OHpy})]$ (4-CH₂OHpy – 4-hydroxymethylpyridine, *IX*), $[\text{Cu}(2,6\text{-pydca})(\text{nia})]$ (nia – nicotinamide, *X*) and $[\text{Cu}(2,6\text{-pydca})(\text{Et}_2\text{nia})(\text{H}_2\text{O})]$ (*N,N*-diethylnicotinamide, *XI*)

Crystal structures of complexes *I*, *II*, *IV*, *V* and *XI* are presented. The above compounds have been characterized also by IR, electronic and EPR spectra and their biological properties studied. In the structures, 2,6-pyridinedicarboxylate often acts not only as a tridentate chelating ligand, but also as a bridging ligand.

Present work has been financially supported by the Grant Agency of the Slovak Republic (Grant No. 1/2452/05) and Technology Assistance Agency under the contract No. APVT-20-005504.

REFERENCES

1. Mikloš D., Segľa P., Palicová M., Kopcová M., Melník M., Valko M., Glowiak T., Korabik M., Mrozinski J.: *Polyhedron* 20, 1867 (2001).
2. Koman M., Moncol J., Hudecová D., Dudová B., Melník M., Korabik M., Mrozinski J.: *Pol. J. Chem.* 75, 957 (2001).
3. Mikloš D., Segľa P., Koman M., Jašková J., Glowiak T., Melník M.: *DMS-RE, Proceedings of the 14th Joint Seminar, Lednice 2004*. (Nitsch K., Rodová M., ed.), str. 39. Lednice 2004.

2P-29 STUDY OF LEAD IODIDE CRYSTALS FOR X-RAY DETECTION

MARIE MATUCHOVA*, KAREL ZDANSKY,
and JIRI ZAVADIL

*Institute of Radioengineering and Electronics, Academy of
Science of the Czech Republic, Chaberska 57, 182 51 Prague 8
Marie.Matuchova@tiscali.cz*

Semiconductor detectors of ionizing radiation have gained considerable importance in recent years. Several materials can be used for this purpose, as for example PbI_2 .

Lead iodide is a promising material applicable for X-ray and gamma ray detectors operating at room temperature.

The method of synthesis have been used for preparation of PbI_2 material. For further purification zone melting has been used. After this stage material has been grown in the Bridgman-Stockbarger apparatus to get bulk crystal. The material has been further investigated for the application for radiation detection.

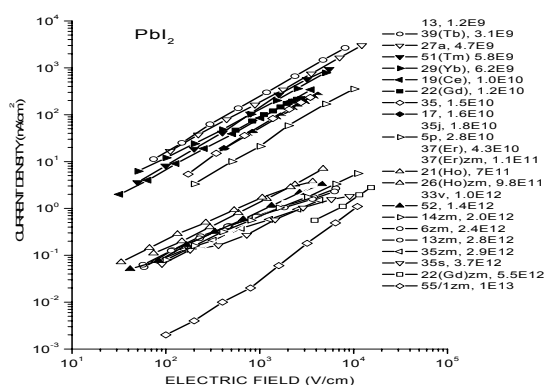


Fig. 1. Electric characteristics of current density versus electric field intensity of PbI_2 samples in log-log scale. In the inset the samples purified by multiple zone melting are labeled by 'zm' ending

The rare earth elements can be added to synthesis as admixtures to remove impurities with regard to their high reactivity. Indeed, lead iodide crystals of higher resistivity have been obtained in all cases. Best improvement by 2.5 orders has been obtained with admixture of holmium. After zone melting the resistivity of $1.3 \times 10^{13} \Omega\text{cm}$ has been obtained.

The material has been further characterized by low temperature photoluminescence and the ability for detection has been established by $\mu\tau$ product, life time of electrons, spectral resolution, charge collecting efficiency (CCE).

An example of measured I-V characteristics of samples after synthesis and after zonemelting is demonstrated in Fig.1.

This work has been supported by the grants No. 102/04/0959 and 102/03/0379 of the Grant Agency of Czech Republic.

2P-30 ¹H NMR MODIFIKOVANÝCH MEĎNATÝCH FORIEM SYNTETICKÉHO ZEOLITU ZSM5

STANISLAVA NAGYOVÁ^a, SILVIA ČUVANOVÁ^b
a MÁRIA REHÁKOVÁ^c

^a *Katedra fyziky, Technická univerzita, 042 00 Košice;*
^b *Ústav geotechniky SAV, Košice;* ^c *Ústav chemických vied,
Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, 041 54
Košice*

stanislava.nagyova@tuke.sk

Meďnaté formy syntetického zeolitu ZSM5 patria medzi produkty zaujímavé z hľadiska ich katalytických vlastností. Zeolity s obsahom výmenných kationov hrajú významnú úlohu pri rozklade niektorých atmosférických polutantov, napr. N_2O a iných oxidov dusika.

Naše štúdium modifikovaných meďnatých foriem zeolitu ZSM5 bolo zamerané na prípravu a charakterizáciu produktov s obsahom etyléndiamínu (en) s cieľom ozrejmiť súvislosti medzi experimentálnymi podmienkami ich syntézy a vlastnosťami a prispieť k objasneniu väzby zeolit-en. Vplyv podmienok prípravy sa prejavil na zložení a obsahu, ako aj na vlastnostiach, vrátane farieb výsledných zeolitických produktov. Tieto boli charakterizované pomocou širokočiariovej prútovej CW ^1H NMR spektroskopie, CHN analýzy, elektrónovej mikroskopy, EDS, RTG práškovej difrakcie, XPS, IR a hmotnostnej spektroskopie.

Na vyhodnotenie NMR meraní bola použitá metóda druhého momentu spektrálnej čiary a šírka čiary. Výsledky NMR meraní potvrdili odlišné vlastnosti produktov pripravených rôznymi spôsobmi syntézy a boli v súlade so závermi ostatných experimentálnych metód: a) etyléndiamín je viazaný na Cu(II) ióny koordinátnou väzbou, b) prítomnosť en zmenila pôvodné vlastnosti zeolitu ZSM5, pričom zmeny sú ovplyvnené spôsobom prípravy a obsahom etyléndiamínu¹.

V súčasnosti sa zaoberáme štúdiom meďnatých foriem syntetického zeolitu ZSM5 modifikovaných pomocou N,N' -dimetyletyléndiamínu (dmen)². Produkty boli opäť syntetizované za rôznych experimentálnych podmienok a charakterizované pomocou výsledkov viacerých experimentálnych metód, podobne ako horeuvedené produkty obsahujúce etyléndiamín. Výsledky ^1H NMR meraní potvrdili rozdielnosť študovaných produktov Cu-ZSM5 a Cu-dmen-ZSM5 a boli v súlade s výsledkami XPS meraní i ostatnými experimentmi. Pre detailnú charakterizáciu prítomného organického ligandu a jeho väzby v Cu-ZSM5 modifikovanej forme je potrebné ďalšie štúdium.

Táto práca vznikla za podpory Vedeckej grantovej agentúry Slovenskej republiky, grant č. 1/1385/04 a 1/1373/04.

LITERATÚRA

1. Reháková M., Wadsten T., Nagyová S., Bastl Z., Briančin J.: J. Inclusion Phenom. Macrocylic Chem. 39, 181 (2001).
2. Čuvanová S., Reháková M., Nagyová S., Fajnor V. Š.: Chem. Listy 98, 8, 630 (2004).

2P-31**BIOLOGICKÉ ÚČINKY NOVOSYNTETIZOVANÝCH BIOKOORDINAČNÝCH ZLÚČENÍN MEDI****ZUZANA ONDRUŠOVÁ^a, PETRA OLEJNÍKOVÁ^a, MARIÁN KOMAN^b, MILAN MELNÍK^b a DANIELA HUDECOVÁ^a**

^a Oddelenie biochémie a mikrobiológie, Ústav biochémie, výživy a ochrany zdravia, ^b Oddelenie anorganickej chémie, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, SR zuzana.ondrusova@stuba.sk

Koordináčne zlúčeniny medi zostávajú v centre pozornosti viacerých pracovníkov z rôznych oblastí chémie, biológie a farmakológie, vďaka rôznym väzbovým možnostiam, variabilite štruktúr a teda aj vlastnostiam týchto zlúčenín. Biologická aktivita samotného iónu medi s tvorbou komplexu nielen súvisí, ale v mnohých prípadoch aj narastá. Vznikom komplexu sa často vytvorí podmienky pre transport farmakofora v organizme, zmenší sa toxicita iónu kovového prvku a pod. Ďalšou možnosťou zvyšovania biologickej účinnosti je príprava komplexov medi s aniónom karboxylovej kyseliny a vhodným neutrálnym ligandom.

Výsledky ostatných rokov ukazujú, že zlúčeniny medi môžu mať svoje nezastupiteľné miesto pri liečbe niektorých reumatických ochorení. Komplexy medi patria do skupiny nesteroidných antiflogistických analgetík. Boli vyvinuté tri generácie týchto látok: salicylany (kyselina acetylsalicylová, známa skôr pod komerčným názvom aspirín, acylpyrín, či anopyrín), fenamáty (kyselina tolfémová – clotam a diclofenová – diclofenac) a propionáty (kyselina naproxénová – naproxen a *p*-izobutylfenylpropionová – brufen, ibuprofen, fluorbiprofen – flugalín).

S úmyslom rozšíriť poznatky týkajúce sa biologickej aktivity novosyntetizovaných fenamátomeďnatých komplexov a ich aduktov s *N*-donorovými heterocyklickými ligandami (chinolín, izochinolín), sme sa zamerali na stanovenie antimikrobiálnej aktivity na vybraných predstaviteľoch baktérií, kvasiniek a mikroskopických mycéliových húb; pri najúčinnějších zlúčeninách tiež na stanovenie prípadnej mutagénnej, resp. antimutagénnej aktivity, oxidačnej či SOD-podobnej aktivity a ich vplyvu na permeabilitu biologických membrán.

Táto práca vznikla s podporou grantov VEGA MŠ SR č. 1/0109/03 a č. 1/2452/05.

2P-32**STANOVENÍ ISOELEKTRICKÉHO BODU TiO₂****JIŘÍ PALARČÍK a LADISLAV SVOBODA**

Katedra anorganické technológie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice jiri.palarcik@upce.cz

Tato práce je zaměřena na stanovení izoelektrického bodu různých typů titanové běloby. Pro své vynikající optické vlastnosti, netoxicitu a světlostálost je TiO₂ v současnosti nejvíce používaný bílý pigment. Její výroba prochází neustálým vývojem, sortiment výrobků se s rostoucími požadavky na specifické vlastnosti rozšiřuje. S tím je mimo jiné spojena potřeba snadné rozlišitelnosti jednotlivých typů TiO₂ a jednou z možností je použití izoelektrického bodu (IEP), který je v daném prostředí pro jednotlivé látky charakteristický. Nejčastěji se vyjadřuje pomocí hodnoty pH, při které byl dosažen (pH_{IEP}).

Byly změřeny závislosti zeta potenciálu na pH pro různé druhy TiO₂ anatasového a rutilového typu a z nich odečteny hodnoty IEP. Dále bylo sledováno, jakým způsobem ovlivní izoelektrický bod změna disperzního prostředí a také metoda, pomocí níž byl izoelektrický bod měřen.

LITERATURA

1. Hunter R. J.: *Zeta Potential in Colloid Science*. New York 1981.
2. Ščukin E. D., Percov A. V., Amelinová E. A. : *Koloidní chemie*. Academia, Praha 1990.

2P-33**ANTIBAKTERIÁLNÍ AKTIVITA NANOČÁSTIC STŘÍBRA****ALEŠ PANÁČEK^a, LIBOR KVÍTEK^a, MILAN KOLÁŘ^b a RENATA VEČEROVÁ^b**

^a Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Tr. Svobody 26, 771 47 Olomouc, ^b Ústav mikrobiologie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého, I.P. Pavlova 6, 771 47 Olomouc panacek@prfnw.upol.cz

V současné době činí vzrůstající rezistence bakterií vůči antimikrobiálním látkám závažný problém nejen při léčení infekcí, ale také v epidemiologické praxi. Pro potlačení rezistence bakterií je nutné vyvíjet preventivní opatření vedoucí k potlačení tvorby a šíření rezistentních bakterií a současně je nutné vyvíjet nové baktericidní látky^{1,2}. V posledních několika letech se proto velice intenzivně studují antibakteriální účinky koloidních částic stříbra, které vykazují vysokou antibakteriální aktivitu již při velmi nízkých koncentracích (10 μg ml⁻¹) a současně vůči nim nevykazují bakterie nijak významnou rezistenci³⁻⁵.

Metoda řízené přípravy koloidních částic stříbra vyvinutá na našem pracovišti umožňuje připravit koloidní částice s průměrnou velikostí od 25 nm do 450 nm. Řízená příprava spočívá v redukci [Ag(NH₃)₂]⁺ komplexu sacharidy (glukosa, galaktosa, maltosa a laktosa), přičemž výsledná velikost koloidních částic stříbra závisí na koncentraci amoniaku v reakčním systému a na typu redukční látky⁶.

Redukcí [Ag(NH₃)₂]⁺ komplexu maltosou při koncentraci amoniaku 0,005 mol dm⁻³ byly připraveny úzce monodisperzní stříbrné nanočástice s průměrnou velikostí 25 nm, které vykazovaly vysokou antibakteriální a baktericidní aktivitu vůči Gram-pozitivním a Gram-negativním bakteriím včetně vysoce multirezistentních kmenů jako jsou např. methicillin-

rezistentní *Staphylococcus aureus* či vancomycin-rezistentní *Enterococcus faecium*. Antibakteriální aktivita stříbrných nanočástic byla prokázána již při velmi nízkých koncentracích Ag – 1,69 $\mu\text{g ml}^{-1}$. V porovnání s doposud publikovanými výsledky jsou dosažené hodnoty antibakteriální aktivity téměř řádově nižší, jelikož jinými metodami připravované částice vykazují v nejlepším případě hodnoty okolo 10 $\mu\text{g ml}^{-1}$ (cit. 3,4).

LITERATURA

1. Neu H. C.: Science 257, 1064 (1992).
2. Kolář M., Urbánek K., Látal T.: Int. J. Antimicrob. Agents 17, 357 (2001).
3. Sondi I., Salopek-Sondi B.: J. Colloid. Interface Sci. 275, 177 (2004).
4. Baker C., Pradhan A., Pakstis L., Pochan D. J., Shah S. I.: J. Nanosci. Nanotechnol. 5, 244 (2005).
5. Percival S. L., Bowler P. G., Russel D.: J. Hosp. Infect. 60, 1 (2005).
6. Kvítek L., Pucek R., Panáček A., Novotný R., Hrbáč J., Zbořil R.: J. Mater. Chem. 15, 1099 (2005).

2P-34

VPLYV OXIDU ZIRKONIČITÉHO NA TERMICKÚ STABILITU LÍTNOKREMIČITÝCH SKIEL

VILIAM PAVLÍK*, EUGEN JÓNA
a KATARÍNA NEMČEKOVÁ

Katedra chémie a technológie anorganických materiálov,
Fakulta priemyselných technológií v Púchove, Trenčianska
univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne, I. Krasku 491/30
02001 Púchov, Slovensko
pavlik@fpt.tnuni.sk

V predkladanej práci sa študoval vplyv rôzneho množstva oxidu zirkoničitého na termickú stabilitu lítnokremičitých skiel. Do základnej sústavy $\text{Li}_2\text{O} \cdot 2 \text{SiO}_2$ sa pridalo 1 mol.% ZrO_2 čo predstavuje $\text{Li}_2\text{O} \cdot 2 \text{SiO}_2 \cdot 0,03 \text{ZrO}_2$, 2 mol.% ZrO_2 ($\text{Li}_2\text{O} \cdot 2 \text{SiO}_2 \cdot 0,062 \text{ZrO}_2$), 3 mol.% ZrO_2 ($\text{Li}_2\text{O} \cdot 2 \text{SiO}_2 \cdot 0,1 \text{ZrO}_2$). Ukázalo sa, že hodnoty aktivačnej energie rastú so zvyšujúcim sa prídavkom ZrO_2 .

Základná informácia z hľadiska existencie a potenciálnej aplikácie skiel je ich stabilita voči kryštalizácii. Existuje veľa prác, ktoré sa zaoberajú vplyvom rôznych oxidov na kryštalizáciu $\text{Li}_2\text{O} \cdot \text{SiO}_2$ skiel. Sakka a Tashiro¹ zisťovali vplyv prídavku rôznych oxidov do sústavy $\text{Li}_2\text{O} \cdot 3 \text{SiO}_2$. Stokey² skúmal prídavok TiO_2 a Moriya, Sakaino a Tonaka³ použili ako nukleačné činidlá NiO a V_2O_5 . Niektorí autori⁴⁻⁶ navrhli ako kritérium na zisťovanie stability skiel aktivačnú kryštalizačnú energiu, E .

Pri štúdiu termickej stability skiel so zložením $\text{Li}_2\text{O} \cdot 2 \text{SiO}_2 \cdot n \text{ZrO}_2$ ($n = 0,00; 0,03; 0,062$ a $0,1$) sa použila diferenčnú termickú analýzu (DTA). Zo získaných údajov sa vypočítala aktivačná energia, E , frekvenčný faktor, A podľa⁷:

$$\ln (T_f^2 / \beta) = E_{(Tf)} / RT_f + \ln E_{(Tf)} / R - \ln A \quad (1)$$

$$\ln (T_p^2 / \beta) = E_{(Tp)} / RT_p + \ln E_{(Tp)} / R - \ln A \quad (2)$$

$$\ln \beta = E_{(\beta)} / RT_p \quad (3)$$

kde T_p je teplota maxima exotermického píku na DTA krivke, T_f je teplota inflexného bodu a β je rýchlosť ohrevu vzoriek. Zistilo sa, že ZrO_2 pôsobí významne na nukleáciu až pri prídavku 3 mol.%.

Teplota maxima exotermického píku, T_p , bola odčítaná priamo z DTA kriviek. Na zistenie teploty inflexného bodu, T_f , boli použité zderivované DTA krivky. Aktivačné energie $E_{(Tf)}$, $E_{(Tp)}$, $E_{(\beta)}$ a frekvenčné faktory, A , boli vypočítané metódou najmenších štvorcov z rovníc (1), (2) a (3).

Tabuľka I

Aktivačné energie a frekvenčné faktory pre sústavy
 $\text{Li}_2\text{O} \cdot 2 \text{SiO}_2 \cdot n \text{ZrO}_2$

Množstvo ZrO_2 [mol.%]	$E_{(Tf)}$ [kJ mol ⁻¹]	A	$E_{(Tp)}$ [kJ mol ⁻¹]	A	$E_{(\beta)}$ [kJ mol ⁻¹]
1	290	3,33 E+16	315	4,67 E+17	331
2	302	4,11 E+16	325	5,62 E+17	340
3	332	1,08 E+18	356	1,08 E+19	372

Príprava vzoriek

Zmiešali sa vypočítané množstvá Li_2CO_3 , SiO_2 a ZrSiO_4 a zmes sa tavila v peci v platinovom tégliku pri 1500 °C počas 2 hodín. Tavenina sa nechala voľne vychladnúť a na meranie DTA kriviek sa použili práškové vzorky s veľkosťou zrn 0,1 mm až 0,16 mm.

Meranie DTA kriviek

DTA krivky boli merané pomocou zdigitalizovaného derivatografu MOM Budapešť na pripravených vzorkách s hmotnosťou 20–30 mg v oxalovom tégliku pri rýchlostiach ohrevu cca 5, 10, 15, 20 a 25 K min⁻¹.

Získané aktivačné energie $E_{(Tf)}$, $E_{(Tp)}$, $E_{(\beta)}$ vypočítané na základe rovníc (1), (2), (3) a frekvenčné faktory A sú uvedené v tabuľke I.

Pri sústavách s prídavkom 1 mol.% ZrO_2 , 2 mol.% ZrO_2 a 3 mol.% ZrO_2 hodnoty aktivačných energií stúpajú. Zo získaných hodnôt možno usudzovať, že pri malých koncentráciách ZrO_2 sa sústava pravdepodobne dostáva do oblasti metastabilného odmiešania a ZrO_2 pôsobí ako nukleátor. So zvyšujúcim sa prídavkom ZrO_2 sa proces kryštalizácie stáva energeticky viac náročný a kryštalizácia prebieha pomalšie. Môže to byť spôsobené odlišným spôsobom zabudovania oxidu zirkoničitého do kremičitanovej siete tetraédrov. ZrO_2 pri vyšších koncentráciách pôsobí ako sieťotvorný oxid, pri nižšom obsahu môže pôsobiť ako modifikátor, prípadne nukleátor. Získané aktivačné energie v sebe zahrňujú proces nukleácie aj kryštalizácie. Ako je vidieť, nukleácia sa vo významnej miere viac prejavuje pri menších prídavkoch ZrO_2 . Tieto výsledky korelujú aj s hodnotami teplôt T_p , ktoré sa so zvyšujúcim prídavkom ZrO_2 zvyšujú.

Na posúdenie termickej stability pripravených vzoriek sa použili hodnoty aktivačných energií. Zistilo sa, že so zvyšujúcim sa prídavkom ZrO_2 hodnoty aktivačných energií stúpajú, t.j. stúpa aj termická stabilita lítnokremičitých skiel voči kryštalizácii.

Táto práca vznikla za podpory grantu KEGA č. 3/3230/05.

LITERATÚRA

1. Sakka S., Tashiro M.: *J. Ceram. Soc. Japan.* 69, 67 (1961).
2. Stookey S. D.: *Glastech. Ber.* 32 k, V/1 (1959).
3. Moriya T., Sakaino T., Tanaka K.: *J. Ceram. Soc. Japan.* 63, 1129 (1960).
4. Marotta A., Búri A., Branda F.: *J. Non-Cryst. Solids* 95-96, 593 (1987).
5. Zhao X., Sakka S.: *J. Non-Cryst. Solids* 95-96, 487 (1987).
6. Branda F., Marotta A., Búri A.: *J. Non-Cryst. Solids* 134, 123 (1991).
7. Chena K.: *J. Phys. Chem., B* 103, 8272 (1999).

2P-35

SYNTEZA A RŮST MONOKRYSTALŮ INDIUM FOSFIDU PRO DETEKTORY ZÁŘENÍ

LADISLAV PEKÁREK

*Fyzikální ústav AV ČR, Na Slovance 2, 182 21 Praha 8
pekareklad@volny.cz*

Indium fosfid je polovodičová sloučenina skupiny $A^{III}B^V$ v současné době využívaná zejména v oblasti mikrovln, optoelektroniky a slunečních článků. InP má však i vhodné fyzikální parametry pro aplikace v oblasti detektorů rentgenova, γ a korpuskulárního záření. Pro účinnou detekci těchto záření je nutná nízká energie vzniku párů elektron-díra, vysoké atomové číslo india, vysoká pohyblivost nosičů náboje a vysoké hodnoty dob života těchto nosičů. Pro účinný sběr nábojů na elektrodách je nutné přiložit na detektor určité napětí, a proto musí mít krystal i vysoký měrný odpor – semiizolační (SI) vlastnosti.

Pro získání SI monokrystalů InP je nutné syntetizovat nejprve polykrystal InP vysoké čistoty s maximální koncentrací příměsí v řádu 0,1 ppm. Protože InP má inkongruentní bod tání, 1062 °C a disociační tlak 2,7 MPa, byla syntéza prováděna v zatavených evakuovaných ampulích modifikací vertikální Bridgmanovy metody z taveniny s přebytkem india. Polykrystal rostl v křemenných kelímecích při teplotě 900 až 980 °C, kde teplota hladiny india byla o 60–80 °C vyšší, než u kónického dna kelímku. Po 340 hodinách syntézy byly získány polykrystalové vysoké čistoty o hmotnosti až 380 g.

Růst monokrystalů InP byly z těchto polykrystalů prováděn metodou Czochralského, technikou překryvu taveniny InP inertní taveninou B_2O_3 , která slouží jako kapalinový uzávěr. Pokud působí na obě taveniny tlak inertního plynu 5 MPa, nedochází k rozkladu taveniny a z monokrystalického zárodku orientace B/111/ lze rychlostí 1,5 cm h⁻¹ vypěstovat monokrystal o hmotnosti až 500 g.

Monokrystalové InP bez dopantu mají sice vysokou pohyblivost elektronů až 4500 cm²/Vs, avšak nízký měrný odpor v řádu 0,1 Ω cm. SI vlastnosti lze v nich vytvořit dopanty ze skupiny přechodových prvků, zejména železem v koncentraci 0,1–1 ppm, kdy získané monokrystalové mají měrný odpor v řádu 10⁷ Ω cm a pohyblivost elektronů přes 2000 cm²/Vs, avšak i vysoký záchytný průřez pro elektrony. Proto jsme použili metodu dvojitého dopování titanem a zinkem, nebo titanem a manganem, kde měrný odpor je jen o 1 řád nižší,

avšak záchytný průřez o několik řádů nižší a tím je i nižší rekombinace nosičů náboje. Dále byly obdobné SI krystalové získány použitím dopantů, které mají getovací účinek na zbytkové příměsi, zejména křemík, v tavenině. Zde se osvědčil tantal jako dopant, který po vyžhání krystalu na 950 °C po dobu 90 h vytváří v krystalu SI stav. Stejný postup byl zvolen i při žhání krystalů bez dopantu.

Z těchto monokrystalů byly připraveny detektory rentgenova záření 40 keV, úspěšně odzkoušené i pro γ záření 122 keV a 662 keV a korpuskulární záření.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 102/06/0153.

2P-36

PRÍPRAVA A ŠTÚDIUM VLASTNOSTÍ 2-CHLÓRBENZOÁTŮV ZINOČNATÝCH S BIOAKTÍVNÝMI LIGANDMI

LENKA PIKNOVÁ^a, KATARÍNA GYÓRYOVÁ^a, JANA KOVÁŘOVÁ^b, JOZEF CHOMIČ^a, DANA HUDECOVÁ^c, DAGMAR MUDROŇOVÁ^d, VLADIMÍR ZELENÁK^a a ZUZANA VARGOVÁ^a

^a Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzsova 11, 041 54 Košice, Slovenská republika, ^b Ústav makromolekulárnej chémie AV ČR, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika, ^c Katedra biochémie a mikrobiológie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU Radlinského 9, 812 39 Bratislava, Slovenská republika, ^d Výskumný ústav veterinárnej medicíny, Hlinkova 1/A, 040 01 Košice, Slovenská republika
piknoval@upjs.sk

V súčasnosti sa venuje veľká pozornosť zlúčeninám prechodných a neprechodných kovov, hlavne tým, ktoré obsahujú biogénne kovy. Tieto kovy sú súčasťou mnohých metaloenzymov a zúčastňujú sa regulačných, metabolických a oxidačno-redukčných reakcií v organizme. Z tohto hľadiska stále narastá záujem o nové využitie týchto kovov v priemysle, životnom prostredí a medicíne. Do tejto skupiny patrí aj zinok.

Zinok je jedným z najvýznamnejších biogénnych prvkov a je súčasťou enzýmov, kde je potrebný pre stabilizáciu štruktúry, alebo pôsobí ako katalyzátor hydrolytických reakcií, kde má funkciu Lewisovej kyseliny. V oboch prípadoch hrá dôležitú úlohu schopnosť zinku tvoriť komplexy. Zinok vytvára pevnejšie komplexy s tvrdými bázami t.j. hlavne s ligandmi, ktoré sa koordinujú prostredníctvom O, N a menej stabilné komplexy s P a S.

Heterocyklické zlúčeniny zohrávajú dôležitú úlohu v mnohých biologických systémoch, hlavne systémy s *N*-donorovými ligandmi sú zložkou niektorých vitamínov a liekov ako napr. nikotínamid, kofeín a pod¹.

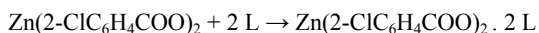
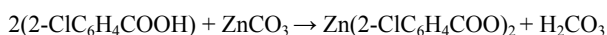
Alifatické a aromatické karboxyláty zinku s bioaktívnymi ligandmi, ich spektrálne, termické, kryštalografické údaje a ich biologická aktivita boli predmetom našich predošlých prác²⁻⁵.

Nakoľko neboli zatiaľ zosyntetizované a študované haloģenbenzoáty zinočnaté s *N*-donorovými ligandmi ako napr. kofeín, močovina, metyl-3-pyridylkarbamát a pod., ktoré sú

významné z hlediska biologické aplikace, rozhodli jsme se ich zosyntetizovat a studovat ich fyzikálněchemické vlastnosti.

Vypracovali jsme metódu na přípravu 2-chlórbenzoátů zinku s bioaktivními ligandmi typu $Zn(2-ClC_6H_4COO)_2 \cdot n H_2O$ (kde $L =$ kofeín, močovina, metyl-3-pyridylkarbamát, $n = 0; 1; 2$), které jsme charakterizovali CHN analýzou, chemickou analýzou a IČ spektroskopiou.

Syntézu těchto karboxylátů zinku jsme realizovali podľa rovníc:



Tepelné vlastnosti připravených zlúčenin jsme študovali metodami termickej analýzy (TG/DTG, DTA). Určili sme ich tepelnú stabilitu a objasnili sme mechanizmus ich tepelného rozkladu. Tepelný rozklad připravených zlúčenin možno charakterizovať ako viacstupňový proces. V prípade hydratovaných zlúčenin sa tepelný rozklad začína v prvom stupni uvoľňovaním vody, potom dochádza k rozkladu *N*-donorových organických ligandov a na koniec dochádza k rozkladu karboxylátového aniónu.

Táto práca vznikla podporou grantu VEGA č. 1/2474/05.

LITERATÚRA

1. Icbudak H., Heren Z., Ali Kose D., Necefoglu H.: J. Therm. Anal. Cal. 76, 837 (2004).
2. Györyová K., Balek V., Melník M.: J. Thermal Anal. Cal. 53, 577 (1998).
3. Chomič J., Györyová K., Szunyogová E., Kovařová J.: J. Thermal Anal. Cal. 76, 33 (2004).
4. Zeleňák V., Cisařová I., Sabo M., Llewellyn P., Györyová K.: J. Coord. Chem. 57, 87 (2004).
5. Györyová K., Kovařová J., Chomič J.: J. Thermal Anal. Cal. 80, 375 (2005).

2P-37

VLIV ANIZOTROPIE A MINERÁLNÍHO SLOŽENÍ NA DILATAČI HORNIN

EVA PLEVOVÁ a VĚRA ŠUGÁRKOVÁ

ÚGN AVČR, Studentská 1768, 708 00 Ostrava – Poruba
plevova@ugn.cas.cz

Změny struktury horniny a její fázové změny vyvolané zahříváním za neizotermních podmínek jsou jedny z faktorů významných pro komplexní posouzení chování hornin a horninového masivu v napětovém poli indukovaném lidskou činností.

Mineralogicko-petrografické složení je jednou ze základních vlastností horniny, která ovlivňuje a určuje rozsah a intenzitu působení teploty na konkrétní horninu, a to nejen při progresivním zahřívání, ale také při ochlazování. Intenzita vlivu působení teploty na horninu je závislá hlavně na mineralogickém složení horniny, na její struktuře a na prostorové orientaci minerálů. V horninotvorných minerálech probíhají při zahřívání procesy dehydratace, dehydroxilace, disociace, polymorfni přeměny a tvorba nových fází, spojené se struk-

turní přestavbou minerálů a provázené objemovými změnami^{1,2}.

Práce je zaměřena na studium procesů probíhajících při teplotě vybraných hornin a jejich vliv na výslednou dilatační horniny spolu s vlivem orientace vzorku. Vzorky byly podrobeny měření dilatace ve třech osách na konečnou teplotu 800 nebo 1000 °C.

Pro studium vlivu anizotropie a minerálního složení na tepelnou roztažnost hornin byly s ohledem na předchozí výsledky vybrány reprezentativní vzorky mramorů, žuly a pískovců z tuzemských nalezišť. Vzorky pro dilatační měření byly řezány diamantovou pilou orientovaně vzhledem ke stavbě horniny. Dilatace u vzorků mramoru, pískovce a žuly byly měřeny ve třech kolmých osách X, Y, Z. V případě pískovce se v jednotlivých osách téměř žádné rozdíly neprokázaly. V případě žuly je pak celková dilatace v ose X a Z téměř stejná, v ose Y je hodnota roztažnosti nižší. Dilatace při ohřevu a ochlazování jsou také velmi podobné. V případě mramorů jsou pak rozdíly výraznější, celková dilatace v osách Z a Y je sice téměř stejná, avšak v ose X je několikanásobná. Podobně je tomu i pro dilataci u ohřevu a ochlazování v ose X, která je taktéž několikanásobná. Pro doplnění experimentálních dat změn roztažnosti v závislosti na minerálním složení a fyzikálně-chemických přeměnách během tepelného namáhání materiálu byly dané vzorky podrobeny simultánnímu měření TG/DTA a IR spektroskopie.

Tato práce vznikla za finanční podpory Grantové agentury ČR v rámci grantu č. 105/04/1019.

LITERATURA

1. Battaglia S., Franzini M., Mango F.: Nuovo Cimento C, 16C 1, 4, 453 (1993).
2. Ehara S.: J. Soc. Mater. Sci. 32, 363, 1403 (1983).

2P-38

VLASTNOSTI A STRUKTURA SKEL O SLOŽENÍ 50MO-10B₂O₃-40P₂O₅ A 50MO-10B₂O₃-40P₂O₅+16TiO₂, M = Ca²⁺, Pb²⁺, Zn²⁺

JAROSLAV POSPÍŠIL, LADISLAV KOUDELKA a PETR MOŠNER

Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice
jaroslav.pospisil@upce.cz

Borofosfátová skla modifikovaná oxidy jako jsou CaO a ZnO naležají uplatnění např. jako nízkotající skelné pájky. Jsou-li tato skla navíc dotována oxidem titaničitým, mohou sloužit jako prekurzory porézních sklo-keramických materiálů s vyjimečnými vlastnostmi, jakými jsou velmi nízký koeficient délkové teplotní roztažnosti a odolnost proti teplotním šokům. Z borofosfátových skel vápenatých dotovaných TiO₂ může být získána tepelnou úpravou krystalická fáze CaTi₄P₆O₂₄ vykazující biokompatibilní vlastnosti.

V této práci byl studován vliv oxidů CaO, PbO, ZnO na vlastnosti a strukturu skel o složení 50MO-10B₂O₃-40P₂O₅ a 50MO-10B₂O₃-40P₂O₅+16TiO₂, kde M=Ca²⁺, Pb²⁺, Zn²⁺.

Skla byla připravena tavením při teplotách 1200–1300 °C

a následným vylitím taveniny do měděné formy. Termické analýzy (DSC, TMA) ukázaly, že skla obsahující CaO mají výrazně vyšší teplotu skelné transformace, než skla obsahující ZnO nebo PbO. Z DSC vyplynulo, že skla o složení $50\text{MO}-10\text{B}_2\text{O}_3-40\text{P}_2\text{O}_5$ krystalizují při zahřívání ve dvou krocích, přičemž rentgenová strukturální analýza odhalila přítomnost krystalických fází BPO_4 a příslušného difosfátu ($\text{Ca}_2\text{P}_2\text{O}_7$, $\text{Pb}_2\text{P}_2\text{O}_7$, $\text{Zn}_2\text{P}_2\text{O}_7$). DSC křivky skel o složení $50\text{MO}-10\text{B}_2\text{O}_3-40\text{P}_2\text{O}_5+16\text{TiO}_2$ obsahovaly pouze jeden krystalizační pik, kdy pouze u skla obsahujícího CaO se podařilo identifikovat krystalické fáze BPO_4 , $\text{Ca}_2\text{P}_2\text{O}_7$ a $\text{CaTi}_4\text{P}_6\text{O}_{24}$.

Struktura skel byla studována pomocí Ramanovy spektroskopie. Ramanova spektra skel o složení $50\text{MO}-10\text{B}_2\text{O}_3-40\text{P}_2\text{O}_5$ obsahovala silný vysokofrekvenční vibrační pás, který odpovídá symetrickým vibracím nemůstkových atomů kyslíku v metafosfátových a difosfátových strukturách celků. U skel $50\text{MO}-10\text{B}_2\text{O}_3-40\text{P}_2\text{O}_5+16\text{TiO}_2$ je tento pás rozštěpen do tří menších pásů odpovídajícím vibracím metafosfátových, difosfátových a orthofosfátových strukturách celků. Vliv dvojmocných oxidů kovů se projevuje především v mírném posuvu maxim vibračních pásů odpovídajících fosfátovým strukturám jednotkám, které jsou ovlivněny silou iontového pole jednotlivých kationů.

Tato práce vznikla za finanční podpory Grantové agentury ČR (grant č. 104/04/0711) a za finanční podpory Ministerstva školství ČR (výzkumný projekt č. 0021627501).

2P-39

RARE EARTH ELEMENTS AND OXIDES IN LIQUID PHASE EPITAXY

OLGA PROCHÁZKOVÁ^a, JAN GRYM^a, JIŘÍ ZAVADIL^a, and MILADA KOPECKÁ^b

^a*Institute of Radio Engineering and Electronics, Academy of Sciences of the Czech Republic, Chaberská 57, 182 51 Praha 8,* ^b*Czech Geological Service, Geologická 6, 152 00 Praha 5, Czech Republic*
olgap@ure.cas.cz

Thick InP single crystal layers are promising materials for the preparation of radiation detectors operating at room temperature. High purity materials with shallow impurity concentration bellow 10^{15} cm^{-3} are needed in the context of radiation detection. An effect of the admixture of rare-earth (RE) elements and oxides on the quality and the thickness of grown epitaxial layers is reported.

An effort has been devoted to the optimization of liquid phase growth technique for preparation of relatively thick ($> 10 \mu\text{m}$) layers with residual undesirable impurity concentration bellow 10^{15} cm^{-3} . Our attention has been turned towards peculiarities of RE and particularly to their considerable chemical reactivity and reduction capability. The gettering ability of RE in the context of semiconductor growth has been reported in the past but the purification efficiency of RE has not been studied so systematically. We have compared the impact of elements from the whole lanthanide series.

Prepared layers have been investigated by optical and

scanning electron microscopy together with low temperature photoluminescence (PL) spectroscopy. Shallow impurity concentrations and conductivity type have been monitored by measuring C-V characteristics using mercury probe. It has been found that the growth rate and structural properties such as surface morphology and defect density are profoundly influenced by RE concentration in the growth melt. This effect differs considerably for individual RE elements or oxides. Generally RE admixture leads to pronounced narrowing of low-temperature PL spectra and enabled to resolve exciton related transitions and to distinguish band-acceptor transitions from donor-acceptor pair ones. We consider it a major manifestation of a substantial purification effect due to RE addition. There has been no observed influence of the variation of RE concentration in the melt on PL spectra. It has been observed that the admixture of certain RE causes not only substantial reduction of residual shallow impurities but also conversion of electrical conductivity from *n* to *p* type. This electrical conductivity cross-over is particularly important for the construction of detector structures since a good quality Schottky barrier could be made on *p*-type layers while not on *n*-type ones.

The work has been supported by the Grant Agency of the Czech Republic, project No. 102/06/0153.

2P-40

CATALYTIC DECOMPOSITION OF HYDROGEN PEROXIDE ON IRON OXIDES

MICHAL OTYEPKA^a, EVA OTYEPKOVÁ^a, ČENĚK GREGOR^a, ROBERT PRUCEK^a, and RADEK ZBORIL^{a,b}

^a*Department of Physical Chemistry, tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc,* ^b*Center for powder nanoparticles, Palacky University, Šlechtitelů 11, Olomouc*
otyepka@risc.upol.cz

Catalysts based on iron oxide have nowadays found wide applications in laboratory, industrial and environmental practice. This study compares catalytic properties of fourteen iron oxide catalysts, measured by catalytic decomposition of hydrogen peroxide, considering their chemical composition, structure and particle size.

The catalytic activity of iron oxides was studied in a simple reaction system containing hydrogen peroxide in concentration of 20 mmol/L and iron oxide catalyst (1 g L^{-1}). The course of the reaction was determined by the manometric method. The obtained results of the observed reaction rates (Table I) demonstrate that the reaction rate depends not only on the surface area of the iron oxide catalyst but also on the chemical constitution and crystallographic structure of the catalyst.

Financial support from the project MSM 6198959218 of Ministry of Education of the Czech Republic is gratefully acknowledged.

Table I

Summary of the observed first-order rate constant (k_{obs}) of the hydrogen peroxide decomposition for all studied iron oxide catalysts

Iron oxide	$10^{-3} k_{\text{obs}}$ [min^{-1}]	Surface [$\text{m}^2 \text{g}^{-1}$]
$\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$	0.50, 0.62, 0.87	30
$\beta\text{-Fe}_2\text{O}_3$	3.94, 1.41, 1.11	7
$\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$	1.52, 1.29, 1.35	48
Fe_3O_4	0.10, 0.15	15
FeO	0.03, 0.005	1,2
$\alpha\text{-FeOOH}$ (Aldrich)	6.22, 6.25, 7.05	109
$\alpha\text{-FeOOH}$ (Industrial)	0.19, 0.18, 0.4	44
$\alpha\text{-FeOOH}$ (Laboratory)	5.66, 4.41, 3.77	85
$\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot n \text{H}_2\text{O}$ (D254-2)	17.76, 19.15, 19.73	254
$\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot n \text{H}_2\text{O}$ (ZHP3-C)	6.60, 7.37, 8.81	180
amorphous Fe_2O_3	18.12, 21.20, 18.56	290
nano- $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ precursor	4.74, 5.16, 4.91	112
nano- $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$	13.83, 14.89, 12.71	129
amorphous Fe_2O_3	3.38, 3.31	400

2P-41

**ŠTÚDIUM INTERAKCIE IMIDAZOLU S Ni(II)
A Fe(III) FORMAMI MONTMORILLONITU
V CELOM ROZSAHU pH VODNÝCH ROZTOKOV
TEJTO ORGANICKEJ BÁZY**

**MARTINA SAPIETOVÁ^a, EUGEN JÓNA^a, KAROL
JESENÁK^b a ĽUBOMÍR KUČHTA^b**

^a Katedra chémie a technológie anorganických materiálov, Fakulta priemyselných technológií, Trenčianska Univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne, I.Krasku 491/30, 020 01 Púchov, ^b Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava 4 sapietova@fpt.tnuni.sk, jona@fpt.tnuni.sk

Montmorillonit, získavaný z horniny bentonit, patrí medzi ílové minerály s expandujúcou štruktúrou (smektity). V posledných rokoch sa výskum zaoberal štúdiom interakcií organických zlúčenín s montmorillonitom. Po praktickej stránke tieto štúdiá prispeli tiež k riešeniu problematiky ochrany pôdneho fondu pri vnášaní cudzorodých látok do pôdy^{1,2}.

Cieľom práce bolo štúdium interakcií imidazolu s Ni^{2+} , Fe^{3+} formami montmorillonitu v celom rozsahu pH vodných roztokov imidazolu. Práca sa zamerala na štúdium možnosti viazania imidazolu ako kationu, neutrálnej molekuly a aniónu do medzivrstvia montmorillonitu. Vzniknuté organo-montmorillonity sa pripravili adsorpciou vodných roztokov imidazolu na Ni(II)- a Fe(III)-montmorillonit. Pri adsorpcii sa použil nielen roztok imidazolu bez úpravy pH, ale aj roztoky, ktorých pH sa upravilo na 2 a 12. V kyslej oblasti pH dochá-

dzalo k iónovej výmene, v neutrálnej a zásaditej oblasti dochádzalo ku koordinácii neutrálnych molekúl imidazolu na vymeniteľný kation.

Na identifikáciu pripravených organo-montmorillonitov sa použili IČ spektroskopía, RTG difrakčná analýza a elementárna analýza.

Imidazol tvorí s niklom viacero komplexných zlúčenín a preto bola snaha preskúmať interacie imidazolu s medzivrstevnými nikelnatými kationmi. Vzorka Ni-IM 1 sa pripravila pri pH 2. Do medzivrstvia sa adsorbovali kationy imidazólia a do roztoku sa vytesnili nikelnaté kationy. Vstup kationov imidazólia sa prejavil najmä v oblasti 1200–1500 cm^{-1} . V porovnaní so spektrom chloridu imidazólia sa intenzity pásov v tejto oblasti znížili resp. niektoré pásy zanikli³. Prítomnosť imidazólia v medzivrstvi dokazujú aj pásy deformačných a valenčných vibrácií NH skupiny. Bez úpravy pH sa pripravili tri vzorky Ni-IM 2–4 v rozmedzí koncentrácie od 0,1 až 0,3 mol dm^{-3} . So zvyšujúcou koncentráciou narastá množstvo imidazolu v medzivrstevnom priestore (tab. I). Na IČ spektrách sa prejavilo zvýšenie množstva adsorbovaných molekúl imidazolu u jednotlivých vzoriek narastaním intenzity všetkých pásov. Koordinácia imidazolu na vymeniteľný kation Ni^{2+} sa prejavila hlavne v oblasti 1200–1500 cm^{-1} . Deformačné a valenčné vibrácie skupiny NH dokazujú prítomnosť imidazolu v medzivrstvi a jeho následnú koordináciu na Ni^{2+} cez pyridínový dusík. Vzorka Ni-IM 5 sa pripravila pri pH 12. Priebeh IČ spektra je takmer rovnaký ako v prípade predchádzajúcich vzoriek (pH 9). Medzirovné vzdialenosti d_{001} sú uvedené v tabuľke I. U vzoriek Ni-IM 1 a 2 možno z hodnôt d_{001} konštatovať, že imidazol je plošne usporiadaný v medzivrstevnom priestore.

Pri pH 2 sa pripravila vzorka Fe-IM 1. Do medzivrstvia sa adsorbovali kationy imidazólia a vytesnili sa železité kationy. U vzorky Fe-IM 2 pripravenej v slabo zásaditej oblasti pH sa adsorbovali molekuly imidazolu do medzivrstvia, kde došlo k ich následnej protonizácii a vznikol imidazólium-montmorillonit. Priebeh IČ spektrier týchto vzoriek je takmer identický. V oblasti od 1200 cm^{-1} do 1500 cm^{-1} výrazne poklesli intenzity pásov prislúchajúcich imidazóliu resp. niektoré zanikli³. Dôkazom adsorpcie kationu imidazólia sú deformačné a valenčné vibrácie skupiny NH. V silne zásaditom

Tabuľka I
Adsorpcia imidazolu na Ni- a Fe-MMT

Označenie vzorky	c [mol dm^{-3}]	pH	$\text{IM}_{\text{adsor.}}$ [mmol g^{-1}]	Fe^{3+} (Ni^{2+}) _{desor.} [mmol g^{-1}]	d_{001} [nm]
Ni-IM 1	0,02	2,0	0,59	0,38	1,25
Ni-IM 2	0,01	9,1	0,74	0	1,25
Ni-IM 3	0,02	9,3	1,43	0	1,43
Ni-IM 4	0,03	9,4	2,05	0	1,53
Ni-IM 5	0,01	12,0	1,45	0	1,57
Fe-IM 1	0,06	2,0	0,51	0,25	1,25
Fe-IM 2	0,06	9,8	0,67	0	1,25
Fe-IM 3	0,06	12,5	0	0	1,23

prostředí sa pripravila vzorka Fe-IM 3, ale z výsledkov elementárnej analýzy a IČ spektier vyplýva, že sa imidazol neadsorboval do medzivrstvového priestoru. V tabuľke I sú uvedené hodnoty medzivrstvových vzdialeností d_{001} . Na záznamoch týchto vzoriek sa nachádzajú násobné reflexy (002), čo môže poukazovať na lepšiu usporiadanosť vrstiev. V porovnaní Fe(III)-montmorillonitom majú tieto vzorky menšiu medzivrstvovú vzdialenosť a možno konštatovať, že imidazol je v medzivrstvovom priestore usporiadaný rovnoobežne s bazálnou rovinou.

Takýto osobitý spôsob prípravy interkalátových komplexov v silikátových vrstevnatých mineráloch vytvára možnosť tvorby rôznych koordinačných zlúčenín, ktoré sa nedajú získať bežnými metódami. Prítomnosť organickej látky v medzivrstvovom priestore montmorillonitu môže zvýšiť životnosť katalyzátora a jeho katalytická aktivita.

Táto práca vznikla za podpory grantu KEGA č.3/3230/05.

LITERATÚRA

1. Čičel B., Novák I., Horvát I.: *Mineralógia a kryštalochémia ílov*. Veda, Bratislava 1981.
2. Kowalska M., Güler H., Cocke D. L.: *Sci. Tot. Envir.* 141, 223 (1994).
3. Drolet D. P., Manuta D. M., Less A. J.: *Inorg. Chim. Acta* 146, 173 (1988).

2P-42

PRÍPRAVA TENKÝCH KOVOVÝCH VRSTEV NA POLYMERECH

JAKUB SIEGEL*, VLADIMÍR KOTÁL, PETR SLEPIČKA a VÁCLAV ŠVORČÍK

Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 jakub.siegel@vscht.cz

Kovové vrstvy na polymerných substrátech se v současné době uplatňují v mnoha oblastech průmyslu. Nacházejí využití jako obalový materiál pro potraviny ale i v elektronických aplikacích, např. biosenzory^{1,2}. Pro zlepšení adheze rozhraní kov-polymer se v současné době využívá celá řada fyzikálních i chemických metod. Plazmové techniky mají v současnosti dominantní postavení především díky jednoduchosti a reprodukovatelnosti leptacího procesu. Je jimi možno měnit chemické i fyzikální vlastnosti povrchu, se současným zachováním objemových vlastností³.

Práce se zabývá charakterizací polymerních substrátů a na ně deponovaných ultratenkých Au vrstev. Studovanými polymery byly PE (polyethylen), PET (polyethylentereftalát), PTFE (polytetrafluorethylen). Byly studovány zejména vlastnosti polymerního povrchu a vliv expozice v plazmě na povrchovou morfologii a smáčivost substrátů. Dále jsou charakterizovány napařené Au vrstvy na těchto substrátech. Studována byla tloušťka vrstev, povrchová morfologie a rezistance. Byl sledován vliv expozice v plazmě a teploty depozice Au na vlastnosti deponovaných vrstev. Smáčivost povrchu polymerů byla stanovena měřením kontaktního úhlu. Tloušťky vrstev

byly měřeny profilometrem a AAS spektroskopii. Spojitost a homogenita vrstev byla studována měřením plošné rezistance. Povrchová morfologie polymerů i připravených vrstev Au byla studována metodou AFM.

Smáčivost povrchu dosahuje nejvyšší hodnoty bezprostředně po expozici v plazmě a s dobou po expozici smáčivost povrchu klesá. Modifikace polymerů plazmou způsobuje výrazné změny v morfologii povrchu. S rostoucí tloušťkou deponované vrstvy klesá její plošná rezistance. Po depozici vrstvy Au stoupá drsnost povrchu. Zvýšená teplota způsobuje změny morfologie polymerních substrátů; drsnost povrchu zůstává konstantní. Morfologie deponovaných vrstev Au je teplotou značně ovlivněna.

Autoři děkují za finanční podporu VŠCHT k vnitřnímu grantu č. 126/08/0015 a grantu MŠMT č. LC 06041.

LITERATURA

1. Stutzmann N., Tervoort T. A., Bastiaansen Smith K. P.: *Nature* 407, 613 (2006).
2. Švorčík V., Zehentner J., Rybka V., Slepíčka P., Hnatowicz V.: *Appl. Phys., A* 75, 541 (2002).
3. Švorčík V., Kotál V., Slepíčka P., Bláhová O., Špirková M., Sajdl P., Hnatowicz V.: *Nucl. Instrum. Meth., B* 244, 365 (2006).

2P-43

VLIV CuCl_2 NA KINETIKU OXIDACE OXIDAČNĚ ALTEROVANÉHO UHLÍ

MICHAELA LIPTÁKOVÁ a VÁCLAV SLOVÁK

Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská Univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 33 Ostrava vaclav.slovak@osu.cz

Termogravimetricky byl sledován vliv množství adsorbovaných iontů Cu^{2+} na kinetiku oxidace oxidačně alterovaného uhlí. Vzorky uhlí obohaceného Cu^{2+} byly připraveny sorpcí z vodných roztoků CuCl_2 s různou koncentrací v rozmezí 0 až 5 mmol dm^{-3} .

Z termogravimetrických dat byly určeny kinetické parametry oxidace metodou přímé nelineární regrese¹ za předpokladu jednotkového řádu reakce.

Bylo zjištěno, že za daných podmínek vzorky alterovaného uhlí sorbují maximálně 0,15 mmol Cu^{2+} na 1 g uhlí. S rostoucím obsahem Cu^{2+} se oxidace vzorků posouvá k nižším teplotám a rychlost reakce roste. Na druhou stranu vypočtené hodnoty aktivačních energií ukázaly, že tento parametr klesá s rostoucím obsahem Cu^{2+} pouze do určité prahové hodnoty (120–130 kJ mol^{-1} při obsahu 0,12 mmol Cu^{2+} na 1 g uhlí) a dále se již výrazně nemění. To nasvědčuje tomu, že při tomto obsahu Cu^{2+} dochází ke změně mechanismu interakce kyslíku s uhlíkem a další urychlování reakce již nelze vysvětlit jednoduchým katalytickým účinkem (snížením aktivační energie).

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 105/06/0630.

LITERATURA

1. Slovák V.: *Thermochim. Acta* 372, 175 (2001).

2P-44

A MODEL OF GETTERING EFFECTS OF RARE-EARTH ELEMENTS IN III-V COMPOUNDS

FEDOR ŠROBÁR and OLGA PROCHÁZKOVÁ

Ústav radiotechniky a elektroniky AV ČR, Chaberská 57, 182 51 Praha 8
srobar@ure.cas.cz

Achieving true doping effects of rare earth elements (REE) has proven difficult in most III-V compounds: their atoms are not readily incorporated into the host lattice. On the other hand, REE atoms show enhanced chemical affinity towards most species of the shallow donors, forming microscopic crystalline inclusions and thus purifying the material. This is of importance in applications such as gamma-ray and nuclear particle detectors where high electron and hole drift velocities are appreciated¹.

We present a quantitative model of the gettering phenomenon, yielding explicit form of the dependence of the free carrier concentration n on the total REE atoms concentration in the melt, RE . Denoting further as D the total concentration of shallow donors, D^f the concentration of free donors and RED the concentration of donors chemically bound to REE, as well as RE^f the concentration of free REE atoms, one can write two particle-conservation equations: $D = D^f + RED$, and $RE = RE^f + RED$. Equilibrium of the reaction $RE^f + D^f \leftrightarrow RED$ (the symbols here denote chemical entities, not concentrations, and are therefore not italicized) is described by the mass action expression $RE^f * D^f / RED = K$. At room temperature the shallow donors are virtually all ionized; if each contributes one electron to the conduction band, one has $D^f = n$. An example of the computed $n - vs - RE$ dependence is shown in the figure; it corresponds well to the experimentally observed trends.

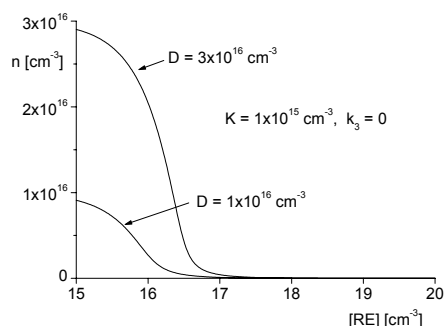


Fig. 1. Dependences of the carrier concentration on total amount of REE in the growth melt for two values of the univalent shallow donor concentration

This work was supported by the project # 102/06/0153 of the Grant Agency of the Czech Republic.

REFERENCE

1. Procházková O., Zavadil J., Žďánský K., Grym J.: Mater. Sci. Eng. 91, 407 (2002).

2P-45

PŘÍPRAVA SLOUČENIN TYPU $Al_{2-(x+y)}Y_xLn_yO_3$

MICHAL TŮMA, PETRA ŠULCOVÁ A MIROSLAV TROJAN

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. Legií 565, 532 10 Pardubice
michal.tuma@upce.cz

Tato práce se zabývá hodnocením barevných vlastností sloučenin typu $Al_{2-(x+y)}Y_xLn_yO_3$, kde $x = 0; 0,2; 0,5; 0,7$ a $0,9$ ($x+y=1$) a $Ln = La, Ce, Nd, Pr, Tb, Sm, Ho, Dy, Gd, Eu$ a Er , které by jako chemicky odolné, termicky stabilní a ekologicky nezávadné sloučeniny bylo možné použít pro vybarvování zejména vysokoteplotních aplikací v glazurách.

Příprava pigmentů byla provedena klasickým suchým způsobem syntézy spočívajícím v homogenizaci směsi výchozích oxidů v třecí misce tloučkem a následně kalcinaci v elektrické peci při teplotě 1550 °C. Barevné vlastnosti pigmentů byly měřeny po aplikaci pigmentů do organického pojivového systému v plném tónu na spektrofotometru ColorQuest XE (HunterLab, USA) v systému barevných souřadnic¹ CIE $L^*a^*b^*$ v oblasti vlnových délek viditelného světla (400–700 nm). Sytost S byla vypočítána podle: $S = [(a^*)^2 + (b^*)^2]^{1/2}$.

Barva většiny připravených pigmentů je nevýrazná, většinou má světlý hnědožlutý barevný odstín, jehož intenzita s klesajícím obsahem prvku lanthanoidu klesá. Pigment s obsahem Nd je fialový, s obsahem Er růžový a s obsahem prvků Pr a Tb má hnědý barevný odstín. Nejlepších výsledků bylo dosaženo u pigmentu s obsahem Ce. Barva pigmentu je žlutooranžová a s klesajícím obsahem Ce přechází barevný odstín na jasnou světle žlutou barvu pigmentu $AlY_{0,9}Ce_{0,1}O_3$. Výjimkou je pouze pigment $AlCeO_3$, který je bílý.

Grantový projekt č. 104/04/1078 a 104/05/2081. Grantová agentura ČR.

LITERATURA

1. Šulcová P.: Vlastnosti anorganických pigmentů a metody jejich hodnocení. Skriptum, Univerzita Pardubice 2000.

2P-46

SPECIAL GLASSES FOR IR APPLICATIONS

JIŘÍ ZAVADIL^a, JITKA PEDLÍKOVÁ^b, JÁN KALUŽNÝ^c, and DIMITRIJ LEŽAL^b

^a Institute of Radio Engineering and Electronics, Academy of Sciences of the Czech Republic, Chaberska 57, 182 51 Praha 8-Kobylisy, ^b Institute of Inorganic Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, LIM, 250 68 Řez u Prahy, ^c Department of Non-Metal Materials, Slovak University of Technology, Faculty of Materials Science and Technology, Paulínska 16, 917 24 Trnava, Slovakia
zavadil@ure.cas.cz

Chalcogenide and heavy metal oxide (HMO) glass sys-

tems exhibit smaller phonon energies and larger refraction indices than quartz, borosilicate or phosphate glasses and thus they are transparent up to the mid infra-red (IR) region. Consequently both base glass systems and those doped with rare-earth (RE) elements are promising materials for photonics and optoelectronics¹.

In this paper we review the preparation of chalcogenide and HMO glass systems and their characterisation by measuring optical and electrical properties. Specially designed quartz ampoule has been used to maintain the high chemical and physical purity because the concentration of impurities strongly influences the solubility of RE³⁺ ions in the host glass, optical and luminescence properties and the rise of clusters. Prepared glass systems have been characterised by absorption spectroscopy, low-temperature photoluminescence and by measurement of the direct electrical conductivity and complex electrical modulus.

The attention in this contribution is focused on sulphide, selenide and telluride multi-component glass systems that are transparent up to 16 μm in the infra-red. Particularly, telluride glasses on the base of Ge (Ge-Se, Ge-Se-Te) have been prepared by systematic replacement of Se by Te. Selected systems have been doped with Er and/or Pr and inner shell 4f-4f transitions of RE³⁺ ions have been investigated.

The influence of F \rightarrow Cl substitution on electrical, optical and luminescence properties has been investigated in detail for the HMO glass system (TeO₂)₆₀(PbCl₂)_{40-x}(PbF₂)_x. The concentrations of the hydrogen related impurities were estimated from intensities of absorption band at 2.93 μm and assigned to OH⁻ groups. The increase of PbF₂ content was found to decrease the OH⁻ groups concentration, the optimum amount of F \rightarrow Cl substitution being around 50 % (i.e. 20 mol.%). The increase of F \rightarrow Cl substitution also leads to steady decrease of base glass luminescence.

The work has been supported by the Grant Agency of the Czech Republic, grant No. 104/05/0878.

REFERENCE

1. Ležal D., Pedlíková J., Zavadil J.: J. Optoelectronics Adv. Mater. 6, 133 (2004).

2P-47

REMOVAL OF THE TEMPLATE FROM THE AS-SYNTHESISED MESOSTRUCTURED SILICAS: CALCINATION AND EXTRACTION ROUTE

DÁŠA HALAMOVÁ, MILAN BURČÁK
and **VLADIMÍR ZELENÁK***

*Department of Inorganic Chemistry, P.J. Šafárik University, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovakia
vladimir.zelenak@upjs.sk*

Mesoporous silicas (MS) prepared either by ionic¹ or amphiphilic PEO-PPO-PEO surfactants² attract a great interest as materials for a variety of possible applications e.g. in the fields of adsorption, catalysis or optics³⁻⁵. For many applications surface modification, i.e., grafting of functional groups onto the pore walls of the silica via silylation reactions

between the surface silanol groups (SiOH) and the grafting material. Therefore a high level of silanol concentrations may be desirable for postsynthesis functionalization of mesoporous wall structures.

To remove template from surfactant-templated mesoporous silicas, usually two methods are employed, solvent extraction and calcination. It was observed that the solvent-extracted mesoporous silicas contained a higher density of surface silanol groups than the calcined ones⁶. Our contribution deals with the comparison of solvent extraction and calcination methods used for the template-removal from mesoporous silicas of MCM and SBA type.

Ordered mesoporous silica materials of MCM (ref.¹) and SBA-type (ref.²) were synthesized using cationic surfactant cetyltrimethylammonium bromide (CTAB) and triblock copolymer poly(ethyleneoxide)-poly(propyleneoxide)-poly(ethyleneoxide) (Pluronic F127) as structure directing agent. The prepared materials differed in the interactions between surfactant (S) and inorganic walls (I). For the MCM materials the strong S⁺T⁻ interaction is characteristic, while for SBA materials weak S⁺Cl⁻T⁺ interactions are typical. The template removal from as-synthesized hexagonal (MCM-41) and cubic (MCM-48, SBA-16) materials was studied by extraction in Soxhlet apparatus, using EtOH/HCl mixture as solvent. The silica samples were collected after 2, 4, 6, 8, 10, 24, 48, 72 and 100 hrs of extraction. The amount of the template residue was determined by thermogravimetric analysis. The samples were characterized by XRD, SEM, IR and porosity measurements. Neither cationic, nor neutral triblock copolymer was completely removed by the extraction technique. The template was still embedded in the samples even after the extraction for 100 hrs. The highest portion of the template was removed for the SBA-16 sample, the lowest for MCM-48 sample. The different amount of the surfactant removal is explained by the accessibility of the pores and by the strength of the interaction between surfactant and pore walls. Moreover, for the SBA material the interpenetration of the copolymer into silica walls is supposed to be responsible for only partial surfactant removal. In addition, the template removal from the as-synthesised samples was studied by the non-isothermal kinetics. Activation energy (E_a), and kinetic pre-exponential factor (lnA), have been calculated from the thermogravimetric data at heating rates of 4.5, 6 and 9 K min⁻¹ by differential (Friedman's equation) and Integral (Flynn-Wall-Ozawa's equation) methods. The results are discussed with respect to dimensionality of the porous structure (2-D hexagonal, 3-D cubic) and the interactions between surfactants and mesoporous silica walls (S⁺T⁻ or S⁺Cl⁻T⁺, respectively).

The financial support from the 6. FP. Project No. 020133 (DeSANNs) and MVTS6 Project is gratefully acknowledged.

REFERENCES

1. Beck J. S., Vartuli J. C., Roth W. J., Leonowicz M. E., Kresge C. T., Schmitt K. D., Chu C.T.-W., Olson D. H., Sheppard E. W., McCullen S. B., Higgins J. B., Schlenker J. L.: J. Am. Chem. Soc. 114, 10834 (1992).
2. Zhao D., Huo Q., Feng J., Chmelka B. F., Stucky G. D.: J. Am. Chem. Soc. 120, 6024 (1998).
3. Trong On D., Desplandiers-Giscard D., Dahunac C., Kaliaguine S.: Appl. Catal., A 222, 299 (2001).

- Enomoto N., Kawasaki K., Yoshida M., Li X., Uehara M., Hojo J.: *Solid State Ionics* 151, 171 (2002).
- Ogawa M.: *J. Photochem. Photobiol., C: Photochem. Rev.* 3 129, (2002).
- Zhao X. S., Lu G.Q., Whittaker A. K., Zhu H. Y.: *J. Phys. Chem., B* 101, 6525 (1997).

2P-48

PREPARATION OF NOVEL MAGNETIC SEMICONDUCTORS BASED ON VANADIUM-DOPED $Sb_{2-x}Bi_xTe_3$ CRYSTALS

MAREK ŽABČÍK^a, LUDVÍK BENEŠ^a, PETR LOŠTÁK^a, ČESTMÍR DRAŠAR^a, ZHENHUA ZHOU^b, and CTIRAD UHER^b

^a Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, nám. Čs. legii 565, 532 10 Pardubice, Czech Republic,

^b Department of Physics, University of Michigan, Ann Arbor, Michigan 48109, USA

Marek.Zabcik@upce.cz, cuher@umich.edu

In our previous paper¹, the single crystals of $Sb_{2-x}V_xTe_3$ were shown to belong to a new class of materials designated in the literature as diluted magnetic semiconductors (DMS). It was found that a small content of vanadium in the Sb_2Te_3 crystals gives rise to ferromagnetic behavior at low temperatures; the Curie temperature T_C increases with the vanadium content and reaches approximately 23 K for $Sb_{1.97}V_{0.03}Te_3$. A significant feature of this DMS is distinct anisotropy of magnetic properties which is related to the layered structure of tetradymite – type crystals (space group D_{3d}^5).

It is well known that the Curie temperature depends on carrier concentration for most of DMS. The aim of this paper is to investigate the influence of carrier concentration on T_C in vanadium-doped $(Sb_{1-x}Bi_x)_2Te_3$. Since the progressive substi-

tution of Sb atoms by Bi atoms in the crystal lattice of Sb_2Te_3 , i.e. creation of solid solutions $(Sb_{1-x}Bi_x)_2Te_3$, results in a pronounced decrease in the concentration of holes², we have prepared quaternary crystals $(Sb_{1-x}Bi_x)_{2-y}V_yTe_3$ with successively increasing x.

First, we have prepared polycrystalline materials of composition $(Sb_{1-x}Bi_x)_{1.97}V_{0.03}Te_3$ and $(Sb_{1-x}Bi_x)_{1.98}V_{0.02}Te_3$ for x = 1, 0.75, 0.5, 0.25 and 0 with a view to explore the solubility of vanadium in the solid solutions. X-ray measurements carried out on the samples of $(Sb_{1-x}Bi_x)_{1.97}V_{0.03}Te_3$ for x = 0.5, 0.25 and 0 show diffraction peaks of a minor phase of composition $V_{1.04}Te_2$. However for y = 0.02, there is no evidence of any secondary phase. Therefore, we have focused on single crystals of composition $(Sb_{1-x}Bi_x)_{1.98}V_{0.02}Te_3$.

Single crystals were grown by a modified Bridgman method from elements of 5N purity. The samples were characterized by measurements of the temperature dependence of the electrical resistivity, Hall coefficient, and magnetic susceptibility in the temperature range of 2–300 K. In addition, we also measured magnetization curves.

It was found that all samples under investigation become ferromagnetic at low temperatures. The highest Curie temperature of $T_C = 17.0$ K is obtained on $Sb_{1.98}V_{0.02}Te_3$. With the increasing content of Bi, the Curie temperature gradually decreases and for $Bi_{1.98}V_{0.02}Te_3$ we measure $T_C = 1.9$ K. In other words, T_C diminishes with decreasing free carrier concentration.

This research was supported by Ministry of Education of Czech Republic under the project No. MSM 0021627501 and the NSF grant INT 0201114.

REFERENCES

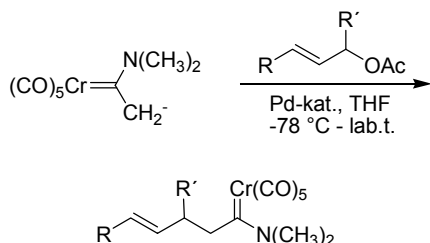
- Dyck J. S., Hájek P., Lošťák P., Uher C.: *Phys. Rev., B* 65, 115212 (2002).
- Stordeur M., Stölzer M., Sobotta H, Riede V.: *Phys. Stat. Solidi (b)* 150, 165 (1988).

3L-01

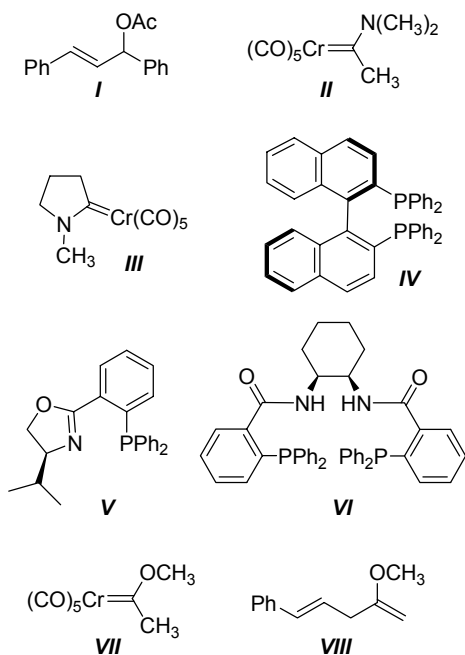
KARBENOVÉ KOMPLEXY CHROMU JAKO NUKLEOFILY PŘI ENANTIOSELEKTIVNÍ PALLADIEM-KATALYZOVANÉ ALLYLOVÉ SUBSTITUCIJAROSLAV PADEVĚT a **DALIMIL DVOŘÁK**

Ústav organické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6
dalimil.dvorak@vscht.cz

Aniony aminokarbenových komplexů chromu mohou reagovat podobně jako jiné stabilizované C-nukleofily s allylovými acetáty nebo karbonáty za vzniku γ,δ -nenasyčených karbenových komplexů¹. Enantioselektivní provedení této reakce by umožnilo syntézu nových chirálních aminokarbenových komplexů s možností využití v organické syntéze.



Enantioselektivní katalýza byla studována na reakci 1,3-difenylallylacetátu (**I**) s lithnými solemi komplexů **II** a **III**. V případě komplexu **II** bylo nejlepších výsledků dosaženo při použití (*R*)-BINAPu (**IV**) v toluenu (44 % ee) a „Pfaltzova ligandu“ (**V**) v THF za přítomnosti ZnCl₂ (90 % ee). „Troštův ligand“ (**VI**) byl překvapivě málo účinný (12 % ee). Karbenový komplex **III** poskytl směs dvou diastereoisomerů. Nejlep-



šího diastereoisomerního přebytku bylo dosaženo s ligandem **VI**, nejvyšší enantiomerní přebytky poskytl (*R*)-BINAP (**IV**) (70 a 32 % ee). Při použití alkoxykarbenového komplexu **VII** dochází při pokusu o allylovou substituci k přenosu methoxyvinylové skupiny za vzniku enoletheru **VIII**.

Práce vznikla za podpory GA ČR (grant č. 203/04/0487) a výzkumného centra LC06070: Struktura a syntetické aplikace přechodných kovů.

LITERATURA

1. Drahoňovský D., Borgo V., Dvořák D.: Tetrahedron Lett. 43, 7867 (2002).

3L-02

Pd(II)-KATALYZOVANÉ CYKLIZÁCIE AMINOALKENITOLŮ

PETER SZOLCSÁNYI*, TIBOR GRACZA, KATARÍNA HROBOŇOVÁ a NÁDA PRÓNAYOVÁ

Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika
peter.szolcsanyi@stuba.sk

Pd(II)/CuCl₂-katalyzovaná chlóracyklizácia¹ chirálních aminoalkenitolů představuje efektivní metódu přípravy nasýtených dusíkatých heterocyklov, ktoré následne slúžia ako ideálne stavebné bloky na syntézu rôznych typov alkaloidů a ich funkčných analogů² (schéma 1).

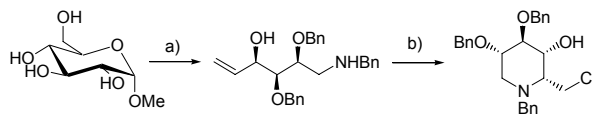


Schéma 1. a) 30 % v 5 stupňoch; b) kat. Pd(II), CuCl₂, AcONa, AcOH, 70 %

Prednáška sa bude zaoberať vývojom predmetnej metodiky a jej aplikáciou v totálnej syntéze nových derivátov 6-chlór-1-deoxy-iminohexitolů. Paralelne bude diskutovaný aj objav a vypracovanie novej syntetickej metodiky Pd(II)/CuCl₂-katalyzovanej bicyklizácie aminoalkenitolů na prípravu fúzaných nasýtených *N,O*-skeletov³.

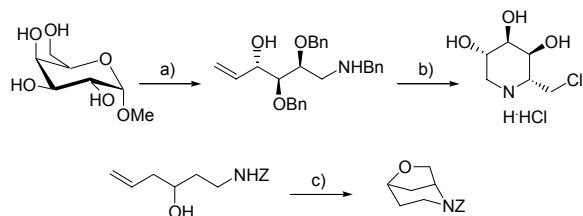


Schéma 2. a) 23 % v 5 stupňoch; b) 1. kat. Pd(II), CuCl₂, AcONa, AcOH 2. H₂/Pd-C, HCl, 50 % v 2 stupňoch; c) kat. PdCl₂, CuCl₂, AcOH, 74 %.

Táto práca bola financovaná z grantu Agentúry pre podporu vedy a výskumu SR (APVT-20-000904).

LITERATURA

1. Wada M., Aiura H., Akiba K.: *Heterocycles* 26, 929 (1987).
2. Szolcsányi P., Gracza T., Koman M., Prónayová N., Liptaj T.: *Tetrahedron: Asymmetry* 11, 2579 (2000).
3. Szolcsányi P., Gracza T.: *Chem. Commun.* 2005, 3948.

3L-03

NIKLEM KATALYZOVANÁ AKTIVACE: TVORBA VS. ŠTĚPENÍ C-C VAZEB

DAVID NEČAS^a, MATYÁŠ TURSKÝ^a a MARTIN KOTORA^{a,b}

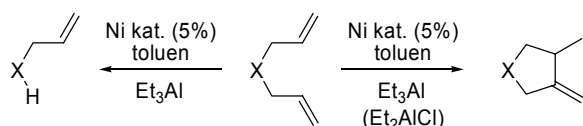
^a Katedra organické a jaderné chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Albertov 2030, 128 43 Praha 2,

^b Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemingovo náměstí 2, 166 10 Praha 6

david.necas@seznam.cz, kotora@natur.cuni.cz

V dnešní době je tvorba a štěpení vazeb C-C pomocí katalytických systémů na bázi komplexů přechodných kovů intenzivně studovanou oblastí v oboru organických syntéz¹. Alkeny mohou reagovat s komplexy přechodných kovů za vzniku organokovových sloučenin obsahujících vazbu C-kov a tyto látky většinou reagují dále za vzniku jedné či více nových vazeb C-C. Typickým zástupcem těchto reakcí jsou polymerace² či cyklizace³ dienů. Opačný proces, tj. degradace alkenů na menší celky, není příliš znám. Katalytické štěpení C-C vazeb pomocí komplexů přechodných kovů probíhá většinou pouze s látkami se silným sterickým pnutím, kde hnací silou je snížení tohoto pnutí⁴.

Tento projekt vychází z předešlého studia železem katalyzovaných cyklizací 2-chlor- α,ω -dienů⁵, při kterém jsme našli nový a snadno použitelný katalytický systém na bázi Ni. Vhodnou volbou výchozího dienu, reakčních podmínek a změnou molárních poměrů jednotlivých komponent katalytického systému je možné dosáhnout buď tvorby C-C vazeb (cyklizace), či změnit směr reakce a dosáhnout štěpení C-C vazeb (deallylace)⁶. Tento jev byl podroben zkoumání z hlediska reakčního mechanismu a vlivu struktury výchozí sloučeniny na přednostní průběh reakce.



Tento projekt byl podpořen grantem GA ČR 203/03/H140 a projektem č. 1M6138896301 Centrum pro nové antivirotika a antineoplastika MŠMT České Republiky.

LITERATURA

1. Activation of Unreactive Bonds and Organic Synthesis, *Top. Organomet. Chem.* 3, 1 (1999).

2. Chen E. Y. X., Marks T. J.: *Chem. Rev.* 100, 1391 (2000).
3. Trost B. M., Krische M. J.: *Synlett* 1 (1999).
4. Bishop K. C. III.: *Chem. Rev.* 76, 461 (1976).
5. Nečas D., Kotora M., Čísařová I.: *Eur. J. Org. Chem.* 2004, 1280.
6. Nečas D., Turský M., Kotora M.: *J. Am. Chem. Soc.* 126, 10222 (2004).

3L-04

KARBONYLATIVNÍ LAKTONIZACE KATALYZOVANÁ Pd⁰: VÝVOJ METODOLOGIE A SYNTETICKÉ APLIKACE

MILAN POUR

Centrum pro výzkum nových virostatik a antineoplastik, Katedra anorganické a organické chemie, UK-Farmaceutická fakulta, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové
milan.pour@faf.cuni.cz

Pd-katalyzované kaplinkové reakce prováděné za karbonylativních podmínek vedou k řadě užitečných produktů, jako jsou např. oxosloučeniny a deriváty karboxylových kyselin. Při použití nenasyčených substrátů s vhodně umístěným interním nukleofilem, který atakuje přechodně vzniklé acylpalladnaté species, lze takto připravit cyklické látky s potenciálně zajímavými biologickými účinky.

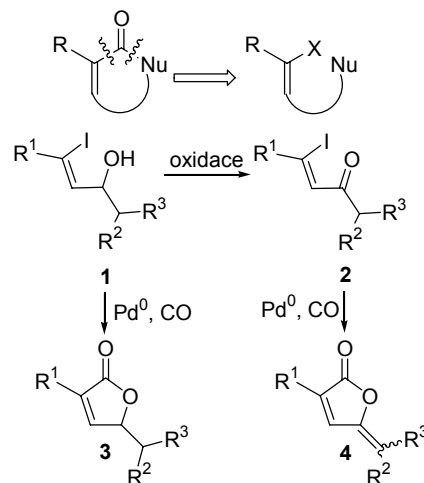


Schéma 1. Karbonylativní laktonizace některých nenasyčených prekurzorů

Např. karbonylativní laktonizace (Z)-jodalkoholů typu 1 poskytuje ve vysokých výtěžcích 3,5-disubstituované furanony 3, zatímco stejná reakce aplikovaná na β -jodenony 2 vzniklé oxidací těchto alkoholů vede ke γ -alkylidenbutenolidům 4 jako produktům.

Podporováno „Centrem pro nová antivirotika a antineoplastika“ MŠMT ČR (1M0508), GA ČR (203/04/2134) a projektem MSM0021620822 (MŠMT ČR).

LITERATURA

1. Fáková H., Pour M., Kuneš J., Šenel P.: *Tetrahedron Lett.* 46, 8137 (2005).
2. Schiller R., Pour M., Fáková H., Kuneš J., Císařová I.: *J. Org. Chem.* 69, 6761 (2004).

3L-05

VÝROBA A VÝVOJ KAPALNÝCH POLYBUTADIENŮ VE FIRMĚ SARTOMER

JINDŘICH PYTELA

Sartomer Czech s.r.o., O. Wichterleho 816, 278 52 Kralupy nad Vltavou
jindrich.pytela@sartomereurope.com

Kapalné polybutadieny, tj. nízkomolekulární polymery butadienu, jsou průmyslově vyráběné produkty, které lze zařadit do kategorie polymerních specialit. Komerčně dostupné jsou jak typy bez funkčních skupin, tak typy s funkčními skupinami umístěnými na koncích nebo podél polymerního řetězce.

Výrobní jednotka firmy Sartomer v Kralupech nad Vltavou využívá technologie aniontové polymerace butadienu. Tato technologie umožňuje přípravu dobře definovaných polymerů se specifickou mikrostrukturou, lineárním řetězcem, přesně nastavenou molární hmotností a úzkou polydisperzitou. Na polymeraci může navazovat funkcionalizace, při níž jsou na polymer zavedeny koncové hydroxylové skupiny. Následnou modifikací těchto telechelických hydroxylovaných polybutadienů se připravují další typy reaktivních polymerů, např. s koncovými isokyanátovými skupinami.

Kapalné polybutadieny nacházejí uplatnění v různých oborech. Nízkomolekulární polybutadieny bez koncových funkčních skupin se používají v gumárenském průmyslu jako koaktivátory peroxidické vulkanizace a zpracovatelské přísady. Hydroxylem a isokyanátem končené typy mohou být složkami polyurethanových systémů.

Technologie aniontové polymerace nabízí široké možnosti dalšího rozvoje sortimentu kapalných polybutadienů. Vývoj nových typů je zaměřen na nízkovinylové polybutadieny, dále na polymery s jednou koncovou hydroxylovou skupinou a na nízkomolekulární butadien-styrenové kopolymery.

3L-06

SYNTÉZA NĚKTERÝCH VÍCEJADERNÝCH NH KYSELIN S BENZO[g]CHINOXALINOVÝM A [1,2,4]TRIAZINOVÝM CYKLEM

IVETA FRYŠOVÁ a JAN SLOUKA

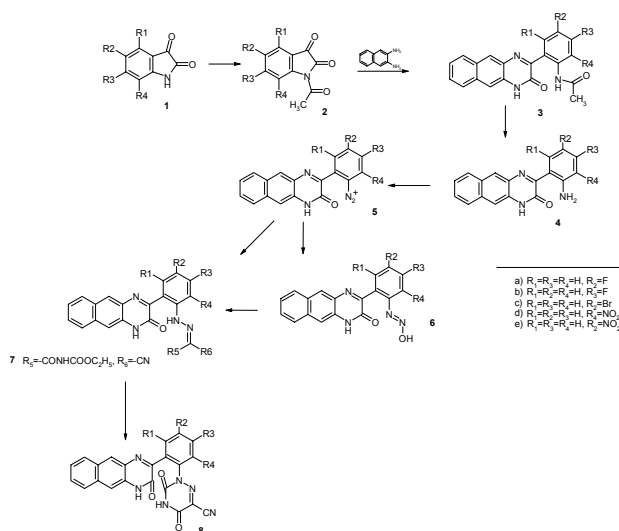
Katedra organické chemie, Univerzita Palackého,
Trž. Svobody 8, 771 46 Olomouc
frysova@orgchem.upol.cz

Vícejaderné nekondenzované heterocykly obsahující kyselé skupiny N-H mohou při interakcích s biomolekulami, jako jsou např. proteiny nebo nukleové kyseliny, zaujímat takové konformace, které jsou schopné prostřednictvím inter-

molekulárních vodíkových vazeb na dvou a více vazebných centrech zasahovat do prostorového uspořádání těchto molekul a tím ovlivňovat jejich funkci.

Syntézami sloučenin uvedeného typu se zabývá olomoucké pracoviště již řadu let. Připravena byla celá řada různých dvoujaderných¹⁻⁴ i tříjaderných⁵ sloučenin, kde úlohu heterocyklu s kyselou skupinou NH hrál 6-azauracilový cyklus. Některé vícejaderné 6-azauracily byly prokázány jako účinné inhibitory interleukinu-5 (cit.⁶).

Předmětem této práce bylo rozšířit tuto oblast o sloučeniny, které vedle 6-azauracilového cyklu budou obsahovat i cyklus benzo[g]chinoxalinový, který obsahuje kyselou skupinu NH poněkud jiného charakteru.



Tato práce vznikla za podpory grantu MSM6198959216.

LITERATURA

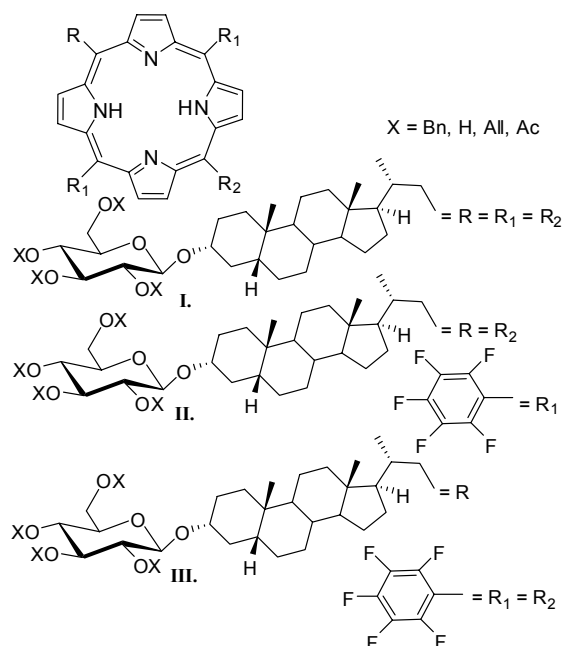
1. Hlaváč J., Slouka J., Hradil P., Lemr K.: *J. Heterocyclic Chem.* 37, 115 (2000).
2. Slouka J.: *Pharmazie* 34, 796 (1979).
3. Slouka J.: *Pharmazie* 35, 744 (1980).
4. Slouka J.: *Collect. Czech. Chem. Commun.* 44, 2438 (1979).
5. Slouka J.: *Collect. Czech. Chem. Commun.* 55, 2967 (1990).
6. Lacrampe J. F. A.: *PCT Int. Appl.* WO 0110,866; C.A. 134, 178571k (2001).

3L-07

PŘÍPRAVA STEROIDNÍCH DERIVÁTŮ PORFYRINU PRO STUDIUM JEJICH VLASTNOSTÍ V POLÁRNÍM PROSTŘEDÍ

KAREL ZELENKA^a, TOMÁŠ TRNKA^a a PAVEL DRAŠAR^{b,c}

^a Katedra organické chemie, Univerzita Karlova, Hlavova 2030, 128 40 Praha 2, ^b Ústav organické chemie a biochemie, Flemingovo náměstí 2, 166 10 Praha 6, ^c Vysoká škola chemicko-technologická, 166 28 Praha 6
zelil@post.cz



Cílem práce byla příprava *meso*-substituovaných steroidních derivátů porfyrinu. V poslední době byly připraveny porfyriny^{1–3} se zajímavými vlastnostmi^{2,3}. Tyto molekuly byly využity v elektrochemii⁴, pro membránové a biologické studie a pro studium samoskladných vlastností. V tomto příspěvku chtěli autoři demonstrovat možnosti kombinace již známých receptorů se sacharidy, které mohou sloužit jako „polární kotvy“ a modifikátory rozpustnosti. Byla vypracována metoda pro přípravu jednotlivých derivátů typů A₄(**I**), A₂B₂(**II**), A₃B(**III**). Veškeré podrobnosti o jejich přípravě budou předmětem tohoto sdělení. Jejich vlastnosti a potenciál využití jsou v současné době předmětem studií.

Práce byla podporována projektem MSM 1131 00001.

LITERATURA

1. Zelenka K., Trnka T., Tišlerová I., Král V., Dukh M., Drašar P.: *Collect. Czech. Chem. Commun.* 69 (5), 1149 (2004).
2. Dukh M., Černý I., Urbanský M., Pouzar V., Král V., Drašar P.: *Czech Pat.* 290491, *Czech Pat. Appl.* 3098 (1999).
3. Dukh M., Šaman D., Lang K., Pouzar V., Černý I., Drašar P., Král V.: *Org. Biomol. Chem.* 1, 3458 (2003).
4. Dukh M., Černý I., Pouzar V., Král V., Berek J., Drašar P., in: *US-CZ Workshop on Electrochemical Sensors*, Abstract Book p. 5, Czech Chemical Society, Prague 2001

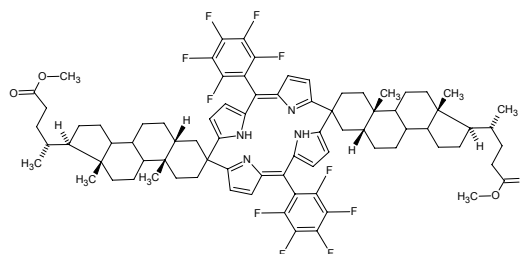
3L-08 SYNTÉZA SPIROANELOVANÉHO OLIGO-PYRROLOVÉHO MACROCYKLU ODVOZENÉHO OD LITHOCHOLOVÉ KYSELINY

PETRA KLÍMKOVÁ^a, NGUYEN THI THU HUONG^a, JANA ŠAULIOVÁ^a a PAVEL DRAŠAR^b

^a Katedra chemie, PŘF UJEP v Ústí nad Labem, České mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem, ^b Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6, nguyen@sci.ujep.cz, Pavel.Drasar@vscht.cz.

U systémů tetrapyrrolového makrocyklu se spiroanelovaným steroidním substituentem lze očekávat nové a velmi cenné vlastnosti, např. komplexotvorné a případně i schopnost selektivní molekulární interakce, zajímavou fluorescenční aktivitu a schopnost podílet se v elektronové výměně v excitovaných tripletových stavech. Tyto molekuly také mohou mj. sloužit jako selektivní molekulární receptor na organické i anorganické sloučeniny, dále by se daly využít např. v oblastech molekulového rozpoznání, k výstavbě iontových kanálů pro přenos iontů a nebo ve fotodynamické terapii (PDT). Příbuzný konjugát steroidu s porfyrinem je také mj. používán na vázání sacharidu v protickém prostředí¹.

Práce předkládá syntézu spiroanelovaného tetrapyrrolového derivátu lithocholové kyseliny. Syntéza vychází z 3-ketoderivátu získaného z methylesteru lithocholové kyseliny², který byl cyklizován kondenzací dipyrlylmetanového meziprojektu³ s pentafluorbenzaldehydem. Pro zrychlení mezikroku byl využíván mikrovlnný reaktor.



Produkt je charakterizován ¹H, ¹³C a ¹⁹F-NMR a MS spektry.

Práce na projektu byla financována grantem GA ČR 203/06/0006.

LITERATURA

1. Dukh M., Šaman D., Lang K., Pouzar V., Černý I., Drašar P., Král V.: *Org. Biomol. Chem.* 1, 3458 (2003).
2. Pouzar V., Slavíková T., Černý I.: *Steroids* 63, 454 (1998).
3. Koivukorpi J., Valkonen A., Kolehmainen E.: *J. Mol. Struct.* 693, 81 (2004).

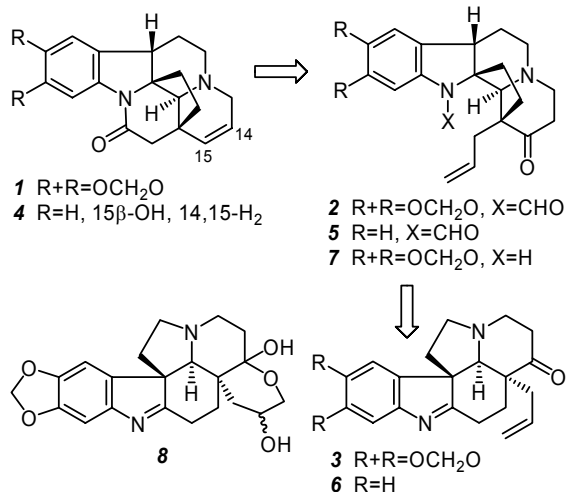
3L-09

K TOTÁLNÍ SYNTÉZE SCHIZOZYGINU:
NEOČEKÁVANÝ OXIDATIVNÍ PŘESMYK
SEKOSCHIZOZYGANOVÉHO SKELETU

TOMÁŠ PILARČÍK a JOSEF HÁJÍČEK*

Zentiva, a.s., R&D divize, U Kabelovny 130, 102 37 Praha 10
josef.hajicek@zentiva.cz

Schizozysin (*1*) je hlavní alkaloid afrického keře *Schizozygia caffaeoides* Boj. (Baill.) (Apocynaceae). Náš přístup k syntéze (\pm)-*1* je založen na předpokladu, že v klíčovém stupni indolenin poskytne **3** reduktivním přesmykem *N*-formylindolin **2**. V modelové studii jsme syntetizovali 15 β -hydroxystrempeliopin (**4**) z indoleninu **6** přes formamid **5** a demonstrovali tak, že 15-karbonyl jako prekursor dvojně vazby je kompatibilní s podmínkami této strategie¹.



Reduktivní přesmyk indoleninu **3** (Zn/Cu(II), AcOH), připraveného v sérii stupňů z dostupných chemikálií, poskytl ve vysokém výtěžku indolin **7** (66 %). Jak **7**, tak formamid **2** se ukázaly být mnohem citlivější k oxidaci než **5**, což zabránilo ozonolytickému uzávěru laktamového kruhu. Bylo zkoušeno množství oxidantů pro štěpení allylové dvojně vazby. Překvapivé byly reakce indolinu **7** (ale ne formamidu **2**) s ADMixem- α a Lemieuxova-Johnsonova oxidace, které poskytly vysoký výtěžek indoleninu **3**, resp. příbuzný indolenin **8** (13 %). Obdobně byl při reakci **7** s 2-nitrobenzen-sulfochloridem a DIPEA získán místo sulfonamidu indolenin **3** v 96% výtěžku.

LITERATURA

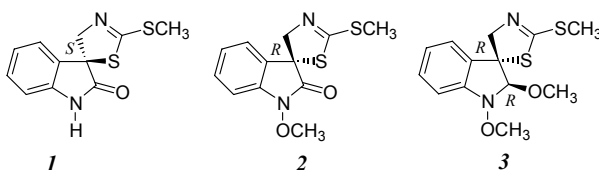
- Pilarčík T., Havlíček J., Hájiček J.: *Tetrahedron Lett.* **46**, 7909 (2005).

3L-10

SYNTÉZA, ABSOLÚTNÁ KONFIGURÁCIA
A PROTINÁDOROVÁ AKTIVITA SPIRO-
INDOLÍNŮVÝCH FYTOALEXÍNŮV A ICH ANALÓGOVPETER KUTSCHY^{a*}, ZUZANA ČURILLOVÁ^a, ANETA
SALAYOVÁ^a, KENJI MONDE^b, MOUSSA KHLIFA^a,
MARTINA PILÁTOVÁ^c a JÁN MOJŽIŠ^c

^a Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesova 11, 041 67 Košice, ^b Hokkaido University, Graduate School of Science, Division of Biological Sciences, Kita-Ku, Sapporo 001-0021, Japan, ^c Ústav farmakológie, Lekárska fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, Trieda SNP 1, 040 66 Košice
peter.kutschy@upjs.sk

Spiroindolínové fytoalexíny (*S*)-(-)-spirobrasinín (*1*), (*R*)-(+)-1-metoxyspirobrasinín (**2**) a (2*R*,3*R*)-(-)-1-metoxyspirobrasinolmetyléter (**3**) izolované z Japonskej reďkovky (*Raphanus sativus*), čeľaď Krížokveté (*Cruciferae*, syn. *Brassicaceae*) predstavujú štruktúrne neobvyklé alkaloidy obsahujúce spiroindolín[3,5]tiazolínový skelet¹. Syntéza týchto prírodných látok z izatínu² a 1-metoxylindol-3-karbaldehydu^{3,4} ako základných východiskových látok umožnila štúdium ich



absolútnej konfigurácie a protinádorovej aktivity. Skúmaná bola tiež syntéza a biologická aktivita niektorých analógov⁵ obsahujúcich aminoskupinu namiesto 2-metoxy alebo metylsulfanylovej skupiny.

Táto práca vznikla s podporou grantov MVT S Jap/Slov/UPJŠ a VEGA, č. 1/3553/06.

LITERATÚRA

- Pedras M. S. C., Okanga F. I., Zaharia I. L., Khan A. Q.: *Phytochemistry* **53**, 161 (2000).
- Suchý M., Kutschy P., Takasugi M., Goto H., Harada N., Monde K., Dzurilla M., Balentová E.: *J. Org. Chem.* **66**, 3940 (2001).
- Kutschy P., Suchý M., Monde K., Harada N., Marušková R., Čurillová Z., Dzurilla M., Miklošová M., Mezencev R., Mojžiš J.: *Tetrahedron Lett.* **43**, 9489 (2002).
- Monde K., Taniguchi T., Miura N., Kutschy P., Čurillová Z., Pilátová M., Mojžiš J.: *Bioorg. Med. Chem.* **13**, 5206 (2005).
- Kutschy P., Čurillová Z., Salayová A., Khlifa M., Pilátová M., Mojžiš J.: nepublikované výsledky.

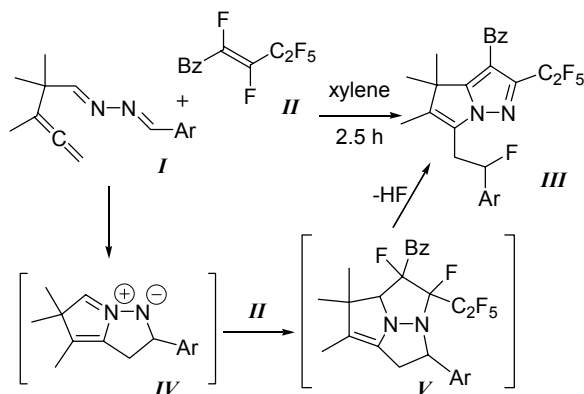
3L-11

INTRA-INTERMOLECULAR CRISS-CROSS
CYCLOADDITIONS OF NONSYMMETRICAL ALLE-
NYLAZINES WITH FLUORINATED ENONESTANISLAV MAN^a, MAREK NEČAS^b, JEAN-
PHILIPPE BOUILLON^c, CHARLES PORTELLA^d,
and MILAN POTÁČEK^a

^a Department of Organic Chemistry and ^b Inorganic Chemistry, Masaryk University of Brno, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Czech Republic; ^c Sciences et Méthodes Séparatives – EA 3233, Université de Rouen. IRCOF. F-76821 Mont-Saint-Aignan Cedex, France; ^d UMR 6519 “Réactions Sélectives et Applications”. CNRS - Université de Reims Champagne-Ardenne. B.P. 1039, 51687 Reims Cedex 2, France sten@chemi.muni.cz

Criss-cross cycloadditions¹ are well known for a rather long time as a special case of [2+3], respectively 1,3-dipolar cycloadditions. Based on our knowledge of combined intra-intermolecular criss-cross cycloadditions of nonsymmetrical allenylazines **I** with phenylisocyanate² and alkynes³, we studied this reaction with a new fluorinated dipolarophile **II**.

We found formation of a new unexpected compound **III** as the main product of the azine **I** reaction with enone **II** in boiling xylene⁴. We assume that the first step of this reaction is intramolecular formation of dipole **IV** and its subsequent reaction with enone **II** leading to the intermediate **V**. The intermediate **V** is unstable and undergoes further transformations to product **III** connected with elimination of HF, fluorine atom shift, and cleavage of carbon-nitrogen bond.



Supported by European Commission (Marie Curie Training Site HPMT-CT-2000-00112).

REFERENCES

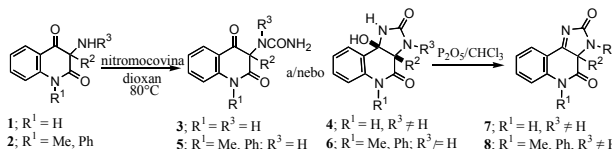
- Bailey J. R., McPherson A. T.: J. Am. Chem. Soc. 39, 1322 (1917).
- Man S., Kulhánek P., Potáček M., Nečas M.: Tetrahedron Lett. 43, 6431 (2002).
- Man S., Bouillon J.-P., Nečas M., Potáček M.: Tetrahedron Lett. 45, 9419 (2004).
- Man S., Nečas M., Bouillon J.-P., Portella C., Potáček M.: Eur. J. Org. Chem., in press (2006).

3L-12

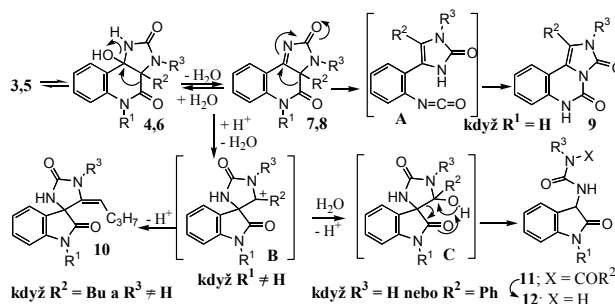
PŘESMYKY IMIDAZO[4,5-*c*]CHINOLIN-2,4-DIONŮANTONÍN KLÁSEK^a, ANTONÍN LYČKA^b a MICHAL
HOLČAPEK^c

^a Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati, 762 72 Zlín,
^b Výzkumný ústav organických syntéz a.s., Rybíví 296, 532 18
Pardubice 20, ^c Fakulta chemicko-technologická, Univerzita
Pardubice, 532 10 Pardubice
antonin.lycka@vuosas.cz

Nedávno jsme popsali produkty reakce 3-amino-1*H*,3*H*-chinolin-2,4-dionů **1** a **2** s močovinou ve vroucí kyselině octové^{1,2}. V závislosti na charakteru substituce ve výchozích látkách **1** byly získány čtyři rozdílné typy produktů přesmyku. K vyjasnění reakčních mechanismů těchto přeměn jsme se rozhodli připravit imidazo[4,5-*c*]chinolin-2,4-diony jako předpokládané reakční intermediáty. Reakce **1** s nitromočovinou v dioxanu poskytla sloučeniny **3** a/nebo **4** (cit.³), látky **5** a **6** byly získány analogickou reakcí **2** (cit.⁴). Látky **7** a **8** vznikly dehydratací **4** a **6**.



Sloučeniny **3-8** podléhaly přesmyku ve vroucí kyselině octové a poskytly látky **9-12**, které jsou identické s látkami připravenými reakcí **1** a **2** s močovinou. Byly navrženy dvě rozdílné reakční cesty, které závisejí na charakteru substituentu R¹:



Budou rovněž prezentovány konstituce reakčních produktů vzniklých přesmykem látek **4** substituovaných na dusíku N-1.

LITERATURA

- Klásek A., Kořístek K., Lyčka, A., Holčapek M.: Tetrahedron 59, 1283 (2003).
- Klásek A., Kořístek K., Lyčka A., Holčapek M.: Tetrahedron 59, 5279 (2003).
- Klásek A., Lyčka A., Holčapek M., Hoza I.: Tetrahedron 60, 9953 (2004).
- Klásek A., Lyčka A., Holčapek M., Hoza I.: J. Heterocycl. Chem. 43, 203 (2006).

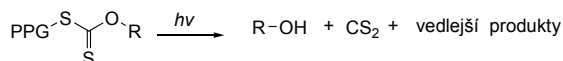
3L-13 DITHIOKARBONÁT JAKO LINKER PRO FOTOLABILNÍ CHRÁNICÍ SKUPINY

NELA PAVLÍKOVÁ a PETR KLÁN*

*Katedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy university, Kotlářská 2, 611 37 Brno
klan@sci.muni.cz*

Použití fotochemicky odstranitelných chránicích skupin (PPG – photoremovable protecting group) je jednou z možných cest, jak zabránit chemickým reakcím vybraných funkčních skupin. Výhodou tohoto postupu je skutečnost, že k odstranění PPG a uvolnění chráněné skupiny využíváme pouze UV/vis záření bez přítomnosti dalších činidel.

Předmětem našeho zkoumání byla možnost zapojit dithiokarbamat (xantát) jako linker pro chránění alifatických alkoholů a fenolů. Xantát, stabilní termicky i v kyselém prostředí, byl využit pro tři různé fotolabilní chránicí skupiny: 2,5-dimethylfenacylovou¹, 2-nitroben-zylovou a 2-(2-nitrofenyl)propylkarbonylovou². Bylo zjištěno, že hydroxysloučeniny jsou uvolňovány s kvantovými výtěžky, které odpovídají charakteru použité PPG, a s vysokými chemickými výtěžky.



LITERATURA

1. Literak J., Wirz J., Klan P.: *Photochem. Photobiol. Sci.* 4, 43 (2005).
2. Givens R. S., Conrad P. G., Yousef A. L., Lee J.-I., v: *CRC Handbook of Organic Photochemistry and Photobiology*, (Horspool W. M., Lenci, F., ed.), 1–46. Boca Raton, 2004.

3L-14 VYUŽITIE TEORETICKÝCH METÓD PRI VÝVOJI NOVÝCH LIEČIV

MILAN REMKO

*Katedra farmaceutickej chémie, Farmaceutická fakulta UK, Odbojárov 10, 832 32 Bratislava, Slovenská republika
remko@fpharm.uniba.sk*

Metódy počítačovej chémie a chemickej informatiky^{1,2} sú v súčasnosti integrálnou súčasťou racionálneho projektovania a vývoja nových liečiv. V odbornej literatúre sa takéto postupy označujú aj pojmom „počítačovo podporované projektovanie liečiv“ (angl. CADD).

V prednáške sa budem zaoberať základnými metódami molekulového modelovania a chemickej informatiky, ktoré sa používajú pri teoretickom štúdiu štruktúry a vlastností liečiv. Ich aplikácie v oblasti výskumu liečiv budem demonštrovať na príkladoch vlastných teoretických výpočtov dôležitých fyzikálnochemických parametrov (štruktúra, reaktivita, lipofilita, solubilita, pK_a, absorpcia...) antihypertenzív^{3–7}, biologic-

ky aktívnych sulfónamidov^{8–10} a antirobotík^{11,12}. V súčasnosti sa metódy molekulového modelovania používajú pri všetkých štádiách vývoja liečiv v rámci racionálneho výskumu a vývoja nových liečiv^{1,2}. Skôr ako sa začne syntéza nových biologicky aktívnych zlúčenín je preto nevyhnutné teoreticky určiť fyzikálnochemické vlastnosti, ktoré sú dôležité pre účinok a biologickú dostupnosť liečiva. Tým sa má zabrániť príprave takých zlúčenín, ktorých výpočty predpovedali nepriaznivé biofarmaceutické charakteristiky.

Táto práca vznikla s podporou grantu APVT č. 51-034504.

LITERATÚRA

1. Remko M.: *Molekulové modelovanie. Princípy a aplikácie*, s. 242. SAP Bratislava 2000.
2. Remko M.: *Základy medicínskej a farmaceutickej chémie*, s. 392. SAP Bratislava 2005.
3. Remko M., Walsh O. A., Richards W. G.: *Phys. Chem. Chem. Phys.* 3, 901 (2001).
4. Remko M., Walsh O. A., Richards W. G.: *Chem. Phys. Lett.* 336, 156 (2001).
5. Remko M., Walsh O. A., Richards W. G.: *J. Phys. Chem., A* 105, 6926 (2001).
6. Remko M., Van Duijnen P. Th., Swart M.: *Struct. Chem.* 14, 271 (2003).
7. Remko M., Swart M., Bickelhaupt F. M.: *Bioorg. Med. Chem.* 14, 1715 (2006).
8. Remko M.: *J. Phys. Chem., A* 107, 720 (2003).
9. Remko M., Garaj V.: *Mol. Phys.* 101, 2357 (2003).
10. Remko M., von der Lieth C.-W.: *Bioorg. Med. Chem.* 12, 5395 (2004).
11. Remko M., von der Lieth, C.-W.: *J. Chem. Inf. Modeling*, v tisku.
12. Remko M., von der Lieth C.-W., *J. Chem. Inf. Modeling*, v tisku.

3L-15 SYNTÉZA NOVÝCH KVARTERNÍCH BISPYRIDINIOVÝCH SLOUČENIN A JEJICH SCHOPNOST *in vitro* REAKTIVOVAT ORGANO- FOSFÁTY INHIBOVANOU ACETYLCHOLINESTERASU

**KAMIL MUSÍLEK^a, KAMIL KUČA^b, DANIEL JUN^b,
VLASTIMIL DOHNAL^c a MARTIN DOLEŽAL^a**

*^aKatedra farmaceutickej chémie a kontroly liečiv, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové Univerzity Karlovy v Praze, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, ^bKatedra toxikologie, Fakulta vojenského zdravotníctví Univerzity obrany, Třebešská 1575, 500 01 Hradec Králové, ^cÚstav technologie potravin, Mendelova zemědělská a lesnická univerzita v Brně, Zemědělská 1, 613 00 Brno
musilekk@faf.cuni.cz, kucakam@pmfhk.cz*

Pesticidy (např. parathion, chlorpyrifos, diazinon) stejně jako nervově paralytické látky (např. soman, sarin, tabun, VX) patří do skupiny organofosfátů. Tyto látky ireverzibilně inhibují enzym acetylcholinesterasu (AChE). Jejich účinek je založen na fosforylaci aktivního místa enzymu, kde se kovalentně váží na serinový hydroxyl. Reaktivátory AChE štěpí

vazbu enzym-inhibitor a slouží jako antidota při otravách organofosfáty. Jejich účinek je specifický pro jednotlivou strukturu inhibitoru a žádná dosud známá látka není schopna efektivně reaktivovat strukturně široké spektrum organofosforových inhibitorů.

Byly připraveny nové reaktivátory AChE modifikací známých syntetických postupů. Jejich aktivita byla testována *in vitro* na organofosfáty inhibovanou AChE a porovnána s aktivitami známých reaktivátorů. Z výsledků *in vitro* měření byl vyvozen vztah mezi strukturou a aktivitou. Reaktiváční účinnost závisí na přítomnosti a množství kvarterních dusíků, konstituci a délce spojovacího řetězce a poloze a počtu hydroxyiminomethylových skupin v molekule.

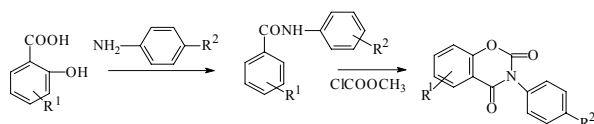
3L-16

CÍLENÝ VÝZKUM ANTITUBERKULOTIK: V ACYLOVÉ ČÁSTI HALOGENOVANÉ N-(4-ALKYLFENYL)SALICYLAMIDY A ODPOVÍDAJÍCÍ 3-(4-ALKYLFENYL)BENZOXAZIN-2,4(3H)-DIONY

JOSEF MATYK^a, KAREL WAISSER^a a JARMILA KAUSTOVÁ^b

^a Katedra anorganické a organické chemie, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Univerzita Karlova v Praze, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, ^b Zdravotní ústav se sídlem v Ostravě, Partyzánské náměstí 7, 702 00 Ostrava
matyk@faf.cuni.cz, jarmila.kaustova.zuova.cz

Na základě QSAR analýzy uveřejněné v předchozích sděleních^{1,2} jsme připravili skupinu 24 nových N-(4-alkylfenyl)salicylamidů a 21 3-(4-alkylfenyl)benzoxazin-2,4(3H)-dionů.



Látky byly hodnoceny na *M. tuberculosis*, *M. avium* a dva kmeny *M. kansasii*. Vztahy mezi strukturou a antimykobakteriální aktivitou byly hodnoceny metodou podle Free a Wilsona. Nejúčinnější 4-chlor-N-(4-propylfenyl)salicylamid a 5-chlor-N-(4-propylfenyl)salicylamid byly zvoleny pro další biologická hodnocení jako úvod k preklinickým testům.

Tato práce je podporována výzkumným záměrem MSM0021620822.

LITERATURA

1. Waisser K., Bureš O., Holý P., Kuneš J., Oswald R., Jirásková L., Pour M., Klimešová V., Kubicová L., Kaustová J.: Arch. Pharm. 336, 53 (2003).
2. Waisser K., Bureš O., Holý P., Kuneš J., Oswald R., Jirásková L., Pour M., Palát K., Kaustová J., Danse H.-M., Möllmann U.: Pharmazie 58, 83 (2003).

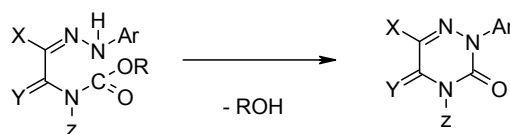
3L-17

SYNTEZA KONDENZOVANÝCH 1,2,4-TRIAZINŮ METODOU CYKLIZACE HYDRAZONO KARBAMÁTŮ

JAKUB STÝSKALA a JAN SLOUKA

Katedra organické chemie PřF UP Olomouc, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc
styskala@orgchem.upol.cz

Podle způsobu uzávěru 1,2,4-triazinového cyklu jsou známé téměř všechny typy z hlediska tvorby nových vazeb. Jednou z možností je i cyklizace vhodných karbamátů substituovaných v sousední poloze azo, resp. tautomerní hydrazonovou skupinou, kde dochází k uzávěru mezi atomy 2 a 3.



Je to metoda, kterou byly získány jak nekondenzované 1,2,4-triaziny (př. X = CN, Y = O, Z = H)^{1,2}, tak i 1,2,4-triaziny kondenzované (př. X+Y = isocyklus nebo heterocyklus)³⁻⁶. Výchozí hydrazono-karbamáty se nejpohodlněji získávají kopulací diazoniových solí s karbamáty obsahujícími reaktivní methylenovou skupinu nebo N-arylkarbamáty, kdy vzniklé azosloučeniny jsou s hydrazony tautomerní. Dle převládající azo, resp. tautomerní hydrazono formy se tyto cyklokondenzační reakce provádějí buď termicky nebo v alkalickém či kyselém prostředí.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM6198959216.

LITERATURA

1. Hadáček J., Slouka J., v knize: *Chemie der Monocyclischen Asymmetrischen Triazine*, I und II Teil. UP J. E. Purkyně, Brno 1966.
2. Neunhoeffer H., v knize: *Chemistry of 1,2,3-triazines and 1,2,4-triazines, tetrazines and pentazines*, Chemistry of Heterocyclic compounds, vol. 33. John Wiley, New York 1978.
3. Slouka J.: Tetrahedron 37, 4007 (1968).
4. Slouka J.: Pharmazie 42, 413 (1987).
5. Stýskala J., Slouka J., Hejsek M., Bekárek V.: Collect. Czech. Chem. Commun. 62, 1754 (1997).
6. Stýskala J., Lyčka A., Slouka J.: J. Heterocyclic Chem. 39, 1305 (2002).

3L-18

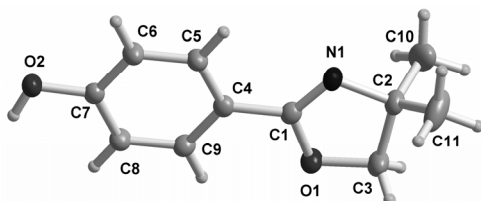
ŠTRUKTÚRA 2-(4-HYDROXYFENYL)-4,4-DIMETYL-2-OXAZOLÍNU

VRATISLAV LANGER^a, DALMA GYEPESOVÁ^b, EVA SCHOLTZOVÁ^b, JOZEF LUSTOŇ^c, JURAJ KRONEK^c a MIROSLAV KOOŠ^d

^aInorganic Environmental Chemistry, Department of Chemical and Biological Engineering, Chalmers University of Technology, SE-41296 Göteborg, ^bÚstav anorganickej chémie SAV, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, ^cÚstav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, ^dChemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava

Cyklické iminoétery, medzi ktoré patria aj 2-oxazolíny, sú schopné podieľať sa na viacerých typoch polymerizačných reakcií. Predmetom nášho záujmu sú hydroxyfenyl-2-oxazolíny, zlúčeniny, obsahujúce v molekule 2-oxazolín a fenolovú funkčnú skupinu, ktorá môže interagovať s iónovými časticami pri raste reťazca. Syntézy týchto zlúčenín sú známe, avšak, ich kryštalová štruktúra nebola doteraz publikovaná. Z tejto skupiny zlúčenín sa vyriešila kryštalová a elektrónová štruktúra troch izomérnych foriem hydroxyfenyl-2-oxazolínu: 2-(2-hydroxyfenyl)-2-oxazolínu, 2-(3-hydroxyfenyl)-2-oxazolínu a 2-(4-hydroxyfenyl)-2-oxazolínu¹. Všetky tieto zlúčeniny polymerizujú veľmi rýchlo okolo 200 °C. V pokračujúcom výskume sa syntetizoval 2-(4-hydroxyfenyl)-4,4-dimetyl-2-oxazolín *I* a vyriešila sa jeho kryštalová štruktúra. Polymerizácia tejto zlúčeniny je však obmedzená².

V kryštalovej štruktúre *I*, silné intermolekulové O—H...N vodíkové väzby spolu so slabými intramolekulovými C—H...O väzbami vedú k tvorbe nekonečných reťazcov molekúl, ktoré sú prepojené slabými intermolekulovými C—H...O vodíkovými väzbami.



Oxazolínový kruh sa významne odchyľuje od roviny (deformácia na väzbe C2—C3) a má ⁴T₃(³T₂) konformáciu, mierne posunutú k ⁴E (³E) konformácii. Predpokladá sa a aj na základe DFT výpočtov na B3LYP/6-31G** úrovni, že 4,4-dimetyl substitúcia je zodpovedná za neplanaritu kruhu a s tým súvisiacu nízku reaktivitu zlúčeniny *I* v kationovej polymerizácii.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA, SAV č. 2/6178/26 a 2/6117/26.

LITERATÚRA

- Langer V., Kooš M., Gyepesová D., Sládkovičová M., Lustoň J., Kronek J.: Acta Cryst. C61, o602 (2005).
- Lustoň J., Kronek J., Böhme F.: J. Polym. Sci.-Polym. 44, 343 (2006).

3L-19

Doc. Dr. Ing. KAREL BLÁHA, CSc., 1926–1987

JAROSLAV VIČAR

Ústav lekárskej chémie a biochémie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého, 77515 Olomouc
jarvic@unw.upol.cz

Karel Bláha, jeden z nejdůležitějších poválečných českých chemiků se narodil v roce 1926 ve Vejvanově v okrese Rokycany. Po maturitě na gymnasiu v Plzni studoval na Vysokém učení chemicko-technologického inženýrství v Praze, které absolvoval v roce 1949; o rok později získal doktorát technických věd. Deset let působil v Laboratorii heterocyklických sloučenin VŠCHT vedené Rudolfem Lukešem, kde se zabýval hlavně chemií alkaloidů. V roce 1960 se jeho pozice na vysoké škole z politických důvodů stala neúnosnou a Karel Bláha přešel spolu s několika dalšími v podobné situaci do Ústavu organické chemie a biochemie ČSAV. Tam působil ve skupině chemie peptidů vedené jedním z významných světových představitelů tohoto oboru Josefem Rudingem. Karel Bláha přináší do skupiny zaměřené na syntézu hluboké znalosti fyzikálních metod, které tehdy procházely svým zlatým obdobím. Rozhodujícím způsobem u nás přispěl k zavedení a rozšíření chiroptických metod, což souviselo s jeho hlubokým zájmem o stereochemii. Během pobytu na Polytechnic Institute of Brooklyn, USA, se pod vedením Murray Goodmana zabývá metodami studia konformace peptidů a bílkovin. V roce 1972 dokončuje a odevzdává doktorskou disertaci, další řízení je však zastaveno. V roce 1982 se v Praze konal pod jeho předsednictvím 12. sjezd Evropské peptidové společnosti. Tato perfektně zorganizovaná a úspěšná událost byla příležitostí pro světové peptidové kapacity vyjádřit Karlu Bláhovi (již desátý rok nemohl cestovat do ciziny) podporu a úctu. Jeho postavení se zlepšuje až během uvolnění osmdesátých let – v roce 1982 se stává vedoucím oddělení organické chemie na ÚOChAB a později se mu opět otevírá možnost cestovat. Naposledy jsem s ním hovořil na oslavě jeho šedesátin. Byl plný naděje a dalších plánů – vše se zdálo být na dosah a jeho celoživotní neuvěřitelná práce se mohla nyní konečně zúročit na pozicích, kam již dávno patřil. Bohužel, osud mu vyměřil už jen jeden rok.

Karel Bláha byl jedním z vědců obdařených schopností zaujmout přednáškou a byl proto velmi žádaný o proslovy na nejrůznějších sjezdech a konferencích. V roce 1969 se habilitoval na Lékařské fakultě Univerzity Palackého (u svého přítele profesora Františka Šantavého) pro obor Organická chemie a biochemie a pravidelně potom jezdil do Olomouce přednášet. Další oblastí, ve které se projevila erudice Karla Bláhy, byla jeho činnost redaktorská a názvoslovná. Od roku 1957 byl redaktorem *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*, od roku 1962 šéfredaktorem až do svého odchodu. Je nepochybně jedním z těch, kteří mají rozhodující zásluhu na minulém i současném renomé tohoto časopisu. Od roku 1963 pracoval jako předseda komise pro nomenklaturu organické chemie Československé společnosti chemické, od roku 1969 jako člen komise pro nomenklaturu organické chemie IUPAC (1976–78 místopředseda). Ve výčtu činností nelze zapomenout jeho obětavou práci v Československé společnosti chemické (1978 místopředseda, dále šéfredaktor

Bulletinu), jmenovitě v tehdejší Pražské pobočce a ve skupině organické chemie, a při pořádání „Liblické“ konference *Pokroky v organické a farmaceutické chemii*. Je autorem nebo spoluautorem více než 200 publikací, 70 přehledných referátů

a 6 monografií. Karel Bláha vykonal pro československou organickou chemii opravdu hodně. Snad si mohu dovolit říci za ostatní, že pro nás, jeho spolupracovníky a žáky, zůstává vzorem vědce a člověka, jakých není mnoho.

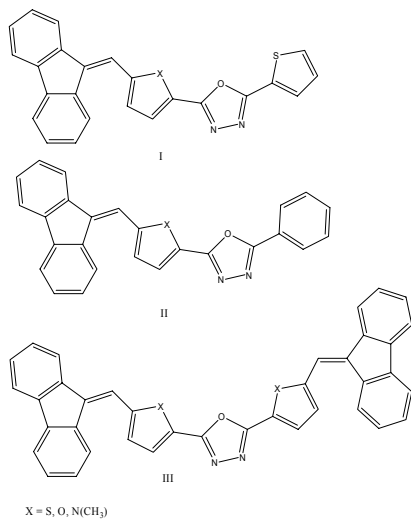
3P-01**MOLECULAR ORDERED π -CONJUGATED OLIGOMERS NETWORKS: SYNTHESIS OF FLUORENE-OXADIAZOLE CONTAINING OLIGOMERE****ANITA ANDICSOVÁ, MARTIN ŠTEFKO, and DANIEL VĚGH**

*Institute of organic chemistry, catalysis and petrochemistry, Slovak University of Technology, Radlinského street 9, 812 37 Bratislava, Slovakia
anitka.andics@post.sk*

Fluorene containing oligomere are an important class of electroactive and photoactive materials. This compounds are exceptional electrooptical properties for applications in polymer light emitting diodes (PLEDs)¹.

In this letter, a series of oligomers (I–III) consisting of electron-rich fluorene, thiophene, furane and pyrrole unit and electron-deficient oxadiazole unit with different unit lengths were successfully synthesized.

Generally, the oligomers synthesis involves three procedures, for example, the synthesis of the series of new fluorelidene heterocyclic monomers, functionalisation (-CHO, CN, tetrazol..) and transformation of tetrazoles to oxadiazole unit by Huisgen reaction².



The synthesis, spectral measurements of this compounds (I, II, III) are presented.

This work was financially supported by grants from the Ministry of Education of the Slovak Republic No. 1/1379/04 and the Science and Technology Assistance Agency (No. APVT-20- 007304).

REFERENCES

1. Leclers M.: J. Polym. Sci., Part A: Polym. Chem. 39, 2867 (2001).
2. Huisgen R., Axen Ch., Seidl H.: J. Chem. Soc. 98, 2966 (1965).

3P-02**THE COMPARISON OF PHOTOCATALYTIC ACTIVITY OF TiO₂ AND Fe(III) SALT DURING SULFA-DRUGS PHOTODEGRADATION****WOJCIECH BARAN**

*Department of General and Analytical Chemistry, Medical University of Silesia, 41-200 Sosnowiec, Jagiellońska 4, Poland
bw.xxl@poczta.fm*

Sulfonamides (sulfa-drugs) belong to hazardous for environment substances^{1,2} and are resistant to biodegradation^{2,3}. The degradation of sulfonamides in the environment is possibility of photocatalytic advanced oxidation methods³.

The aim of the study was assessment of photochemical activity of selected catalysts in photocatalytic degradation of sulfanilamide process.

The investigated processes of sulfonamide photodegradation were conducted in aqueous solutions in the presence of selected catalysts (TiO₂, TiO₂/FeCl₃, FeCl₃, Fe(NO₃)₃, Fe₂(SO₄)₃ and FeSO₄) during illumination (0–60 min) with UV radiation (λ_{max} 366 nm). The used concentration of all catalysts experimental was determined as optimal. In the samples investigated concentrations of sulfanilamide (HPLC-UV method) were determined. The activity of photocatalysts investigated was evaluated on the base photodegradation rate of sulfanilamide.

It was shown, that in the case of all photocatalysts applied, the sulfanilamide undergo the photodegradation, however in the presence of FeSO₄ process investigated is very slow. Practically, in this case Fe(II) ion do not have the photocatalytic properties.

The photocatalytic activity characteristic of substances investigated can be illustrated by series:

FeCl₃ \cong Fe(NO₃)₃ > TiO₂/FeCl₃ > TiO₂ > Fe₂(SO₄)₃ >>> FeSO₄

On the base of results obtained FeCl₃ was found as the best catalyst of photodegradation sulfonamides.

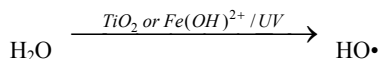
REFERENCES

1. Halling-Sørensen B., Nors Nilesen S., Lanzky P. F., Ingerslev F., Holten Lützhøft H. C, Jørgensen S. E.: Chemosphere 36, 357 (1998).
2. Kümmerer K., ed.: *Pharmaceuticals in the Environment. Sources, Fate, Effects and Risks*. Springer-Verlag, Heidelberg 2001.
3. Baran W., Sochacka J., Wardas W.: Chemosphere, in press.

3P-03**THE CHEMICAL MECHANISM OF SULFA-DRUGS PHOTOCATALYTIC DEGRADATION WITH TiO₂/UV AND FeCl₃/UV****WOJCIECH BARAN and JOLANTA SOCHACKA**

*Department of General and Analytical Chemistry, Silesian Medical University of Silesia, 41-200 Sosnowiec, Jagiellońska 4, Poland
bw.xxl@poczta.fm*

Sulfonamides (used in human and veterinary medicine) undergo photocatalytic degradation¹. The photocatalytic degradation of organic compounds, ipso facto sulfonamides, may proceed with HO• radicals generated in the presence of TiO₂ or Fe(OH)²⁺ in water solutions during UV exposure^{2,3}



The aim of the study was to identify intermediate products of the photocatalytic degradation of five sulfa-drugs (sulfanilamide, sulfacetamide, sulfamethoxazole, sulfadiazine and sulfathiazole).

The investigated processes of sulfonamides photodegradation were conducted in aqueous solutions in the presence of selected catalysts (FeCl₃, TiO₂ or TiO₂/FeCl₃) during illumination with UV radiation (λ_{max} 366 nm). The intermediate products were detected using HPLC-MS method. The change of concentration of intermediate products during illumination was determined using HPLC-UV method.

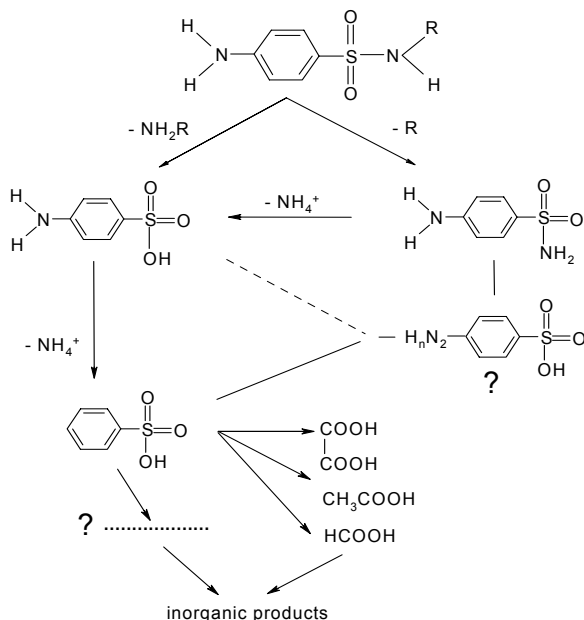


Fig. 1. The photodegradation pathway

The change of concentration of intermediate products during illumination was determined using HPLC-UV method.

It was shown, that in the case of all used photocatalysts the investigated degradation process proceed in the same way (the same intermediate products were generated). Besides, in the case of all examined sulfonamides – sulfanilamide as intermediate product was generated. In the study sulfanilic acid, benzenesulfonic acid, *p*-hydrazino-benzenesulfonic acid (?), acetic acid and oxalic acid were detected.

The proposed pathway of investigated process is presented in fig. 1.

REFERENCES

1. Baran W.: Mikrozanieczyszczenia w środowisku

człowieka, Politechnika Częstochowska, Konferencje 55, p.153 (2004).

2. Herrmann J.-M.: Catal. Today 53, 115 (1999).
3. Wu F., Deng N.: Chemosphere 40, 389 (2000).

3P-04

N-BENZYLTHIOSALICYLAMIDY, NOVÁ SKUPINA VYSOCE ÚČINNÝCH ANTIMYKOBAKTERIÁLNÍCH LÁTEK

RAFAEL DOLEŽAL^a, KAREL WAISSER^a, LENKA KUBICOVÁ^a a JARMILA KAUSTOVÁ^b

^a Katedra anorganické a organické chemie, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Univerzita Karlova v Praze, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, ^b Zdravotní ústav se sídlem v Ostravě, Partyzánské náměstí 7, 702 00 Ostrava dolezalr@faf.cuni.cz, jarmila.kaustova@zuova.cz

Thiobenzamidy patří mezi potenciální antituberkulotika. V sedmdesátých letech byly zkoumány na mnohých pracovištích ve světě, např. v předním německém ústavu pro výzkum tuberkulózy v Borstelu, Pasteurově ústavu ve Francii, na univerzitě v Katanii a také na naší fakultě.

Další možnosti zvýšení antimykobakteriální aktivity látek přináší modifikace struktury molekuly. Velké zvýšení aktivity bylo dosaženo substitucí dusíku arylem (tj. přechod k benzanilidům). Velké zvýšení aktivity přinesla substituce v poloze 2 hydroxylem, tj. přechod k salicylanilidům a k thio-salicylanilidům. Cílem této práce byl výzkum *N*-benzylthiosalicylamidů. Syntetické postupy byly vypracovány na našem pracovišti. Volby substituentů byly provedeny podle metody vypracované Toplissem. Látky byly hodnoceny na *M. tuberculosis*, *M. avium* a dva kmeny *M. kansasii*.

Výsledek byl velmi slibný, látky aktivitou i širokým spektrem účinku i proti dalším kmenům mykobakterií překonávaly soudobá léčiva.

Práce byla podporována výzkumným záměrem MŠMT ČR – MSM0021620822.

3P-05

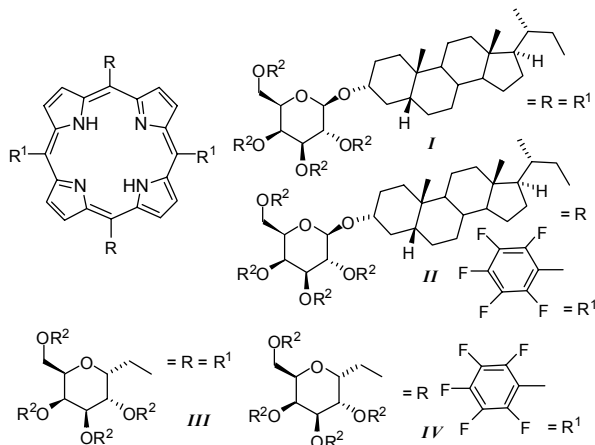
PŘÍPRAVA A STUDIUM SAMOSKLADNÝCH VLASTNOSTÍ PORFYRINŮ SE STEROIDNÍ A CUKERNOU *meso*-SUBSTITUCÍ

PAVEL DRAŠAR^{a,b}, TOMÁŠ TRNKA^c, PETR ŠTĚPÁNEK^{a,b}, DONATO MONTI^d, GIOVANNA MANCINI^e a KAREL ZELENKA^c

^a ÚCHPL, VŠCHT, 166 28 Praha 6, ^b ÚOCHB AV ČR, 100 10 Praha 6, ^c PFF UK, 128 40 Praha 2, ^d DSTC, Univ. Roma "Tor Vergata", I-00133 Rome; ^e IMR-CNR, c/o Dip. Chim., Univ. Roma "La Sapienza", I-00185 Rome Pavel.Drasar@vscht.cz

Príspevek predkladá syntézu a studium porfyriinových receptorů (typ *I–IV*) *meso*-substituovaných steroidů a cukry, založené na zkušenosti s podobnými molekulami¹. Výsledky,

kteří máme zatím k dispozici, podporují původní předpoklad, že uvedené typy sloučenin v roztocích podléhají samoskladbě do organizovaných struktur. Cílem studia je nalézt možnosti využití takových agregací k ovlivnění membrán, molekulového rozpoznání a diskriminace, jež by vedly ke konstrukci sensorů^{2–4}. Uvedené typické struktury (**I–IV**) ukazují možnost ovládnutí polarity, množství a orientace donorů a akceptorů vodíkových vazeb a celkové polarity substitucí porfyrinu v *meso*-polohách či různým stupněm chránění hydroxylů na cukrých složkách.



Autoři děkují za podporu MŠMT; projekty MSM 1131 00001, MSM 6046137305, 1P04OCD31.001, COST D-31 a GA ČR; projekt 203/06/0006.

LITERATURA

- Dukh M., Šaman D., Lang K., Pouzar V., Černý I., Drašar P., Král V.: *Org. Biomol. Chem.* 1, 3458 (2003).
- Zelenka K., Trnka T., Tišlerová I., Král V., Dukh M., Drašar P.: *Collect. Czech. Chem. Commun.* 69, 1149 (2004).
- Dukh M., Černý I., Urbanský M., Pouzar V., Král V., Drašar P.: *Czech Pat.* 290491.
- Dukh M., Černý I., Pouzar V., Král V. M., Berek J., Drašar P., v: *US-CZ Workshop Electrochem. Sensors. Abstracts*, p. 5, CCS, Praha 2001.

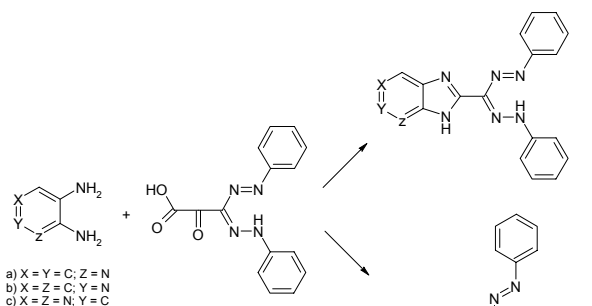
3P-06

STUDIUM ZÁVISLOSTI REAKČNÍCH PODMÍNEK PŘI ANOMÁLNÍ REAKCI FORMAZYLGLYOXYLOVÝCH KYSELIN S AROMATICKÝMI DIAMINY

IVETA FRYŠOVÁ a **JAN SLOUKA**

*Katedra organické chemie, Univerzita Palackého, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc
frysova@orgchem.upol.cz*

Již dříve se nám podařilo objasnit anomální průběh reakce formazylglyoxylových kyselin s *o*-fenylendiaminem za vzniku substituovaných benzimidazolů¹. Pro studium závislosti reakčních podmínek při této reakci jsme se rozhodli využít následujících diaminů – 4,5-dimethyl-1,2-diaminobenzen²,



a) X = Y = C; Z = N
b) X = Z = C; Y = N
c) X = Z = N; Y = C

2,3-diaminonaftalen³, 1,2,4,5-tetraaminobenzen, 2,3-diaminopyridin, 3,4-diaminopyridin, 4,5-diaminopyrimidin⁴.

Tato práce vznikla za podpory grantu MSM6198959216.

LITERATURA

- Wiedermannová I., Slouka J., Lemr K.: *Heterocyclic Commun.* 8, 479 (2002).
- Fryšová I., Slouka J., Gucký T.: *ARKIVOC* xv, 1 (2005).
- Fryšová I., Slouka J., Hlaváč J.: *ARKIVOC* ii, 207 (2006).
- Fryšová I., Slouka J.: *J. Heterocyclic Chem.*, přijato do tisku (2006).

3P-07

SYNTÉZY VÍCEJADERNÝCH NH KYSELIN A ŘEŠENÍ JEJICH STRUKTURY

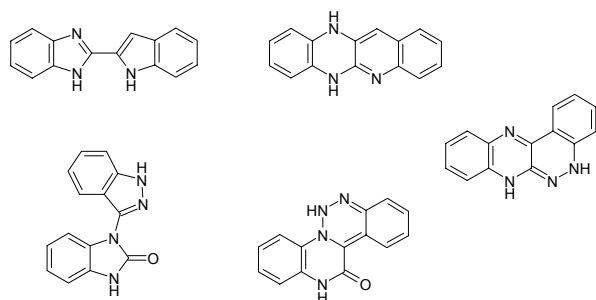
IVETA FRYŠOVÁ, **ANTONÍN LYČKA** a **JAN SLOUKA**

*Katedra organické chemie, Univerzita Palackého, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc, Výzkumný ústav organických syntéz, 532 18 Pardubice-Rybitví
frysova@orgchem.upol.cz*

Současný výzkum v oblasti organické chemie je z velké části zaměřen na syntézu látek s potenciální biologickou aktivitou. Důraz je kladen především na účinnost kancerostatickou, neméně pak na účinnost virostatickou či bakteriostatickou. V pozadí nezůstávají ani snahy o nalezení účinných preparátů při nemocech kardiovaskulárního systému, nervové soustavy nebo poruchách metabolismu.

Mezi sloučeniny interkalující se do dvojité šroubovice DNA patří především kondenzované aromatické systémy isocyklické a heterocyklické. Bylo zjištěno, že přírodní chinoxalinové sloučeniny, jako je echinomycin a triostiny, jsou v tomto ohledu zvláště zajímavé, poněvadž působí jako bisinterkalátory.

Z tohoto důvodu byl jeden ze směrů výzkumu na olomouckém pracovišti zaměřen i na deriváty chinoxalinu, avšak s ohledem na výzkum heterocyklických N-H kyselin disponovaných k interakcím s vazebnými centry prostřednictvím intermolekulárních vodíkových vazeb, byly vybrány deriváty chinoxalinu s kyselou skupinou N-H. Pozornost byla pak



zaměřena na sloučeniny, které obsahují dvě tyto skupiny N-H, a to buď v neměnné, předem stanovené vzdálenosti nebo v proměnných vzdálenostech daných konformací molekuly.

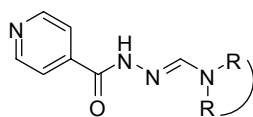
Tato práce vznikla za podpory grantu MSM6198959216.

3P-08 PREPARATION AND ANTIMYCOBACTERIAL ACTIVITY OF HYDRAZONOFORMAMIDE DERIVATIVES OF ISONIAZIDE

**ALEŠ IMRAMOVSKÝ^a, JARMILA VINŠOVÁ^a,
and JOSEF JAMPÍLEK^b**

^a Department of Inorganic and Organic Chemistry, Faculty of Pharmacy in Hradec Králové, Charles University in Prague, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, ^b Zentiva a.s., U kabelovny 130, 102 37 Prague 10
imramovsky@faf.cuni.cz

Tuberculosis, the world's leading infectious disease, caused by *Mycobacterium tuberculosis* represents major global health problem. Thus, research efforts are required to develop new compounds as potential antituberculous agents^{1–3}. Primary screening of all compounds was evaluated against *M. tuberculosis* H₃₇Rv in BACTEC 12B medium using the BACTEC 460 radiometric system⁴. This paper is the result of our interest in hydrazoneformamide derivatives of isoniazide and deals with synthesis and antituberculous activity of the compounds based on references^{5,6}.



R = H, alkyls, substituted phenylalkyls,
heterocycles, substituted heterocycles

Modification of the hydrazoneformamide part of the molecule resulted in increasing biological activity. The lipophilicity (log *K*) of the compounds was determined by means of RP-HPLC. The purity was checked by HPLC as well. In the present study the structure-activity relationships of the studied compounds are discussed.

This study was supported by IGA the Ministry of Health of the Czech Republic No. 1A/8238-3, GAUK 285/2006/B-CH/FaF and MSM 0021620822. Antimycobacterial data were pro-

vided by the Tuberculosis Antimicrobial Acquisition and Coordinating Facility (TAACF) through a research and development contract with the U.S. National Institute of Allergy and Infectious Diseases.

REFERENCES

1. Vinšová J., Horák V., Buchta V., Kaustová J.: *Molecules* 10, 783 (2005).
2. Imramovský A., Vinšová J., Polanc S., Jampílek J., Doležal M.: *ESOC-14, Helsinki, Finland, July 4–8, 2005*, p. 295.
3. Imramovský A., Vinšová J., Polanc S., Jampílek J.: *Chem. Listy* 95, 845 (2005).
4. <http://www.taacf.org/about-TAACF.htm> (January, 2006).
5. De Logu A., Onnis V., Saggi B.: *J. Antimicrob. Chemother.* 49, 275 (2002).
6. Sinha N., Jain S., Tilekar A.: *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 15, 1573 (2005).

3P-09 HYDROPHOBIC PROPERTIES OF NEW HYDRAZONOFORMAMIDE DERIVATIVES OF ISONIAZIDE

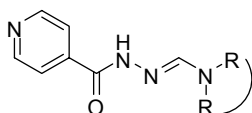
**JOSEF JAMPÍLEK^a, ALEŠ IMRAMOVSKÝ^b,
JARMILA VINŠOVÁ^b, and JIRÍ DOHNAL^a**

^a Zentiva a.s., U kabelovny 130, 102 37 Prague 10,
^b Department of Inorganic and Organic Chemistry, Faculty of Pharmacy in Hradec Králové, Charles University in Prague, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové
josef.jampilek@zentiva.cz, imramovsky@faf.cuni.cz,
vinsova@faf.cuni.cz

Tuberculosis (TB), caused especially by *Mycobacterium tuberculosis*, is one of the most devastating diseases primarily due to several decades of neglect, and presents a global health threat of escalating proportions. TB remains a deadly disease and continues to claim approximately 2 million lives annually. TB is the second leading infectious cause of mortality today only after HIV/AIDS (ref.¹).

Isoniazide (INH) is a frontline tuberculosis-specific drug that is used in combination with other drugs. Modification of its molecule is still up to date. Some new hydrazoneformamide derivatives of isoniazide were prepared^{2,3}. As hydrophobicity is one of the most important physical properties of biologically active compounds (the drugs cross biological barriers most frequently through passive transport, which strongly depends on their lipophilicity), the series of new isoniazide derivatives was analyzed using the reversed phase high performance liquid chromatography (RP-HPLC) method for the lipophilicity measurement. The procedure was performed under isocratic conditions with methanol as an organic modifier in the mobile phase using end-capped non-polar C18 stationary RP column.

In the present study the correlation between RP-HPLC retention parameter log *K* (the logarithm of capacity factor *K*) and log *P* data calculated in various ways is discussed as well as the relationships between the lipophilicity and the chemical structure of the studied compounds.



R = H, alkyles, substituted phenylalkyles,
heterocycles, substituted heterocycles

This study was supported by IGA the Ministry of Health of the Czech Republic No. 1A/8238-3, GAUK 285/2006/B-CH/FaF and MSM 0021620822.

REFERENCES

1. <http://www.who.int/mediacentre/factsheets/fs104/en/> (January 2006).
2. Imramovský A., Vinšová J., Polanc S., Jampilek J., Doležal M.: *ESOC-14, Helsinki, Finland, July 4–8, 2005*, p. 295.
3. Imramovský A., Vinšová J., Polanc S., Jampilek J.: *Chem. Listy 95*, 845 (2005).

3P-10

DISTRIBUCE PRODUKTŮ NITRACE KETONŮ SUBSTITUOVANÝCH 1-ADAMANTYLEM A FENYLEM

ROBERT VÍCHA*, VERONIKA JEŽKOVÁ a IVO
KUŘITKA

Ústav chemie, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Náměstí T.G.M. 275, 760 01 Zlín
rvicha@ft.utb.cz

Cílem zde prezentované práce bylo připravit mononitrované ketony 1-adamantyl(fenyl)keton (**1**), 1-adamantyl(benzyl)keton (**2**), 1-adamantylmethyl(fenyl)keton (**3**) a 1-adamantylmethyl(benzyl)keton (**4**) jakožto intermedie při syntéze aminů určených pro cílenou modifikaci biologicky aktivních látek. Vzhledem k požadované konstituci finálních aminů bylo žádoucí připravit *meta*- a *para*- mononitrované deriváty výchozích ketonů. Struktura nitrovaných ketonů měla na poměr zastoupení jednotlivých isomerů podstatně větší vliv než změna reakčních podmínek či nitrčního činidla pro každý z nich. Keton **1** poskytl při nitraci směsí HNO₃/kat. množství H₂SO₄ (podmínky **A**) směs *o*-/*m*-/*p*- = 29/37/34 %, přičemž velmi podobné výsledky byly dosaženy nitrací acetylnitratem v acetanhydridu (podmínky **B**). Pouze nitrace HNO₃ v konc. H₂SO₄ (podmínky **C**) vedla ke zvýšení zastoupení *m*- isomeru na úkor *p*- isomeru (14/56/30 %). Keton **2** poskytl za podmínek **B** jako hlavní produkt očekávaný *m*-isomer, ale rovněž velmi vysoký podíl *o*- isomeru (30/65/5 %). Za ostatních podmínek v přítomnosti H₂SO₄ docházelo velmi rychle k oxidaci výchozí látky. Hlavním produktem při nitraci ketonů **3** a **4** byl *o*- isomer v relativním zastoupení 80–99 %, a to v případě metody **A**, **B** i **C**. Zjištěné zastoupení jednotlivých isomerů v produktech prováděných nitrací nelze jednoduše vysvětlit na základě distribuce elektronové hustoty na benzenovém jádře výchozích ketonů. Zejména relativně vysoký obsah *o*- a *p*- isomerů v produktech nitrací ketonů **1** a **2**

neodpovídá vypočítaným parciálním nábojům v těchto polohách. Diskuse možných mechanismů vysvětlujících uvedené skutečnosti je součástí prezentace.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (projekt č. 203/06/P362) a Ministerstva školství mládeže a tělovýchovy (projekt č. MSM7088352101).

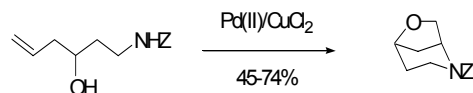
3P-11

Pd(II)/CuCl₂ -KATALYZOVANÉ CYKLIZÁCIE AMINOHEXENITOLOVÉ

PETER KUBIZNA a PETER SZOLCSÁNYI

Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie, Slovenská Technická Univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika
peter.kubizna@stuba.sk

Pd(II)/CuCl₂-katalyzovaná bicyklizácia *N*-ochránených aminohehexenitolov predstavuje novú a efektívnu syntetickú metodiku prípravu 6-oxa-2-aza-bicyklo[3.2.1]oktánov¹.



Cieľom projektu je štúdium variácie reakčných parametrov – charakteru ochrannej skupiny na dusiku (Bn, Boc, Cbz), typu rozpúšťadla (AcOH, THF, DMF, toluén, DCM) a katalytického systému – na selektivitu za účelom optimalizácie predmetnej transformácie. Budú sa diskutovať možné alternatívy predpokladaného mechanizmu reakcie, ako aj potenciálne aplikácie piperidínových skeletov ako stavebných blokov v totálnej syntéze prírodných látok a ich analógov.

Výskum bol financovaný Agentúrou pre podporu vedy a techniky (Grant No. APVT-20-000904).

LITERATURA

1. Szolcsányi P., Gracza T.: *Chem. Commun.* 2005, 3948.

3P-12

PREPARATION AND PROPERTIES OF 2,4,6-TRIS[(BENZ)AZOL-1-YL]-1,3,5-TRIAZINES

VIKTOR MILATA^a, ROSA MARIA CLARAMUNT^b,
PILAR CABILDO^b, MARIA DOLORES SANTA
MARIA^b, PILAR CORNAGO^b, LOURDES INFANTES^c,
FÉLIX HERNÁNDEZ CANO^c, MARIA CARMEN
CARRIÓN^c, ANA RODRÍGUEZ^d, ANA GUERRERO^c,
FELIX ANGEL JALÓN^c, BLANCA ROSA MANZANO^c,
ANTONIO de la HOZ^c and JOSÉ ELGUERO^d

^aInstitute of organic chemistry, catalysis and petrochemistry, Slovak University of Technology, Radlinského street 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, ^bDepartamento de Química Orgánica y Biología, Facultad de Ciencias, UNED, Senda del Rey 9, E-28040 Madrid, Spain, ^cDepartamento de Cristalografía, In-

stituto de Química-Física Rocasolano, CSIC, Serrano 119, E-28006 Madrid, Spain, ^dInstituto de Química Médica, CSIC, Juan de la Cierva 3, E-28006, Madrid, Spain, ^eDepartamento de Química Inorgánica, Orgánica y Bioquímica, Universidad de Castilla-La Mancha, Facultad de Químicas, Avda. Camilo J. Cela, E-13071 Ciudad Real, Spain viktor.milata@stuba.sk

Method of preparation of new class of multidentate ligands, symmetrically trisubstituted 1,3,5-triazines with (benz) azoles (being good leaving group) has been developed using 2,4,6-trichloro-1,3,5-triazine (cyanuric chloride) and (benz)azole anion generated in situ according to ANRORC mechanism^{1,2}. It has been found that these compounds exists in chloroform solutions like one type of propelane structure, but in DMSO the same compound displays more signals due to turnover of the (benz)azole nucleus – atropoisomerism. In trifluoroacetic acid is shown only a mixture of hydrolyzed (benz)azole and 2,4,6-trihydroxy-1,3,5-triazine because the first one are stable, good leaving group.

We will present spectral data such as ¹H, ¹³C, ¹⁵N NMR of title compounds, their physico-chemical and antifungal data (imidazolyl derivative is known to be an interesting antifungal and antitumor agent³). Two X-ray structures were recorded.

Due to strong complexing power these compounds were used for preparing complexes with palladium^{4,5}. Very promising in this field is benzimidazol-2-one derivative.

This work was supported by Science and Technology Assistance Agency under contract No. APVT-20-007304 and Science Grant Agency 1/2448/05.

REFERENCES

1. Milata V., Claramunt R.M., Cabildo P., Cornago P., Elguero J.: *Heterocycles* 55, 905 (2001).
2. Milata V.: unpublished results.
3. References 15, 16 in 1.
4. Carrión Carmen M., Guerrero A., Jalón F. A., Manzano B. R., de la Hoz A., Claramunt R. M., Milata V., Elguero J.: *Inorg. Chem.* 42, 885 (2003).
5. Guerrero A., Jalón F. A., Manzano B. R., Rodríguez A., Claramunt R. M., Cornago P., Milata V., Elguero J.: *Eur. J. Inorg. Chem.* 2004, 549.

3P-13

VLASTNOSTI FILMŮ PŘIPRAVENÝCH Z HYDROLYSÁTU ŠKROBU AMARANTOVÉ MOUKY

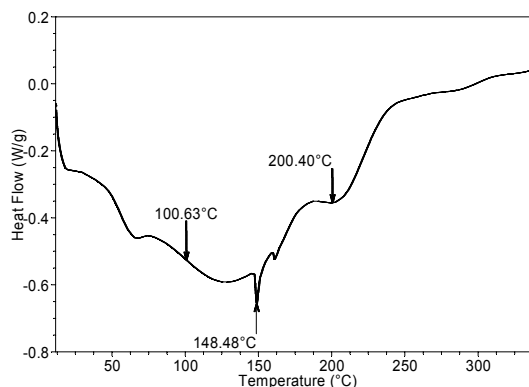
PAVEL MOKREJŠ, DAGMAR JANÁČOVÁ, KAREL KOLOMAZNIK, MILAN MLÁDEK a FERDINAND LANGMAIER

Ústav inženýrství polymerů, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, nám. TGM 275, 762 72 Zlín mokrejs@ft.utb.cz

Práce se zabývá přípravou a vlastnostmi filmů, které byly zhotoveny z hydrolysátu škrobu technické amarantové mouky. Hydrolysát škrobu byl získán enzymovým ztekucením

škrobu amarantové mouky za námi stanovených optimálních podmínek: dávkování mouka:voda = 1:20, dávka enzymů = 5 l t⁻¹ mouky (enzymy BAN 480 L:AMG 300 L:CELLUCLAST 1,5l FG v poměru 4 : 3 : 2) a 4 h době hydrolýzy.

Filmy byly připraveny z roztoku o koncentraci 2,5 g / 25 ml litím za studena na silikonové desky o rozměrech 70 × 122 mm. Bylo připraveno několik filmů s/bez přídavku změkčovadla. Změkčovadlo (glycerin) bylo přidáváno na sušinu v množství 1–5–10–20–40 %. Filmy byly vytvořeny odpařením vodné fáze za pokojové teploty. Pro zkoušky rozpustnosti byly připraveny vzorky o velikosti 1,5 × 1,5 cm. Následně byly kondicionovány v exsikátoru nad vysušeným silikagelem 48 h. Poté byly filmy podrobeny zkouškám rozpustnosti ve vodě za definovaných podmínek – inkubace při 25 °C, 24 h, občasné zamíchání. Nerozpuštěná část filmů byla po vyjmutí a po vysušení při 103 °C stanovena gravimetricky a bylo vypočítáno % rozpuštěného filmu. Další část filmů byla podrobena termické analýze na diferenciálním skeningerovém kalorimetru (DSC 2010, TA Instruments, USA). Analýza byla provedena v otevřených hliníkových miskách za ochranné dusíkové atmosféry při průtoku 150 ml min⁻¹ v teplotním intervalu 20 až 350 °C s teplotním gradientem dT/dt = 10 °C min⁻¹.



Obr. 1. Modelový průběh DSC filmu bez přídavku glycerinu

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM 7088352102.

3P-14

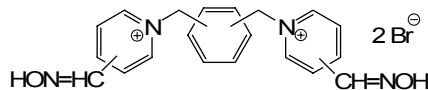
**SYNTEZA NOVÝCH ASYMETRICKÝCH
BISPYRIDINIOVÝCH SLOUČENIN S XYLENOVÝM
SPOJOVACÍM ŘETĚZCEM A JEJICH SCHOPNOST
IN VITRO REAKTIVOVAT ORGANOFOSFÁTY
INHIBOVANOU ACETYLCHOLINESTERASU**

**KAMIL MUSÍLEK^{a*}, KAMIL KUČA^b, DANIEL JUN^b,
VLASTIMIL DOHNAL^c a MARTIN DOLEŽAL^a**

^a Katedra farmaceutické chemie a kontroly léčiv, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové Univerzity Karlovy v Praze, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, ^b Katedra toxikologie, Fakulta vojenského zdravotnictví Univerzity obrany, Třebešská 1575, 500 01 Hradec Králové, ^c Ústav technologie potravin, Mendelova zemědělská a lesnická univerzita v Brně, Zemědělská 1, 613 00 Brno
musilekk@faf.cuni.cz

Pesticidy (např. parathion, chlorpyrifos, diazinon) stejně jako nervově paralytické látky (např. soman, sarin, tabun, VX) patří do skupiny organofosfátů¹. Tyto látky ireverzibilně inhibují enzym acetylcholinesterasu (AChE). Jejich účinek je založen na fosforylaci aktivního místa enzymu, kde se kovalentně váží na serinový hydroxyl². Reaktivátory AChE štěpí vazbu enzym-inhibitor a slouží jako antidota při otravách organofosfáty. Jejich účinek je specifický pro jednotlivou strukturu inhibitoru a žádná dosud známá látka není schopna efektivně reaktivovat strukturně široké spektrum organofosforových inhibitorů³.

Byly připraveny nové asymetrické bispyridiniové reaktivátory AChE s xylenevým spojovacím řetězcem modifikací známých syntetických postupů. Jejich aktivita byla testována *in vitro* na organofosfáty inhibovanou AChE a porovnána s aktivitami známých reaktivátorů. Z výsledků *in vitro* měření byl vyvozen vztah mezi strukturou a aktivitou. Reaktivací účinnost závisí na přítomnosti a množství kvarterních dusíků, konstituci a délce spojovacího řetězce a poloze a počtu hydroxyiminomethylových skupin v molekule⁴⁻⁵.



Tato práce vznikla za podpory grantu GA UK 302/2005/B-CH/FaF a grantu Ministerstva obrany České republiky No. FVZ0000501.

LITERATURA

- Marrs T. C.: Pharmacol. Therap. 58, 51 (1993).
- Bajgar J.: Adv. Clin. Chem. 38, 151 (2004).
- Musilek K., Kuca K.; Jun D., Dohnal V., Dolezal M.: J. Enzym. Inhib. Med. Chem. 20, 409 (2005).
- Musilek K., Kuca K.; Jun D., Dohnal V., Dolezal M.: Bioorg. Med. Chem. Lett. 16, 622 (2006).
- Kuca K., Jun D., Musilek K.: Mini-Rev. Med. Chem. 6, 269 (2006).

3P-15

**VLIV CENTRÁLNÍHO KOVU NA SPEKTRÁLNÍ
A FOTOCHEMICKÉ VLASTNOSTI
AZAFTALOCYANINŮ**

PAVEL PETRIK, PETR ZIMČÍK a JIŘÍ SOUKUP

Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Univerzita Karlova v Praze, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Česká republika
pavel.petrik@faf.cuni.cz

Azaftalocyaniny (AzaPc) jsou skupina látek s možností využití ve fotodynamické terapii (photodynamic therapy, PDT), což je relativně nová, perspektivní metoda léčby onkologických i jiných onemocnění (např. senilní makulární degenerace)¹.

Cílem práce bylo připravit AzaPc s osmi diethylaminovými skupinami na periférii a AzaPc s osmi *tert*-butylsulfanylovými skupinami na periférii. Oba periferní substituenty snižují agregaci. Byly připraveny AzaPc obou základních struktur s různými centrálními kovy (Zn, Mg, Cu, Ni) a bezkovové AzaPc. U těchto AzaPc byly pak sledovány změny UV-VIS spekter, zejména bathochromní posun. Další část výzkumu byla zaměřena na testování produkce singletového kyslíku těmito látkami. Látky byly testovány v roztoku v monomerní formě. Metodou rozkladu 1,3-difenyliisobenzofuranu (DPBF) byly spočítány kvantové výtěžky singletového kyslíku (Φ_{Δ}) pro jednotlivé AzaPc. Hodnoty Φ_{Δ} klesají v pořadí Zn > Mg > 2H > Cu > Ni. Jako nejlepší byly shledány AzaPc s Zn jako centrálním atomem, naopak jako prakticky nepoužitelné byly shledány AzaPc s Cu a Ni.

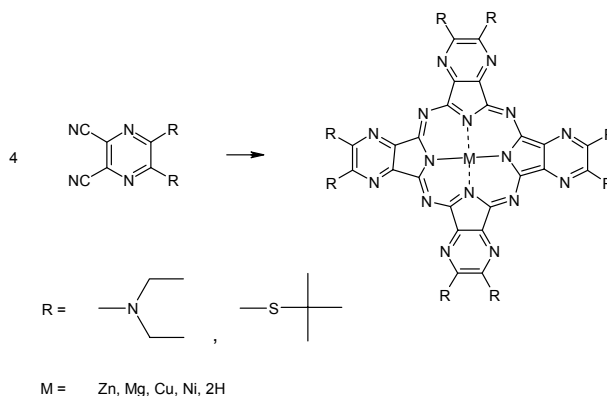


Schéma 1. Syntéza azaftalocyaninů s diethylaminovými a *tert*-butylsulfanylovými skupinami na periférii

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru MSM0021620822.

LITERATURA

- Mittra R. A., Singerman L. J.: Optom. Vis. Sci. 79, 218 (2002).

3P-16

ANTI-2-HYDROXY-2-METYL-1-TETRALÓN OXÍM

DALMA GYEPESOVÁ^a, PAVEL MACH^b, EVA SCHOLTZOVÁ^a, MARTA SALIŠOVÁ^c, ANDREJ BOHÁČ^c, BORIS GAŠPÁR^c a VRATISLAV LANGER^d

^a Ústav anorganickej chémie SAV, 845 36 Bratislava,

^b Katedra jadrovej fyziky a biofyziky, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského, 842 48 Bratislava, ^c Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, 842 15 Bratislava, ^d Inorganic Environmental Chemistry, Department of Chemical and Biological Engineering, Chalmers University of Technology, SE-41296 Göteborg, Sweden.

salisova@jns.uniba.sk

Zistilo sa, že kryštály racemického anti-2-hydroxy-2-metyl-1-tetralón oximu (schéma 1) majú v asymetrickej jednotke dva typy molekúl – konformérov. Jeden konformér má exocyklickú OH skupinu v ekvatoriálnej polohe, zatiaľ čo druhý má túto skupinu v axiálnej polohe. Molekuly s ekvatoriálnou OH skupinou vytvárajú nekonečné reťazce (tvorené tým istým enantiomérom), ktoré sú spájané centrosymetrickými dimérmí molekúl (oboch enantiomérov), v oboch prípadoch s axiálnou OH skupinou (schéma 1). Z tohto pohľadu je zaujímavá konformačná flexibilita prikonenzovaného kruhu, nakoľko tri atómy tohto kruhu sú v sp² hybridizácii a ďalšie obmedzenie je vyvolané konjugáciou =N-OH väzby s aromatickým kruhom. Výpočty pomocou B3LYP a MP2 potvrdili, že pomerne ľahké konformačné zmeny medzi axiálnou a ekvatoriálnou OH sú možné a vedú cez intermediárnu zošíkmenú konformáciu.

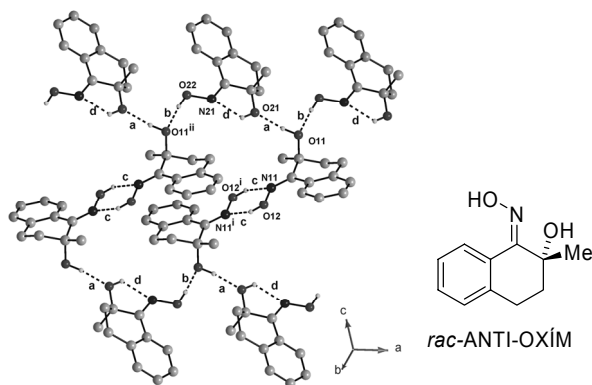


Schéma 1

Hľadajú sa možnosti prípravy enantiomérne čistého 2-hydroxy-2-metyl-1-tetralón oximu a zodpovedajúceho 2-hydroxy-2-metyl-1-tetralónu – potenciálneho pomocného chirálneho činidla pre syntézu neprírodných α -aminokyselín, resp. pre deracemizáciu α -aminokyselín.¹

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA No. 2/3104/23 a No. 1/0217/03 a APVT-20-031904.

LITERATÚRA

- Solladie-Cavallo A., Šedý O., Sališová M., Schmitt M.: Eur. J. Org. Chem. 2002, 3042.

3P-17

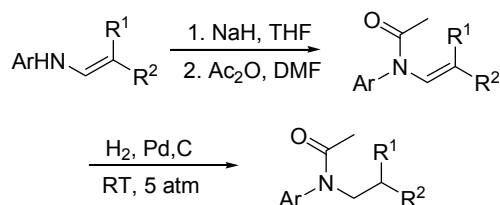
BEHAVIOUR OF ENAMIDOMALONATES AND ENAMINOMALONATES UNDER VARIOUS REDUCTIVE CONDITIONS. A NOVEL SYNTHETIC APPROACH TO *N*-ACETYL-*N*-ARYL- β -AMINO ACIDS

TOMÁŠ SOLČAN, PAVOL JAKUBEC, and VIKTOR MILATA

Institute of organic chemistry, catalysis and petrochemistry, Slovak University of Technology, Radlinského street 9, 812 37 Bratislava, Slovakia
tomas.solcan@stuba.sk

Anilinomethylenemalonates and related derivatives of cyano- or 3-oxobutanoic (acetoacetic) acids are very frequently used for synthesis of biologically active compounds such as antibacterial 4-quinolones and their analogues¹. For these reasons is frequently used thermal or catalytical cyclization, but another type of reactions, such as oxidations or reductions were not systematically studied.

A behaviour of *N*-substituted enamino malonates under various reductive conditions and several routes of their deprotection to amines is described. Mild conditions for alkylation and acylation of the amino group are depicted. A new synthetic approach to *N*-acyl- β -amino acids using catalytic reduction has been discovered.



We will present the results from screening of various reduction conditions employed in reductions of conjugated *N*-substituted aminomethylenemalonates.

This work was supported by Science and Technology Assistance Agency under contract No. APVT-20-007304 and Science Grant Agency 1/2448/05.

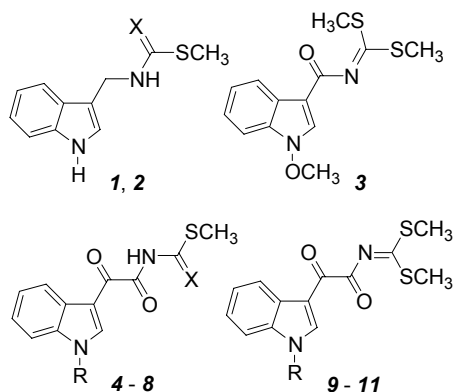
REFERENCES

- Advances heterocyclic chemistry (Katritzky A., R., ed.), Vol. 54: Hermecz I., Keresztúri G., Vasvári-Debreczy L.: Aminomethylene malonates and Their Use in Heterocyclic Synthesis. Academic Press, 1992.

3P-18

GLYOXYLOVÉ ANALÓGY BRASINÍNU, BRASITÍNU
A 1-METOXYBRASINÍNU BMÁRIA REPOVSKÁ^a, ANDREJ SÝKORA^a,
MIROSLAVA ŽÁKOVÁ^a, ERIK HALŽA, PETER
KUTSCHY^{a*} a JÁN MOJŽIŠ^b^a Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita
P. J. Šafárika, Moyzesova 11, 041 67 Košice, ^b Ústav farma-
kológie, Lekárska fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, Trieda
SNP 1, 040 66 Košice
sykora@unipo.sk

Rastliny čeľade krížokveté produkujú fytoalexíny obsahujúce indolové jadro a bočný reťazec, alebo ďalší heterocyklus s atómami dusíka a síry¹. V tejto práci sme študovali syntézu a protinádorovú aktivitu glyoxylových analógov fytoalexínov brasinínu (**1**, X = S), brasitínu (**2**, X = O) a 1-metoxybrasinínu B (**3**). Zavedenie glyoxylovej skupiny namiesto CH₂ resp. C=O skupiny vychádzalo z poznatkov, že substituované indolyglyoxylamidy vykazujú protinádorovú aktivitu^{2,3}. Aktivita produktov **4–11** bola porovnaná s prírodnými fytoalexínmi. Najvyššiu účinnosť vykazovali analógy 1-metoxybrasinínu B **9–11**, kým účinnosť analógov brasinínu **4–6** (X = S) a brasitínu **7 a 8** (R = H, OCH₃; X = O) bola nižšia.

R = H; OCH₃; 2,3,4,6-tetra-O-acetyl-β-D-glukopyranozyl
X = O, S

Tato práca vznikla za podpory grantu VEGA, č. 1/2472/05.

LITERATURA

1. Pedras M. S. C., Okanga F. I., Zaharia I. L., Khan A. Q.: *Phytochemistry* 53, 161 (2000).
2. Bacher G., Nickel B., Emig P., Vanhoefer U., Seeber S., Shandra A., Klenner T., Beckers T.: *Cancer Res.* 61, 392 (2001).
3. Li W.-T., Hwang D. R., Chen Ch.-P., Shen Ch.-W., Huang Ch.-L., Chen T.-W., Lin Ch.-H., Chang Y.-L., Chang Y.-Y., Lo Y.-K., Tseng H.-Y., Lin Ch.-Ch., Song J.-S., Chen H.-Ch., Chen S.-J., Wu S.-H., Chen Ch.-T.: *J. Med. Chem.* 46, 1706 (2003).

3P-19

NEW SYNTHESIS AND SYNTHETIC UTILISATION
OF PENTAFLUOROBENZALDEHYDE
AND TETRAFLUOROTEREPHTHALIC ALDEHYDEDANIEL VÉGH^a, TOMÁŠ SOLČÁN^a, KATARÍNA
HRŇČARIKOVÁ^a, and JOZEF KOŽÍŠEK^b^a Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry,
^b Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics
Slovak University of Technology, Radlinského street 9,
812 37 Bratislava, Slovakia
daniel.vegh@stuba.sk

The utilization of perfluoroaromatics for molecular recognition has in recent years been an intensely studied topic. The pentafluorobenzaldehyde (PFBA) and tetrafluoroterephthalic aldehyde (TFTA), both important starting materials for the above mentioned research have so far been hardly investigated. With the sole exception of the reduction of pentafluorobenzonitrile¹ to pentafluorobenzaldehyde (yield 64 %) all the known methods for the synthesis of PFBA and TFTA involve multi-step processes with low overall yields and starting from rather inaccessible raw materials.

In the course of our search for alternative cheap and accessible starting materials for the preparation of PFBA and TFTA we were intrigued by the possible deployment of the hexafluorobenzene for this purpose.

Nucleophilic displacement of a single fluorine atom in hexafluorobenzene by nitromethane affords 1,2,3,4,5-pentafluoro-6-nitromethylbenzene; replacement of another fluorine affords then 1,2,4,5-tetrafluoro-3,6-bis-nitromethyl-benzene² – a compound easily undergoing the Neff reaction when treated with KOH and KMnO₄ with good yields. The procedure represents a novel, as yet unpublished synthesis of PFBA and TFTA.

We investigated the reactivity of fluorine substituents in PFBA and TFTA towards nucleophiles (e.g. azide anion, 4-methylphenylthiolate anion) as well as that of carbonyl group in PFBA and TFTA towards amines, diamines and 2-thenylacetonitrile. The target compounds can be used as building blocks for novel materials with optoelectronic properties and supramolecular structure in solid state.

Structures of target compounds were proved by IR, UV, ¹H NMR, ¹³C NMR and ¹⁹F NMR spectral methods, and by X-ray analysis².

This work was financially supported by grants from the Ministry of Education of the Slovak Republic No. 1/1379/04 1/2449/05 and the Science and Technology Assistance Agency (No. APVT-20- 007304).

REFERENCES

1. Chapman N. B., Clarke K., Pinder R. M., Shavney S. N.: *J. Chem. Soc. C.* 1967, 293.
2. Perašinová L., Svoboda I., Végh D., Solčán T., Kožíšek J.: *Acta Cryst. Sect. E* 62 2006, 1689.

4L-01**POVRCHOVÉ PROJEVY HLUBOKO ULOŽENÉHO LOŽISKA ROPY VE STŘEDNÍCH ČECHÁCH****MICHAL STEJSKAL, VÁCLAV SUCHÝ, JIŘÍ KROUFEK a GUSTAV ŠEBOR***Ústav technologie ropy a petrochemie, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6
michal.stejskal@vscht.cz*

Letos a v uplynulých letech zazněla na konferencích APROCHEM¹ řada přednášek věnovaných výskytu ropných indicií v Čechách se zaměřením na jejich formy, místa nálezu, dynamiku plynných uhlovodíkových emisí, včetně vlastních experimentálních poznatků a hypotéz o možném původu ropy. Kvalitativně jde o ropné plyny, uhlovodíkové inkluze v horninách, ropné a asfaltické impregnace hornin včetně makronálezů ropy, rozsáhlý výskyt oxidačně a radiačně degradovaných asfaltů aj. Na území Čech přitom nacházíme stopy nejméně dvou „generací“ rop, ta mladší, velmi lehká a nedegradovaná, dodnes aktivně vertikálně migrující, je zatím bez časového určení, po té starší, raně-prvohorní, nám zůstaly zachovány např. silně oxidačně degradované asfalty v dolomitických vápencích Velké Chuchle, anthraxolit v uranových dolech a velmi pravděpodobně také rozsáhlá ložiska jihočeského grafitu. Prvohorní i mladší ropa vertikálně migrovaly na několika ekvidistantních severojižních zónách (plzeňská, pražská a hradecká) až do povrchových hornin. Ropné uhlovodíkové indicie se vyskytují na zhruba 30 km širokých severojižních liniích vedle jiných hlubinných fluid, jako jsou termální vody, helium, neuhlovodíkové zemní plyny a vedle rudonosných a zvláště uranonosných hydrotermálních roztoků, z nichž se vyloučily kovové rudy. Tytéž vertikální migrační cesty využívá i dnes lehká ropa vyplňující např. v Barrandienu dutiny zkamenělin a impregnující i celé bloky hornin ve vápencových lomech u Berouna. Oblast Čech se na specifických severojižních zónách chová jako roponosné území s povrchovými ropnými projevy, které se stále obnovují. Zóny zasahují i do sousedních států, kde se na nich nacházejí těžná ložiska ropy a zemního plynu. Na rozdíl od Moravy, kde se ropa těží i z hloubek kolem 4000 m, bylo území Čech v rámci vrtného uranového průzkumu probádáno jen do hloubek kolem 2000 m a i z této doby jsou publikovány poznatky o výskytu ropných stop a vzácně i ropy ve vrtech. Ložiskový zdroj vertikální migrace ropných uhlovodíků může být tedy uložen spíše hlouběji, nelze však vyloučit ani dálkovou, horizontální migraci uhlovodíků ze vzdálených oblastí. Ropa je totiž velmi lehká a prakticky neobsahuje tmavé asfaltické podíly.

*Práce byla podpořena MŠMT ČR v rámci projektu výzkumných záměrů č. MSM 6046137304.***LITERATURA**

1. Stejskal M., Kroufek J., Šebor G., Suchý V. a kol.: Výskyt ropných indicií v Čechách, Sborníky z konferencí APROCHEM, Milovy-Sněžné, (2003–2006).

4L-02**VYUŽITÍ KAPALNÝCH BIOPALIV PRO POHON MOTOROVÝCH VOZIDEL****GUSTAV ŠEBOR a JAN POSPÍŠIL***Ústav technologie ropy a petrochemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
Gustav.Sebor@vscht.cz*

V České republice v současné době probíhá intenzivní diskuse o využití kapalných biopaliv jako pohonných hmot v dopravě. Tato diskuse je vedena jak na zákonodárné a exekutivní úrovni, tak i mezi odborníky a motoristy jako koncovými uživateli.

Využití biopaliv v dopravě v EU je v posledních letech věnována intenzivní pozornost. Program zavádění biopaliv je součástí širšího programu využití alternativních paliv, a to nejenom v dopravě, ale také v energetice při výrobě elektrické energie a tepla. K realizaci tohoto programu vedou státy EU zejména tyto důvody:

- rostoucí celková spotřeba energie včetně energie pro dopravu,
- nedostatečné zásoby ropy v zemích EU,
- obava z rostoucí ceny ropy,
- závislost na dovozu tohoto cenného zdroje fosilního uhlíku, zejména ze zemí Středního Východu, která by v roce 2020 mohla dosáhnout až 70 %,
- rostoucí emise zejména skleníkových plynů (GHG) ohrožující klimatické podmínky,
- závazky na snižování emisí skleníkových plynů (GHG) vyplývající z Kjótského protokolu.

U sektoru dopravy se jeho závislost na ropě v zemích EU v současné době pohybuje na úrovni 98 %. Pokud se týká využití biopaliv v dopravě, pro tuto problematiku přijaly Evropský parlament a Evropská rada tzv. Akční plán a dvě směrnice, směrnice 2003/30/EC o podpoře využívání biopaliv a nebo jiných obnovitelných zdrojů v dopravě a směrnice 2003/96/EC týkající se zdanění energetických produktů. Tyto směrnice obsahují regulační a fiskální rámec podpory biopaliv. V akčním plánu je definována strategie pro dosažení plánované 20% náhrady klasických kapalných motorových paliv alternativními palivy do roku 2020.

Směrnice 2003/30/EC ukládá členským zemím zajistit minimální podíl biopaliv a jiných alternativních pohonných hmot na jejich národních trzích a v tomto ohledu stanoví národní indikativní cíle (priority). Jako referenční hodnota pro tyto cíle byla navržena pro rok 2005 hodnota 2 % podílu energetického obsahu (e.o.) automobilového benzínu a motorové nafty spotřebovaných pro dopravní účely v tomto kalendářním roce a v roce 2010 by pak mělo být dosaženo hodnoty podílu 5,75 % (e.o.). Směrnice 2003/30/EC ale nestanovuje, jak má být uvedených cílů dosaženo, tj. nestanovuje kvóty jednotlivých typů biopaliv, zda má být použit jejich plošný přídavek, nebo mají být použita samotná v určitých odvětvích, resp. ve vybraných typech vozidel. Směrnice rovněž ukládá, aby nebylo bráněno volnému obchodování s bioopalivy, což umožňuje použít ke splnění uvedených cílů případně i importovanou zahraniční produkci.

V příspěvku jsou stručně shrnuty způsoby výroby

kapalných biopaliv, které lze využít jako pohonné hmoty v dopravě, dále technické aspekty použití dvou zatím nejrozšířenějších biopaliv, bioethanolu a bionafty, pro tyto účely a jsou uvedeny možnosti jejich využití v dopravě v České republice.

Práce vznikla za podpory MŠMT ČR v rámci projektu MSM 6046137304.

LITERATURA

1. White Paper „European transport policy for 2010: time to decide“, COM (2001) 370 final, Brusel, 12.9. 2001.
2. Van Thuil E., Roos C. J., Beurskens L. W. M.: „An overview of biofuels technologies, market and policies in Europe“, ECN 7.7449.02.01., Amsterdam, Holandsko, únor 2003.
3. International Energy Agency: „Biofuels for Transport, An International Perspective“, IEA 2004.
4. Tzimas E., Soria A., Peteves S. D.: „The introduction of alternative fuels in the European transport sector, techno – economic barriers and perspectives“, Technical Report EUR 21173, Luxembourg 2004.
5. Well-to-Wheels Analysis of Future Automotive Fuels and Powertrains in the European Context – EUCAR, CONCAWE and JRC, Well-to-Wheels Report, Version 2a, December 2005.

4L-03

ALTERNATIVNÍ PLYNNÁ PALIVA V DOPRAVĚ

MILAN POSPÍŠIL a GUSTAV ŠEBOR

*Ústav technologie ropy a petrochemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
Milan.Pospisil@vscht.cz*

Plynná paliva představují další typ alternativních pohonných hmot, jejichž využití v dopravě je významně podporováno Evropskou komisí. Evropská komise vypracovala a přijala v r. 2001 program, tzv. Bílou knihu Evropské dopravní politiky, pro využití alternativních pohonných hmot v dopravě a současně i navrhla „balíček opatření“, jehož realizace by měla splnění tohoto programu zajistit. Program předpokládá, že do roku 2020 by mělo být nahrazeno 20 % motorových paliv vyráběných na bázi ropné suroviny alternativními palivy, biopalivy a zemním plynem a vodíkem.

Zemní plyn, ať již stlačený (CNG) či zkapalněný (LPG), by se měl podílet v střednědobém až dlouhodobém horizontu 2 % (r. 2010) resp. 10 % (r. 2020) na celkové spotřebě motorových paliv. Zemní plyn je z hlediska emisí skleníkových plynů výhodnější než současná klasická kapalná motorová paliva a biopaliva. Nezbytným předpokladem pro jeho větší využití je však dostatečně široká nabídka vozů na zemní plyn od výrobců a zejména pak vytvoření potřebné infrastruktury. Jedná se zejména o výstavbu dostatečného množství čerpacích (plnicích) stanic. V březnu letošního roku byla v Praze podepsána „Dohoda o rozšíření zemního plynu jako alternativního paliva v dopravě“, která má vytvořit podmínky pro rozvoj použití stlačeného zemního plynu

v dopravě na smluvním základě, kdy smluvními partnery jsou na jedné straně stát a na straně druhé RWE Transgas a osm regionálních plynárenských distribučních společností. Tato dohoda by měla garantovat vybudování 100 plnicích stanic na CNG v ČR do r. 2020 a finanční podporu plynofikace autobusů MHD.

Využití vodíku jako alternativní pohonné hmoty v dopravě se ve větší míře očekává až v dlouhodobém horizontu, kdy by měl jeho podíl na celkové spotřebě pohonných hmot dosáhnout 2 % (r. 2015) resp. 5 % (r. 2020). Velké ropné společnosti produkující klasická kapalná motorová paliva i výrobci motorových vozidel jsou přesvědčeni, že vodík je palivem budoucnosti. Pro masové využití vodíku v dopravě je ovšem třeba mít k dispozici jeho dostatečný a relativně levný zdroj a vybudovat potřebnou infrastrukturu pro jeho distribuci. Je třeba říci, že vodík není primárním zdrojem energie, ale jejím nosičem pro pohon motorových vozidel. Pro pohon motorových vozidel lze vodík využít dvěma základními způsoby:

- jako palivo ve spalovacích zážehových motorech a to buď samotný, nebo v kombinaci s dalším palivem (methan, benzin),
- jako surovinu pro elektrochemickou oxidaci v palivových článcích generujících elektrickou energii použitou pro pohon motorového vozidla.

Vodík je nejčistším palivem, při jeho spalování vzniká jako vedlejší produkt pouze voda. Z tohoto důvodu je výhodné jej použít přímo jako pohonnou hmotu pro motorová vozidla. Za perspektivní se však považuje především jeho využití v palivových článcích s ohledem na skutečnost, že při generování energie vykazují podstatně větší energetickou účinnost než motory s vnitřním spalováním. Předpokládá se, že palivové články by se mohly stát dominujícím způsobem pohonu motorových vozidel v průběhu příštích 20 až 30 let.

Bioplyn a bioplynové systémy představují energetické zdroje s pozitivními přínosy pro ochranu životního prostředí. Bioplynové systémy ve všech možných uspořádáních pracují jako plně obnovitelné energetické zdroje transformující a využívající solární energii. Základní podmínkou nutnou pro možnost využití bioplynu k pohonu motorových vozidel je dokonalé odstranění všech nežádoucích složek a příměsí tak, aby bioplyn kvalitou odpovídal kvalitě zemního plynu v distribuční síti. Použití surového či částečně vyčištěného bioplynu je možné pouze ve speciálně seřízených spalovacích motorech kogeneračních jednotek za cenu rapidního zkrácení životnosti motoru v důsledku silného korozivního působení spalin na kovové části motoru. Je však třeba poznamenat, že veškeré množství v současnosti vyráběného bioplynu se spotřebovává pro energetické účely a nejsou k dispozici volné kapacity pro výrobu bioplynu s cílem jeho použití k pohonu vozidel. V současnosti navíc není v ČR k dispozici funkční zařízení pro čištění bioplynu na kvalitu zemního plynu potřebnou v případě použití bioplynu jako alternativního paliva pro dopravu.

Směs zkapalněných uhlovodíkových plynů (LPG) je jako pohonná hmoty v dopravě již několik desítek let. Je relativně levný a jeho ekologické přednosti oproti klasickým kapalným palivům jsou jeho nespornou výhodou. Lze jej získat ze dvou zdrojů, a to ze zemního plynu a z ropných. Potenciál ropného LPG je limitován světovými zásobami ropy. Naopak očekávané zvýšení těžby zemního plynu a jeho lepší

zpracování by mělo zvýšit dostupnost LPG z tohoto zdroje. To by mělo vést i k následnému mírnému zvýšení jeho využití jako pohonné hmoty v dopravě.

V příspěvku jsou diskutovány možnosti využití plynných paliv v dopravě v ČR z pohledu potřebných zdrojů, infrastruktury, vozového parku, dopadů na životní prostředí, ekonomických a legislativních aspektů.

Práce vznikla za podpory MŠMT ČR v rámci projektu MSM 6046137304.

LITERATURA

1. White Paper „European transport policy for 2010: time to decide“, COM (2001) 370 final, Brusel, 12.9. 2001.
2. <http://www.cng.cz>.
3. A Technical Study on Fuels Technology related to the Auto-Oil II Programme, Final Report, Volume II: Alternative Fuels, December 2000.
4. Tzimas E., Soria A., Peteves S. D.: „The introduction of alternative fuels in the European transport sector, techno – economic barriers and perspectives“, Technical Report EUR 21173, Luxembourg 2004.
5. Well-to-Wheels Analysis of Future Automotive Fuels and Powertrains in the European Context – EUCAR. CONCAWE and JRC, Well-to-Wheels Report, Version 2a, December 2005.

4L-04

NOVÁ GENERACE MOTOROVÝCH OLEJŮ

JAROSLAV ČERNÝ

*Ústav technologie ropy a petrochemie, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6
jaroslav.cerny@vscht.cz*

Přednáška podává krátký přehled o situaci na trhu motorových olejů a vysvětluje potřebu nové generace motorových olejů, která je spojena s nástupem emisních limitů Euro IV. Dodržování těchto limitů je povinné od roku 2007. Limity Euro IV jsou mnohem přísnější, přibližně na polovičních hodnotách, než předcházející Euro III ve všech kategoriích regulovaných emisí. Přísnější limity Euro IV by měly přispět především ke snížení emitovaného množství pevných částic (sazí) a oxidů dusíku. Účinnější záchyt emisních složek lze provádět díky použití nových typů katalyzátorů a záchytových zařízení: např. SCR katalyzátor, EGR ventil, zařízení na záchyt částic (DPF, CRC).

Úprava výfukových plynů novými katalyzátory a záchytovými filtry vyžaduje také použití nové generace motorových olejů. Účinnost filtrů je velmi citlivá k určitým prvkům (síra, fosfor), které jsou obsaženy v motorovém oleji, a k množství popela ze spáleného paliva a oleje.

Pro správnou funkci výfukových zařízení a pro zachování jejich efektivity a životnosti je proto nutné používat motorové oleje, v nichž je obsah těchto kritických prvků podstatně snížen. Maximální limit obsahu kritických prvků je také obsažen ve všech specifikacích pro nové generace olejů (API, ACEA, JASO a klasifikace výrobců motorů). Oleje splňující tyto nové specifikace se často také označují jako tzv. „low

SAPS“ oleje. Od r. 2005 jsou např. plněny do všech nových automobilů Škoda Octavia a dalších vozů koncernu VW.

Snížení koncentrace kritických prvků vede ke snižování úrovně koncentrace aditiv a neslučuje se tak s dnešními většími nároky na motorový olej. Jedná se především o nutnost snížit obsah detergentů (obsahují kovy a tedy tvoří popel). Detergenty mají za úkol udržet motor v čistotě a jsou nositeli alkalické (neutralizační) rezervy olejů. Díky tomuto trendu se alkalita motorových olejů (TBN) snížila za poslední roky z 10 až 12 mg KOH/g až na 6 mg KOH/g u low SAPS olejů. Dalšími prvky, kterých se dotknou změny formulace olejů, jsou mazivostní přísady a vysokoteplotní antioxidanty (dialkyl-dithiofosfáty zinku). Vhodné náhrady zatím většinou nejsou k dispozici, při vývoji nových formulací olejů se spoléhá na vhodnou skladbu aditiv a jejich synergické působení.

Bude pravděpodobně nutné zvážit další vývoj v oblasti výměnných intervalů motorových olejů. V současné době se např. nedoporučuje používání nových low SAPS olejů tam, kde to není výslovně nařízeno. Jejich použití by tedy mělo být omezeno pouze na případy, kde je dieselový motor vybaven filtrem pevných částic. Pokud výrobce motoru nabízí volbu mezi low SAPS a běžným olejem, je z hlediska životnosti motoru žádoucí použití běžných motorových olejů.

Tato práce vznikla za podpory projektu Ministerstva dopravy č. 1F44G/038/150.

4L-05

PERSPEKTIVA VYUŽITÍ BITUMENOVÝCH PÍSKŮ A KEROGENNÍCH HORNIN PŘI VÝROBĚ POHONNÝCH HMOT

JOSEF BLAŽEK

*Ústav technologie ropy a petrochemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
Josef.Blazek@vscht.cz*

Zásoby extra těžké ropy v zemské kůře se odhadují na 330 Gt (z toho ve Venezuele 324 Gt)¹, zásoby bitumenu v bitumenových píscích na 412 Gt (v Kanadě 261 Gt)¹ a množství syntetické ropy teoreticky získatelné rozkladem organických látek obsažených v kerogenních horninách na 488 Gt (v USA 380 Gt)¹. Tyto zásoby, které výrazně převyšují ověřené těžitelné zásoby ropy (144 Gt)², mají velký strategický význam zejména pro průmyslově vyspělé státy dovážející ropu, protože jejich hlavní část se nachází mimo oblast Středního Východu.

Těžba a přepracování extra těžké ropy a bitumenu na syntetickou ropu jsou investičně i provozně nákladné a spotřebuje se na ně velké množství energie. Vzhledem k současným cenám ropy je zajištěna dostatečná návratnost prostředků investovaných do těžby a zpracování extra těžké ropy a bitumenu, proto se předpokládá³ nárůst těžby z cca 80 Mt v roce 2003 na více než 200 Mt v roce 2013.

Výroba syntetické ropy z kerogenních hornin je ještě nákladnější než její výroba z bitumenových písků. Kerogenní horniny se proto v současné době využívají jen v množství cca 18 Mt/rok, zejména k výrobě syntetické ropy (cca 10 Mt, z toho vyrobeno cca 0,6 Mt syntetické ropy), elektrické ener-

gie a tepla (cca 8 Mt) a v malém množství také k výrobě cementu a jiných stavebních hmot¹. Zpracování kerogenních hornin je ale většinou nerentabilní nebo nesplňuje ekologické standardy vyspělých států. Až se celkové náklady na výrobu syntetické ropy z kerogenních hornin dostanou dlouhodobě pod úroveň ceny konvenční ropy, najde tato syntetická ropa uplatnění na trhu. Vzhledem k nákladům potřebným k výrobě syntetické ropy z kerogenních hornin a k ohromnému zatížení životního prostředí, ke kterému dojde ve spojitosti s touto výrobou, nebude pravděpodobně výroba této ropy nikdy tak velká, aby byla schopna nahradit velkou část současně spotřebovávaného množství ropy.

Práce vznikla za podpory MŠMT ČR v rámci projektu MSM 6046137304.

LITERATURA

1. World Energy Council: *2004 Survey of Energy Resources* (Trinnaman J., Clarke A. ed), s. 73, 93. Elsevier, London 2004.
2. British Petroleum: *BP Statistical Review of World Energy June 2005*. <http://www.bp.com/statisticalreview>, staženo 12. července 2005.
3. Saniere A., Hénaut I., Argillier J. F.: *Oil Gas Sci. Tech. Rev. IFP* 59, 455 (2004).

4L-06

VYUŽITÍ BIOMASY JAKO OBNOVITELNÉHO ZDROJE ENERGIE

SIARHEI SKOBLJA^a, DANIEL TENKRÁT^a, MARTIN VOSECKÝ^{a,b}, MICHAEL POHOŘELÝ^b, MARTIN LISÝ^c, MAREK BALAŠ^c a ONDŘEJ PROKEŠ^a

^a *Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha,* ^b *Ústav chemických procesů AV ČR, Rozvojová 2/135, 165 02 Praha 6-Suchbát,* ^c *Vysoké učení technické v Brně, Technická 2896/2, 616 69 Brno*
skobljas@vscht.cz

Biomasa bezesporu představuje hlavní zdroj obnovitelné energie současnosti, a to jak v podmínkách České republiky, tak i v celosvětovém měřítku¹. Klíčovou otázkou ovlivňující využití biomasy je na straně jedné její dostupnost a cena, a na straně druhé nedostupnost levné a účinné technologie výroby elektrické energie². Příspěvek se v první řadě věnuje těmto kritickým otázkám a dále uvádí současný stav a diskutuje možné perspektivy budoucího vývoje¹.

Zplyňování a následné použití plynu pro výrobu elektrické energie pomocí moderních postupů s vyšší účinností než u klasických spalovacích cyklů může být, dle autorů, právě tou nejvhodnější technologií. Vyrobený plyn lze mimo jiné použít i pro výrobu náhradních kapalných a plynných syntetických paliv a tím částečně nahradit fosilní zdroje. Avšak pro realizaci těchto plánů je nutno vznikající plyn vyčistit na přísné požadavky jednotlivých technologických postupů, což klade vysoké nároky na vývoj efektivního a levného procesu čištění plynu^{3,4}.

V příspěvku také uvádíme moderní technologie výroby energetického plynu z biomasy a představujeme demonstrač-

ní, poloprovozní a provozní jednotky. Je zde také stručně shrnut současný stav dané problematiky v ČR a ve světě.

Autoři děkují Grantové agentuře České republiky za poskytnutí finanční podpory prostřednictvím grantu č. 104/04/0829 a MŠMT ČR za prostředky poskytnuté v rámci výzkumného záměru MSM6046137304.

LITERATURA

1. Skoblja S.: *Doktorská disertační práce*. VŠCHT Praha 2004.
2. Skoblja S., Malecha J., Koutský B.: *Sborník přednášek konference Chemie energetických oběhů 5* (Jukličková H., ed.) s. 290. VŠCHT, Praha 2004.
3. Hejdová P., Solich M., Vosecký M., Malecha J., Koutský B., Punčochář M., Skoblja S.: *Proceedings of the 7th conference New Trends in Technology System Operation* (Hloh S. ed.) s. 221. Ikaro, Prešov, Slovak Republic 2005.
4. Chrz V., Lisý M., Ochrana L., Skoblja S.: *Energetika* 56, 60 (2006).

4L-07

ENERGETICKÉ VYUŽITÍ VODÍKU V ČR A VE SVĚTĚ

ONDŘEJ PROKEŠ

Ústav plynárenství, koksochemie a ochrany ovzduší, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha
ondrej.prokes@vscht.cz

Zdroje energie, které v současnosti masivně čerpáme a využíváme (kapalná, pevná nebo plynná fosilní paliva), představují zásoby vyčerpatelné zdroje energie. Kdy dojde k jejich konečnému vyčerpání, je pouze otázkou času popř. matematické kalkulace.

Energetické využívání fosilních paliv vede k produkci velkého množství škodlivých látek, které nevratně poškozují životní prostředí. Jednou z možných alternativních variant je možno spatřovat ve využití jaderné energie, která je ovšem stále ve větší míře obyvatelstvem méně akceptována. Z tohoto důvodu se svět obrací právě na vodík, ve kterém spatřuje vhodnou alternativu s minimální zátěží životního prostředí ať již při jeho získávání nebo energetickém využití.

Molekula vodíku je nejmenší ze všech existujících molekul, s tím jsou ovšem spojeny i jeho další fyzikálně-chemické vlastnosti. V příspěvku prezentuji právě tyto odlišnosti a srovnávám je s vlastnostmi stávajících fosilních paliv. S odlišnými fyzikálně-chemickými vlastnostmi vodíku je nutné počítat především při dopravě, skladování nebo konečném využití.

Využití vodíku pro energetické účely je pevně spojeno s problematikou palivových článků. Z tohoto důvodu v příspěvku uvádím rozdělení palivových článků včetně přehledu jejich využití v různých oblastech.

I když jsou palivové články považovány za technologie budoucnosti, již nyní jsou k dispozici první funkční prototypy. Oblast aplikací je možné rozdělit do tří hlavních vývojových směrů. Jedna oblast je zaměřena na dopravu, tzn. auta, autobusy, lodě, ponorky, vzducholodě apod. Druhá oblast využívá

vodík v miniaturních palivových článcích, kde se nahrazují stávající klasické baterie. Jedná se o mobilní telefony, fotoaparáty, kamery, notebooky apod. Třetí oblast využití vodíku v palivových článcích zahrnuje výrobu tepla a elektrické energie. Zde se využívá flexibilního systému zapojení palivového článku tak, že lze dosáhnout modulárního výkonu od několika Wattů až k do oblasti megawattů.

LITERATURA

1. Wasserstoff – Der neue Energieträger: Studie von Deutscher Wasserstoff- und Brennstoffzellen-Verband, 22. März 2004.
2. Weber R. E., Mübig S.: *Gas/Erdgas 10/11*, 133 (1992).
3. Eisenbeiss G.: *Phys. Unserer Zeit 36*, 3 (2005).
4. Schmitz G.: *Gas/Erdgas 3*, 139 (1998).

4L-08

VYUŽITÍ LPG V ČESKÉ REPUBLICE

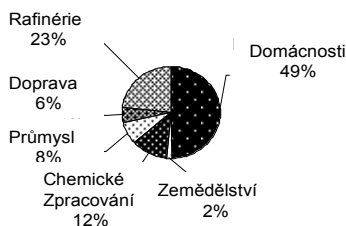
DANIELA ŘÍMANOVÁ a ONDŘEJ PROKEŠ

*Ústav plynárenství, koksochemie a ochrany ovzduší, Fakulta ochrany prostředí, Vysoká škola chemicko technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6
Daniela.Rimanova@vscht.cz; Ondrej.Prokes@vscht.cz*

Zkapalněný uhlovodíkový plyn představuje moderní a ekologické palivo. Skládá se především z propanu a butanu, přičemž mohou být přítomny i další složky – propen, buteny, penteny atd.

V posledních letech se stále zvyšuje zájem o využívání tohoto paliva. Oblasti použití je možné zhruba rozdělit na hlavní (průmysl, automobilová doprava) a vedlejší (zemědělství, domácnosti, turistika, atd.).

Počátky využívání LPG ve světě spadají do začátků dvacátého století. V automobilové dopravě se začal využívat nejprve v Německu ve 30 letech dvacátého století. V ČR byl LPG pro automobilovou dopravu využíván přibližně od poloviny dvacátého století.



Obr. 1. Procentuální rozdělení využití LPG ve světě v roce 2004

Kromě klasických způsobů využití LPG v různých odvětvích průmyslu se do popředí dostávají i moderní způsoby využití, z nichž lze jmenovat např. vytápění hal pomocí infračervených nebo využívání LPG jako hnacího plynu do sprejů.

Odhaduje se, že do České republiky je dovážen LPG z cca 50 různých zdrojů, proto je složení jednotlivých produktů velmi různorodé. Díky narůstajícímu zájmu o LPG a stále se rozšiřujícím oblastem jeho využívání je nutné znát přesné složení jednotlivých produktů LPG a jejich základní fyzikálně-chemické vlastnosti.

Největším problémem při využívání LPG jsou jeho korozivní vlastnosti. Ke korozivnímu poškození na kovových materiálech průmyslových zařízení dochází především vlivem sirných sloučenin obsažených v LPG.

Technologie využívající LPG splňují veškeré technické, bezpečnostní a legislativní zásady a aktivně naplňují principy trvale udržitelného rozvoje. Z tohoto pohledu je LPG předpokládána velká budoucnost.

LITERATURA

1. Kol. autorů: *Plynárenská příručka*. GAS s.r.o, Praha 1997.
2. WLPGA: Statistical review of global LP Gas, 2004.
3. ČSN EN 589: Motorová paliva – LPG – technické požadavky a zkušební metody, Praha 2000.

4L-09

TECHNOLOGIE SUŠENÍ A ČIŠTĚNÍ ZEMNÍHO PLYNU POUŽÍVANÉ V PRŮMYSLVÉM MĚŘÍTKU

KAREL CIAHOTNÝ a ONDŘEJ PROKEŠ

*Ústav plynárenství, koksochemie a ochrany ovzduší, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
Karel.Ciahotny@vscht.cz, Ondrej.Prokes@vscht.cz*

Zemní plyn je nutné před jeho přepravou v dálkovodech nebo před použitím k některým účelům zbavit nežádoucích látek. Jsou jimi především voda působící problémy s tvorbou hydrátů nebo některé organické látky, jejichž přítomnost v plynu vadí z nejrůznějších důvodů.

Voda se v zemním plynu vyskytuje jako doprovodná složka již v jeho nalezištích, nebo se do plynu dostává při jeho skladování v podzemních zásobnících. Při poklesu teploty plynu na hodnotu rosného bodu může dojít ke kondenzaci vodní páry a následně tvorbě pevných hydrátů zemního plynu, které mohou zcela ucpat přepravní potrubí. Proto se zemní plyn před dopravou v dálkovodech většinou suší.

Pro sušení zemního plynu byly v minulosti vyvinuty absorpční postupy pracující s glykoly (především TEG). Použití těchto sušidel v technické praxi je však spojeno s řadou problémů daných zejména malou teplotní stabilitou glykolu a jeho rozpadem během procesu tepelné regenerace. Proto jsou v poslední době vyvíjeny postupy sušení zemního plynu založené na procesu adsorpce na pevných adsorbentech. Tyto postupy umožňují nejen účinné odstraňování vodní páry ze zemního plynu, ale i dalších nežádoucích látek, jako jsou např. methanol nebo vyšší uhlovodíky.

Dne 16. 03. 2006 byla v Praze podepsána „Dohoda o rozšíření zemního plynu jako alternativního paliva v dopravě“. Účastníky této dohody jsou na jedné straně český stát a na druhé straně zástupci českých plynárenských firem (RWE Transgas a 8 distribučních plynárenských společností). Tato dohoda předpokládá zvýšení podílu zemního plynu na

celkové spotřebě pohonných hmot ze současných několika promile na 10 %, kterých by mělo být dosaženo do roku 2020. Plynárenské společnosti se budou mimo jiné spolupodílet na výstavbě plnicích stanic stlačeného zemního plynu, kterých by mělo být vybudováno do roku 2020 sto. Stát se naopak zavázal, že zemní plyn používaný pro pohon vozidel bude zatížen do roku 2020 pouze minimální spotřební daní dle směrnic EU.

V současné době je v ČR k dispozici pouze 16 plnicích stanic na CNG. Některé plnicí stanice bohužel nebyly z ekonomických důvodů vybaveny zařízením na sušení a čištění zemního plynu, což působí problémy vozidlům používajícím toto nevyčištěné palivo, zejména v zimních měsících. Vznikla tedy velká podnikatelská příležitost na trhu zařízení pro čištění a sušení zemního plynu komprimovaného na velmi vysoký tlak (až 250 bar). Technické řešení této příležitosti je hledáno v rámci výše uvedeného projektu Impuls MPO, na jehož řešení se podílí firma ATEKO a.s. Hradec Králové jako budoucí dodavatel tohoto zařízení a Ústav plynárenství, koksochemie a ochrany ovzduší VŠCHT Praha jako realizátor výzkumných prací a spoluřešitel.

Práce vznikla za podpory MPO ČR, projekt č. FI-IM/049.

4L-10 USKLADNĚNÍ ZEMNÍHO PLYNU A VYROVNÁVÁNÍ ODBĚROVÝCH KŘIVEK

MARTIN SOLICH a ONDŘEJ PROKEŠ

*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze; Technická 5,
166 28 Praha 6
martin.solich@vscht.cz*

Celková spotřeba zemního plynu v ČR činila v roce 2005 celkem 9562 mil m³. Dodávky zemního plynu do ČR se uskutčily převážně dovozem z Ruska a Norska. Dovoze je doplněn nízkým objemem vnitrostátní těžby, která činí pouze 0,6 % z celkových dodávek¹.

Těžba a doprava zemního plynu je nejehospodárnější, je-li rovnoměrná. Odběratelé však odebírají zemní plyn podle své okamžité potřeby a tedy velmi často nerovnoměrně. Hlavní příčinou nerovnoměrnosti je otopová složka odběru (především v případě malo odběratelů). Nerovnoměrnost odběru se vyjadřuje v časových odběrových cyklech denních, týdenních nebo ročních. Plynárenská soustava je schopna vyrovnat nerovnoměrnost odběru pouze při krátkodobých výkyvech. Pro vyrovnávání sezónních cyklů je nutné v letních měsících uskladnit přebytky plynu, které se naopak v zimním období těží. V České republice se používají k uskladnění výhradně podzemní zásobníky plynu.

Podzemní uskladnění zemního plynu je v současné době považováno již za standardní způsob skladování zemního plynu. Zemní plyn uskladněný v podzemních zásobnících slouží především k vykrytí těch období, kdy kapacita přepravních plynovodů je již nedostatečná a celkový odběr zemního plynu je nutno vykryvat plynem vyskladněným z podzemních zásobníků. Po vytěžení je plyn nutné upravit na smluvní parametry vyžadované odběratelem. U plynu z PZP se jedná především o odstranění vody, sušení, na požadovanou hodnotu

rosného bodu, která činí $-7\text{ }^{\circ}\text{C}$ při tlaku 40 bar.

V současnosti existuje velké množství sušících technologií založených na různých principech odstraňování vody z plynu. Základní principy uplatňující se při sušení plynu jsou chlazení, adsorpce a absorpce.

Mezi nejrozšířenější metody sušení plynu je absorpční sušení pomocí triethylenglykolu (TEG). V sušícím zařízení je glykol v protiproudém kontaktu s plynem. Nasycený roztok glykolu je zbavován vody destilací a opětovně použit².

Vlastní proces absorpčního sušení je v současnosti již dostatečně propracován a pozornost je nyní směřována na proces regenerace TEG a na řešení problémů vznikajících při provozu sušících jednotek^{3,4}.

LITERATURA

1. Vyhodnocení dodávek a spotřeb zemního plynu a ostatních plynů v ČR v roce 2005; www.upd.cz.
2. Prokeš O., Tenkrát D., Buryan P.: Plyn 1, 11 (2003).
3. Forest R.: Extending glycol life in natural gas dehydration system; International gasresearch conference 1998.
4. Solich M. Prokeš. O.: Plyn, 89–93 (2005).

4L-11 PLYNNÁ PALIVA Z ALTERNATIVNÍCH (OBNOVITELNÝCH) ZDROJŮ A MOŽNOSTI JEJICH PŘEPRAVY A DISTRIBUCE VE STÁVAJÍCÍ PLYNOVODNÍ SÍTI

DANIEL TENKRÁT a ONDŘEJ PROKEŠ

*Ústav plynárenství, koksochemie a ochrany ovzduší, VŠCHT
Praha, Technická 5, 166 28 Praha
daniel.tenkrat@vscht.cz*

Země Střední Evropy, Českou republiku nevyjímaje, jsou více než z 90 % závislé na dovozu zemního plynu. V současné době začíná být kladen stále větší důraz na obnovitelné a alternativní zdroje energie, přičemž jedním z cílů je i snaha o snižování závislosti na dovozu všech energetických surovin.

Plynná paliva z alternativních zdrojů vznikají mnoha různými způsoby, a lze je obecně rozdělit do dvou skupin: na plyny methanové a plyny nemethanové. Do první kategorie je možno zařadit plyny z odplyňování skládek, plyny z důlní degazace a bioplyn vznikající anaerobní digestcí. Mezi nemethanové plyny se řadí plyn ze zplyňování biomasy a případně některých druhů odpadů. Tyto nemethanové plyny mohou být využívány např. pro kogeneraci nebo po vyčištění mohou sloužit jako surovina k výrobě syntetického zemního plynu (SNG) díky vysokému obsahu oxidu uhelnatého, oxidu uhličitého a vodíku.

V současné době jsou v běžné praxi využívány plyny z důlní degazace, bioplyny a plyny z odplyňování skládek. V případě zplyňování biomasy se jedná z větší části o pilotní projekty, demonstrační a výzkumné jednotky, a to především z hlediska úpravy kvality vyrobeného plynu. Avšak právě technologiím zplyňování biomasy je přisuzován značný potenciál pro produkci plyných paliv.

Aby tyto plyny mohly být přepravovány plynárenskou soustavou, musí splňovat určité kvalitativní podmínky, které

se však poměrně liší, a to i v rámci EU. V České republice musí být např. splněny podmínky v ČSN 38 6110 a podmínky stanovené provozovatelem plynovodu (RWE Trngas Net).

Tyto požadavky se týkají kromě obsahu vyšších uhlovdíků, sirných sloučenin, obsahu vodní páry a minimální hodnoty Wobeho čísla také celé řady možných nežádoucích příměsí. Praktická realizace přepravy alternativních plynných paliv v plynárenské síti je potom dána použitelností technologií čištění plynů na těchto decentralizovaných zdrojích.

Podmínky pro přepravu alternativních plynů by měly být nastaveny tak, aby zaručovaly bezpečnou a spolehlivou dopravu a zároveň, aby zbytečně nezatěžovaly technicky a ekonomicky producenty těchto paliv.

LITERATURA

- Hofbauer H.: *CHISA 2004, 22.–26. August 2004, Prague*, p. 22–26.
- Tenkrát D., Prokeš O., Skoblja S.: *Conference Bioenergy 2005; 25.–27. October 2005; Trondheim*.

4L-12

VÝZKUM PROCESU PYROLÝZY V A.S.CHEMOPETROL LITVÍNŮV

**TOMÁŠ HERINK, ZDENĚK BĚLOHLAV,
PETR ZÁMOSTNÝ, JAROMÍR LEDERER
a JAN DOSKOČIL**

*CHEMOPETROL, a.s. Litvínov, 436 70 Litvínov-Záluží
tomas.herink@chemopetrol.cz*

Výroba ethylenu a propylenu pyrolýzou je jednoznačně nejvýznamnějším petrochemickým procesem chemického průmyslu. V roce 2004 se vyrobilo ve světě více než 100 mil tun ethylenu. Srovnatelně velký význam pro český chemický průmysl má výroba ethylenu a propylenu instalovaná v Chemopetrolu v Litvínově. Pyrolýza představuje velmi komplexní proces, který na jedné straně širokou paletu uhlovdíků zpracovává a na straně druhé ji produkuje. Základními surovinami pro pyrolýzu jsou rafinérské frakce – plyny, benziny a střední destiláty, speciálně v případě litvínovské pyrolýzy také vakuové frakce z procesů hydrokrakování. Význam tohoto procesu pro výrobu základních petrochemikálií je patrný z tabulky, která uvádí podíl pyrolýzy na celosvětové produkci¹. Obdobný podíl výroby petrochemikálií je i v České republice.

Vzhledem k enormním kapacitám a složitosti vlastního procesu pyrolýzy je trvalým úkolem všech výrobců zlepšovat ekonomiku a efektivitu procesu. Je-li úkolem proces řídit

Tabulka I

Výroba petrochemikálií a podíl produkovaný pyrolýzou

Petrochemikálie	[Mil t / rok]	Podíl výroby [%]
Ethylen	108	100
Propylen	65	66
1,3-Butadien	9	91
Benzen	40	55 (Evropa)

a dospět k maximalizaci produkce cenných uhlovdíků, je nutné získávat a zpracovávat značné množství informací a využívat všech dostupných prostředků, které současná úroveň techniky nabízí.

Výzkumu procesu pyrolýzy se u nás věnuje trvalá pozornost, a to zejména ve spolupráci specialistů Chemopetrolu a VŠCHT v Praze. Výsledkem dlouhodobé spolupráce je vedle získání mnoha nových teoretických poznatků zejména komplexní přístup k celému procesu, kde základem bylo skloubení a kombinace výsledků průmyslové a laboratorní pyrolýzy a matematických modelů. Z tohoto hlediska lze za určitě milníky považovat vývoj metodiky měření výtěžků na pyrolýzních pecích² a vývoj techniky pyrolýzní chromatografie³, která rozšířila možnosti výzkumu na mnoho dalších oblastí, například pro hodnocení surovin pro pyrolýzu technikou laboratorní pyrolýzy, přenos výsledků laboratorní pyrolýzy do průmyslového měřítka⁴ a vývoj několika typů modelů průmyslové pyrolýzy.

Metodou měření výtěžků na pyrolýzních pecích jsou od roku 2000 na ethylenové jednotce prováděny série experimentů zaměřené na získávání informací o výtěžcích pyrolýzy všech základních typů surovin, ověření efektivity různých kopyrolýz, ověření výsledků intenzifikace pyrolýzních pecí a ověření vlivu hlavních provozních parametrů na výtěžky produktů. Získaná data jsou kromě jiného využívána pro vývoj matematického modelu pyrolýzy⁵.

Matematický model litvínovské pyrolýzy je vyvíjen ve spolupráci VŠCHT v Praze a Chemopetrolu již od 2. poloviny 80. let. Během této doby se na jeho vývoji podílela celá řada pracovníků a studentů VŠCHT a zaměstnanců Chemopetrolu. V současné podobě je model pod názvem PYROL schopen simulovat základní vlastnosti všech typů pyrolýzních reaktorů v závislosti na složení surovin, konstrukci reaktorů a základních provozních parametrech. Model pyrolýzních reakcí zahrnuje radikálové reakce a soubor skutečných a formálních molekulárních reakcí. Popis pyrolýzovaných surovin vychází ze složitosti uhlovdíkových směsí. Ethan a LPG jsou popisovány podrobně, u primárních benzinů se používá 150 uhlovdíků, z nichž některé mohou zastupovat i více isomerů. Těžší suroviny jsou charakterizovány souborem uhlovdíků reprezentujících jednotlivé uhlovdíkové skupiny.

Vedle přímých provozních experimentů a matematického modelování a je výzkum ve spolupráci s VŠCHT zaměřen na laboratorní pyrolýzu. K tomuto je využívána technika založená na spojení řízeného pyrolýzního mikroreaktoru a plynové chromatografie. Technikou pyrolýzní chromatografie je na VŠCHT testována a zkoumána řada uhlovdíkových směsí, ať už typických surovin pro pyrolýzu, tj. benzinů, plynových olejů a destilačních zbytků z procesu hydrokrakování nebo zcela nestandardních směsí či individuálních uhlovdíků. Podle laboratorních výtěžků produktů pyrolýzy lze velmi spolehlivě vzájemně porovnávat kvalitu různých surovin z hlediska výtěžků klíčových produktů.

Stručný výčet základních technik předkládá přístup ke komplexnímu využití výsledků dlouhodobého výzkumu pyrolýzy ve spolupráci Chemopetrolu a VŠCHT v Praze. Uvedené nástroje a techniky jsou vhodné především pro hodnocení kvality surovin a optimalizaci provozních podmínek pyrolýzy. Během vývoje se osvědčilo využít a kombinovat všechny možné a dostupné zdroje informací, tj. přímá provozní měření na průmyslových pecích, výsledky testů v laboratorních reak-

toru spojené popř. s transformací laboratorních dat do provozních podmínek nebo výsledky simulačních výpočtů matematickým modelem.

LITERATURA

1. AXENS: 6th EMEA Petrochemicals Technology Conference, 2–3 June 2004, Radisson SAS Portman hotel, London.
2. Herink T., Fulín P., Lederer J., Belohlav Z.: Oil Gas J. 99 (28), 50 (2001).
3. Belohlav Z., Zamostný P., Herink T., Svoboda P.: Pyrolysis GC for thermal cracking feedstocks evaluation, Shimadzu News 3, 12 (2004).
4. Bělohlav Z., Pavlík D., Herink T., Svoboda P., Záměstný P., Marek J.: Chem. Listy 96, 325 (2002).
5. Belohlav Z., Zamostný P., Herink T.: Chem. Eng. Process 42, 461 (2003).

4L-13

VYUŽITÍ VEDLEJŠÍCH PRODUKTŮ ETHYLENOVÉ JEDNOTKY

JAROMÍR LEDERER^a, TOMÁŠ HERINK^b a PETR FULÍN^b

^a Výzkumný ústav anorganické chemie, a. s., Revoluční 1521/84, 400 01 Ústí nad Labem, ^b Chemopetrol a.s., 436 70 Litvínov – Záluží 1
jaromir.lederer@vuanch.cz

Chemopetrol, a.s. Litvínov se v oblasti petrochemie monomerů vedle problematiky výzkumu procesu pyrolýzy¹ intenzivně zabývá možnostmi dalšího zlepšení ekonomiky ethylenové jednotky využitím a zhodnocením komponent obsažených v kapalných pyrolýzních frakcích. V roce 2004 byla úspěšně zahájena výroba naftalenového koncentrátu², finalizováno know-how na výrobu dicyklopentadienu z lehkého pyrolýzního benzínu a dokončeny podklady pro proces na výrobu pyrolýzních smol z pyrolýzního topného oleje. Proces na výrobu technického DCPD rektifikací lehkého pyrolýzního benzínu vyvinul Chemopetrol ve spolupráci s VŠCHT Praha³. Dicyklopentadien je možné v navrhované technologii vyrábět šaržovitě ve dvou variantách kvality:

- A) Izolace 78 až 85% DCPD (DCPD 80), kde hlavní příměsí jsou MeDCPD.
B) Izolace 93 až 95% DCPD (DCPD 94).

V obou případech jsou dále možné dvě subvarianty výroby, a to s dimerací cyklopentadienu (CPD) v lehkém pyrolýzním benzínu nebo bez dimerace CPD. Při zavedení dimerace je možné reálně produkovat až 26 kt DCPD/rok s koncentrací 80 % a asi 20 kt DCPD/rok s koncentrací 94 %. Proces je flexibilně koncipován tak, aby mohl vyrábět v kampaních buď 80% DCPD nebo 93–95% DCPD.

Současný výzkum Chemopetrolu je kromě jiného zaměřen na komplexní propracování možných variant využití chemického potenciálu všech frakcí obsahujících nenasycené aromatické nebo alifatické uhlovodíky, které mohou být perspektivně využity jako suroviny pro výrobu uhlovodíkových pryskyřic. Dlouhodobým výzkumem bylo prokázáno, že lze z těžkého pyrolýzního benzínu (TPB) účinně koncentrovat

frakci s vysokým obsahem methylstyrenů, vinyltoluenů a indenu. Rovněž bylo prokázáno, že připravené koncentráty jsou velmi dobrou surovinou pro výrobu uhlovodíkových pryskyřic a vyhovují svými parametry obecně známým komerčním požadavkům výrobců uhlovodíkových pryskyřic. Na základě těchto výsledků výzkumu byla navržena technologie separace C9 frakce z TPB s obsahem více než 50 % využitelných látek tvořících pryskyřice (resin formers).

Z hlediska kvality potenciální suroviny je možné uvažovat buď o jednodušší jednokolonové technologii separaci „resin formers“ z TPB nebo o mnohem výhodnější a flexibilnější dvoukolonové destilaci TPB. Výhodou dvoukolonového systému je možnost vyrobit surovinu oprostěnou od nežádoucího naftalenu a oligomerů, které jsou částečně obsaženy v TPB nebo v něm postupně vznikají.

LITERATURA

1. Herink T., Bělohlav Z., Záměstný P., Doskočil J., Lederer J., Svoboda P.: Chem. Listy 99, 443 (2005).
2. Doskočil J., Malecký M.: „Nová jednotka na výrobu naftalenu. Od výzkumu k realizaci“. *Aprochem*, 20.–22. září 2004, Hotel Devět skal, Milovy – Sněžné n. Moravou.
3. Pašek J., Herink T., Fulín P.: „Výroba technického naftalenu a DCPD z pyrolýzních kondenzátů“, *Aprochem*, 13.–15. října 2003, Hotel Devět skal, Milovy – Sněžné n. Moravou.

4L-14

REAKTIVITA CYKlickÝCH A ACYKlickÝCH UHLOVODÍKŮ PŘI PYROLÝZE

LUCIE STARKBAUMOVÁ, PETR ZÁMOSTNÝ a ZDENĚK BĚLOHLAV

Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
Lucie.Starkbaumova@vscht.cz

Reaktivita i selektivita štěpení uhlovodíků při pyrolýze závisí velmi výrazně na jejich struktuře. Reaktivita navíc závisí na tom, zda je pyrolýze vystavena testovaná sloučenina ve směsi nebo samostatně. Studium reaktivity (hodnocené podle konverze) a selektivity štěpení individuálních látek proto může být vhodným nástrojem i pro hodnocení komplexnějších surovin ethylenové pyrolýzy (jako jsou např. benziny a recyklované lehké frakce).

Pro experimenty bylo vybráno několik acyklických a cyklických uhlovodíků. Ke kvantitativní analýze produktů pyrolýzy studovaných látek byla použita laboratorní pyrolýzní plynová chromatografie. Byla sledována pyrolýza individuálních sloučenin za standardních podmínek a kopyrolýza alikvotního množství testované látky ve směsi skupiny vybraných uhlovodíků i ve směsi se standardní surovinou – primárním benzinem, vedená za stejných reakčních podmínek. Závislost reaktivity byla porovnávána z hlediska délky řetězce, velikosti a počtu cyklů, počtu, délky a polohy substituentů a přítomnosti dvojné vazby v molekule uhlovodíku.

Při kopyrolýze směsi vybraných uhlovodíků se díky vyš-

šimu obsahu aktivních radikálů v reakční směsi prohlubovala konverze u uhlovodíků, které při individuální pyrolýze dosahovaly jen velmi malých konverzí. Naopak hodnoty konverze se v těchto směsích oproti dosažené konverzi při individuální pyrolýze snižovaly právě u látek, které zmiňovaných aktivních radikálů produkovaly samostatně větší množství. Kopyrolýza se proto jeví jako vhodná technika právě pro hodnocení chování individuálních sloučenin jak ve směsi s různými surovinami, tak i pro hodnocení jejich reaktivity ve skupině látek s podobnými vlastnostmi.

Práce byla podpořena interním grantem Fakulty chemické technologie VŠCHT Praha, č. 111/08/0016.

4L-15 KATALYTICKÉ PŘEMĚNY NAFTENŮ V ROPNÝCH FRAKČÍCH

DAVID KUBIČKA a JAROMÍR LEDERER

*VÚAnCh, Úsek rafinérského a petrochemického výzkumu, pracoviště Litvínov, 436 70 Litvínov – Záluží 1
david.kubicka@yuanch.cz*

Snižování emisí výfukových plynů a jejich škodlivosti je hlavní hnací silou legislativního procesu v oblasti motorových paliv. Po úspěšném snížení obsahu síry v palivech až na 10 ppm se pozornost obrací na další složky paliv, zejména pak na aromatické uhlovodíky. Důvodem je jejich podíl na tvorbě toxických emisí. Omezování obsahu aromátů v palivech znamená, že je potřeba je nahradit jinými složkami a že musí dojít i ke změnám v procesech, které jsou hlavními zdroji aromátů v palivech – katalytickém reformování a pyrolýze. Protože chemická spotřeba aromatických uhlovodíků je výrazně nižší než přebytek aromátů v surovinách pro výrobu automobilových paliv¹, je nasnadě, že je třeba se zaměřit na přeměnu aromatických frakcí tak, aby je bylo možné využít buď jako složek automobilových paliv, anebo jako surovin pro pyrolýzu.

Jednoznačně nejpřímochařejší cestou k odstranění aromátů je jejich hydrogenace na příslušné nafteny. Avšak ani nasycení veškerých aromátů není mnohdy dostačující, protože dojde např. k poklesu oktanového čísla benzinů, nedostatečnému nárůstu cetanového čísla motorových naft či nedostatečnému

Tabulka I
Oktanová čísla C₇ aromátů, naftenů a alkanů³

Sloučenina	OČVM	OČMM
Toluen	120,0	103,5
Methylcyklohexan	74,8	71,1
<i>n</i> -Heptan	0,0	0,0
3-Methylhexan	52,0	55,0
2,2-Dimethylpentan	92,8	95,6
2,4-Dimethylpentan	83,1	83,8
2,2,3-Trimethylbutan	112,1	101,3

nárůstu výtěžků ethylenu a propylenu při pyrolýze. Nabízí se proto následně zhodnocení decyklizací naftenů, již předchází hydrogenace aromátů, a to buď v samostatném stupni, anebo v jednom stupni spolu s decyklizací.

Otevření naftenického kruhu (decyklizace naftenů) je možné dosáhnout dvěma základními přístupy – selektivním a neselektivním otvíráním kruhu. Při neselektivním otvírání naftenického kruhu je decyklizace naftenu doprovázena štěpením a výsledný produkt tak obsahuje převážně C₂–C₄ uhlovodíky. Naproti tomu při selektivním otvírání naftenického kruhu dochází pouze k hydrogenolýze jedné vazby mezi uhlíkovými atomy a konečný produkt obsahuje alkanly se stejným počtem uhlíků jako měl výchozí naften².

Aromatická frakce může být upravena pro použití do automobilového benzínu kombinací hydrogenace a decyklizace vzniklých naftenů. Motivace pro takovýto přístup je zřejmá z Tabulky I. Zatímco samotná hydrogenace vede k poklesu oktanového čísla, decyklizací spojenou s isomerací je možné oktanové číslo opět zvýšit. V zájmu dosažení vysokého oktanového čísla je třeba zaručit maximální rozvětvenost výsledného alkanu. Toho lze dosáhnout selektivní hydrogenolýzou vazeb mezi sekundárními (tedy nesubstituovanými) uhlíky naftenického kruhu.

Tabulka II
Složení surovin a výtěžky produktů získané simulačním výpočtem

Surovina	F1, [hm.%]	F2, [hm.%]	F3, [hm.%]
<i>Složení suroviny</i>			
<i>n</i> -Alkany	19,1	19,1	20,8
iso-Alkany	31,6	31,6	53,4
Cyklany	33,6	48,6	25,1
Aromáty	15,5	0,5	0,5
<i>Distribuce produktů</i>			
Plyny	64,1	71,7	75,8
Pyrolýzní benzin	27,0	22,5	19,7
Pyrolýzní oleje	9,0	5,8	4,6

Benzinové frakce s vysokým obsahem aromátů jsou nevhodné pro zpracování na pyrolýze. Důvodem jsou nízké výtěžky olefinů (ethylenu a propylenu) a vysoké výtěžky pyrolýzního benzínu a pyrolýzních olejů. Primární benzin tradičně zpracováván pyrolýzou obsahuje do 6 hm.% aromátů a nepředstavuje závažnější problém. V souvislosti s nadprodukcí aromátů jsou však na pyrolýzu dodávány benziny s obsahem aromátů až 15 hm.%.

Simulační výpočty ukazují (tabulka II), že vyšších výtěžků olefinů z aromatické suroviny (F1) je možné dosáhnout v případě hydrogenace aromátů na nafteny (F2) a dále jejich přeměnou na alkanly (F3). Jak je patrné z tabulky II, snižování obsahu aromatických uhlovodíků vede k výraznému poklesu tvorby nežádoucích vedlejších produktů pyrolýzy (pyrolýzních benzinů a olejů) a k nárůstu tvorby plyných produktů, především ethylenu a propylenu. Trend ve změně složení produktů pozorovaný pro hydrogenaci (F1→F2) je zaznamenán i pro následnou decyklizaci (F2→F3).

Na příkladu výroby motorových paliv bylo ukázáno, že současný trend snižování obsahu aromatických uhlovodíků v palivech vyžaduje jejich přeměnu na látky, které jsou po všech stránkách přijatelné jako složky paliv. V některých případech může být žádoucí doplnit hydrogenaci otevřením naftenického kruhu a dále tak zvýšit oktanové nebo cetanové číslo paliva. Kombinaci hydrogenace a otevření naftenického kruhu je možné uplatnit i ke zhodnocení aromatických benzinových frakcí pro pyrolýzu a dosáhnout tak vyšších výtěžků olefinů a nižších výtěžků méněhodnotných kapalných produktů.

LITERATURA

1. Weitkamp J., Raichle A., Traa Y.: *Appl. Catal.*, A 222, 277 (2001).
2. McVicker G. B., Daage M., Touvelle M. S., Hudson C. W., Klein D. P., Baird Jr. W. C., Cook B. R., Chen J. G., Hantzer S., Vaughan D. E. W., Ellis E. S., Feeley O. C. J.: *Catal.* 210 137 (2002).
3. Guibet J. C.: *Fuels and Engines*. Technip, 1999.

4L-16

PRŮMYSLVÝ PROCES KATALYTICKÉ DEHYDROGENACE – KINETIKA A MODELOVÁNÍ

JOSEF ŠIMEK, JAROMÍR LEDERER^a, VLADISLAV KRYSTL^b a JIRÍ KOLENA^a

^a VUANCH, Revoluční 1521/84, Ústí nad Labem 400 01,

^b VŠCHT, Technická 5 Praha 6 – Dejvice 166 28

Josef.simek@eurowsupport.nl, jaromir.lederer@vuanch.cz, jiri.kolena@vuanch.cz

Práce byla zaměřena na detailní popis kinetiky přeměn jednotlivých aromatických uhlovodíků C₆ až C₉ popř. nearomátů během hydrodealkylace. Smyslem je prostřednictvím vhodně formulovaného matematického modelu získat takový popis procesu, který bude možné využít pro optimalizaci procesu hydrodealkylace a zajistit tak jeho konkurenceschopnost při zpracování aromatických surovin.

Po zahájení platnosti nové palivářské legislativy od roku 2005 vzniká riziko velkých výkyvů mezi produkcí aromátů a jejich spotřebou. Bude tlak na snižování obsahu aromátů v palivech a jejich přebytky bude nutno zpracovat na petroaromáty.

Hydrodealkylace modelových aromátů byla sledována na třech teplotních hladinách (540, 560 a 580 °C) při konstantním tlaku (5,5 MPa) a molárním poměru vodíku ku surovině rovném 10. Tlakový reaktor o průměru 40 mm byl plněn vždy standardním způsobem – prostor nad vestavbou kolem termojímky (vnější průměr 10 mm, délka od vestavy – 210 mm) byl naplněn karborundem (SiC tj. inertním materiálem pro nekatalytické pokusy) anebo dealkylačním katalyzátorem (H 9430 – oxid chromitý na alumině) do výše 130 mm. Zbýlý volný prostor nad ložem byl vyplněn drátěnou nerezovou výplní Yorkmesh až po horní přírubu reaktoru, která sloužila především pro dispergování nástřiku. Množství katalyzátoru činilo vždy 140 g.

Kapalné reakční produkty byly analyzovány pomocí plynové chromatografie. Byly rovněž odebírány a analyzová-

ny plynné reakční produkty.

Cílem experimentů bylo získat údaje pro stanovení kinetických parametrů studovaných reakcí a dále navrhnout matematický model procesu. Zpracování výsledků experimentálních měření ve formě matematického modelu umožňuje v maximální míře zužitkovat experimentálně získané informace o studovaném systému a předpovídat odezvu systému na měnící se hodnoty vstupních veličin a parametrů.

Při matematickém popisu procesu bylo třeba vzít v úvahu, že dealkylace probíhá nejen na povrchu katalyzátoru (katalytická dealkylace), ale také v prostoru mezi jeho částicemi (termická dealkylace).

Cílem celého projektu bylo vytvoření a ověření matematického modelu procesu výroby benzenu katalytickou dealkylací pyrolýzního benzínu. Tento proces s kapacitou cca 190 kt benzenu/rok je instalován v Chemopetrolu Litvínov a je to jediný proces v ČR, který produkuje benzen. Pro konstrukci modelu byly proměřeny kinetické parametry všech významných reakcí, které při katalytické dealkylaci probíhají. Tato data jsou pak výchozími parametry pro model, který jednak popisuje správně známý stav, který je charakteristický pro provozovanou jednotku, jednak umožňuje propočítat možné technologické situace dané změnami ve složení surovin nebo změnami v konfiguraci procesu. Model byl porovnán s provozními daty.

4L-17

ON EXPLANATION THE NON-ADDITIVE HIGH EFFECT OF VERY SMALL POLYETHYLENE OXIDE QUANTITIES ON INCREASED OF PROPERTIES OF FOUNDRY MOULDING MIXTURES

NIKOLA KALOFOROV^a and HAROLD MÄSIAR^b

^a Dôchodca, Heyrovského 13, 841 03 Bratislava, ^b Fakulta špeciálnej techniky, Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčine, Študentská 1, 911 50 Trenčín, Slovenská republika

For explanation the non-additive high effect of very small polyethylene oxide (PEO) quantities on increased permeability and additional change of further technological properties of foundry moulding mixtures, from all causes we wish to take apart the possibility of complex formation. Paired electrons of etheric bonded oxygen atoms of the PEO chain (-CH₂-CH₂-O-)_n are capable of forming a strong hydrogen bond with a number of compounds (including foundry binders) that are capable of accepting electrons, resulting in formation of complex compounds.

During draining of several types of sludge it has been proven that a mixture of small quantities of polyacryl amid and PEO has a higher effect than individual polymers. This synergistic effect results from complex formation among polymers and sludge components, affects as a binder on particles of the sludge.

The non-additive high changes (synergistic effect) in structure and properties of polypropylene were obtained on addition small (0.02–0.2 %wt.) PEO quantities. This fact was explained by formation of “structural” or “superstructural” complexes among the two polymers on the surface of poly-

mere or pigment particles. For a moulding mixture, similar changes of properties of the electron-accepting binder (bentonites, water, polymers, other organic substances – all in the range of 4–10 %wt.) are expected on effect of very small PEO quantities (0.02–0.15 %wt.). Nearby, the well-known binding bridge scheme should include additional bridges between two binders that are formed as a result of strong hydrogen bonds. If PEO effect in very small quantities (in the presence of further binder) then has not the possibility of stoichiometric complex compounds. In that case the resulting complex compounds should be referred to as “structural” or “superstructural”.

The ideas outlined above we wish to spread in further articles published recently on non-additive high effects of very small PEO quantities on technological properties of bentonite foundry moulding mixtures.

4L-19 VPLYV DISTRIBÚCIE POLYESTEROVÝCH FIBRÍL NA VYFARBITEĽNOSŤ ZMESNÝCH PP/PES VLÁKIEN KLASICKÝM POSTUPOM

**EVA BOLHOVÁ^{a*}, ANNA UJHELYIOVÁ^a, KAREN
De CLERCK^b a ANTON MARCINČIN^a**

^a Oddelenie vlákien a textilu, ÚPM, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika, ^b Department of Textiles, Ghent University (UGent), Technologiepark 907, 9052 Ghent Belgium
bolhova@chtfstuba.sk

Využitie polypropylénových (PP) vlákien v oblasti odevného a bytového textilu je možné ešte zvýšiť zlepšením niektorých jeho vlastností, najmä vyfarbiteľnosti klasickým postupom z kúpeľa. Oblasť zlepšenia vyfarbiteľnosti PP vlákien z kúpeľa využitím rôznych spôsobov modifikácie je veľmi aktuálna a sledovaná už od začiatku ich výroby. V poslednom období bol prezentovaný spôsob zlepšenia vyfarbiteľnosti PP vlákien z kúpeľa na základe prípravy polymérnych zmesí – prípravou zmesných PP/PES vlákien.

V závislosti od typu použitého PES dochádza pri príprave zmesných PP/PES vlákien k rôznej distribúcii PES v PP matrici v ako aj k zmenám v nadmolekulovej aj morfologickej štruktúre PP matrice^{1,2}. Zmeny zahŕňajú zníženie kryštalinity a orientácie PP vlákna ako aj vznik trojfázového systému, ktorý pozostáva z dvoch fáz čistých polymérov (PP, PES) a tretej fázy – medzifázové rozhranie medzi PP a PES. Keďže sa predpokladá, že disperzné farbivo pri farbení zmesných PP/PES vlákien z kúpeľa difunduje hlavne do PES fázy a amorfných oblastí vlákna, potom zmeny, ku ktorým dochádza vplyvom PES v nadmolekulovej a morfologickej štruktúre PP matrice, majú pri farbení týchto systémov dôležitú úlohu^{1,3}.

Práca sa zaoberá štúdiom penetrácie disperzného farbiva do zmesných PP/PES vlákien modifikovaných rôznymi typmi polyesterov (PET, PTT, PBT). Vlákna boli farbené disperzným farbivom C. I Disperse Red 86 pri teplote 110 °C klasickým vytahovacím postupom pre PET vlákna. Distribúcia farbiva v zmesných PP/PES vláknach bola hodnotená Confočálnou laserovou skenovacou mikroskopiou (CLMS), ktorá

Tabuľka I
Percento vyfarbenej plochy zmesných PP/PES vlákien pri teplote farbenia 110°C

Typ PES	% Vyfarbenej plochy z vlákna		
	5 min	15 min	30 min
PET	10,6	13	13,5
PBT	18,04	23,9	28,4
PTT	19,19	31,2	38,2
PET/PBT	9,24	10,1	13,9

využíva na pochopenie penetrácie farbiva do samostatného vlákna (fibrily) priečne rezy farbených vlákien^{5,6}. Na hodnotenie nadmolekulovej štruktúry bola použitá diferenciálna skenovacia kalorimetria (DSC).

Hodnotenie optického profilu zmesných PP/PES vlákien farbených z kúpeľa použitím CLMS poskytlo efektívne monitorovanie penetrácie disperzného farbiva do vlákna ako aj distribúciu vyfarbených PES fibril v jeho vnútri. Typ použitého PES značne vplyva na percento vyfarbenej plochy v závislosti od času farbenia zmesných PP/PES vlákien (tab. I).

Táto práca vznikla za podpory projektu APVV-20-011404 a VEGA 1/2475/05.

LITERATÚRA

- Bolhová E., Ujhelyiová A., Körmendyová E., Marcinčin A.: Vlákna a textil 3, 75 (2004).
- Marcinčin A., Andrejková A., Hricová M.: Vlákna a textil (Fibres and Textiles) 12, 57 (2005).
- Ujhelyiová A., Bolhová E., Oravkinová J., Radovan T., Marcinčin A.: Dyes and Pigments XX, 1, 2005.
- Marcinčin A., Andrejková A., Aneja A. P., Hricová M.: Polypropylene-Poly(trimethylene terephthalate) polymer blend fibres: 4th Central European Conference 2005, 7-9 September, Liberec, Czech Republic.
- De Clerck K., Van Oostveldt P., Rahier H., Van Mele B., Westbroek P., Kiekens P.: Polymer 45, 4105 (2004).
- De Clerck K., Van Oostveldt P., Rahier H., Van Mele B., Westbroek P., Kiekens P.: Polymer 46, 101 (2005).

4L-20 MOŽNOSTI RECYKLACE BINÁRNÍCH SMĚSÍ PA 12 A PP.

VERONIKA DOČKALOVÁ a JAN ŠIMEK*

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

V práci byly zkoumány vlastnosti a morfologie směsí PP/PA 12. Směsi byly modifikovány především za účelem zvýšení vrubové houževnatosti. Modifikace byla prováděna kompatibilizátorem na bázi maleinizedovaného polypropylenu za účelem zvýšení adheze na mezifázovém rozhraní nemísitelných polymerů. Byla vyzkoušena modifikace kompatibili-

zátoru pomocí kapalného polybutadienu končeného isokyanátovými skupinami. Byly vyhodnoceny mechanické vlastnosti (vrubová houževnatost, pevnost na mezi kluzu, tažnost na mezi kluzu) jak směsí nekompatibilizovaných, tak směsí kompatibilizovaných. Směsi byly též testovány pomocí DMA, DSC, SEM a IČ analýzy.

U směsi PA 12/LBD byla vyhodnocena zpracovatelská bezpečnost ze závislosti kroutícího momentu na čase a také vrubová houževnatost, tahové zkoušky a DMA analýza.

Binární směsi PP/PA 12 jsou heterogenní v celém koncentračním rozsahu. Tato heterogenita je patrná ze snímků SEN lomových ploch. DMA a DSC analýzy ukázaly, že jak amorfni, tak krystalické fáze se vzájemně výrazně neovlivňují, a tak teploty skelného přechodu i teploty tání odpovídají samotným polymerům. Vrbová houževnatost i mechanické vlastnosti (pevnost, tažnost) jsou v porovnání se samotnými polymery nižší. Jedná se tedy o dvoufázový systém.

Použitím komerčně dostupného PP-MA jako modifikátoru pro směsi PP/PA 12 došlo k lepšímu rozptýlení fázi na mezifázovém rozhraní díky vytvoření roubovaného kopolymeru PA 12-g-PP-MA. Ačkoli došlo ke zlepšení morfologie těchto směsí, DMA a DSC analýzy potvrdily, že jsou tyto systémy heterogenní. Došlo také ke zlepšení pevnosti a tažnosti těchto směsí. Nárůst vrubové houževnatosti nebyl významný.

Laboratorně připravený PP-MA-LBD také zlepšil mezifázovou adhezi mezi PP a PA 12. Jemnější morfologii směsí ukazují snímky SEM lomových ploch. Amorfni a krystalické fáze se vzájemně významně neovlivňují, a tak teploty skelného přechodu a teploty tání odpovídají samotným polymerům. Byl také zaznamenán nárůst vrubové houževnatosti, pevnosti a tažnosti.

Práce ukázala vhodnost naroubování ohebnějšího polybutadienového řetězce na komerční modifikátor PP-MA za účelem dalšího zlepšení vlastností nemísitelných kompozitů PP/PA 12.

Dále také poukázala na možnost využití LBD jako reaktivního síťovacího činidla pro PA 12. Popsané síťovací reakce vedly ke zlepšení vlastností nesíťovaného PA 12 ve srovnání se sesíťovaným.

Tato práce vznikla za podpory grantu – MŠMT – ČR CEZ – MSM 604 613 7302.

4L-21

VYSOCE VĚTVENÉ POLYIMIDY KOMBINOVANÉ S LINEÁRNÍMI POLYIMIDY

PETR SYSEL, HANA KOMPERTO VÁ, RADANA ČECHOVÁ, MARTINA TRAXMANDLOVÁ a MARIE FRYČOVÁ

*Ústav polymerů, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6
Petr.Sysel@vscht.cz*

Aromatické polyimidy jsou ceněny zejména pro svou celkovou odolnost, kterou si zachovávají v širokém teplotním rozmezí (–100 až 200 °C). Využití nacházejí zejména v mikroelektronice, leteckém průmyslu a jako polymerní

membrány¹.

Membrány připravené z lineárních polyimidů vykazují poměrně nízkou propustnost pro plynná média, ale velmi dobrou dělicí schopnost (selektivitu) pro některé směsi plynů. Na základě literárních poznatků se lze domnívat, že ke zlepšení relace mezi propustností a selektivitou by mohlo přispět využití membrán na bázi vysoce větvených polyimidů².

Vysoce větvené polyimidy ale často poskytují produkty s omezenou mechanickou stabilitou. Proto v této práci byla studována možnost ovlivnění mechanických, ale i dalších vlastností vysoce větvených polyimidů jejich kombinací s lineárními polyimidy.

Jako vstupní komponenty byly pro přípravu prekurzorů lineárních polyimidů, polyamidkarboxylových kyselin, použity dianhydridy 4,4'-oxydi(ftalanhydrid) a dianhydrid kyseliny pyromellitové a diaminy 4,4'-oxydi(benzenamin), 2,2-bis[4-(4-aminofenoxy)fenyl]propan a 1,4-bis[1-methyl-1-(4-aminofenyl)ethyl]benzen. Pro přípravu vysoce větvených polyamidkarboxylových kyselin to byly 4,4'-oxydi(ftalanhydrid) nebo 4,4'-(1,1,1,3,3,3-hexafluorpropan-2,2-diylo)-diftalanhydrid a trojfunkční 2,4,6-triaminopyrimidin v molárním poměru 1:1.

Lineární a vysoce větvené polyimidové prekurzory byly kombinovány ve formě roztoků v *N*-methyl-2-pyrrolidonu. Vrstva nanesené směsi na podložce byla termicky převedena na finální materiál, finálně 1 h při 230 °C. Materiály, obsahující až 75 hm.% vysoce větvené komponenty, měly charakter tenkých, samonosných filmů. Se zvyšujícím se podílem vysoce větvené komponenty stoupá pevnost a modul v tahu a klesá termooxidační stabilita. U některých kombinovaných materiálů rostou též koeficienty propustnosti pro dusík, kyslík a oxid uhličitý.

Tato práce byla podpořena GA ČR v rámci projektu 203/06/1086 a výzkumným záměrem MSM 6046137302.

LITERATURA

1. de Abajo J., de la Campa J. G., v knize: *Handbook of Polymer Synthesis* (Kricheldorf H. R., Nuyken O., Swift G., ed.), kap. 9 (Polyimides), s. 541. Marcel Dekker, New York 2005.
2. Fang, J., Kita H., Okamoto K.: *J. Membr. Sci.* 182, 245 (2001).

4L-22

UV CROSSLINKABLE DERIVATIVES OF PVAL

Summary of a lecture presenting principal results of author's dissertation thesis

PETR DZIK and MICHAL VESELÝ

*Fakulta chemická VUT v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno
petr@dzik.cz*

In our experimental work, we used 2 types of PVAL together with 5 types of modifying agents to prepare modified PVAL bearing lateral photopolymerisable moieties. We expect these photo-cross-polymerisable polymers to be potentially useful for a number of conventional applications (water developable photorezists, hydrophilic gels) as well as the design of "smart" inkjet receiving layers, which could be fixed by radi-

cal UV-curing process.

PVAI was modified by:

- maleic anhydride,
- methacrylic acid,
- glycidyl methacrylate,
- *N*-methacryloyl-*N*-methyl-aminoacetaldehyde dimethyl acetal, and
- methacryloyl-glycidyl-aminoacetaldehyde dimethyl acetal.

All 5 types of modified PVAI were successfully synthesized giving a wide range of samples with varying conversion degree. All samples were susceptible to photochemically induced radical cross-polymerization: upon UV exposure, aqueous solutions were converted into solid elastic gels while dry films were insolubilized. However, PVAI modified by maleic anhydride was prone to bis-ester crosslinking induced by elevated temperatures and therefore was abandoned for further study.

The properties of other modified grades of PVAI were characterised by the following methods:

- the modification process was qualitatively evaluated by FTIR spectrometry,
- the content of photocrosslinkable moieties was determined by UV spectrometry,
- surface properties were characterized by contact angle measurement,
- resist properties were characterised by resist characteristic curves, resist speed was determined and optimal photoinitiator concentration range suggested,
- thermal analysis was used to detect the changes in glass transition of modified PVAI.

We found out that the introduction of lateral moieties featuring activated carbon-carbon double bond generally decreases the polymer's hydrophilicity, making it less soluble in water and increasing the water droplet contact angle. PVAI modified by methacryloyl-glycidyl-aminoacetaldehyde dimethyl acetal is an important exception – amino group effectively compensates the hydrophobic nature of methacrylate endgroup, making modified PVAI more hydrophilic.

As far as the resist properties are concerned, we thoroughly characterised how the resist speed depends on both the concentration of photoinitiator and the conversion degree. From the observed dependancies, it was suggested that the optimal concentration of photoinitiator falls to the range of 2–4 wt.%. Generally, it was shown that the resist speed is very much influenced by the length of the spacer joining the photocrosspolymerisable endgroup to the polymeric backbone. Resist speed increases significantly with the spacer length, i.e. the resist speed depends on the mobility of the reactive endgroup. We also observed interesting relation between the content of residual acetate groups and the resist contrast.

Thermal analysis showed another trend – modification of PVAI leads to a more pronounced glass transition, but without significant influence on transition temperature. It seems that the fraction of amorphous phase increases with modification, which is supported by data from FTIR. Despite the fact that the cross-polymerization was performed in a glassy state, appreciable photochemical speeds were obtained.

Synthesized grades of modified PVAI will be used by collaborating pre- and postgraduate members of our experimental team for further study. We plan to evaluate the possible utilization of these modified grades of PVAI for the design of UV-curable inkjet receptive layers. We also investigate the possible use of UV-crosslinked hydrogel particles as heterogeneous catalyst carriers.

4L-23 LIQUID CHROMATOGRAPHY OF MACRO- MOLECULES UNDER LIMITING CONDITIONS OF ENTHALPIC INTERACTIONS

DUŠAN BEREK

Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, 842 36 Bratislava, Slovakia
dusan.berek@savba.sk

Liquid chromatographic techniques presently dominate the field of molecular characterization of synthetic polymers. The most widely used is size exclusion chromatography (SEC). Complex polymers play a specific role among synthetic polymeric materials with tailored properties. They possess more than one distribution in their molecular characteristics that is in molar mass, chemical structure or physical architecture. Comprehensive molecular characterization of complex polymers by means of SEC alone is possible only in relatively rare cases when functional dependences among molecular characteristics in the particular sample are known. In order to independently determine two distributions of molecular characteristics, two-dimensional high performance liquid chromatography of polymers (2D-LC) must be applied, in which macromolecules are successively and independently separated according to each characteristic. The problem is separation of complex polymers in the first dimension, in which effect of one characteristic, it is usually polymer molar mass, must be suppressed. At present, two groups of methods are rather widely used in analytical practice of complex polymers, namely liquid chromatography under critical conditions of enthalpic interactions (LC CC) and eluent gradient polymer HPLC (EG HPLC). Both latter methods exhibit important drawbacks and therefore further procedures are being developed for separation of macromolecules independently of their molar mass.

A novel approach will be introduced, which includes a group of methods designated *liquid chromatography under limiting conditions of enthalpic interactions*, LC LC. Similar to LC CC and EG HPLC, LC LC combines entropic (exclusion) retention mechanism with enthalpic (interaction) retention mechanisms to suppress separation of macromolecules according to their molar mass. The principle of LC LC is as follows. The column applied is packed with a porous material. Transport of small molecules through the bed of particles is slow because these permeate all packing pores. On the contrary, polymer species, which are partially or fully excluded from the pores, travel much faster along bed of packing. Appropriate column packing and/or auxiliary small molecules can be chosen so that a slowly moving barrier is created, which selectively decelerates fast transport of certain

kind of macromolecules. Macromolecules of other nature will proceed along column unhindered and thus they are separated from decelerated species. The barrier can be eluent itself and in this case macromolecules are dissolved and injected in a liquid, which promotes their elution. Polymer keeps (slowly) travelling within this elution promoting zone. On the contrary, mobile phase can promote elution of macromolecules but sample will be preceded with a narrow zone of liquid preventing elution of particular polymer species. As result, retained macromolecules will accumulate on the barrier edge while non-retained polymer species will elute unhindered. So far, three retention mechanisms were applied in the LC LC method, namely adsorption, enthalpic partition and phase separation. It is expected that the LC LC approach will be applicable also to other retention mechanisms, for example to those based on ion interactions. As adsorbent, narrow pore silica gel is advantageous column packing for polar polymers. For enthalpic partition of non-polar polymers, alkyl bonded HPLC silica gels can be applied. Small molecules of barriers promote either adsorption or enthalpic partition of macromolecules within active column packing. In the case of phase separation retention mechanism, column packing nature is less important and macromolecules are decelerated by an appropriate nonsolvent. Six resulting procedures are called

1. *LC under limiting conditions of adsorption* (LC LCA, eluent promotes polymer adsorption, sample is injected in a desorli solvent preventing adsorption of sample)
2. *LC under limiting conditions of enthalpic partition* (LC LCP, eluent promotes enthalpic partition of macromolecules, sample is injected in a solvent preventing partition)
3. *LC under limiting conditions of solubility* (LC LCS, eluent is a weak nonsolvent and sample is injected in a thermodynamically good solvent)
4. *LC under limiting conditions of desorption* (LC LCD, eluent prevents adsorption of macromolecules but sample is preceded by a narrow zone of adsorli, which promotes their adsorption)
5. *LC under limiting conditions unpartition* (LC LCU, eluent prevents enthalpic partition of macromolecules but sample is preceded with a narrow zone of liquid promoting their enthalpic partition)
6. *LC under limiting conditions of insolubility* (LC LCI, eluent dissolves sample, which is preceded with a narrow zone of a nonsolvent)

Basic features of all six above procedures will be discussed and their application to separation of synthetic macromolecules differing in their chemical composition will be

presented. Important applications of LC LC methods to discrimination of minor macromolecular components from major polymer matrix will be shown. LC LCD was also successfully applied to separation of poly(methyl methacrylate)s according to their stereoregularity. It is anticipated that LC LC methods will be also applicable to various copolymers and to many biopolymers.

Similar to LC CC and to some EG HPLC, LC LC procedures suppress effect of polymer molar mass. In an optimized LC LC system, macromolecules are eluted irrespectively of their molar mass. Compared to LC CC, LC LC procedures exhibit

- a) increased robustness. Changes in eluent composition as large as dozens of percents do not affect applicability of LC LC to separation of polymer blends
- b) no upper molar mass limit. LC LC was successfully utilized with molar masses as high as 30 million g/mol
- c) full sample recovery in case of LC LCD. This is likely resulting from the system properties. Initially, the LC LCD column is equilibrated with elution promoting liquid. Adsorli zone has not enough time to perturb this equilibrium. Moreover, both attachment and detachment of macromolecules in the course of their adsorption and desorption are very fast processes
- d) lower molar mass limit. Transport rate of oligomer molecules with molar masses of several hundreds of g/mol is similar to transport rate of barrier. In the oligomer region, LC CC is often a method of choice.
- e) important sample zone focusing, especially in case of adsorption retention mechanism. Macromolecules hindered by the adsorptive barriers produce very narrow peaks. This is important for application of LC LC as the first separation step in two-dimensional polymer HPLC. So far known two-dimensional polymer HPLC procedures suffer from extensive sample dilution during the first-dimension separation process.
- f) applicability of some LC LC procedures to discrimination of minor (< 1%) macromolecular components from polymer blends, irrespectively to their molar mass.

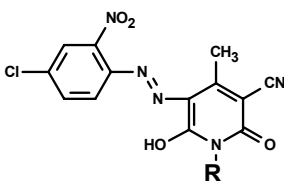
In conclusion, the LC LC procedures represent in many applications an important alternative to both LC CC and EG HPLC. Still, the full comprehension of potential and applicability of LC LC methods needs further study.

Support from the grant agencies APVV, project 51-013204 and VEGA, project 2/6016/26 is acknowledged.

4P-01**BARVENÍ POLYESTEROVÝCH VLÁKEN POMOCÍ HOMOLOGICKÝCH DISPERZNÍCH BARVIV****MICHAL ČERNÝ a JOSEF PŘIKRYL**

*Oddělení vláknitých materiálů a textilní chemie, Ústav polymerních materiálů, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice
michal.cerny@upce.cz*

V pokračování mé práce¹ jsou zde diskutovány výsledky koloristických, vyťahovacích a stálostních vlastností homologické skupiny dalších disperzních azobarviv následujícího strukturního vzorce²:



R = H, methyl, ethyl, *n*-propyl, butyl, cyklohexyl, benzyl

Obr. 1. Strukturní vzorce disperzních azobarviv

Byly připraveny žlutá disperzní azobarviva, která měla na sobě navázané různé alkyly přes dusík na pyridonovém heterocyklu.

Prvním kritériem pro hodnocení těchto barviv je jejich hodnota maximálního možného vytažení barviva na PES vlákno. Bylo zjištěno, že při směsování těchto barviv nedocházelo k odstínovému posunu směsi vůči odstínům jednotlivých složek směsi barviv. Samostatná barviva tohoto typu mají již v některých případech dostačující afinitu k PES vláknu (na rozdíl od barviv dříve publikovaných¹). Kombinací 2 barviv lze dosáhnout jen mírného zvýšení vybarvení barviva, avšak výraznějšího zvýšení maximálního vybarvení se dosáhlo směsováním 3 barviv, např. třísloužková barviva H-M-BU, H-E-BU nebo E-P-BU dosahovala dvanásťnásobek jedninové síly.

Dalším (kinetickým) kritériem pro hodnocení disperzních barviv je jejich schopnost se vytáhnout na PES vlákno, charakterizována vyťahovacími křivkami. Vyťahovací křivky byly stanoveny pro vybarvení v 1/1 RT a v 4/1 RT. Jednotlivá disperzní azobarviva dosahovala předepsanou sílu vybarvení pomaleji. Disperzní směsná barviva naopak dosahovala strmější vyťahovací křivku s rychlejším dosažením požadovaného vybarvení, a to jak při vybarvení v 1/1RT tak i v 4/1RT. Směsná barviva dosahovala také většího vyčerpání barviva z lázně a nízké adsorpce barviva na PES vlákne. Vyzdvihnout lze zvláště pak směsné disperzní barvivo H-M-BU, které dosahovalo výborných koloristických i kinetických vlastností.

Důvodem výrazně lepších koloristických i vyťahovacích vlastností u směsných barviv založených na 4-chlor-2-nitroanilinu je synergický efekt jednotlivých složek, kdy se složky barviva při barvení polyesterové stříže navzájem negativně neovlivňují. Naopak, dochází zde ke vzájemné podpoře jednotlivých složek při přechodu z lázně na vlákno. Důsledkem toho lze vhodnými kombinacemi jednotlivých složek barviv

dosáhnout vyšších limitních saturačních hodnot směsného barviva. Zvýší se tím množství barviva difundovaného do polyesterového vlákna, dále také i vyčerpání lázně a rychleji se dosáhne požadovaného vybarvení.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠM 0021627501.

LITERATURA

1. Černý M., Přikryl J.: ChemZi 1/1, 204 (2005).
2. DE 3246949, (1983).
3. Černý M., Přikryl J.: Zpravodaj STCHK 4, 40 (2004).

4P-02**„ŽIVÁ“ RADIKÁLOVÁ POLYMERIZÁCIA STYRÉNU RIADENÁ FLUORESCENČNE ZNAČENÝM REGULÁTOROM****ŠTEFAN CHMELA a ĽUDMILA HRČKOVÁ**

*Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovenská republika
upollud@savba.sk*

Princíp metódy „živej“ radikálovej polymerizácie je založený na schopnosti stabilných nitroxylových radikálov zachytávať (lapať) rastové alkylové radikály. Prechodne vzniknutý alkoxyamín sa pri vyšších teplotách (90–120 °C) rozkladá na pôvodný nitroxylový radikál a rastový radikál, ktorý počas svojej existencie je schopný adovať časť prítomných molekúl monoméru. Okamžitá koncentrácia rastových radikálov je výrazne nižšia ako pri obvyčajnej radikálovej polymerizácii. Opätovné vratné spojenie makroradikálu s nitroxylovými radikálmi takmer úplne eliminuje nevratné terminačné reakcie rastových makroradikálov (rekombinácia, disproporcionácia a prenos na monomér). Polymerizačná reakcia končí buď pri spotrebe monoméru alebo sa dá ukončiť znížením teploty. Výsledný polymér obsahuje nitroxylový radikál na konci reťazca vo forme alkoxyamínu, ktorý je schopný ďalšej rastovej reakcie. Určenie množstva aktívnych koncov reťazcov predstavuje značný problém. Doterajšie spôsoby boli buď značne nepresné (NMR spektroskopia), nepriame (post-polymerizácia) alebo si vyžadovali chemickú reakciu výmeny koncového nitroxylu za iný, ktorý sa dal detekovať spektroskopicky.

V predkladanej práci sa pripravili polystyrény „živou“ radikálovou polymerizáciou pôsobením kombinovaného regulátora mólových hmotností, ktorý okrem aktívneho stabilného nitroxylového radikálu alebo alkoxyamínu obsahoval fluorescenčnú značku. Stabilný nitroxylový radikál predstavoval 2,2,6,6-tetrametylpiiperidín-*N*-oxyl a kovalentne viazanú fluorescenčnú značku benzotioxantón. Koncentrácia značených koncov reťazcov v získaných polystyrénoch sa dala priamo merať absorbnou a emisnou spektroskopiou. Z tejto koncentrácie sa vypočítala teoretická mólová hmotnosť pre polystyrén, kde každý reťazec je zakončený aktívnou jednotkou nesúcou fluorescenčnú značku. Porovnanie týchto údajov s údajmi mólových hmotností získanými z GPC nám určil rozsah značených t.j. aktívnych koncov reťazcov. Podiel aktívnych koncov reťazcov závisel od konverzie. So zvyšovaním konverzie sa tento podiel znižoval a pri vyšších konverziách (80 %)

dosahoval hodnotu ca. 0,5. Při těchto konverziích iba každý druhý reťazec je ukončený aktívou jednotkou alkoxyaminu nesúcou fluorescenčnú značku. Z toho vyplýva, že kvantita „živosti“ procesu sa so zvyšovaním konverzie znižuje, čo by sa malo prejavíť v rastúcej polydisperzite s rastúcou konverziou. Napriek tomu index polydisperzity bol prakticky rovnaký pre všetky konverzie a dosahoval hodnotu ca. 1,3.

Táto práca vznikla s podporou grantu VEGA 2/5108/25.

4P-03 KINETIKA A MECHANISMUS VYTVRZOVÁNÍ SYSTÉMU EPOXY /ANHYDRID

FRANTIŠEK KOLÁŘ a JAROSLAVA SVÍTILOVÁ

Ústav struktury a mechaniky hornin AVČR,
V Holešovičkách 41, 182 09 Praha 8
kolar@irms.cas.cz

V práci jsou uvedeny výsledky modelového studia kinetiky a mechanismu vytvrzování pryskyřice CHS Epoxy 15 (E15) malein-anhydridem (MA), za katalýzy *N,N*-dimethylanilinem (DMA). Obsah epoxidových skupin, anhydridu, monoesteru a skupin OH byly určovány titračně, podle literatury¹⁻³.

Vznik monoesteru byl modelován reakcí MA s isopropanolem. Pro alkoholýzu katalyzovanou DMA byl odvozen vztah:

$$\frac{dC_A}{dt} = -\frac{k_7 K_6 C_{\text{DMA}}^0 C_A C_{\text{OH}}}{1 + K_6 C_A + K_8 C_M} + r_0 \quad (1)$$

kde k_i a K_i jsou kinetické a rovnovážné konstanty, C_{DMA}^0 , C_A , C_{OH} a C_M jsou koncentrace přidaného katalyzátoru, anhydridu, hydroxylů a monoesteru, r_0 je rychlost nekatalyzované reakce.

Pro nekatalyzovanou reakci E15 s monoisopropyl-maleinátém je rychlost úbytku obou reakčních složek identická a reakce je celkově druhého řádu. Přítomnost DMA vede ke urychlení reakce. Kinetickou rovnici pro úbytek epoxyskupin lze psát ve tvaru:

$$\frac{dC_E}{dt} = -\frac{k_{10} K_8 C_{\text{DMA}}^0 C_E C_M}{1 + K_8 C_M} + r_0 \quad (2)$$

kde r_0 je rychlost ne-katalyzované reakce.

Rovnici (2) lze pak zjednodušit na tvar:

$$\frac{dC_E}{dt} = -k_{10} C_{\text{DMA}}^0 C_E + r_0 \quad (3)$$

Pro vytvrzování pryskyřice E15 maleinanhydridem lze odvodit rychlostní rovnice :

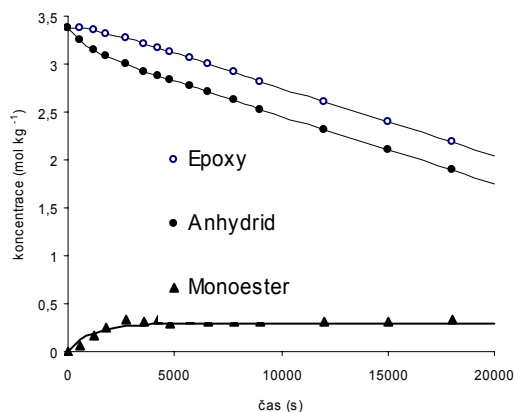
$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{k_7 K_6 C_{\text{DMA}}^0 C_A C_{\text{OH}}}{1 + K_6 C_A + K_8 C_M} \quad \frac{dC_E}{dt} = \frac{k_{10} K_8 C_{\text{DMA}}^0 C_E C_M}{1 + K_6 C_A + K_8 C_M} \quad (4)$$

Pryskyřice E15 se vyznačuje velmi nízkým obsahem hydroxylových skupin a rychlost vytvrzování je limitována právě jejich nízkou koncentrací. Pro tento případ lze rovnice (4) zjednodušit na: rovnice 1. řádu:

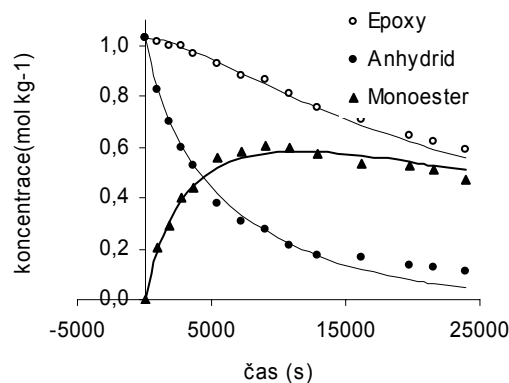
$$\frac{dC_A}{dt} = -k_7 C_{\text{DMA}}^0 C_{\text{OH}} \quad \frac{dC_E}{dt} = -k'_{10} C_{\text{DMA}}^0 C_M \quad (5)$$

$$\text{kde } k'_{10} = \frac{k_{10} K_8}{K_6}$$

a reakci lze vyhodnotit jako nultého řádu vzhledem k oběma výchozím látkám. Na obr. 1 jsou znázorněny časové závislosti koncentrací epoxyskupin, anhydridu a monoesteru pro systém E15/MA katalyzovaný DMA.



Obr. 1. Vytvrzování systému E15/MA; 0,029 mol DMA/kg, teplota 70 °C



Obr. 2. Vytvrzování systému E15/MA s přidavkem iso-propa-nolu; 0,026 mol DMA/kg, teplota 70 °C

Abychom zistili, jaký vliv má zvýšení koncentrace OH na průběh vytvrzování, přidali jsme do reakční směsi takové množství isopropyl-alkoholu, aby koncentrace OH odpovídala koncentracím anhydridu a epo-xidových skupin. Rychlost alkoholýzy není v tomto případě limitována nízkou koncentrací hydroxylů, úbytek anhydridu je rychlejší než úbytek epo-xidových skupin a v reakční směsi se proto hromadí monoester (viz. obr. 2).

LITERATURA

1. Ernest I.: *Preparativní reakce v organické chemii*. AV ČR, Praha 1959.
2. Jureček M.: *Organická analýza*. AV ČR, Praha 1955.
3. Chačapuridze N. A.: *Plastmassy* 4, 57 (1969).

4P-04

ŠTÚDIUM POVRCHOVÝCH VLASTNOSTÍ NIEKTORÝCH KONŠTRUKČNÝCH POLYMÉROV

ŠTEFAN KURUC, IGOR NOVÁK, MARIAN ŠTEVIAR a IVAN CHODÁK

*Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovenská republika
upolkurs@savba.sk*

Uvedený príspevok pojednáva o povrchových vlastnostiach vybraných konštrukčných polymérov (Polyamidov 6; 12 a Kopolyamidu 6,12). Pri charakterizácii vlastností povrchov vybraných konštrukčných polyamidov sme použili nasledovné metódy: Peel testy, meranie uhla zmáčania a určenie povrchovej energie, FTIR.

Dosiahnuté výsledky meraní budú porovnávané pre neupravené vzorky so vzorkami po opracovaní plazmatickými výbojmi (objemový koplánary výboj a povrchový bariérový výboj) v atmosférach O₂ a N₂ pri rôznych časoch opracovania.

This work was supported by WEGA 2/4042/04.

4P-05

NANOKOMPOZITY NA BÁZE BIODEGRADOVATEĽNEJ POLYMÉRNEJ MATRICE

DANIELA MOŠKOVÁ a IVAN CHODÁK

*Ústav polymérov SAV (Centrum excelentnosti CEDEBIPO), Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava
upoldamo@savba.sk*

Biodegradovateľné polyméry zaznamenávajú v súčasnosti veľkú pozornosť ako materiály vhodné na zredukovanie enviromentálnych problémov s plastovým odpadom. Pri ich aplikácii je však dôležité zamerať sa na zlepšenie niektorých nevyhovujúcich úžitkových vlastností, ktoré je do určitej miery možné odstrániť aplikáciou stužujúcich plnív. Klasifikácia biodegradovateľných materiálov v zmysle ISO 14855 pripúšťa maximálny obsah nebiodegradovateľných prísad do 5 hm.%. Z tohto dôvodu sme zamerali pozornosť na nano-

kompozity s vrstevnatými silikátmi, pri ktorých už pomerne malé množstvo plniva v polymérnej matici spôsobí výrazné zlepšenie termických a mechanických vlastností.

Nanokompozity na báze biodegradovateľnej polymérnej matrice (polykaprolaktón – PCL) a vrstevnatých silikátov (organomodifikované a prírodné Cloisity) sa pripravili miešaním v tavenine. Na základe sledovania mechanických vlastností sa stanovil optimálny obsah organomodifikovaného Cloisitu 20A 3 hm.%, zatiaľ čo prídavok nemodifikovaného Cloisitu Na sa na mechanických vlastnostiach neprejavil pozitívne. Reologické vlastnosti sa analyzovali na základe viskoelastických vlastností z oscilačného reologického merania. Nanokompozity s organomodifikovaným plnivom vykazujú vyššiu komplexnú viskozitu v porovnaní s maticou a výrazné „shear thinning“ v oblasti nízkych frekvencií. Výrazný nárast modulov v nízkofrekvenčnej oblasti a ich relatívne nízka závislosť od frekvencie poukazujú na silné interakcie medzi reťazcami polyméru a jednotlivými časticami plniva. Viskoelastické vlastnosti kompozitov sa posunuli do oblasti „solidlike“ v dôsledku prekročenia reologického perkolačného prahu a tvorby fyzikálnej siete. Štruktúrne zmeny v závislosti od koncentrácie plniva sa stanovili pomocou Cole-Cole diagramov.

Podakovanie: VEGA, grant č. 2/4024/04.

4P-06

VPLYV NANOPLNÍV NA VLASTNOTI KOMPOZITOV S KAUKUKOVOU MATRICOU

ZUZANA NÓGELLOVÁ a IVAN CHODÁK

*Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovenská republika
upolnoge@savba.sk*

Všeobecne plnivá zohrávajú dôležitú úlohu pri modifikácii polymérnych materiálov, majú najmä stužujúci efekt. Výsledné fyzikálne vlastnosti sú ovplyvnené okrem charakteru plniva aj veľkosťou častíc. V prípade nanoplíniv, kde veľkosť častíc je rádovo v nanometroch, sa predpokladá ovplyvnenie fyzikálnych vlastností už pri malej koncentrácii v kompozite z dôvodu veľkého povrchu nanočastíc.

V tejto práci sme hodnotili vplyv nanoplíniv a konvenčných plnív na mechanické vlastnosti kaučukov. Použili sme 2 typy kaučukov (prírodný a SBR) a testovali sme 5 typov nanoplíniv a robili sme porovnanie aj s jedným konvenčným plnivom (silika). Sledovali sme vplyv jednotlivých nanoplíniv v koncentrácii do 10 dsk na vlastnosti vulkanizátov, pričom sa sledoval aj efekt kombinácie nanoplíniva so silikou.

Pridaním nanoplíniva sa mechanické vlastnosti v závislosti od typu a koncentrácie nanoplíniva buď nemenili, alebo sa zlepšili a vo väčšine prípadov sa lepšie výsledky dosiahli u kompozitov s prírodným kaučukom. V prítomnosti siliky sa so zvyšovaním obsahu nanoplíniva tiež viac alebo menej zlepšovali mechanické vlastnosti. Keď porovnáme vplyv plnív na jednotlivé typy kaučukov, je zrejmé, že kým u samotných kaučukov bola ťažnosť SBR kaučuku o niečo vyššia než prírodného, pridaním niektorých plnív sa podstat-

nejšie zvýšila ťažnosť prírodného kaučuku, takže kompozity s prírodným kaučukom mali vyššie ťažnosti ako s SBR kaučukom. Porovnaním vzoriek so silikou a bez siliky sa zistilo, že prítomnosť siliky spôsobila niekoľkonásobné zvýšenie parametrov mechanických vlastností a tieto rozdiely boli podstatne väčšie u kompozitov s prírodným kaučukom.

Táto práca vznikla za podpory projektu APVT-51- 018502.

4P-07

STUDY OF SURFACE PROPERTIES AND AGING OF POLYETHYLENE TEREPHTHALATE MODIFIED BY DISCHARGE PLASMA

IGOR NOVÁK, MARIÁN ŠTEVIAR, IVAN CHODÁK,
and ŠTEFAN KURUC

*Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská
cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovenská republika
upolnovi@savba.sk*

The low surface energy and poor adhesive properties of polymers can be greatly increased by plasma modification. The most important feature of the plasma technique is that the surface properties of the polymer can be modified without changing their intrinsic bulk properties. The modification of polymers by plasma leads to changes in surface and adhesive properties. Depending on the gases used, different functional groups are formed in a thin surface layer of the polymer. Not all polymers can be equally well treated. Polyethylene Terephthalate (PET) usually doesn't need to be pre-treated for printing because the level of its surface energy in the untreated state is higher than the value needed for printing. However, for strong adhesive joints, modification of PET by discharge plasma takes an essential place.

The modification of PET foils by surface barrier discharge (SBD) plasma was performed with a laboratory plasma source at atmospheric pressure in atmosphere of N₂ or O₂ gases. The SBD generator consists of electrodes separated by an alumina dielectric plate. The discharge electrodes having the area 80 × 80 mm, and were located inside of glass cover allowing passing of the gases. The used voltage was 100 V, current intensity 1 A, and frequency was 6 kHz.

The radio-frequency discharge (RFD) source working at reduced pressure 0.1 Torr in air consists of stainless steel locked-up vacuum vessel with two circular brass electrodes having a diameter 240 mm. The voltage of RFD source was 2 kV, current density was 0.060 A, and frequency was 13.56 MHz.

A significant increase of surface energy and its polar component of PET modified by SBD plasma at atmospheric pressure in N₂ and O₂ atmosphere or RFD plasma at reduced pressure in air, as well as higher strengths of adhesive joints of modified PET to PEHA were obtained. The surface properties of PET modified by SBD plasma were higher in O₂ than in N₂ atmosphere. The growth of surface energy of PET modified by SBD or RFD plasma was caused almost solely by increase of polar component of surface energy, and the changes of the dispersion component were very small. The peel strengths of modified PET to polyacrylate increased until

power of the plasma source 1.5 W cm⁻², thereafter the strength of adhesive joints fall. The surface properties of PET modified by SBD plasma were considerably higher for freshly pre-treated PET foils compared with stored foils. The process of aging of modified PET has been observed, and an important decrease of surface parameters after 7 days of modified PET foils aging has been found. The changes of the surface properties due to aging were small.

This work was supported by grant VEGA 2/4042/04.

4P-08

STUDY OF SURFACE ENERGY AND ADHESIVE PROPERTIES OF POLYAMIDE 12 MODIFIED BY DISCHARGE PLASMA

MARIAN ŠTEVIAR, IGOR NOVÁK, IVAN CHODÁK,
and ŠTEFAN KURUC

*Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská
cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovenská republika
upolstev@savba.sk*

The polyamide 12 foil with sufficient surface and adhesive properties to other substrates can be prepared by discharge plasma modification. For improvement of bonding, and printing of polymer a surface barrier discharge plasma in medium of N₂, and O₂ as well as a radio-frequency discharge plasma in air has been studied. A significant increase in surface energy of the polymer as well as in strength of adhesive joint to more polar polymer was found.

The chemical changes of PA 12 modified by plasma were analyzed using Fourier Transform Infra Red – Attenuated Total Reflection (FTIR-ATR) spectroscopy, and X-Ray Photoelectron Spectroscopy (XPS) measurements. The observed changes of surface properties of the polymer due to aging were not important.

This work was supported by VEGA 2/4042/04.

4P-09

PŘÍPRAVA A VLASTNOSTI MEZOFÁZE ZE VZORKŮ ČERNOUHELNÉ SMOLY

VĚRA ŠUGÁRKOVÁ, EVA PLEVOVÁ a LENKA
VACULÍKOVÁ

*ÚGN AV ČR, Studentská 1768, 708 00 Ostrava – Poruba
sugarkova@ugn.cas.cz*

V důsledku snižující se produkce karbochemických produktů jsou v současnosti často sledovaným tématem nové způsoby přípravy forem průmyslového uhlíku vhodných pro uplatnění v průmyslové sféře.

Kvalitu výsledných produktů, založených na černouhelné smole příp. na vybraných petrochemických produktech zásadně ovlivňuje stupeň jejich výchozí strukturální čistoty a způsob jejich tepelného zpracování¹⁻⁴.

Tato práce je zaměřena na přípravu mezofáze ze vzorků

černouhelné smoly. Z původních vzorků byla připravena mezofáze temperací na čtyři teploty : 450, 470, 490 a 500 °C s rychlostí ohřevu 0,7 °C min⁻¹. Připravené vzorky mezofáze pak byly podrobeny hodnocení pomocí termogravimetrické a diferenciální termické analýzy, mikroskopické analýzy a infračervené spektroskopie.

Z naměřených IR spekter je zřejmé, že intenzita pásů v oblasti od 3000 cm⁻¹ do 2800 cm⁻¹ u vzorků temperovaných na nižší teploty je větší, tyto absorpční pásy potvrzují výskyt charakteristických valenčních vibračních skupin CH alifatických uhlovodíků. Naopak u vzorků temperovaných na vyšší teploty pak byly prokázány intenzivnější absorpční pásy v rozsahu 3400 cm⁻¹ do 3000 cm⁻¹, které odpovídají charakteristickým valenčním vibračním skupin CH v aromatických uhlovodících.

Mikroskopické hodnocení bylo provedeno za použití imerzního objektivu v polarizovaném světle. U jednotlivých nábrusů byl hodnocen případný výskyt sferulí mezofáze, její vývin a uspořádání anizotropních struktur. S rostoucí konečnou teplotou temperance černouhelné smoly dochází k intenzivnějšímu vývinu sferulí a vzniku anizotropních struktur.

Z termické analýzy pak byly pomocí křivek DTG zjištěny kinetické parametry procesu a také teploty maximální rychlosti oxidace mezofáze. Výskyt převážně izotropní homogenní hmoty s četnými sferulemi u vzorků mezofáze odpovídá nižším hodnotám teplot maximální rychlosti oxidace mezofáze. Výskyt anizotropních struktur pak odpovídá vyšším hodnotám teplot maximální rychlosti oxidace mezofáze. Výsledky získané termickou analýzou dobře korespondují s výsledky mikroskopické analýzy i infračervené spektroskopie.

Tato práce vznikla za finanční podpory Grantové agentury ČR v rámci grantu č. 106/05/0492.

LITERATURA

1. Marsh H.: *Introduction to Carbon Technologies*. Elsevier, Amsterdam 1997.
2. Marsh H.: *Sciences of Carbon Materials*. Elsevier, Amsterdam 2000.
3. Pajak J., Gerald I., Alain E.: *Sci. Technol. Carbon* 1, 45 (1998).
4. Gerald I.: *Fuel* 77, 6, 607 (1998).

5L-02**HISTORIE VÝROBY KAPALNÝCH MOTOROVÝCH PALIV Z MOSTECKÉHO HNĚDÉHO UHLÍ V ZÁLUŽÍ U MOSTU****OLDŘICH ŠVAJGL**

TACITA s.r.o., Litvínov
tacita@iol.cz

Přednáška má za cíl připomenout zejména mladší generaci historii vzniku, vývoje a posléze zániku významné technologie výroby kapalných motorových paliv z hnědého uhlí v Záluží v rozmezí let 1938–1970, daleko složitější, než se kdy v chemickém průmyslu u nás před tím provozovala.

Nejprve je stručně popsán vývoj této technologie v Německu po 1. světové válce na bázi dřívějších úvodních prací vědců ve světě.

Dále se uvádějí údaje o rychlém průmyslovém využití poznatků nejprve v Německu a také v Záluží u Mostu v tehdejších Sudetech během války, pak nejprve poválečný rozvoj a posléze postupný až dramatický úpadek a zánik.

Jsou podrobněji popsány zvláštnosti výroby v Záluží po válce spočívající na specifiku mosteckého hnědého uhlí a na politické situaci tehdejší ČSR.

Je vzpomenuť vliv vlastního výzkumu ve Výzkumném ústavu pro chemické využití uhlí, později uhlovdíků, v tomto závodě.

Postupné zavádění zpracování různých druhů rop na konci padesátých let vedlo k odstavení jednotlivých stupňů výroby motorových paliv z uhlí až ke konečné přeměně na ropnou rafinérii na začátku sedmdesátých let.

Závěrem je zdůrazněno, že zvládnutí obtížných částí technologie, zvláště tlakových procesů s vodíkem, vychovalo naší republice řadu mimořádně kvalifikovaných rafinérských techniků i obsluhy složitých a náročných zařízení. Tito pak mohli úspěšně uvádět do provozu velké výrobní celky při zpracování ropy nejen v Záluží, ale také v celém tehdejším státě, a rovněž např. na Blízkém Východě.

LITERATURA

- Holub J., Švajgl O., Nevošad M., Soukup A., Kopal R.: *Století benzínu. Historie rafinérského průmyslu v Českých zemích*. Pro Českou rafinérskou vydalo Asco – vydavatelství s.r.o., Praha 2005.

5L-03**KE STÉMU ROČNÍKU CHEMICKÝCH LISTŮ****PETR HOLÝ**

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemingovo náměstí 2, 166 10 Praha 6
petrholy@uochb.cas.cz

Pozorní čtenáři si již jistě všimli kulatého čísla ročníku na obálce letošních sešitů *Chemických listů*. Blížící se dovršení stoleté existence národního chemického časopisu je událostí jistě pozoruhodnou, možná i mimořádnou při neustálé obměně časopisových titulů, a tak tomuto výročí věnujeme nyní

zaslouženou pozornost.

Stoleté období je nutně časovým intervalem mnoha státoprávních a společenských změn, značných pokroků ve vědě i mnoha generačních obměn. Je důkazem mimořádné životaschopnosti časopisu, že *Chemické listy* při své prakticky nepřerušované stoleté existenci přečkaly dvě světové války, období hospodářské krize za první republiky, dobu Protektorátu, společenské otřesy po únoru 1948, v letech padesátých i v normalizačním období po roce 1968, a naposledy i převratné ekonomické změny po roce 1989. Udržet onu stoletou kontinuitu se podařilo hlavně obětavou prací a entusiasmem klíčových osobností redakce časopisu a dalších členů jednotlivých generací redakčního kolektivu.

Kulaté číslo ročníku *Chemických listů* je vhodnou příležitostí k historickému zamyšlení, ovšem hned na počátku je třeba upozornit, že historie českého chemického časopisu zasahuje ještě hlouběji. Jak můžeme vyčíst z tiráže letošních čísel *Chemických listů*, 100. ročník tohoto titulu je současně již 130. ročníkem *Listů chemických* a 116. ročníkem *Časopisu pro průmysl chemický*. „Spolek chemiků českých“ se totiž již v červnu 1875 usnesl vydávat spolkový časopis *Listy chemické*, jehož první číslo vyšlo 1. října 1876. V roce 1891 pak započali vydávat Antonín Bělohoubek a František Štolba chemický časopis zaměřený technologicky – *Časopis pro průmysl chemický*. Na společné schůzi „Spolku chemiků českých“ a „Společnosti pro průmysl chemický v Království českém“ byla 26. ledna 1907 ustavena sjednocená „Česká společnost chemická pro vědu a průmysl“. Současně byl jako spolkový orgán označen časopis s názvem *Chemické listy pro vědu a průmysl*, který sice přímo navazoval na předcházející existenci *Listů chemických*, ovšem číslování ročníků bylo zahájeno opět od jedničky, aby byl zdůrazněn nový profil časopisu.

Chemické listy se záhy staly výkladní skříní výsledků české chemie a přinesly české chemii i mezinárodní uznání, protože na stránkách *Chemických listů* (jako národního časopisu) byly zveřejňovány výsledky s významem nadnárodním. Jako příklad je možno uvést krátký článek „Elektrolýza se rtuťovou kapkovou elektrodou“, který sepsal v roce 1922 J. Heyrovský a který ve stejném roce uveřejnily *Chemické listy*. Tato práce dokumentuje základní princip polarografie, a proto je všeobecně považována za prvotní prezentaci objevu polarografie. Takto je článek v *Chemických listech* dodnes hojně citován.

Časopis se stoletou tradicí je významným odkazem minulých generací. Je proto vhodné připomenout ty, kteří se o existenci a úroveň nejvíce zasloužili. Zvláště je třeba jmenovat osoby, které zastávaly funkci šéfredaktora. Dalo by se předpokládat, že za stoletou existenci časopisu to bude dlouhý výčet jmen, ale skutečnost je jiná. Pohled zpět ukazuje, že *Chemické listy* měly (a dosud mají) mimořádné štěstí na osoby ve vedoucí redakční funkci, protože řada z nich se s maximálním osobním nasazením věnovala vedení časopisu po dlouhou řadu let. Seznam šéfredaktorů ve stoleté historii *Chemických listů* tak obsahuje pouhých devět jmen.

Chemické listy (s dovětkem „pro vědu a průmysl“) začínaly s vedením kolektivním. Z počátku byli pověřeni Emil Votoček a František Plzák redigováním části vědecké a současně František Štolba a Antonín Nydrle převzali odpovědnost za část věnovanou průmyslové chemii. Brzy se ukázalo, že je praktičtější svěřit vedení časopisu jedné vůdčí osobě.

Proto byl v roce 1908 ustanoven jako první odpovědný redaktor Josef Hanuš, který řídil *Chemické listy* od roku 1908 až do roku 1926. Po dlouholetém působení Josefa Hanuše se vedení časopisu v roce 1927 ujal Otakar Webr, která v této funkci setrval až do roku 1945. Po Otakarovi Webrovi, který řídil časopis 19 let, převzal funkci šéfredaktora od roku 1946 Josef Košťiř, který vedl redakci *Chemických listů* do roku 1951. V letech 1952–1954 byl šéfredaktorem J. Rudinger. Toho v roce 1955 nahradil v pozici šéfredaktora B. Sedláček, který tuto funkci zastával do roku 1957. V roce 1958 vedl redakci M. Kraus, od roku 1959 se pak stal šéfredaktorem J. Gut, který v této funkci setrval až do roku 1996, tedy řídil vydávání celkem 38 ročníků *Chemických listů*. Roku 1988 vstoupil do redakce B. Kratochvíl, který pak v roce 1996 převzal po J. Gutovi vedení časopisu a je vedoucím redaktorem nyní již desátý rok.

Současný redakční kolektiv usiluje o zachování dědictví stoletého titulu v co nejdůstojnější formě. V současné době je značné úsilí věnováno zachování současného rozsahu a formy časopisu. To je v současné ekonomické situaci značně obtížné. Zatím se daří nalézt způsoby získávání finančních zdrojů tak, aby byly pokryty nutné náklady, to je ovšem možné jen při dodržení vysoké hospodárnosti. Na druhé straně i minimalizace nákladů musí mít své meze, protože není cílem, aby časopis vycházel ve formě neúhledných brožurek. V tomto směru je snad dobrým kompromisem současný vzhled jednotlivých čísel.

Vzhledová stránka časopisu je sice věc důležitá, ale skutečným kritériem kvality časopisu je jeho obsah. Redaktoři jsou připraveni zpracovávat příspěvky s vysokou pečlivostí a náročností, ale základem kvalitního obsahu časopisu je dostatek zajímavých a dobře psaných příspěvků. Pro kvalitu časopisu tak stále platí to, co vyjádřil Josef Hanuš ve svém nástupním provolání, když se v roce 1908 ujal vedení časopisu. V textu se podmínečně zavazuje: ...*“udržeti Listy nejen na vědecké výši, ale vésti je k dalšímu rozkvětu... Však i tu lze úkol výše vytknutý jedině provést, je-li redaktor obklopen řadou stálých spolupracovníků, přispěvatelů.”* Stejně jako tehdy i nyní záleží především na každém členu české (a případně i slovenské) chemické obce, jak se při konkurenci jiných časopisů (možná přinašejících svým impakt-faktorem v různých hodnotících kritériích i výhodnější efekt) postaví za tradici *Chemických listů* a i v začínajícím druhém století jejich existence je podpoří svými kvalitními příspěvky.

5L-04

SOUČASNOST CHEMICKÉHO VZDĚLÁVÁNÍ V ČESKÉ REPUBLICĚ A EVROPSKÉ UNI

HANA ČTRNÁCTOVÁ

*Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Albertov 6, 128 43 Praha 2
ctr@natur.cuni.cz*

Obor, který studuje problematiku chemického vzdělávání, se u nás konstituoval v polovině 20. století. Zaměřoval se zpočátku především na problematiku výuky chemie na ZŠ a SŠ a přípravu učitelů chemie. Z původně empirického oboru se však rychle vyvíjel obor teoreticko-empirický založený

na vlastní metodologii a systémovém řešení problémů.

V současnosti je chemické vzdělávání samostatný a svébytný vědecký obor, v němž se navzájem propojují společenské a přírodovědné oblasti poznání. Je na jedné straně úzce spjatý s rozvojem samotné chemie a na straně druhé s rozvojem vzdělávání a vzdělávacích systémů u nás i v zahraničí. Zatímco však o mezinárodním charakteru chemie nebylo nikdy pochyb, v oblasti vzdělávání si každý evropský stát vytvářel vlastní, relativně samostatný systém. Některé systémy si byly do značné míry podobné, některé se výrazně odlišovaly.

V současném období však tyto rozdíly vlivem vzniku EU a postupující globalizace mizí. V rámci jednání a dohod unie se sjednocují požadavky na chemické vzdělávání na úrovni primárního, sekundárního i terciárního vzdělávání. Vznikají a rozšiřují svou působnost společnosti, které se problematikou chemického vzdělávání zabývají v rámci EU i celého světa. Mezi nejdůležitější patří DivChemEd EuChemS, ICCE IUPAC a další. Pokračují původní a přibývají nové mezinárodní časopisy zaměřené na chemické vzdělávání. Příkladem je *Journal of Chemical Education*, *CERP – Chemistry Education: Research and Practice* [online] a jiné.

Obor má tak charakter vědního oboru se všemi jeho atributy včetně mezinárodní spolupráce. V současnosti tento obor zahrnuje problematiku chemického vzdělávání ve všech jeho aspektech a na všech jeho úrovních, která je řešena a publikována v rámci mezinárodních projektů a publikací v mezinárodních časopisech a sbornících z evropských a světových kongresů a sympózií.

LITERATURA

1. Aikenhead G.: *XIth IOSTE World Symposium Proceedings*. M. Curie-Skłodowska University Press, Lublin 2006, p. 11–36.
2. Čtrnáctová H., Banýr J.: *Chem. Listy* 91, 59 (1997).
3. Čtrnáctová H.: *Chem. Listy* 98, 555 (2004).
4. Irwin A. R.: *Science Education* 84, 5 (2000).
5. Sjöberg S.: *Science and Technology Education in Europe: Current Challenges and Possible Solutions*. Connect (UNESCO), 27 (3–4), p. 1–5, 2002.

5L-05

EUROBAKALÁŘ CHEMIE

JIŘÍ BAREK^a a PAVEL DRAŠAR^b

*^a Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, 128 42 Praha 2, ^b Ústav chemie přírodních látek, VŠCHT Praha, 166 28 Praha 6
barek@natur.cuni.cz, Pavel.Drasar@vscht.cz*

Bude popsán projekt Eurobakalář chemie (Chemistry Eurobachelor – viz <http://www.cpe.fr/ectn/tuning%20eurobachelor.htm>) usilující o harmonizaci výuky chemie na úrovni bakalářského studia v rámci společného evropského prostoru vysokého školství na základě Boloňské deklarace postulující třístupňové studium (bakalářské, magisterské a doktorské). Tento projekt je důsledkem synergického působení projektu TUNING (Tuning Educational Structures in Europe) zaměřeného na sladování vysokoškolské výuky v rámci Evropské

unie (viz http://www.cpe.fr/ectn/tuning_project.htm) a projektu ECTN (European Chemistry Thematic Network – viz <http://www.cpe.fr/ectn/>). Bude popsána historie i současnost tohoto projektu a předpokládané výhledy do budoucna. Budou popsány schopnosti, znalosti a dovednosti vyžadované ve spojení s označením Eurobakalář chemie a s ním související tzv. Budapešťské deskriptory. Diskutována bude i situace při implementaci tohoto projektu v České republice. Pozornost bude věnována i rýsující se koncepci Euromagistra chemie zaměřeného na harmonizaci magisterského studia chemie v evropském měřítku.

5L-06 INTEGRACE V PŘÍRODOVĚDNÉM VZDĚLÁVÁNÍ – STUDIUM VÝCHODISEK

MARTA KLEČKOVÁ*, **RENATA HOLUBOVÁ**
a **VERONIKA KAINZOVÁ**

*Přírodovědecká fakulta Univerzita Palackého, tř. Svobody 8,
771 46 Olomouc
marta.kleckova@upol.cz*

Integrace přírodovědných předmětů proniká do vzdělávání na základních i středních školách (ZŠ a SŠ), neboť při tvorbě školních vzdělávacích programů dle rámcových vzdělávacích programů, v oblasti Člověk a příroda, kam spadají předměty fyzika, chemie, biologie a geografie, je nutná úzká spolupráce učitelů všech těchto přírodovědných předmětů¹.

Školy, resp. učitelé z pedagogické praxe řeší nelehký úkol, vypracovat model přírodovědného učiva pro 2. stupeň ZŠ a následně pro SŠ tak, aby při objasňování základních přírodovědných pojmů učiva fyziky, chemie a biologie byly maximálně účelně využívány integrované prvky výuky. Při výběru učiva je nutné brát v úvahu, že žáci v 6. třídě vstupují do výuky pro ně nově zařazených přírodovědných předmětů již s určitými vědomostmi a představami (prekoncepty)^{2,3}. Každý jedinec – žák si vybudoval své prekoncepty na základě různých zkušeností a vlivů, které na něj působily, např. absolvované předškolní a školní vzdělávání (MŠ a 1. stupeň ZŠ), zájmová činnost, sportovní aktivity, rodinné zázemí, ekonomické podmínky, sdělovací prostředky – televize, internet, tisk, apod. Při utváření prekonceptů každého žáka hrála roli řada aspektů, proto je jejich kvalitativní úroveň a správnost rozdílná, je dobré prekoncepty znát a při vlastní výuce využít.

Na Přírodovědecké fakultě UP je v běhu dílčí výzkum vybraných prekonceptů základních integrujících pojmů učiva fyziky, chemie a biologie. Nejdříve byl proveden výběr přírodovědných pojmů pro výzkum dětských představ – prekonceptů; vybrané pojmy – látka, energie, hustota. Dále byl sestaven didaktický test s 10 otázkami^{4,5}. Následoval předvýzkum (75 respondentů – žáci ZŠ) a testy byly dány k posouzení studentům VŠ, budoucím učitelům přírodovědných předmětů Ch, Bi, M, kteří se vyjádřili ke srozumitelnosti zadaných otázek v testu. Na základě výsledků předvýzkumu a vyhodnocení připomínek studentů VŠ byly některé testové otázky upraveny jak obsahově, tak graficky. V současnosti je tento didaktický test rozeslán na ZŠ po celém území ČR.

Tento výzkum probíhá za podpory grantu GA ČR 406/05/0188.

LITERATURA

1. *Rámcový vzdělávací program pro základní vzdělávání*. VÚP, Praha 2005.
2. Mandíková D.: *Matematika – fyzika – informatika* 3, 80 (1993).
3. Doulík P., Škoda J.: *Pedagogika* 53, 177 (2003).
4. Bílek M., Opatrný P.: *ChemZi* 1, 97 (2005).
5. Fahmy A., F., Lagowski J., J.: *J. Chem. Educ.* 80, 1087 (2003).

5L-07 CHEMIE KOLEM NÁS – VZDĚLÁVÁNÍ V PROJEKTECH

RENATA ŠULCOVÁ a **DANA PISKOVÁ**

*Katedra učitelství a didaktiky chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Albertov 6, 128 43 Praha 2
rena@natur.cuni.cz, dana.piskova@seznam.cz*

V přípravě budoucích učitelů chemie na UK v Praze, PŘF seznamujeme studenty vedle nových a aktuálních oborových vědomostí též s vzdělávacími systémy u nás i v EU, s kurikulárními dokumenty pro vzdělávání, rámcovými a školními vzdělávacími programy. V rámci didaktické přípravy uplatňujeme moderní trendy chemického vzdělávání včetně aktivizačních metod i forem práce, praktických ukázek, využití multimedií i možností internetu.

Pro aplikaci moderních metod řízení vyučovacího procesu v profesní přípravě učitelů se nám osvědčilo uplatnění vlastní tvořivosti studentů v didaktice chemie rozličnými metodami práce. Jednou z nejvhodnějších metod pro uplatnění inovačních snah ve vysokoškolské přípravě a výuce jsou projekty seminářů, založené na řešení komplexních teoretických a praktických problémů na základě aktivní činnosti studentů. Jednotlivci či malé skupinky studentů tvoří, prezentují a ověřují výsledky své práce z témat učiva středoškolské chemie, zpracované pomocí kancelářských i chemických software a moderní didaktické prezentační techniky. Produktem těchto projektů je řada hotových materiálů bezprostředně použitelných pro výuku chemie velmi efektivními metodami – např. zadání úloh a námětů pro žáky, ale i „možná“ řešení pro učitele, pracovní listy a příslušné návody k pokusům, návrhy ověřovacích testů, seznamy doporučené literatury, odkazů a internetových adres. Součástí projektů je i odhad časové náročnosti, návrh organizačního plánu práce, vhodná motivace, metodika, doporučení možných způsobů prezentace výsledků a hodnocení jednotlivých etap projektů. Tak vznikají zajímavé databáze materiálů a didaktických pomůcek pro chemické vzdělávání, které získává vždy celá skupina studentů – autorů ve formě CD ROM¹: „Nápadník I“ (2003); „Nápadník II“ (2004); „Náměty a pomůcky“ (2004); „Nápadnice“ (2005). Letos vznikl obsáhlý soubor kvízů, her, testů a námětů, nazvaný „Chemikovo kukátko“ (2006), na kterém se podílelo celkem 40 autorů. Vytvořené materiály i didaktické pomůcky lze dále používat při pedagogických praxích či ve vlastním zaměstnání, neboť je možno je kdykoli vytisknout nebo upravovat podle aktuální potřeby, doplňovat a rozšiřovat.

Na středních školách se nám podařilo od r. 2000 realizovat

vat postupně několik úspěšných projektů na téma Chemie kolem nás², např. „Voda nad zlato“ (2002), „Tuhy a mýdla“ (2002), „Přírodní látky a naše tělo“ (2003), „Chemie v mikrovlnné troubě“ (2004), „Vonné látky a potravinářské přísady“, „Barviva všude kolem nás“ (2005).

LITERATURA:

1. Šulcová R.: Příprava učitelů chemie s uplatněním ICT. *Alternativní metody výuky 2*. VFU, Praha – Brno 2004.
2. Šulcová R., Chalupová M., Pisková D.: Projekty na téma „Chemie kolem nás“. *Aktuální otázky výuky chemie XV*. Gaudeamus, Hradec Králové 2005.

5L-08**PROBLEMATIKA AROMATICITY V UČIVU ORGANICKÉ CHEMIE**

JOSEF HALBYCH, SIMONA HYBELBAUEROVÁ, DANA PISKOVÁ a RENATA ŠULCOVÁ

Katedra učitelství a didaktiky chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Albertov 6, 128 43 Praha 2

V učivu organické chemie na středních školách, kde je chemie vyučována jako všeobecně vzdělávací předmět (gymnázia a SOŠ), jsou některé tématické úseky, týkající se struktury a reaktivity látek, teoreticky náročné. Jako příklad lze uvést problematiku charakteristiky aromatického stavu (aromaticity) benzenu a dalších aromatických látek. Proto se hledají další možnosti, jak tyto partie učiva optimálně interpretovat a maximálně usnadňovat jejich osvojení.

Úvodní částí učiva o aromatických uhlovodících – arenech – je charakteristika a porozumění pojmu „aromaticita“, odvození jejich struktury pomocí teorie orbitalů s poukazem na odlišnost reaktivity oproti alkenům či alkynům. Aromatické molekuly jsou relativně chemicky stálé a poskytují pouze určité typy reakcí za definovaných podmínek. Didakticky lze učivo o aromaticitě zvládat bez kvantitativních přístupů, které nejsou předmětem učiva na střední škole, vhodnou obsahovou strukturací a promyšleným využitím názorných výukových prostředků, včetně multimediálních programů.

Uspořádání poznatků o aromaticitě se osvědčuje v naznačeném sledu: elektronová struktura organogenních prvků (C, H), rovinné uspořádání molekuly benzenu (koplanarita), vznik elektronového oblaku nad a pod rovinou kruhu tvořeného π orbitaly (delokalizace π elektronů), aromaticita naftalenu, anthracenu a dalších látek. K vysvětlení aromatického stavu se také připojuje energetické hledisko, tj. rozdílná rezonanční energie benzenu (spalná a hydrogenační tepla) oproti hydrogenačnímu teplu hypotetické molekuly cyklohexa-1,3,5-trieny. Je zde možno zahrnout i příklady strukturálně blízké aromatickému stavu.

Ve strukturovaném učivu je didakticky účelné uvést problematiku aromaticity s vyčleněním řady monocyklických konjugovaných polyenů počínaje cyklopropenem. Dosavadní analýza cílů výuky v tématu Areny, s uvedenou posloupností poznatků, vykazovala dobré výsledky v jejich osvojení.

LITERATURA

1. McMurry J.: *Organic chemistry*. Brooks/Cole 2004.

2. Kolář K. a Kodíček M.: *Chemie II*. SPN, Praha 1997.
3. Pacák J.: *Jak porozumět organické chemii*. Karolinum, Praha 1997.

5L-09**PROJEKTOVÁNÍ VÝUKY CHEMIE PROSTŘEDNICTVÍM EXPERIMENTŮ**

PETR KOLOROS

Gymnázium Pierra de Coubertina, 390 30 Tábor

V souvislosti s novými kurikálními dokumenty projektu-jeme experimentální činnost žáků směrem k očekávaným výstupům a kompetencím, zde v tématu kovy.

Žáci spolu s učitelem analyzují možnosti školní chemické laboratoře a navrhnou postup, kterým by bylo možno, při laboratorních cvičeních, určit neznámý kov podle jeho fyzikálních vlastností. Základem postupu bude změření hmotnosti vzorku kovu s přesností na dvě desetinná místa. Následuje zjištění objemu v odměrném válci. Variantou je zde využití pyknometru.

Ukutečnění chemického rozboru je, opět po diskuzi se žáky, rozpuštění části vzorku v kyselině a důkaz kationtu. Kvalitativní analytické reakce kationtů již studenti absolvovali, takže vedle potřebné literatury mohou využít i svých zkušeností. Specifickým úkolem by byl rozbor slitiny dvou kovů.

Organizací cvičení ve funkci manažera je pověřen jeden nebo více žáků, kteří vedle své práce pomáhají při rozdávání vzorků, pomůcek a zde potřebných činidel, dohlížejí na časové limity a pomáhají s vyhodnocováním vzorků. Jsou za tento výkon zvláště hodnoceni. Práci provádějí žáci po skupinách, většinou ve dvojicích. Svě výsledky si ověří u vyučujícího.

Podle textu v učebnici, s využitím Beketovovy elektrochemické řady, navrhnou studenti způsob laboratorního porovnání schopnosti určitého kovu působit jako oxidační (redukční činidlo). Jako nápověda a motivace zde bude očištěný hřebík ponořený do roztoku síranu měďnatého, zavěšení zinkového plíšku do roztoku dusičnanu olovnatého (Saturnův strom) a vložení kapky rtuťi do roztoku dusičnanu stříbrného (Dianin strom). Pro úspěšné zvládnutí tohoto úkolu předvádí vyučující správnou interpretaci dat a jejich zobecnění. Na žácích je, aby navrhli např. tabulku, ve které budou na jedné straně kationty kovů, na druhé straně volné kovy a vzájemnými reakcemi dospějeme k závěru o jejich pořadí podle schopnosti tvořit kationty.

V hodnocení celé práce se objeví též stupeň osvojení laboratorních dovedností a manažerská schopnost žáků pověřených organizací.

Změnou oproti stávajícímu pojetí laboratorních prací je tedy větší míra spoluúčasti studentů na přípravě, řízení a hodnocení výsledků.

LITERATURA

1. Flemn V., Dušek B., : *Chemie (obecná a anorganická) pro gymnázia I*. SPN, Praha 2001.
2. Prášilová M.: *Tvorba vzdělávacího programu*. Triton, Praha 2006.
3. Vohlídal J. a kol.: *Chemické tabulky (pro SPŠCH)*. SNTL, Praha 1982.

5L-10 ŠKOLNÍ CHEMICKÉ EXPERIMENTY S REVERZIBILNÍMI A IREVERZIBILNÍMI KAPESNÍMI OHŘÍVAČI

PAVEL OPATRNÝ^a a MARTIN BÍLEK^b

^a Katedra učitelství a didaktiky chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Albertov 3, 128 43 Praha, ^b Oddělení didaktiky chemie Katedry chemie Pedagogické fakulty Univerzity Hradec Králové, Rokitanského 62, 500 03 Hradec Králové

Pavel.Opatrny@atlas.cz, Martin.Bilek@uhk.cz

Výuka přírodovědných předmětů, jako součást všeobecného vzdělávání chemií nevyjimaje, většinou pozdě reaguje na aktuální vývoj v daném oboru. To může být jedním z faktorů snižujících motivaci studentů k jejich výuce i celkově k jejich nízké oblíbenosti. Zařazováním poznatků o věcech a jevech z každodenního života je možné podstatným způsobem zvýšit zájem o přírodovědnou výuku. Ke skupině materiálů s širokou paletou využití, ale ne příliš známého složení a principů probíhajících dějů, které se těchto materiálů týkají, patří i tzv. reverzibilní a ireverzibilní kapesní ohřivače („chemické ohřivače“). Z mnoha typů kapesních ohřivačů jsme se zaměřili při ladění školních chemických experimentů na reverzibilní kapesní ohřivače na bázi tzv. „podchlazeného gelu“ trihydrátu octanu sodného nebo pentahydrátu thiosíranu sodného a na ireverzibilní latentní ohřivače na bázi exotermické reakce oxidace železa.

Jejich širšímu rozšíření jako komerčních produktů u nás dosud bránila především vysoká cena a nízká dostupnost, což nyní razantně mění jejich tuzemská výroba. Aplikace ve výuce chemie se zaměřuje zejména na objasnění reakčního mechanismu a energetických změn, k nimž dochází při reakci, na technické parametry komerčních produktů, na oblasti využití atd. Praktické aplikace zahrnují provádění školních experimentů s návrhem optimální měřicí aparatury. Jde např. o měření změn teploty u komerčních ohřivačů v závislosti na různých okolních podmínkách (měření teploměrem nebo pomocí teplotního čidla počítačového měřicího systému), o demonstraci principu reverzibilních ohřivačů prostřednictvím experimentů s nasyceným roztokem $\text{CH}_3\text{COONa} \cdot 3 \text{H}_2\text{O}$ aj.

Tato práce vznikla za podpory projektu Specifického výzkumu PdF UHK 2006 „Nové materiály a technologie v integrovaných přírodovědných výukových projektech pro všeobecné vzdělávání“.

LITERATURA

1. Kometz A.: *Moderne Energietechnologien*. Band 1. Martin-Luther-Universität, Halle-Wittenberg 2001.
2. Schmidkunz H.: *Naturwissenschaften in Unterricht Chemie*. 10, 54, 15 (1999).
3. Blume R.: *Wärmekissen: Schnelle Wärme aus Kristallen*. [online] *Bildungserver für Chemie*. [cit. 2005-12-12]. Dostupné z: http://dc2.uni-bielefeld.de/dc2/tip/01_99.htm.

5L-11 JEDNODUCHÝ POLAROGRAF S POČÍTAČOVÝM ŘÍZENÍM

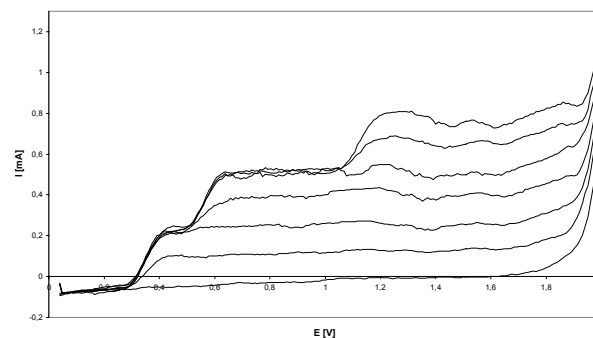
JAN HRDLIČKA a JAN HUSPEKA

Katedra chemie Pedagogické fakulty, Západočeská univerzita v Plzni, Veleslavínova 42, 306 14 Plzeň
hrdlicka@kch.zcu.cz

Tato práce si klade za cíl ukázat aplikaci poznatků z chemie, z fyziky i z elektrotechniky a programování při řešení komplexního problému a naznačit tím současný trend mezioborových výzkumů. Pro přiblížení instrumentální analýzy byla zvolena polarografie, protože je pracováno přímo s elektrickými veličinami napětím a proudem¹.

Adaptér jsme rozdělili do čtyř samostatných bloků. Jedná se o A/D převodník², převodník D/A³, blok stabilizátorů, kde získáváme referenční napětí a napájecí napětí A/D převodníku a blok napájení, který generuje stejnosměrné napětí +/- 15V (cit.⁴).

Jádrum programu je software ovládající A/D převodník. Původní software³ jsme mírně upravili. Hodnoty načtené A/D převodníkem jsou zapisovány do souboru tak, aby bylo možno data snadno načíst do programu EXCEL, kde je možno je dále zpracovávat.



Obr. 2. Polarogramy pro jednotlivé přídatky Pb^{2+} , Cd^{2+} a Co^{2+}

Adaptér jsme testovali měřením polarogramů pro dva přídatky iontů Pb^{2+} , Cd^{2+} a Co^{2+} . Pro toto konkrétní zapojení lze stanovit obsah iontů o koncentraci řádově $10^{-4} \text{ mol l}^{-1}$.

Celý adaptér byl navrhován jako stavebnice na základě publikovaných jednoduchých zapojení. Lze jej dále rozšiřovat a zlepšovat jeho funkce. Postavený přístroj lze používat jako jednoduchý polarograf pro laboratorní cvičení.

LITERATURA

1. Volf R., Karlík M.: *Elektroanalytické metody*. Ediční středisko VŠCHT, Praha 1993.
2. Kainka B., Berndt H.: *Využití rozhraní PC pod Windows*. HEL, Ostrava-Plesná 2000.
3. measure.feld.cvut.cz/groups/edu/cmm/DAC08.pdf
4. Amatérské radio 6, 2 (2006)

5L-12**LABORATORNÍ EXPERIMENTY ŘÍZENÉ
MULTIFUNKČNÍM PŘÍSTROJEM****EVA URVÁLKOVÁ, PETR ŠMEJKAL a HANA
ČTRNÁCTOVÁ***Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Albe-
rtov 6, 128 43 Praha 2**urvalkov@natur.cuni.cz, psmejkal@natur.cuni.cz,
ctr@natur.cuni.cz*

Málokteré současné školní chemické laboratoře reflektují reálnou laboratorní praxi, kde značná část měření bývá prováděna přístroji ovládanými mikroprocesorem, často ve spojení s počítačem. Studenti SŠ tak nejen ztrácejí kontakt s moderními metodami práce v chemické laboratoři, ale zároveň i zájem o chemii, pokud dostatečně nevyužívá ICT.

V řešení daného problému mohou pomoci multifunkční přístroje, které umožňují měřit i více fyzikálně-chemických veličin v závislosti na připojeném čidle, a jsou finančně i metodicky dostupné uživatelům ze SŠ. Staršími systémy jsou např. ISES nebo IP-Coach, jak uvádí publikace^{1,2}. Nicméně bouřlivý rozvoj informačních technologií ve všech oblastech lidského konání vyžaduje i vývoj stále modernějších přístrojů, grafických rozhraní a metod vhodných pro výuku na SŠ a VŠ.

Jedním z takových moderních přístrojů vhodných pro středoškolskou laboratoř může být Pierron Infraline Graphic s přídavným software DidexPro. Náš příspěvek, navazující na prvotní testování přístroje³, se zabývá zpracováním sady laboratorních úloh z chemie realizovatelných pomocí tohoto přístroje a příslušného software. Při návrhu úloh jsme vycházeli převážně z publikací^{4–8}. Ukazuje se, že tento přístup k provádění laboratorních experimentů vyniká zejména vyšší didaktickou hodnotou, neboť odezvu přístroje a průběh děje lze sledovat přímo při samotném měření, je přístupný svou jednoduchostí z hlediska provedení i zpracování naměřených dat a může zdokonalit nejen teoretické znalosti a vědomosti studentů z chemie a fyziky, ale také jejich praktické dovednosti, včetně využití současných informačních technologií.

LITERATURA

1. Bílek M. aj.: *Výuka chemie s počítačem*. Gaudeamus, Hradec Králové 1997.
2. Bílek M.: *Chem. Listy* 91, 1074 (1997).
3. Urválková E., Šmejkal P., Čtrnáctová H.: *Využití přístroje „Infraline Graphic“ při laboratorním experimentu*. V: Aktuální otázky výuky chemie, s. 396–401. Gaudeamus, Hradec Králové 2005.
4. Kolektiv autorů: *Pierron Infraline Graphic – uživatelská příručka*. Pierron Praha, Praha 2004.
5. Čermáková L. aj.: *Analytická chemie (1. a 2. díl)*. SNTL, Praha 1984.
6. Zýka J. aj.: *Analytická příručka 1 a 2*. SNTL/ALFA, Praha/Bratislava 1988.
7. Čtrnáctová H., Halbých J.: *Didaktika a technika chemických pokusů*. Karolinum, Praha 1997.
8. Žusková I. aj.: *Praktikum z fyzikální chemie [online]*. [Cit. 2005-07-15] <http://www.natur.cuni.cz/~zuskova/>.

5L-13**VÝBĚR TÉMAT PRO DALŠÍ VZDĚLÁVÁNÍ
UČITELŮ – CO ZAJÍMÁ UČITELE CHEMIE****MARTA KLEČKOVÁ***Přírodovědecká fakulta Univerzita Palackého, tř. Svobody 8,
771 46 Olomouc**marta.kleckova@upol.cz*

Přírodovědecká fakulta UP úzce spolupracuje se školskou praxí v oblasti dalšího vzdělávání pedagogických pracovníků (DVPP). Obor chemie pravidelně pořádá kurzy DVPP pro učitele přírodovědných předmětů. V posledních letech byly na PřF UP akreditovány MŠMT vzdělávací programy DVPP „Výuka chemie v novém tisíciletí“ (platnost akreditace 2002–2003), „Toxikologie pro učitele přírodovědných předmětů“ (platnost akreditace 2005–2006). V letošním roce byla získána akreditace MŠMT vzdělávacího programu DVPP „Zařazení moderních přírodovědných poznatků do výuky na SŠ a ZŠ“ (platnost akreditace 2006–2009).

Program jednotlivých kurzů je vždy sestavován dle požadavků pedagogické praxe, které pravidelně sledujeme, abychom učitelům nabízeli témata, která je zajímají nebo problematiku, která je páli.

Posledního dotazníkového šetření se zúčastnilo 102 respondentů (učitelé chemie SŠ a ZŠ). Učitelé měli možnost vybrat (z nabídky 17 námětů) či doplnit témata, problematiku, o kterých by chtěli získat více informací a kompetencí na takové úrovni, aby je mohli využít ve výuce chemie, případně jiného přírodovědného předmětu.

Největší zájem učitelů (více jako 50 %) je o tato témata:

- bezpečný provoz školní laboratoře (minimalizace odpadu při realizaci experimentů, „nejedovaté pokusy“, apod.),
- jednoduché chemické experimenty pro ZŠ a SŠ,
- vývoj nových léčiv a možnosti jejich aplikace při léčení vybraných chorob (AIDS, rakovina, atp.),
- tvorba Školního vzdělávacího programu dle RVP¹ – chemie.

Dále následoval zájem o biochemická témata (více jako 40 % respondentů):

- bioorganická chemie, styčné body mezi biologií a anorganickou chemií (hemoglobin, chlorofyl, bioanorg. léčiva),
- nukleové kyseliny, využití genových manipulací,
- novinky v oblasti analytické chemie (analýza potravin, farmaceutik, znečištění ŽP).

Klesl zájem o problematiku zaměřenou na výpočetní techniku (pouze 20% respondentů).

Učitelé sami navrhli několik témat, např.:

- nové učebnice chemie, přehled dostupné odborné literatury vhodné i pro studenty,
- chemická terminologie, upřesnění definic základních chemických a fyzikálně-chemických pojmů,
- recyklace odpadů, moderní technologie, nové materiály.

Tato práce vznikla za podpory grantu FRVŠ 1059/2006.

LITERATURA

1. *Rámcový vzdělávací program pro základní vzdělávání*.

Rámcový vzdelávací program pro gymnaziální vzdelávání. VÚP, Praha 2005.

5L-14 SÚČASNÉ PROBLÉMY VÝUČBY CHÉMIE NA SLOVENSKU

PETER SILNÝ

*Katedra didaktiky prírodných vied, psychológie a pedagogiky, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina CH-1, 842 15 Bratislava
silny@fns.uniba.sk*

Výsledky dlhodobého zisťovania úrovne vedomostí žiakov základných škôl a gymnázií z chémie ako aj ďalších výskumov jednoznačne ukázali, že je potrebné venovať zvýšenú pozornosť výberu základného učiva a jeho transformácie do základných pedagogických dokumentov¹. Hlavnými dôvodmi vypracovania nových pedagogických dokumentov sú:

- nízka úroveň osvojenia vedomostí platného vzdelávacieho štandardu z chémie pre základné školy a gymnáziá,
- predimenzovanosť súčasne platných vzdelávacích štandardov z chémie,
- neexplicitné vymedzenie základného učiva v učebných osnovách,
- nedostatočná prepojenosť obsahu učiva s každodenným životom,
- nedostatočná implementácia environmentálneho minima do obsahu učiva chémie,
- nevyvážené uplatňovanie medzipredmetových vzťahov chémie s inými učebnými predmetmi,
- nízka prepojenosť pedagogických dokumentov s učebnými textami^{2,3} atď.

S cieľom skvalitnenia úrovne vedomostí žiakov z chémie bolo predovšetkým vypracovať návrh nových vzdelávacích štandardov z chémie pre základné školy a gymnáziá, a zistiť úroveň ich osvojenia.

Pri tvorbe návrhu nových vzdelávacích štandardov z chémie sme vychádzali z podrobnej kvalitatívno-kvantitatívnej analýzy výskumov zameraných na zistenie úrovne osvojenia súčasných vzdelávacích štandardov, ktoré sa začali realizovať od roku 1999. Postupne na základe získaných výsledkov boli navrhnuté nové vzdelávacie štandardy, ktorých úroveň osvojenia sa v súčasnosti overuje na základných školách a gymnáziách vo všetkých krajoch Slovenska. Súbežne s výskumom zameraným na zisťovanie úrovne vedomostí bol uskutočnený výskum, ktorého cieľom bolo zmapovať názory učiteľov chémie, odborníkov z chémie a didaktiky chémie na problematiku vhodného výberu základného učiva pre jednotlivé typy škôl.

Doterajšie výsledky realizovaných výskumov naznačujú, že zredukovaním a upresnením cieľových požiadaviek vo vzdelávacom štandarde skutočne dochádza k systematickému zvyšovaniu úrovne vedomostí žiakov z chémie na základných školách a gymnáziách.

LITERATÚRA

1. Silný P.: *Biológia, ekológia, chémia I*, 2 (1996).
2. Kmeťová J., Silný P., v: *Badania w Dydaktyce Chemii*, s. 105–110. Wydaw. Naukowe, Krakow 2004.
3. Kmeťová J., Tomeček O.: *Chemické rozhľady* 5, 56 (2004).

5L-15 PROGRAM OPChem A JEHO VYUŽITÍ PŘI VÝUCE

OLDŘICH PYTELA

*Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Čs. legií 565, 532 10 Pardubice
oldrich.pytela@upce.cz*

Program OPchem umožňuje vizualizaci molekul a výpočet některých fyzikálně-chemických vlastností z experimentálních dat. Program obsahuje datové manažery (včetně importu z Excelu a exportu do Excelu), modul pro vizualizaci a stereochemii molekul (v 3D-projekci a v 3D/2D-projekci, zobrazení atomových *p*-orbitalů a hybridních orbitalů v 3D-projekci, odečítání vnitřních souřadnic a jejich změnu, konstrukci a export *Z*-matice, vyhledávání a zobrazení prvků symetrie, zařazení molekuly do grupy symetrie, určení absolutní konfigurace (*R/S*) na chirálních centrech, určení *cis-trans* isomerie (*Z/E*) na dvojných vazbách, export a tisk zobrazených objektů ve vysokém rozlišení), modul pro vizualizaci a vzájemnou koordinaci více molekul v 3D-projekci, modul pro simulaci vibračních módů v 3D-projekci, modul pro výpočet disociačních konstant a konstant stability komplexů ze spektrálních dat (měření absorbance při více vlnových délkách) a modul pro vytváření grafických prezentací. Možnosti programu budou předvedeny při přednášce.

Program OPchem je vhodný pro výuku zaměřenou na obecnou chemii (vazba, formální elektronová distribuce), prostorové uspořádání molekul (stereochemie, symetrické vlastnosti molekul, mechanismy organických reakcí) a infračervenou spektroskopii (dynamické zobrazení vibračních módů). Program OPchem je volně ke stažení (vyžaduje pouze autorizaci) na internetové adrese <http://webak.upce.cz/~koch/cz/veda/OPgm.htm>.






5L-16 GRAFICKÉ ZNÁZORNĚNÍ CHIRALITY

PAVEL DRAŠAR

*Ústav chemie přírodních látek, VŠCHT Praha, 166 28 Praha 6
Pavel.Drasar@vscht.cz*

Základní norma pro grafické znázornění chirálních molekul v dvourozměrné projekci je „Graphic Representation of Three-Dimensional Structures“ publikovaná IUPAC (cit.¹).

Pravidla IUPAC z roku 1996 říkají, že strukturální vzorce (diagramy) znázorňující stereochemii musí být zpracovány velmi pečlivě tak, aby se předešlo nedorozumění. Podle této

normy znázorňují čáry o základní tloušťce vazby ležící přibližně v rovině nákresny. Vazby směřující nad tuto rovinu jsou označeny klínem  s tím, že špiče (užší konec) klínu je připojena k atomu ležícímu v rovině nákresny. Vazby směřující pod nákresnu značíme krátkými rovnoběžnými čárkami (příčně šrafovanou stužkou) . Alternativně ke klínu může být použito i tučné vazby . Někdy se této tučné vazby používá ke znázornění vazby rovnoběžné s tenkou vazbou, ale ležící blíže k pozorovateli. Podélně čárkovaná vazba - - - -, která bývala užívána ke znázornění vazby za nákresnu se nyní nepoužívá, neboť je vyhrazena pro vazbu částečnou (menšího řádu než 1), delokalizace, nebo vazbu vodíkovou. Použití příčně šrafovaného klínu  není doporučeno, neboť jeho používání není jednotné. Někteří autoři považují užší konec za výchozí, tj. ten atom, který je v nákresně a jiní (ve shodě s perspektivou) naopak. Pokud není stereochemie známa použije se vlnovky, která je na obou koncích stejně silná . Ostatní specifické projekční konvence jako Fischerova a Newmanova projekce, prostorové znázornění řetězce a použití klínů se řídí vlastními pravidly². Použití teček či koleček ke znázornění stereochemie je striktně zakázáno.

Příspěvek se zabývá použitím těchto pravidel u různých typů struktur a sloučenin a podá přehled o použití běžných počítačových strukturálních editorech pro tento účel. Z tohoto aspektu lze shrnout, že přesný popis stereogenního centra umožňuje pouze CS ChemDraw a ACD/Labs ChemSketch.

Tato práce vznikla za podpory MŠMT v rámci výzkumného záměru č. MSM6046137305.

LITERATURA

1. <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/stereo/intro.html> (staženo 5.5.2006).
2. Moss G. P.: Basic Terminology of Stereochemistry, (IUPAC Recommendations 1996), <http://www.chem.qmul.ac.uk/iupac/stereo/> (staženo 5.5.2006).
3. Drašar P., Valter B., Paleta O.: Chem. Listy 97, 1027 (2003).
4. IUPAC Basic terminology of stereochemistry. Recommendations 1996, Pure Appl. Chem. 68, 2193 (1996).

5L-17

ROZVOJ PROSTOROVÉ PŘEDSTAVIVOSTI V CHEMII

JAN GRÉGR, BOŘIVOJ JODAS, JAROSLAV PERNÝ, JANA PŘÍHONSKÁ a MARTIN SLAVÍK

*Technická univerzita v Liberci, Hájkova 6, 461 17 Liberec
jan.gregr@tul.*

Pro výuku chemie nestačí jen znalosti o látkách, ale potřebujeme i představu, co se skrývá za chemickými značkami a vzorci. Nejedná se jen o skutečný vzhled sloučenin, ale i o mikropohled, tedy o prostorové vnímání molekul. Prostorovou představivost rozvíjí prvotně u žáků a studentů matematika. Chceme-li u žáků zakotvit hlubší znalosti spolu s dokonalými představami, musíme navazovat na poznatky didaktiků matematiky a dále je rozvíjet na speciálních případech i ve výuce chemie.

Studující chemie by měli pochopit a získat jasné představy o těchto problémech vyžadujících prostorovou představivost:

1. pravidelné rozdělení prostoru okolo centrálního atomu pro 4 a více vázaných atomů (tetraedrické, oktaedrické atp. uspořádání),
2. deformace geometrických tvarů změnou atomu ve struktuře,
3. spojování základních geometrických útvarů – molekul,
4. geometrická isomerie sloučenin.

K vysvětlování těchto problémů doporučujeme využít počítačovou vizualizaci molekul. Další didakticky vhodný postup by mohl obsahovat využívání různých způsobů znázornění atomů a vazeb, volné otáčení 3D strukturálních modelů, pravoúhlu projekci 3D struktur a hledání prvků symetrie modelů molekul.

Klasické používání jediného typu znázornění molekul např.: kalotový typ, zakrývá existenci vazeb a jejich prostorové směřování. Je tedy výhodnější použít zároveň i drátový, tyčinkový a kuličkový model, ale navrhuje doplnit též polyedrické znázornění. To pomůže v orientaci žáků v prostorových pojmech tetraedr, oktaedr, trigonální bipyramida atp. Pokud mají žáci možnost sami si vytvářet struktury a volně s nimi otáčet (ACD ChemSketch + ACD 3D Viewer), dokážou si uvědomit prostorovost a mohou hledat zakrývání atomů při pootočení modelu i prvky symetrie pozorovaných útvarů. Pro přesné otáčení struktur o 90° je asi nejvhodnější program Mercury 1,4,1. Zde je možné získat pravoúhlé průměty modelů molekul nejen v klasických třech projekcích, ale též v pohledu, pohledu zezadu a z obou stran.

Didakticko-matematický přístup k modelům molekul pomůže k lepšímu pochopení chemické látky, ale zároveň zpětně podpoří i všeobecnou prostorovou představivost.

LITERATURA

1. Barke H.-D., Engida T.: Chem. Educ.: Research and Practice in Europe 2, 227 (2001).
2. Příhonská J.: *Dizertační práce*. PedF UK, Praha 2004.

5L-18

WEBQUEST – VIRTUÁLNÍ PROSTŘEDÍ PRO PROJEKTOVOU VÝUKU CHEMIE

MARTIN BÍLEK a MONIKA ULRICHOVÁ

*Oddělení didaktiky chemie Katedry chemie Pedagogické fakulty Univerzity Hradec Králové, Rokitského 62, 500 03 Hradec Králové
Martin.Bilek@uhk.cz*

V poslední době se objevují na Internetu informace o novém modelu jeho využití v projektově orientované výuce, označované jako WebQuest¹. Volně by se tento výraz mohl přeložit jako „Webovská výprava za poznáním“. Metoda WebQuestu nabízí projektově orientovanou výuku s využitím aktuálních a autentických materiálů dostupných na Internetu, autonomní a kooperativní učení, učení se partnerství a spolupráci, samostatně plněné úkoly, práci s rešeršemi apod. (více se lze o tomto didaktickém konceptu dozvědět na <http://www.webquest.cz/>, <http://www.webquest-forum.de/> či [691](http://</p>
</div>
<div data-bbox=)

webquest.sdsu.edu/). Jako příklad využití tohoto postupu ve výuce chemie můžeme uvést téma „Putování historií atomových modelů“ zpracované na adrese <http://www.geocities.com/dlkennen/webquest> nebo podobně tematicky zaměřený projekt na <http://www.pekinhigh.net/webquest/springborn/index.htm>.

Tyto projekty jsou určeny pro žáky vyšších ročníků ZŠ a na stránkách jsou jejich jednotlivé kroky podrobně popsány. Jde o zpracovávání posterů na zvolená témata, hledání zdrojů a jejich rešerše atd.^{2,3}. V českém prostředí Internetu nabízí využívání WebQuestu portál „Učitelství spomocník“ Katedry informačních technologií a technické výchovy Pedagogické fakulty Univerzity Karlovy (viz výše uvedená adresa s doménou „cz“)⁴. Ve výuce chemie jsou využitelné zde dostupné projekty – např. „Tajemství kilojoulů“, „Geneticky upravené potraviny“, „Environmentální diskuse“ aj.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR č. 406/05/0188 „Konstruktivismus a jeho aplikace v integrovaném pojetí přírodovědného vzdělávání“ a projektu Specifického výzkumu PdF UHK 2006 „Nové materiály a technologie v integrovaných přírodovědných výukových projektech pro všeobecné vzdělávání“.

LITERATURA

1. Bílek M., Ulrichová, M.: *Využití Internetu ve výuce chemie*. CP Books, a.s., Brno, v tisku.
2. Bílek, M.: *ICT ve výuce chemie*. Gaudeamus, Hradec Králové 2005.
3. Doulík, P., Škoda, J.: Information Technology and the Internet in Chemistry Tuition. In: Bílek, M. (ed.): *Internet in Science and Technical Education*, s. 42–47. Gaudeamus, Hradec Králové 2005.
4. WebQuest [online]. Praha : Katedra informačních technologií a technické výchovy Pedagogické fakulty Univerzity Karlovy, 2005 – [cit. 2005-12-15]. Dostupné z: <http://www.webquest.cz/>.

5L-19

EDUKAČNÁ KLÍMA NA HODINÁCH CHÉMIE V ZÁKLADNÝCH ŠKOLÁCH NA SLOVENSKU

JARMILA KMEŤOVÁ a **HENRIETA DROBKOVÁ**

*Katedra chémie, Fakulta prírodných vied Univerzita Mateja Bela, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica
kmetova@fpv.umb.sk*

Výchovno-vzdelávací proces v školskej triede sa uskutočňuje v špecifickom edukačnom prostredí. Počas interakcie subjektov tohto procesu vznikajú psychosociálne javy, ku ktorým patrí edukačná klíma. Jej charakter má významný vplyv nielen na správanie žiakov, na ich motiváciu a učebné výsledky, ale aj na psychickú situáciu učiteľov, ich pracovnú spokojnosť a motiváciu.

Okrem súčasných výskumov, ktorých cieľom je monitorovať úroveň vedomostí žiakov z chémie na základných školách, bolo skúmať aj edukačnú klímu na hodinách chémie ZŠ. Jej skúmaním je možné prispieť k odhaleniu jej prípadných nedostatkov. Ich poznanie a odstránenie môžu mať významnú

úlohu v procese zvyšovania efektívnosti vyučovania chémie¹.

Výskum sa uskutočnil v rokoch 2005 a 2006. Jeho cieľom bolo okrem skúmania edukačnej klímy, chápanou ako závisle premennou, zistiť aj vzťahy medzi klímou a súborom nezávisle premenných. Za nezávisle premenné boli zvolené: vek učiteľa, dĺžka pedagogickej praxe učiteľa, pohlavie učiteľa, lokalita, zloženie triedy podľa pohlavia žiakov a celkový počet žiakov v triede. Respondentmi boli žiaci 9. ročníkov ZŠ z rôznych miest a dedín SR. Ako výskumný prostriedok bol použitý dotazník zhotovený podľa českej verzie dotazníka CES-A, aplikovaného Lašekom a Marešom^{2,3}. Z tohto dotazníka bolo prevzatých celkom 7 položiek. Doplnené boli položkami vlastnej konštrukcie, ktoré boli prispôbené špecifikám učebného predmetu chémie. Položky boli roztriedené do piatich charakteristík, resp. premenných: jasnosť pravidiel, zaujatie žiaka prácou na hodinách chémie, poriadok a organizovanosť, participácia žiakov na hodinách chémie, kvality a kompetencie učiteľa chémie. Pri vyhodnocovaní údajov bola použitá metóda bodového škálovania.

Na základe získaných výsledkov možno hodnotiť klímu na vyučovaní chémie v slovenských základných školách ako neutrálnu. V jasnosti pravidiel prevažujú pomerne vysoké hodnoty nad hodnotami priemernými, hodnotenie zaujatia žiaka prácou na hodinách chémie je priemerné. Priemerné hodnotenie možno priradiť aj pre charakteristiku poriadok a organizovanosť či participáciu žiakov na hodinách chémie. Kvality a kompetencie učiteľa chémie boli žiakmi hodnotené vysoko pozitívne. Ako už bolo uvedené, okrem tohto sumárneho zhodnotenia boli skúmané aj vzťahy medzi jednotlivými charakteristikami a nezávisle premennými.

LITERATÚRA

1. Silný P.: *Biológia, ekológia, chémie 1, 2* (1996).
2. Lašek J.: *Pedagogická revue 47, 43* (1995).
3. Lašek J., Mareš J.: *Pedagogická revue 43, 401* (1991).

5L-20

PROJEKT „STUDIJNÍ OPORY PRO STUDIUM CHEMIE“

MILOSLAV NIČ^a, JIŘÍ JIRÁT^a, BEDŘICH KOŠATA^a, MICHAL BOŽOŇ^a, IRENA HOSKOVCOVÁ^a, PAVEL MATĚJKA^a, JIŘÍ SVOBODA^a, DAGMAR KOHOUTOVÁ^b, ALENA KOZLOVÁ^b a ZITA VALENTOVÁ^b

*^a Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, ^b Masarykova střední škola chemická, Křemencova 179, 116 28 Praha 1
Jiri.Jirat@vscht.cz*

V rámci projektu Jednotný programový dokument pro Cíl 3 regionu NUTS 2 hlavní město Praha (JPD 3.1), jednoho ze strukturálních fondů Evropské unie, jsou ve spolupráci Vydavatelství VŠCHT Praha a Laboratoře chemie a informatiky FCHT VŠCHT Praha s Masarykovou střední školou chemickou připravovány elektronické opory pro studium středoškolské chemie. Cílem dvouletého projektu je vytvoření nových, moderních studijních opor (vzájemně se doplňující interaktivní elektronické a tištěné formy).

Připravované materiály jsou zaměřeny na oblasti anorga-

nické, organické a analytické chemie a obsahují jak výkladovou, tak procvičovací část. V žádné z oblastí se však materiály nesnaží nahrazovat papírové učebnice, ale doplňovat je v případech, kde elektronická podoba přináší výhody oproti klasickým knihám. Cílem je modernizace výuky chemie, zpřístupnění a procvičování jejích obtížných partií formou nových výukových počítačových programů a podpoření zájmu středoškolských studentů o studium na vysokých školách přírodovědného a technického směru. Nejlepší studenti budou moci studovat problematiku nad rámec středoškolských osnov, čímž se zlepší udržení jejich pozornosti ve chvíli, kdy se středoškolský pedagog věnuje slabším studentům.

Nové studijní opory jsou vytvářeny na základě analýzy současných středoškolských osnov a analýzy toho, co by měli středoškolská studenti znát při svém nástupu na vysokou školu.

Díky úzké spolupráci středoškolských a vysokoškolských pedagogů při realizaci projektu lze rovněž očekávat prospěšnou výměnu zkušeností a informací, která přispěje k všeobecnému zlepšení výuky a vzájemné návaznosti studia mezi oběma typy škol.

Každá oblast se skládá z modulů, které jsou vzájemně provázány – např. anorganická chemie se dělí na: vyčíslování rovnic, názvosloví, elektronové vzorce, prostorové uspořádání anorganických sloučenin, průběh chemických reakcí.

Hlavní části organické chemie jsou pak procvičování názvosloví, reakcí, prostorové stavby a stereochemie.

Materiály pro analytickou chemii jsou podobně rozděleny do několika podkapitol: důkazy, techniky a vzorce.

Důležitým prvkem je kombinace tištěné a elektronické formy – ze stejného zdroje budou cenově efektivně generovány tištěné i elektronické výstupy.

Tato práce vznikla za podpory projektu Jednotný programový dokument pro Cíl 3 regionu NUTS 2 hlavní město Praha (JPD 3.1), č. CZ.04.3.07/3.01.1/0055.

5L-21 VÝUKA V PŘEDMĚTU „TECHNOLOGIE CHEMICKÝCH LÁTEK“

JURAJ KIZLINK

*Fakulta chemická VUT, Purkyňova 118, 612 00 Brno
kizlink@fch.vutbr.cz*

V daném předmětu se uvádí stav chemického průmyslu v ČR, SR a EU s návazností na vývoj ve světě, surovinová základna, dostupnost energie, vody a kvalifikované pracovní síly. Uveden je také přehled výrobků anorganické chemie, organické chemie a petrochemie včetně možnosti využití některých odpadů z chemických výrob a dopad na životní prostředí. V každé kapitole jsou uvedeny i citace doporučené literatury. Praktickou součástí přednášek jsou i obrázky, schémata a některé součásti chemických aparatur. Vhodným doplňkem přednášek jsou také exkurze do vybraných chemických provozů s ukázkou typických chemických aparatur a zařízení. Na tento předmět navazuje další předmět „Technologie nakládání s odpady“.

Při přednáškách z předmětu „Technologie chemických látek“ vycházejí mnohé věci ze znalostí anorganické a orga-

nické chemie. Rozsah je 4/0 hodin týdně pro semestr, studijní rozsah je celkem asi 500 stran textu. Na tento předmět navazuje další můj předmět „Technologie nakládání s odpady“.

Na začátku přednášky obvykle seznámím studenty s částí, kterou budeme probírat, její současný stav včetně důležitosti pro denní život a průmysl. Důležitou součástí předmětu je i dostupnost vhodné studijní literatury. Málokdo ze studentů si bude drahou zahraniční literaturu kupovat nebo z vypůjčené všechno studovat. Pokud není k dispozici celostátně doporučená učebnice, tak je přímo povinností přednášejícího napsat vhodná skripta a tyto zhruba po pěti letech inovovat, což by se mělo odrazit i v hodnocení jeho osoby fakultou.

Skripta jsou něco jako „vizitka“ pedagoga, kde má být téměř všechno, co jest k předmětu potřebné. Má to ale háček – pokud je tam opravdu všechno, tak si mnozí studenti skripta jednoduše koupí a na přednášky chodit nebudou. Zde je nutno uvést i fakt, že hodně studentů při studiu i brigádnicky pracuje, a to z různých důvodů. To má za následek jejich častou nepřítomnost ve škole (praktika absolvovat musí, ale přednášky nejsou povinné). Proto osobně určité věci ve skriptech neuvádím, ale uvedu je prostě jen na přednáškách. Kdo tam není, může si to potom opsat od jiného studenta. Nověji se už mnohá naše skripta přestávají tisknout a jsou uváděny na webových stránkách fakulty.

Určité části ve skriptech, které stačí pouze přečíst, ponechávám na samostudium a získaný čas využívám hlavně na přednes částí předmětu, které jsou komplikovanější a pro studenty méně pochopitelné. Značnou část přednášek mi zaberou také ukázky faktografického materiálu. Na projektoru promítám folie se vzorci, reakcemi a schémata různých výrob, nechávám také kolovat různé obrázky a výstřížky z denního a odborného tisku a často také vzorky různých výrobků a materiálů (suroviny, PHM, pesticidy, gumárenské chemikálie, přísady pro plasty, finální a komerční výrobky aj.) včetně armatur a konstrukčních materiálů (kovy, sklo, plasty, kohouty, ventily, šoupátka, manometry aj.). Specialitou bývá u posledních přednášek z biotechnologie i ochutnávka cukru, škrobu, piva, vína a destilátů (frakce jako hlava-předky, srdceprodukt, ocas-zbytky, přiboudlina, cuvée, odstranění pachů, upravené vzorky, odpady aj.).

Přednášky trvají obvykle 45–50 minut a potom je přestávka. Dvouhodinovky obvykle 90–100 minut bývají jen zřídka a to vždycky jen po dohodě se studenty. Obvykle to bývá při probírání velice poutavé části skript, časové tísňe, napjatosti rozvrhu (studenti potřebují delší dobu v bufetu, na obědě nebo večer už pospíchají na večeri a také na spoje domů aj.). I když někdy do přednášek zařazuji také něco uvolňujícího, relaxačního a zábavného (legendy, zajímavosti a vtipy), tak při těchto dvouhodinovkách to bývá obvykle častěji.

Zkoušky provádím výhradně písemnou formou a „progresivním“ počtem otázek. Normální termín 10–12 otázek, první opravný termín 15 a druhý opravný termín 20 otázek. Delší otázky střídají kratší podle časové náročnosti. Celé je to proto, že hodně studentů buď na normální termín vůbec nepřijde, nebo pokud přijde, tak jen jako do loterie, prohlédnou si zadání a když jim otázky „nesedí“, tak prostě odejdou. Potom se jich celá kupa hlásí mimo zkušební období a později, když jim už téměř „hoří u zadku“, tak si skripta konečně i prostudují a snaží se udělat zkoušku alespoň na stupeň hodnocení E. Po zhodnocení písemky vždy navrhnou

studentovi známku a pokud ji student nepřijme, dostane ještě další obvykle kratší otázky, na které může odpovědět ihned ústně nebo si je promyslet a vypracovat písemně. Toto se ale stává málokdy a bohužel nyní žijeme v době „éček“, protože jak vidím, tak studenti současné „digitální generace“ velké ambice nemají a mnozí z nich chtějí studium absolvovat i s „odřenými ušima“. Hlavním cílem je získat diplom jako „papír“, se kterým se už nějak v praxi zařadí, nejlépe jako chemikové na nechemických pracovištích. V mnoha případech jim už někdo z jejich rozvětvené rodiny připravil slušné místo a je tedy nutné pouze nějak školu dokončit. Finanční dotaci dostává každá fakulta podle počtu studentů, a proto zjevně není v zájmu, aby větší počet studentů školu nedokončil. V médiích bylo uvedeno, že v zemích EU-15 je průměrně 30 % vysokoškolsky vzdělaných lidí, což u nás je méně, v ČR asi 18 % a v SR asi 13 % a tento stav je prý nutno rychle dohnat. Doufám ale, že ne pomocí „velkovýroby“ vysokoškolsky vzdělaných absolventů, zákonitě potom nastane „inflace“ diplomů.

Co se týká struktury probírané látky, tak v první části vycházím z historie chemického průmyslu, chemického inženýrství, základních pochodů obecně, anorganické a organické technologie, zpracování ropy a petrochemie s doplňkem překladů ze zahraniční literatury a s použitím učebnic i pro přírodovědecké fakulty včetně informací o strojích a zařízeních chemického průmyslu.

V druhé části uvádím speciální výrobky chemického průmyslu, výrobky zpracování ropy a petrochemie a potravinářských a biochemických výrob. Důležitými jsou zde i novější poznatky ze zahraniční cizojazyčné literatury, které jsem v krátkosti uvedl i ve svých rozsáhlých a dvoudílných a nedávno inovovaných skriptech s uvedením doporučené domácí časopisecké a různé odborné literatury.

5L-22 SYSTÉM KERBEROS VE VÝUCE ORGANICKÉ CHEMIE

ROBERT VÍCHA^a, PETR KULHÁNEK^b, MICHAL KOVÁŘ^a, VLADIMÍR MRKVIČKA^a, DANUŠE STARÁ^a a STANISLAV KAFKA^{a,*}

^a Ústav chemie, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Náměstí T.G.M. 275, 760 01 Zlín, ^b Katedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno
kafka@ft.utb.cz

Systém Kerberos¹ slouží k automatizovanému přezkoušování studentů. Učitel vytváří databázi otázek a testů pro jednotlivé oblasti zkoušeného učiva, které potom student vypracovává. Systém funguje ve vztahu k oběma uživatelům – učitel/student – na principu klient–server. Dosavadní verze systému Kerberos umožňovala komunikaci mezi klientským počítačem a serverem pouze prostřednictvím intranetu. Tato vlastnost značně omezovala používání systému pouze na situaci, kdy je k dispozici patřičný počet zkoušecích klientů na vymezených počítačích většinou pod permanentním dohledem vyučujících nebo na klientech v počítačových učebnách využívaných například pro hromadné písemné práce

v seminářích. V nové verzi bude k dispozici webové rozhraní, jehož prostřednictvím budou moci studenti vypracovávat „neostré“ testy vytvářené systémem z omezeného množství dostupných otázek a připravovat se tak individuálně na samotné zápočtové nebo zkouškové práce. Velký význam má toto rozšíření i pro studenty kombinované formy studia. Systém bude dále rozšířen o možnost přípravy testů v tištěné podobě. Tento zdánlivý krok zpět však umožní využití systému i tam, kde není k dispozici potřebný počet počítačů pro individuální skládání testů studenty.

Na Fakultě technologické UTB ve Zlíně je v současné době systém zaváděn do výuky Organické chemie, která je zajišťovaná pracovníky Ústavu chemie. Vytvořená databáze otázek bude pokrývat základní kapitoly organické chemie od názvosloví přes chemii jednotlivých skupin organických sloučenin až po základy chemie biomolekul. Vícevrstevná struktura databáze otázek umožní vytvářet nejen testy pro danou skupinu látek, jak bývá obvyklejší, ale i testy například klasickými kapitolami (např.: eliminace, přesmyky, nukleofilní substituce, atd/ap.). Systém Kerberos bude využíván jak pro vytváření průběžných zápočtových prací, tak pro vytváření zkouškových testů.

Tato práce je podporována Fondem rozvoje vysokých škol (projekt č. 06/2252/F6d).

LITERATURA

1. Kulhánek P., Vícha R., Pospíšil T., Čmelík R., Potáček M.: Chem. Listy 97, 703 (2003).

5L-23 PRINCIPY A REALITA VÝZKUMU A VÝVOJE V CHEMICKÉM PRŮMYSLU A KOOPERACE S UNIVERZITAMI

MARTIN NAVRÁTIL

SYNPO a.s., S. K. Neumanna 1316, 532 07 Pardubice
martin.navratil@synpo.cz

Realita výzkumu a vývoje v chemickém průmyslu je vysvětlena v kontextu obchodního a strategického záměru firmy s důrazem na pečlivé rozlišení mezi výzkumem a vývojem (V&V) a inovací a na boření mýtů o patentech a o ochranně duševního vlastnictví, ať tvořeného „uvnitř“ firmy či při kooperacích na univerzitách. O průmyslovém výzkumu a vývoji existuje řada mýtů, které jsou opakovány tak často, že jsou nyní považovány za fakta (tisíckrát opakovaná lež ... atd.). Jedním z nejzákladnějších je, že firmy, které investují do V&V, jsou úspěšnější než ty, které ho nedělají, a dokonce, že čím více investují, tím jsou úspěšnější. Počítat patenty bývá též často považováno za dobrý způsob, jak měřit kvalitu a úspěšnost V&V. Objektívně studie, ale i moje osobní zkušenosti mě však vedou k podstatně jiným závěrům. Otázka, zda a jak dělat V&V, je neoddelitelná od celkové strategie firmy. Jestliže má firma strategický záměr a schopnosti zavádět nové produkty a technologie a jestliže je na trhu, kde tento záměr dává smysl, pak si musí zajistit přístup k těmto novým produktům a technologiím. Ani tehdy však nemusí V&V dělat sama, pouze si musí „zajistit přístup“.

V druhé části přednášky bude popsán obchodní model SYNPO coby společnosti zaměřující se na komerční výzkum a vývoj, který nabízí poměrně unikátní synergii s podpůrnými technickými a výrobními službami pro vhodné obchodní partnery.

Otázky vlastnických práv vyplývajících z kooperací ve V&V mezi univerzitami a výdělečnými soukromými společnostmi jsou řešeny různým způsobem v různých zemích. Je to určeno převážně rozdílnými právními podmínkami. Nicméně principy jsou v podstatě stejné. Profesori a studenti vždy publikují, část výsledků se buď patentuje nebo utají, a průmyslový sponzor či sponzoři práce (často jsou to skupiny firem) mají nějakým způsobem na určitou dobu zajištěn exkluzivní přístup k výsledkům, za které si zaplatil(i).

Tato práce vznikla za podpory programového projektu výzkumu a vývoje v rámci Národního programu výzkumu, realizovaného MŠMT, dílčí program Programy mezinárodní spolupráce.

5L-24

INOVACE ÚLOH LABORATORNÍHO CVIČENÍ V PŘEDMĚTU FYZIKÁLNĚ CHEMICKÁ CVIČENÍ

ZDEŇKA KOLSKÁ a JAROSLAV REJNEK

*Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita J. E. Purkyně, České mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem
kolska@sci.ujep.cz, rejnekj@sci.ujep.cz*

Tento úkol je řešen v rámci projektu FRVŠ a klade si za cíl inovovat a rozšířit spektrum praktických úloh pro předmět Fyzikálně chemická cvičení, které v dosavadním provedení přestávají stačit rostoucímu počtu studentů Katedry chemie, rozšiřujícím se možností studia na Katedře chemie a zejména stále narůstajícím požadavkům na znalosti a dovednosti našich absolventů. Laboratorní kurz Fyzikálně chemická cvičení sice z velké části pokrýval náplň kurzu Fyzikální chemie (obsahem byly úlohy z termodynamiky, fázových rovnováh, chemických rovnováh, chemické kinetiky, elektrochemie a optických metod), některé z úloh tohoto kurzu byly však zatím prováděny na úrovni pokusů pro žáky základních a středních škol zejména z důvodu, že Katedra chemie doposud připravovala pouze studenty studijního oboru učitelství chemie pro základní nebo střední školy. Doposud používaná přístrojová technika byla již značně zastaralá. Z toho důvodu byl i výběr experimentálních úloh v posledních letech omezený.

Z důvodu akreditace nových studijních programů s chemickým zaměřením (odborné bakalářské tříleté studijní programy pro prezenční formu studia: *Chemie: chemie pro dvouoborové studium; Chemie a technologie materiálů: Stavební chemie; Chemie: Toxikologie a analýza škodlivin*) je nutné rozšířit úlohy předmětu Fyzikálně chemická cvičení tak, aby pokryly širší a hlubší oblast jednotlivých oddílů Fyzikální chemie.

Tuto problematiku jsme řešili již v loňském roce koupí termostátované nádoby (vodní lázně MEMMERT WB), díky níž jsme schopni sledovat závislost některých měřených charakteristik na teplotě (např. hustoty, viskozity, reakční rych-

losti). V tomto roce jsme si dali za cíl některé experimenty inovovat a některé nově vložit a použít k nim bohatší laboratorní vybavení. Např. pro určování některých typů entalpií (reakční či neutralizační teplo, atd.) jsme z uvedeného grantu vybavili laboratoř jednoduchým transparentním kalorimetrem s příslušenstvím od firmy Phywe, který tvořil největší položku plánovanou v tomto projektu (cca 60 tis. Kč ze získaných 93 tis. Kč). Dále chceme umožnit studentům porovnání měření některých charakteristik i jinými dostupnými technikami, např. pomocí jiných typů viskozimetrů, hustoměrů. K tomuto účelu jsme zakoupili z daného projektu nové průtokové viskozimetry a ponorné hustoměry a doplnili tak již dříve zakoupený tělískový Höpplerův viskozimetr. Ke všem modifikovaným nebo nově vloženým úlohám je nutné vypracovat psané návody. Ty budou průběžně doplňovány a studentům zpřístupňovány na stránkách Katedry chemie. Ukončení projektu je plánováno na prosinec 2006.

Projekt je řešen v rámci řešení projektu FRVŠ č. 1479/2006, tématický okruh F 6 a.

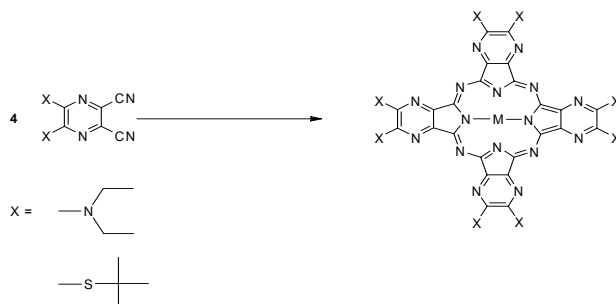
5L-25

ZÁKLADNÍ PRINCIPY FOTODYNAMICKÉ TERAPIE V PREGRADUÁLNÍ VÝUCE

KAMIL KOPECKÝ, ZBYNĚK MUSIL a PETR ZIMČÍK

*Farmaceutická fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové
kamil.kopecky@faf.cuni.cz*

Fotodynamická terapie (photodynamic therapy, PDT) je relativně novou perspektivní metodou léčby onkologických i jiných onemocnění (např. senilní makulární degenerace), která se používá již několik let i v České republice. Do této doby jí nebyla věnována ve vzdělávání nových farmaceutů dostatečná pozornost. Z tohoto důvodu jsme se rozhodli seznámit studenty pregraduálního studia na farmaceutické fakultě s hlavními principy této léčby. K tomuto záměru jsme sestavili úvodní seminář zaměřený na základní mechanismy PDT a přehled látek používaných v současné době v terapii i v klinických testech. Posluchače jsme také seznámili se základní metodikou přípravy těchto látek, kterou si pak sami prakticky vyzkoušeli na praktických cvičeních. Jednalo se o syntézu vybraných potenciálně účinných látek metodou nejčastěji používanou na našem pracovišti. Tedy tetracyklo-



merizací 5,6-disubstituovaných 2,3-pyrazin dikarbonitrilů (příklady viz. schéma) v *N,N*-dimethylaminoethanolu za přítomnosti octanu zinečnatého, resp. v butanolu pomocí butanolátu lithného. Studenti si také prakticky vyzkoušejí metodu testování jejich účinnosti pomocí chemické metody. Ta využívá rozkladu 1,3-difenyliisobenzofuranu (DPBF) – specifického „scavengeru“ singletového kyslíku na 1,2-dibenzoylbenzen. Pokles koncentrace DPBF můžeme pozorovat v UV oblasti snížením jeho absorpce při 417 nm.

Informace a praktické zkušenosti získané z této praktické výuky budou moci studenti využívat v jejich dalším profesním životě.

Tato práce vznikla za podpory grantu FRVŠ 1762/2006 a výzkumného záměru MSM0021620822.

5L-26 INNOVATION OF SUBJECT LABORATORY CLASSES FROM COLORISTICS AND COLORIMETRICS

NADĚŽDA FASUROVÁ^{*} and LUCIE WOLFOVÁ

*Institute of Physical and Applied Chemistry, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118, 612 00 Brno
fasurova@fch.vutbr.cz*

Laboratory classes from coloristics and colorimetrics is subject in practice of 4. class of specialization Consumer chemistry (3 hours). Oral presentation are given in 3. class. Since academic year 2006/2007 this classes will be held in 1. class of subsequent master study programme as elective subject and in 3. class of bachelor study programme as compulsory subject. Student's classes are finished at graded credit. Currently there are 12 projects coming out of the manuale of assoc. prof. Václav Prchal, Laboratory classes in coloristics and colorimetrics, Brno University of Technology, Faculty of Chemistry 1998. Average number of participants is 40.

Classes are focused on practical measurements of optical properties, measurement of colourness of materials, determination of coordinates of colour space, following of inks, indicator components, influence of electrolyte or mordants on hue, using natural herbaceous dyes etc.

New 6 projects are prepared. Laboratory classes will be also innovated by new manuals and buying new literature^{1,2} and materials.

Objective of project:

1. Specification of subject, class and form of study, number of students
2. New manuals (theory, aim of tasks, parts of work, instrumentation, methods)
3. Schedule of new projects
4. Schedule of present projects

New schedule of Laboratory classes in coloristics and colorimetrics.

Naděžda Fasurová, Ph. D.

1. Herbaceous dyes extraction. Chromatographic determination of chlorophyll a, b in spinach by TLC method. Photometric determination of chlorophylls.

2. TLC chromatography of β -carotene and other dyes in red paprika. TLC chromatography indicators and saturn dyes.
 3. Paper chromatography of cartridge pens, Centropen-Liner and Centropen-Permanent markers.
 4. Determination of chromaticity of colour papers. Determination of hue of different papers. Colour coordinates and chroma in CIE Lab space.
 5. Dyeing with natural dyes. Using of mordants and evaluation of hue. Quality of dyeing with CIE Lab differences.
 6. Silk painting. Mixing of dyes and substrate etching with rock and table salt. Contour technique.
- Present schedule of Laboratory classes in coloristics and colorimetrics.

assoc. prof. Václav Prchal

1. Evaluation of the influence of chemical composition of substantive dyes on hue on the base of theory of colours. (The work with Colour Index)
2. Construction of absorbance and transmittance spectra of dyes. Influence of the dye concentration and electrolyte concentration on the maximal characteristic wavelength.
3. The determination of the molar absorption index of dyes.
4. Verification of colorimetric determination of substances in mixed solutions.
5. Colorimetric assessment of dye concentration in the solution.
6. Verification the dependences $A/c = f(L)$ and $T = f(L)$.
7. Determination of chromaticity coordinates x, y, z ; trichromatic parts X, Y, Z ; colour coordinates a, b and chroma C , hue H .
8. Measurement and quality of rates of dyeing, with CIE Lab difference.
9. Determination of CMC difference.
10. Assessment of whiteness degree of textile substrate W (CIE), W (Berger).
11. Measurements of whiteness of substrates with brightening agents.
12. Determination of yellow index of the paper and measurement of opacity.

This project was supported with Czech Ministry of Youth, Education and Sports, Project No. 996, 2006.

REFERENCES

1. Christie R. M.: *Colour Chemistry*. Royal Society of Chemistry 2001.
2. Nassau K.: *The Physics and Chemistry of Color*. Second edition, John Wiley & Sons, 2001.

5L-27

ZAVEDENÍ PŘÍPRAVY 3-CHLORPYRAZIN-2,5-DIKARBONITRILU DO PRAKTICKÝCH CVIČENÍ PŘEDMĚTŮ FARMACEUTICKÁ CHEMIE A TECHNOLOGIE SYNTETICKÝCH LÉČIV OBORU FARMACIE NA FAF UK V HRADCI KRÁLOVÉ

LUKÁŠ PALEK, JAROSLAV DVOŘÁK a MARTIN DOLEŽAL

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

Výzkumná činnost na oddělení farmaceutické chemie při Katedře farmaceutické chemie a kontroly léčiv se dlouhodobě ubírá směrem hledání nových potenciálních léčiv. Pracovní skupina doc. Doležala konkrétně přípravou a testováním analogů pyrazinamidu, jakožto potenciálních antituberkuloticky aktivních látek. Pyrazinamid se v praxi používá jako léčivo první volby (v kombinaci s dalšími léčivy) při terapii tuberkulózy. Jeho zavedení přineslo významné zkrácení délky terapie této nemoci.

U některých připravených derivátů byla zjištěna též vysoká antifungální aktivita, proto jsou všechny připravené látky testovány i jako potenciální antimykotika. Jedním z perspektivních směrů výzkumu je příprava analogů odvozených od 3-chlorpyrazin-2,5-dikarbonitrilu, které vykazují aktivitu jak antituberkulotickou, tak i antifungální.

Do praktických cvičení výše uvedených předmětů pregraduální výuky oboru farmacie byly zařazeny dvě úlohy,

jedna syntetická, kterou je příprava pyrazinamid-*N*-oxidu z pyrazinamidu, jakožto potřebného meziprojektu při substitucích prováděných na heteroaromatickém pyrazinovém jádře (schéma 1). Druhou úlohou je experiment ukazující využití přístrojové „flash“ chromatografie při separaci čistých meziprojektů syntézy 3-chlorpyrazin-2,5-dikarbonitrilu. Konkrétně se jedná o dělení tří polohových isomerů chorpyrazinkarbonitrilu vznikajících při reakci pyrazinamid-*N*-oxidu s fosforochloridem (schéma 2).

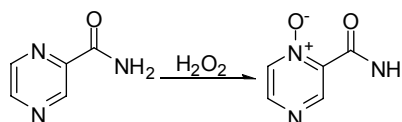


Schéma 1

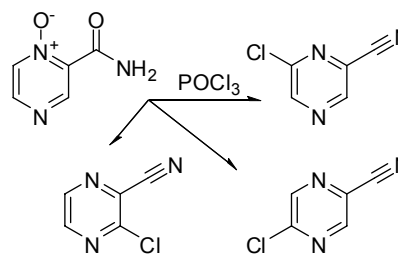


Schéma 2

Tato práce vznikla za podpory MŠMT/FRVŠ 1412/G/202123.

5P-01 VÝUKA CHEMIE NA FAKULTĚ STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ VUT V BRNĚ

MARTINA KLUČÁKOVÁ

*Ústav fyzikální a spotřební chemie, Fakulta chemická,
VUT v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno
klucakova@fch.vutbr.cz*

Úroveň znalostí a praktických dovedností z chemie je u posluchačů prvního ročníku FSI VUT v Brně různorodá. Průměrně přes 50 % studentů pochází ze středních škol, kde se chemie vyučuje pouze jeden rok, zpravidla v prvním ročníku, dalších 12 % nemá zpravidla chemii na střední škole vůbec. Zastoupení studentů s danou úrovní znalostí se navíc rok od roku dosti výrazně liší. Problémem je jednak vysoký podíl studentů s minimálními znalostmi chemie, jednak značná nerovnoměrnost v dosud získaných znalostech a praktických dovednostech z chemie. S tím souvisí i variabilita rozdělení studentů podle typu středních škol, ze kterých na FSI přichází. Velké části posluchačů chybí základní teoretické a praktické znalosti z tohoto oboru, které ovšem nezbytně potřebují pro vlastní studium své odbornosti a specializace. Tento předmět je proto pro všechny studenty prvního ročníku povinný a prodou jím všichni absolventi fakulty. Pro řadu z nich je zjištění, že musí složit zkoušku z chemie opravdu šokem a díky absenci výuky chemie v jejich předchozím studiu na středních školách trpí doslova „chemo-fobií“. Názornost výuky a srozumitelnost výkladu je tolik potřebná zejména z důvodu velmi nízké úrovně znalosti chemie nastupujících posluchačů. Cílem je zavést způsob výuky, který ocení nejen posluchači, ale i pedagogové z FSI, kteří budou moci pokračovat na kvalitních základech položených v kurzu chemie.

Projekt byl realizován za finanční podpory ze státních prostředků prostřednictvím Fondu rozvoje vysokých škol Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy, projekt č. 2155/2006.

5P-02 VODA OKOLO NÁS

**JAN GRÉGR, BOŘIVOJ JODAS, HANA
SCHEJBALOVÁ a MARTIN SLAVÍK**

*Technická Univerzita v Liberci, Hálkova 6, 461 17 Liberec
jan.gregr@tul.cz*

Projektová výuka je jednou z forem uplatnění mezioborových vztahů při vzdělávacím procesu. Nepředkládá učivo formou soustavných slovních informací, ale vede žáky k vlastním činnostem, k vyhledávání zdrojů poznatků, k osvojování si postupů při řešení problémů, k pozorování, k experimentování a k interpretaci získaných informací. Rozvíjí uplatňování individuální aktivity a tvořivosti žáků při řešení konkrétních praktických problémů, vede žáky ke schopnosti rozhodovat, k podnikavosti, ke kritičnosti při hodnocení informací. Spojuje proces učení bezprostředně s běžným životem a projekt může být takto skutečně využit.

Na tradiční vyučování jsou učitelé, žáci i rodiče zvyklí

a je mu přizpůsobena školní legislativa i celkové pojetí práce ve škole. Nevýhodou je neustálá potřeba hledání motivace a dále i fakt, že tradiční vyučování dostatečně neprohlubuje získané poznatky, nepřihlíží k individuálním rozdílnostem žáků a nedostatečně rozvíjí sociální vztahy.

Při výchově budoucích učitelů nestačí jen uplatňovat netradiční výukové formy v hodinách didaktiky, ale i v dalších předmětech. Volitelné předměty obvykle uzavíráme studentskou minikonferencí s prezentacemi projektů, které si studenti sami na základě zvládnutí učiva a vyhledání dalších informací připravili. Tímto způsobem vzniká databáze projektů na pomoc další výuce. Při pedagogické praxi mohou studenti po dohodě s vedoucím pedagogem odzkoušet projektovou výuku jako motivační a inovační prvek ve výuce na ZŠ.

Jako nejzajímavější a nejlépe uplatnitelné téma na všech úrovních jsme několikrát odzkoušeli projekty „Voda okolo nás“. Zatímco v předchozích letech jsme ponechávali studentům volnější možnost výběru tématu, v minulém roce jsme se soustředili na dva okruhy „Voda a energie“ a „Člověk a voda“. Jednotlivá témata v prvním okruhu zahrnovala spojení s výukou geografie – nejzajímavější vodopády, s výukou fyziky – od mlýnského kola až po největší světové vodní elektrárny, velký zájem vzbudila i prezentace o ničivé síle vody. Vztah člověka k vodě prezentovaly práce o koloběhu vody v přírodě, vodě mořské, v atmosféře a ve Vesmíru, vodoláčbě, balených vodách na trhu, nouzovým čištění vod a vodních systémech a dějích v akváriích.

Studenti měli možnost dodatečných dotazů a bodového hodnocení jednotlivých prezentací. Po dodatečném „dolažení“ jsou prezentace převáděny na katedrální webové stránky a slouží jako inspirace i podklad pro studium. Obdobný postup volíme též ve výuce předmětů Historie chemie¹, Úvod do mineralogie a Člověk a chemie.

LITERATURA

1. Grégr J., Jodas B., Schejbalová H., Slavík M.: Historie očima mladých chemiků Aktuální otázky výuky chemie XV., Univerzita Hradec Králové, sborník přednášek XV. Mezinárodní konference o výuce chemie, IX-2005, (Bílek M., ed.), s. 235. Gaudeamus, Hradec Králové 2005.

5P-03 PORTÁL ELEKTRONICKÝCH STUDIJNÍCH OPOR VŠCHT PRAHA

**JIŘÍ JIRÁT^a, MILOSLAV NIČ^a, BEDŘICH KOŠATA^a,
EVA DIBUSZOVÁ^b, LUCIE ŠMÍDOVÁ
a JIŘÍ ZNAMENÁČEK^b**

^a *Laboratoř informatiky a chemie, Fakulta chemické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6,*

^b *Vydavatelství VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
Jiri.Jirat@vscht.cz*

Vydavatelství VŠCHT Praha ve spolupráci s pracovníky zodpovědnými za obor „Informatika a chemie“ zahájilo před dvěma lety projekt vytváření on-line kolekce elektronických publikací VŠCHT Praha.

V rámci projektu byly vypracovány metodiky a následně byl vytvořen systém tvorby elektronických publikací. Systém

byl navržen tak, aby umožňoval jak produkci samostatné elektronické publikace, tak tvorbu elektronické verze každého tištěného titulu vydávaného vydavatelstvem VŠCHT Praha, aniž by zatěžoval autory jakoukoli prací navíc. Ukazuje se, že koexistence obou forem je ideální pro výuku studentů i jako rychlý informační zdroj.

Elektronická verze full-textově prohledávatelná, přitom zachovávající stejnou strukturu jako verze tištěná s možností rychle vyhledat nebo si oživit určitou informaci tak ideálně doplňuje formu tištěnou vhodnou ke studiu většího rozsahu. Naprostá většina výukových materiálů je přístupná volně na adrese: http://vydavatelstvi.vscht.cz/katalogy-e/katalog_e-books_cze.html.

Autorsko-právní stránka projektu je smluvně ošetřena a zajišťuje ji vydavatelství VŠCHT Praha.

Vzhledem k rychlému nárůstu počtu elektronických studijních materiálů je nutnost jejich systematického uspořádání nezbytností. Proto bylo rozhodnuto vytvořit portál elektronických studijních opor: <http://www.vscht.cz/eso/>.

Při rozhodování o technickém a organizačním zajištění standardního provozu byly zvažovány dvě varianty: centrální katalogizátor, nebo otevřený systém, kdy každý uživatel může modifikovat informace.

Po vyhodnocení počáteční fáze byl zvolen první přístup (katalogizátor) – frekvence změn je relativně nízká. Katalogizátor, který se dobře orientuje v celém systému, výrazně ulehčí práci a ušetří čas autorům a pedagogům.

Studijní materiály jsou v portálu tříděny podle následujících aspektů: studijní předmět, studijní obor, typ studijního materiálu (tabulky, skripta, návody k laboratorím atd.), autor, pracoviště, zařazení podle Polytematického strukturovaného hesláře STK¹.

Tato práce vznikla za podpory TRANSFORMAČNÍCH ROZVOJOVÝCH PROGRAMŮ MŠMT ČR na rok 2006 – projekt č. 432 „Integrovaný systém elektronických studijních opor VŠCHT Praha“.

LITERATURA

1. Polytematický strukturovaný heslář <http://www.stk.cz/psh.html>

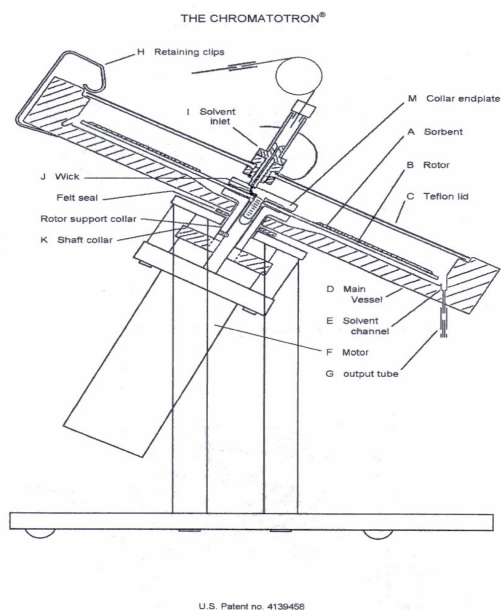
5P-04

VYUŽITÍ CHROMATOTRONU® A JEHO ZAŘAZENÍ DO LABORATORNÍ ÚLOHY Z ORGANICKÉ CHEMIE PRO OBOR: ZDRAVOTNICKÁ BIOANALYTIKA, KOMBINOVANÁ FORMA STUDIA

ALEŠ IMRAMOVSKÝ*, JARMILA VINŠOVÁ a JUAN MONREAL FÉRRIZ

*Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Univerzita Karlova v Praze, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové
Ales.Imramovsky@faf.cuni.*

Chromatotron model 7924T je preparativní, centrifugálně urychlený, radiální, tenkovrstvý chromatograf. Jednoduchá konstrukce zajišťuje snadnou manipulaci a dobré výsledky



Obr. 1. Chromatotron model 7924T (náčrtek)

separací. Schematický náčrtek přístroje je uveden na obr. 1. Chromatografie je prováděna v tenké vrstvě sorbentu A (přístroj umožňuje separaci na silikagelu nebo oxidu hlinitém vždy ve spojení s vhodným pojivem). Vrstva sorbentu je umístěna na rotoru B. Motor F otáčí rotorem konstantní rychlostí umístěným v hlavní části přístroje D. Roztok vzorku je na rotor nanášen přes přívod I a rovnoměrnost nanášení je zabezpečena knotem J. Mobilní fáze je na rotor dopravována stejnou cestou jako vzorek. Eluent přechází z rotoru do kanálku, který ho přivádí k výstupu z přístroje G. Teflonové víko C je transparentní pro UV záření a umožňuje za použití vhodných rozpouštědel stálou kontrolu separace. Kovové svorky H přidržují teflonové víko, které zamezuje odpařování rozpouštědel z vrstvy sorbentu tj. změnám poměrů rozpouštědel v mobilní fázi a dalším negativním vlivům. Konstrukce zařízení umožňuje pracovat rovněž za inertních podmínek (N₂, Ar). Separační vrstva může být podle typu separace regenerována a opětovně využita.

Cílem prezentace, která je součástí projektu dlouhodobého rozvoje Faf UK a její vzdělávací činnosti, je modernizace předmětu Praktických cvičení z organické chemie, studijního programu Zdravotnická bioanalýtika. Jedná se o provedení syntézy některých biologicky aktivních látek v semimikro-preparativním měřítku s využitím pokrokových syntetických a izolačních metod.

V prezentaci bude provedeno porovnání separačních chromatografických metod dostupných na Katedře anorganické a organické chemie Faf UK tj.: Chromatotron® model 7924T, VersaFlash™ systém (Supelco®), Horizon™ HPFC (Biotage) a klasická kolonová chromatografie, hodnocení účinnosti separace a ekonomické aspekty jednotlivých metod.

Tato práce vznikla za podpory grantu MSM 002162082 a FRVŠ 152/2006/G6/Faf.

6L-01**ANTIMIKROBIÁLNÍ A SAMOČISTICÍ VLASTNOSTI FOTOKATALYTICKÝCH SUPERHYDROFILNÍCH VRSTEV****MICHAL VESELÝ, PETR DZIK, MÁRIA VESELÁ, JANA CHOMOUCKÁ a JANA CHOVANCOVÁ**

Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno
 vesely-m@fch.vutbr.cz

Využití světlem indukovaných redoxních procesů na povrchu fotokatalyzátoru, jakým je oxid titaničitý, se ukazuje stále víc slibnějším a nachází další možnosti praktické aplikace. Po absorpci záření s energií větší než je šířka zakázaného pásu příslušného polovodiče dochází ke generaci páru elektron-díra. Za příznivých podmínek dochází po migraci nosičů náboje k povrchu částice k jejich interakci s adsorbovanými molekulami, jakými jsou voda, kyslík, hydroxylové ionty a vznikají vysoce reaktivní kyslíkaté radikály, zejména hydroxylový radikál, atakující organické molekuly.

Tento efekt byl využitý pro inaktivaci kvasinek ve vodě a sledování kinetiky tohoto procesu. Po ataku hydroxylového radikálu na vnější membránu mikroorganismů dochází k jejímu narušení. Během tohoto procesu buňka významně neztrácí životaschopnost, dochází ale ke změnám propustnosti ve vztahu k reaktivním kyslíkovým radikálům a k jejich pronikání do buňky. Vzniklé radikály atakují cytoplasmickou membránu a dochází k peroxidaci lipidické membrány, což má za následek smrt buňky. K tomu účelu bylo zkonstruováno několik fotokatalytických reaktorů s imobilizovaným oxidem titaničitým. Koncentrace kvasinek byla určována během reakce nepřímou, kultivační metodou i přímou metodou s epifluorescenčním mikroskopem a barvením Akridinovou oranží. Fluorescenční mikroskopie spolu s vhodným fluorescenčním barvivem umožnila výborné rozpoznání živých a mrtvých buněk.

Zatímco pro fotokatalytickou inaktivaci kvasinek není potřebné vytvářet velice tenké vrstvy fotokatalyzátoru, pro druhý sledovaný jev – superhydrofilní efekt – již bylo potřeba připravit vrstvy zcela transparentní. Byly zhotoveny tenké transparentní vrstvy oxidu titaničitého s tloušťkou menší než 150 nm na sodnovápenatých sklech sol-gel procesem. Fotokatalytická aktivita byla zjišťována z rychlosti fotokatalytické degradace modelových látek ve fotokatalytických reaktorech ve vsádkovém i průtočném režimu. Superhydrofilní vlastnosti, úzce související se samočisticím efektem připraveného povrchu byly charakterizované měřením kontaktních úhlů vody. Po ozáření takového povrchu se kontaktní úhel vody měnil z původních 35 ° k nule během několika desítek sekund. Dosažení superhydrofilního efektu transparentních vrstev oxidu titaničitého záviselo na mnoha faktorech, jako například před-úprava povrchu před nanášením solu, způsob nanášení solu, složení solu a intenzitě ozařování připravené vrstvy.

Tato práce vznikla za podpory grantu FRVŠ ČR 2389.

LITERATURA

1. Rincón A.-G., Pulgarin C.: Appl. Catal., B 49, 99 (2004).
2. Kühn K. P.: Chemosphere 53, 71 (2003).

6L-02**RUBISCO – JEDEN Z MNOHA ENZYMŮ****JIŘÍ KALINA^a, OTMAR URBAN^b a RADKA BUKOVSKÁ^a**

^a Katedra fyziky, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava 1, ^b Laboratoř ekologické fyziologie rostlin, Ústav systémové biologie a ekologie AV ČR, Poříčí 3b, 603 00 Brno
 jiri.kalina@osu.cz

Enzym ribulosa-1,5-bisfosfát karboxylasa/oxygenasa (Rubisco, EC 4.1.1.39) je nejhodnějším proteinem zemské biosféry. Nachází se ve stroma chloroplastů ve velké koncentraci a tvoří až 50 % rozpustných listových bílkovin. Je nejdůležitějším fotosyntetickým enzymem, protože katalyzuje první reakci Calvin-Bensonova cyklu, tj. karboxylaci, při které je CO₂ fixován v organických molekulách. Změny v aktivitě i v obsahu enzymu Rubisco jsou používány jako citlivý diagnostický parametr při zjišťování negativních efektů biotických i/nebo abiotických faktorů životního prostředí. Hlavním faktorem prostředí, které významně ovlivňuje růst a vývoj rostlin, je ozáření a koncentrace CO₂ ([CO₂]) v atmosféře. Působení zvýšené [CO₂] obecně vede jak ke zvýšení kapacity fotosyntézy (pozitivní aklimace) spojené se zvýšeným využitím absorbované energie ve fotochemických reakcích, tak i k poklesu kapacity fotosyntézy (aklimační deprese). Aktivita enzymu Rubisco může být stanovena *in vivo* použitím měření výměny plynů nebo *in vitro* spektrofotometrickými metodami. Obsah enzymu Rubisco může být stanovován separačními metodami, jako jsou gelová a kapilární elektroforéza a radioimmunoprecipitační metoda. Pro stanovení aktivity, resp. množství enzymu Rubisco jsme využili spektrofotometrickou metodu, která spočívá v měření rychlosti oxidace NADH (časové změny absorbance při 340 nm), resp. stanovení absorbance při 270 nm.

Tato práce byla podpořena grantem „CzechCarbo – studium cyklu uhlíku v terestrických ekosystémech ČR v souvislostech Evropského projektu CARBOEUROPE (VaV/640/18/03)“ a grantem „Změny aktivity a obsahu enzymu Rubisco při působení zvýšené koncentrace CO₂“ (GA ČR 522/06/0930).

6L-03**CUDZORODÉ LÁTKY V PŮDÁCH PODUNAJSKEJ NÍŽINY****JÁN TOMÁŠ^a, LADISLAV LAHUČKÝ^a, JANETTE MUSILOVÁ^a, JUDITA BYSTRICKÁ^a a PETER OBTULOVÍČ^b**

^a Katedra chemie, Fakulta biotechnologie a potravinářstva, ^b Katedra statistiky a operačního výzkumu, Fakulta ekonomiky a manažmentu, Slovenská poľnohospodárska univerzita, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, SR
 Jan.Tomas@uniag.sk

Výsledky stanovení celkových obsahů těžkých kovů v půdách katastrof obcí Vračka, Dolný Bar, Očko a Svätý

Peter poukazujú na zložitost' vzťahu pôda – rastlina. Z výsledkov vyplýva, že kým referenčné hodnoty určené pre Cr, Pb, Ni a Co v analyzovaných pôdach neboli prekročené, v prípadoch Cu a Cd stanovené obsahy boli vyššie ako sú limity A (Rozhodnutie MP SR č. 531/1994), znamená to obsah ťažkých kovov nad hranicami prirodzeného pozadia a môže sa to prejavovať zvýšením ich obsahu v rastlinách (na kyslých pôdach alebo u rastlín, ktoré vo zvýšenej miere prijímajú rizikové prvky).

V ďalšom sa budeme zaoberať len týmito ťažkými kovmi. Kým priemerný obsah Cu v zemskej kôre sa udáva na 55 mg kg^{-1} , v pôde je klarkový obsah 25 mg kg^{-1} (priemerný obsah prvku vo vrchnej časti zemskej kôry, ktorý sa používa ako všeobecná hodnota pozadia, údaje podľa Taylora a Mc Lennana 1985). Podľa Linkeša a spol. (1997), priemerný obsah Cu v poľnohospodárskych pôdach SR v hĺbke 0,1 m je $22,59 \text{ mg kg}^{-1}$. Za rizikové pôdy nad hranicou prirodzeného pozadia limit A sú pôdy s hodnotou nad 36 mg kg^{-1} . Prepočítaná hodnota A pre podstatnú časť pôd v Podunajskej nížine napr. černoze a čierne hlinité s intervalom zastúpenia ilovitej frakcie od 11 po 22 % s priemerným obsahom humusu po zaokruhlení vychádza priemerne 30 mg Cu kg^{-1} . Pre hnedozeme po prepočítaní vychádza priemerná hodnota 29 mg Cu kg^{-1} . Ako to vyplýva z dosiahnutých výsledkov, nad hranicami A sú pôdy z katastra Vrakuňa, Dolný Bar, kým viac ako dvojnásobné prekročenie hodnoty A sa zistilo v katastri Svätý Peter. Súvisí to s dlhodobým používaním mednatých fungicidov v uvedených podnikoch. Celkovo však ani v jednej vzorke sa nezistilo prekročenie k indikačnej hodnote B, ktorá znamená, že kontaminácia pôd bola analyticky preukázaná.

Keď budeme vychádzať zo zákona 220/2004 Z.z. a predpokladu, že výsledky získané stanovením ťažkých kovov v extraktoch získaných rozkladom zeminy zmesou $\text{HF} + \text{HNO}_3 + \text{HCl}$ môžeme rámcovo analogizovať s výsledkami získanými v lúčavke kráľovskej a v oboch prípadoch budeme výsledky považovať za totálne obsahy resp. pseudototálne obsahy, potom pre prevažnú časť Podunajskej nížiny podľa pôdneho druhu hlinité, piesočnato-hlinité, potom limitná hodnota Cu 60 mg Cu kg^{-1} . Znamená to, že podľa súčasnej platnej legislatívy v Podunajskej nížine stanovené obsahy Cu v pôde neprekročili limitnú hodnotu, ktorá indikuje jej kontamináciu. Rovnako ani podľa platnej legislatívy do roku 2004 nebola prekročená indikačná hodnota B $100 \text{ mg Cu kg}^{-1}$, ktorá znamená kontamináciu pôdy.

Relatívne vyššie hodnoty Cu nad referenčnou hodnotou A, teda na hodnotu pozadia, súvisia s reakciou Cu^{2+} s uhličitami v ČA, ČM a HM vyvinutých prevažne na karbonátových substrátoch ako i s väzbami s organickou hmotou. Cu s organickou hmotou vytvára rozlične stabilné komplexy, kde môže byť tak silno viazaná, že je pre rastliny neprístupná.

Priemerný obsah Cd v zemskej kôre je $0,2 \text{ mg kg}^{-1}$, Klarkový obsah je $0,10 \text{ mg kg}^{-1}$. Podľa Linkeša a spol. (1997) je v poľnohospodárskych pôdach v hĺbke do 0,1 m je $0,285 \text{ mg Cd kg}^{-1}$. Prepočítaná norma je $0,6 \text{ mg Cd kg}^{-1}$. Podľa súčasnej legislatívy pre hlinité a piesočnato hlinité pôdy je to $0,7 \text{ mg Cd kg}^{-1}$.

Referenčné hodnoty A boli prekročené vo všetkých analyzovaných pôdach Podunajskej nížiny. V porovnaní s klarkovými obsahmi sú to hodnoty niekoľkonásobne vyššie.

Relatívne najvyššie obsahy Cd sme stanovovali v katastri Šurianky v hnedozemiach. Ako sme už skôr uviedli, priemerné obsahy ťažkých kovov v HM boli $1,44 \text{ mg kg}^{-1}$ a maximálna hodnota $2,16 \text{ mg kg}^{-1}$. Zrejme je to výsledok dlhodobého používania superfosfátu, nakoľko fosforečňany spracované u nás dovezené z Afriky obsahovali až $110 \text{ mg Cd kg}^{-1}$. Stanovené obsahy Cd Podunajskej nížiny prekračujú aj limitné hodnoty podľa Z.z. 220/2004 pre hlinité a piesočnato-hlinité $0,7 \text{ mg Cd kg}^{-1}$. Navyiac pre pôdny druh hlinité a piesočnato-hlinité s pH nižším ako 6,0 je pre Cd limitná hodnota ešte nižšia ako pre piesočnaté a hlinito-piesočnaté $0,4 \text{ mg kg}^{-1}$. Popri pôdnej reakcii pohyb Cd ovplyvňuje redox potenciál, obsah humusu, zrnitosť a obsah Fe, Mn, Al. Zvýšenie obsahu Cd v povrchových horizontoch súvisí s dlhodobým prísunom do pôdy atmosférickým spadom a fosforečnými hnojivami. Jeho obsah v bazických horninách je vyšší ako v horninách kyslých, kde Cd je silne viazané vysokomolekulovými huminovými kyselinami, kým fulvokyseliny tvoria s Cd rozpustné cheláty a z toho dôvodu mobilita Cd je určená pomerom HK a FK. V oxidačných podmienkach Cd tvorí málo mobilné zlúčeniny.

Výskum vznikol s podporou GP VEGA č. 1/2428/05.

LITERATÚRA

1. Jomová K., Zima M., Hegedusová A., Tóth T.: ChemZi 1/1, 265 (2005).
2. Tóth T., Tomáš J., Lazor P., Chlpík J., Jomová K., Hegedusová A.: ChemZi 1/1, 225 (2005).
3. Vollmannová A., Lazor P., Hegedusová A.: Chem. Listy 98 (8), (2004).

6L-04

RIZIKOVÉ PRVKY ANTROPOGÉNNEHO PÔVODU V PÔDACH STREDNÉHO SPIŠA

TOMÁŠ TÓTH^a, ALENA VOLLMANNOVÁ^a, JANETTE MUSILOVÁ^a, JUDITA BYSTRICKÁ^a, ALŽBETA HEGEDŮSOVÁ^b a KLAUDIA JOMOVÁ^b

^a Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovanská poľnohospodárska univerzita, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, ^b Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita Konštantína Filozofa, Tr. A. Hlinku 1, 949 01 Nitra, SR Tomas.Toth@uniag.sk

Sledované poľnohospodárske pôdy v imisnom areáli Stredný Spiš vzhľadom k geologickým i klimatickým podmienkam majú prirodzenú úrodnosť nižšiu. Energetickými vstupmi vo forme priemyselných hnojív, pesticídov ako i používaním výkonných odrôd, hospodáriace subjekty viaceré desaťročí odolávali negatívnym vplyvom exhalátov z priemyslu v danom regióne, lokalizovaného v Krompachoch a Rudňanoch. Napriek tomu, že úrody poľnohospodárskych plodín boli úmerne pôdno-klimatickým podmienkam, ich hygienická kvalita bola vstupom hlavne rizikových kovov často riziková. Kontaminované krmné plodiny či už inkorporáciou rizikových kovov cez koreňový systém, alebo mechanická kontaminácia zo znečisteného ovzdušia sa odrážajú na úžitkovosti a zdravotnom stave hospodárskych zvierat.

Kontaminácia sledovaných poľnohospodárskych pôd zo znečisteného ovzdušia bola v minulosti živelná a jej variabilitu umožňovali meniace sa veterné a zrážkové pomery, členitosť terénu ako aj výška výduchových priemyselne znečistených plynov.

Výsledky tejto práce poukazujú na mieru kontaminácie pôd prevažne zlúčeninami Hg, Pb, Cu a Zn. I keď sme v predchádzajúcej časti uviedli, že zdroje znečistenín zo ŽB Rudňany boli odstránené, avšak kontaminácia pôd sa v podstate neznižila. Zdroj kontaminantov z iných zdrojov (KO Krompachy) v zníženej miere pretrvávajú a stále sa uplatňuje znečistenie ovzdušia sekundárnou prachosťou. Vysoko kontaminované pôdy ako i niektoré skládky sa stávajú infekčnými zdrojmi pre ďalšiu kontamináciu pôd i vegetácie. Je preto nutné zvážiť i mieru zavinenia kontaminácie reziduálnej.

Obsah rizikových prvkov sme sledovali na 12 parcelách regiónu Stredný Spiš. V regióne sú zastúpené prevažne stredne ťažké pôdy, fluvizeme a kambizeme. Pôdna reakcia sa pohybuje v rozmedzí 4,21 až 6,98, tj. sú zastúpené pôdy s extrémne kyslou až neutrálnou pôdnou reakciou.

Z hodnotenia obsahu sledovaných ťažkých kovov (Cu, Ni, Cd, Pb, As, Hg) vyplýva, že obsah medi v pôde sa pohybuje v rozmedzí 31,6 až 709,2 mg kg⁻¹, čo znamená, že niektoré lokality pre ich veľmi vysoký obsah (prekročenie limitnej hodnoty C) medi v pôde je nutné vyňať z poľnohospodárkeho pôdneho fondu, je potrebná sanácia pôdy (1 lokalita) a 7 stanovišť svojím obsahom medi v pôde je preukázateľne kontaminovaných týmto prvkom (prekročenie limitnej hodnoty B). Obsah niklu, kadmia a olova je v pôdach Stredného Spiša taktiež vysoký, prekračujúci legislatívou stanovenú limitnú hodnotu. Ide však o len o prekročenie limitnej hodnoty A pre tieto prvky (limitná hodnota A pre Ni = 35 mg kg⁻¹, Cd = 0,8 mg kg⁻¹, Pb = 85 mg kg⁻¹).

Obsah arzénu v sledovaných pôdach sa pohyboval v rozmedzí 5,28 až 124,3 mg kg⁻¹. Z 12 sledovaných lokalít 5 lokalít nevykazuje kontamináciu pôdy As, obsah je nižší ako limitná hodnota A = 29 mg kg⁻¹, na 1 lokalite bola prekročená limitná hodnota B (30 mg kg⁻¹) a na 6 sledovaných lokalitách sme zistili prekročenie indikačnej hodnoty C (50 mg kg⁻¹) pre obsah As v pôde. Tieto pôdy je potrebné v súlade s legislatívou sanovať. Podobne ako v prípade azrénu, a pri sledovaní obsahu ortuti v pôde sme zistili zvýšený obsah Hg v pôde. Dve stanovišťa majú vyšší obsah Hg v pôde ako je indikačná hodnota C (10 mg kg⁻¹), prekročenie indikačnej hodnoty B (2 mg kg⁻¹) sme zistili na troch stanovištiach a prekročenie indikačnej hodnoty A (0,3 mg kg⁻¹) sme zistili na 7 stanovištiach. Ako z uvedeného vyplýva, všetky sledované stanovišťa vykazujú určitú mieru kontaminácie pôd ortuťou.

Z dosiahnutých výsledkov možno konštatovať, že hodnotenie a sledovanie pôdnej hygieny v tomto regióne je nutné a veľmi dôležité. Obsahy niektorých sledovaných prvkov prekračujú legislatívou stanovené limitné hodnoty, čo z tohto pohľadu radí tieto pôdy medzi pôdy rizikové, kontaminácia je analyticky preukazná. Rizikovosť týchto pôd sa odzrkadľuje aj na kvalite dopetrovaných produktov, či už z pohľadu potravinárskej hodnoty, ako aj ich hygienickej nezávadnosti. Vzhľadom na ohrozenosť pôd v tomto regióne je potrebné sa stavu pôdnej hygieny venovať zvýšenú pozornosť.

LITERATÚRA

1. Zaujec A., Tomáš J.: Chem. Listy 59, (2005).

2. Lahučký L.: Agriculture 51, (2005).
3. Hruškovičová A.: Sledovanie ťažkých kovov v niektorých druhoch zeleniny. In : I. ved. konf. – Bezpečnosť a kvalita surovín a potravín. Nitra, 2005. Nitra 2005.
4. Bajčan D., Tomáš J., Timoracká M., Lahučký L., Magdina P.: Chosen qualitative parametres of agricultural plants in Hontiansky region. In : I. ved. konf. – Bezpečnosť a kvalita surovín a potravín, Nitra 2005. Nitra 2005.
5. Melicháčová S.: Transfer ťažkých kovov v semenách, listoch a slame pohánky obyčajnej a laskavca ohnutého. In: III. ved. konf. štud. a dokt. s medzinárodnou účasťou, Nitra 2005. SPU, Nitra 2005.

6L-05

CHLOR V LESNÍM EKOSYSTÉMU – PŘIROZENÁ CHLORACE PŮDNÍ ORGANICKÉ HMOTY

M. MATUCHA^a, M. GRYNDLER^b, H. UHLÍŘOVÁ^c, S.T. FORCZEK^a, K. FUKSOVÁ^d, P. SCHRÖDER^c a J. ROHLENOVÁ^a

^a Ústav experimentální botaniky AV ČR, 142 20 Praha 4,

^b Mikrobiologický ústav AV ČR, 142 20 Praha 4, ^c Výzkumný ústav lesního hospodářství a myslivosti, Jiloviště-Strnady, 156 04 Praha 5, ^d 1. lékařská fakulta UK, 121 08 Praha 2,

^e GSF-National Research Center for Environment and Health, Institute of Soil Ecology, Neuherberg, FRG
matucha@biomed.cas.cz, gryndler@biomed.cas.cz, uhlirova@vulhm.cz, fuksovak@seznam.cz

Byla studována málo prozkoumaná role chloru v lesním ekosystému – tvorba, cesty a přeměny vybraných organických chlorovaných látek jako jsou chloroform, kyseliny di- a trichloroctová (DCA a TCA), event. dalších, v lesní půdě a jejich vliv na vegetaci.

Chlorid byl považován za environmentálně chemicky inertní látku právě tak, jako chlorované organické látky byly pokládány téměř výhradně za látky antropogenního původu. V poslední době však bylo zjištěno, že úloha chloru v životním prostředí je mnohem aktivnější, důležitější a složitější než se předpokládalo^{1,2}. V souvislosti s našimi nedávnými studiemi role chloroctových kyselin (CAA) v environmentálních procesech³⁻⁵ bylo potvrzeno, že CAA (vznikající při chloraci půdní organické hmoty spolu s CHCl₃) mohou jako jeden ze stresových faktorů negativně ovlivňovat jehličnany a jako intermediáty také hrát důležitou roli při rozkladu půdní organické hmoty (SOM) v lesním ekosystému. Jako další majoritní produkt chlorace se uvádí chloroform, který je obsažen v půdním roztoku a proniká spolu s chloridem i do spodních vod. V této souvislosti je třeba vidět vliv používání posypových solí k ošetření vozovek na životní prostředí.

Při užití [1,2-¹⁴C]DCA a [1,2-¹⁴C]TCA bylo zjištěno, že CAA jsou v půdě relativně rychle mikrobiálně degradovány na oxid uhličitý a chlorid, užitím radiochloru ³⁶Cl byl naopak potvrzen jejich vznik chlorací SOM spolu s dalšími chlorovanými organickými látkami. Důležitým faktorem jsou mikroorganismy, zejména houby. Ty jsou schopné v půdě enzymaticky konvertovat chlorid na radikál chloru Cl•, který pak SOM

(např. huminové a fulvokyseliny) v půdě chloruje. Ke sledování uvedených procesů jsou aplikovány námi dopracované analytické metody a oba zmíněné radioizotopy s příslušnými radioanalytickými metodami⁶. Cílem výzkumu je kromě osvětlení uvedených procesů v lesním ekosystému posouzení jejich role v geografické situaci České republiky (v porovnání s přímořskými oblastmi s vyššími depozicemi chloridů) a dopadu na lesní ekosystém ve volné souvislosti s globálními změnami klimatu a cyklem uhlíku a chloru, resp. vlivem na životní prostředí.

Tento výzkum byl podporován granty GAČR 522/02/0874 a 526/05/0636 a GSF Neuherberg.

LITERATURA

1. Öberg G. M., v: *The Handbook of Environmental Chemistry* (Gribble G., ed.), Vol. 3, Part P, pp. 43–62. Springer-Verlag 2003.
2. Laturus F., Fahimi I., Gryndler M., Hartmann A., Heal M. R., Matucha M., Schöler H.-F., Schroll R., Svensson T.: *Environ. Sci. Pollut. Res.* 12, 233 (2005).
3. Forczek S. T., Matucha M., Uhlířová H., Albrechtová J., Fuksová K., Schröder P.: *Biologia Plantarum*, 44, 317 (2001).
4. Matucha M., Forczek S. T., Gryndler M., Uhlířová H., Fuksová K., Schröder P.: *Chemosphere* 50, 303 (2003).
5. Matucha M., Gryndler M., Forczek S. T., Uhlířová H., Fuksová K., Schröder P.: *Environ. Chem. Letters* 1, 127 (2003).
6. Matucha M., Rohlenová J., Forczek S. T., Uhlířová H., Gryndler M., Fuksová K., Schröder P.: *Chemosphere*, v tisku.

6L-06

MOŽNOSTI ŽUŽITKOVÁNÍ POUŽITÝCH NÍZKOTUHNOCÍCH CHLADÍCÍCH SMĚSÍ NA BÁZI GLYKOLU

JURAJ KIZLINK^a a KAROL FANČOVIČ^b

^a *Fakulta chemická VUT, Purkyňova 118., 612 00 Brno, Česká republika,* ^b *Muškatova 32., 821 01 Bratislava, Slovensko*
kizlink@fch.vutbr.cz

Přehled možností zužitkování použitých nízkotuhnocích chladících směsí na bázi glykolů jako odpadu z provozu motorových vozidel. Odpadní ethylenglykol lze buď vyčistit a recyklovat jako novou chladicí směs, anebo po úpravě použít jako penetrátor do dřeviny pro chemickou ochranu dřeva, případně i jako protimrazový přípravek pro přepravu uhlí, koksu, škváry a šterku. Rozhodujícím faktorem je zde stále správná organizace sběru tohoto odpadu, což je zatím u nás kromě autoservisů celkem neuspokojivé a většina těchto odpadů hlavně od soukromníků, žel končí v kanalizaci.

Nízkotuhnocí chladicí směsi (NCS) na bázi glykolů tvoří důležitou spotřební a periodicky měněnou součást chladicího systému motorových vozidel¹. V současnosti při jejich výměně sice v menším množství probíhá jejich sběr v autoservisech, ale větší množství pořád končí v kanalizaci, což představuje značnou zátěž pro ČOV a celý ekologický

vodní systém. Proto se neustále hledají cesty jejich snadného a hlavně levného zužitkování, regenerace, recyklace a zneškodňování.

Hlavní možností zužitkování použité NCS zůstává pořád její využití pro motorová vozidla. Úpravou použité NCS obvykle pomocí přísad (aktivní uhlí, fosforečnany, sorbenty aj.) lze filtrací získat poměrně čistý vodní roztok glykolů, který po úpravě čistým glykolem na požadovanou koncentraci a přidavku potřebných přísad (alkalizéry, antidegradanty, antikoro-rodanty, odpěňovače aj.) lze znovu použít jako NCS pro chladicí systém motorových vozidel^{2,3}.

Pro regeneraci a recyklaci glykolů připadá do úvahy proces hlavně jejich destilace, a to až po úpravě použité NCS filtrací a také oddestilování značného podílu vody, což je obvykle asi polovina celkového objemu směsi. Toto vyžaduje značné množství tepelné energie a dovolit si to mohou pouze velké podniky s vlastní teplárnou nebo přebytkem tepelné energie. Takový způsob měli v plánu zavést i v podniku Slovnaft a.s. Bratislava, ale dodnes nebyl ve velkokapacitním měřítku zaveden do praxe⁴.

Jiná možnost je použitou NCS pouze důkladně přečistit a zase po doplnění glykolem a dalšími přísadami znovu použít pro daný účel. Nový způsob skládající se z dekantace, filtrace, kontaktu s aktivním uhlím a silně kyselým katexem, oddělení dikarboxylových kyselin, kontaktu se silně bazickým anexem a dalšího kontaktu s aktivním uhlím, poskytuje téměř čistý vodní roztok glykolů. Tento lze buď zpracovat na novou recyklovanou NCS, nebo destilačně na příslušný glykol. Zařízení je sestaveno z dekantéru, filtrů, kolon s aktivním uhlím, kolony s katexem, odlučovače dikarboxylových kyselin, kolony s anexem a destilační resp. rektifikační jednotky s vakuovou pumpou⁵.

Co se týká možností zužitkování použité NCS pro jiné účely, tak do úvahy zde připadají zatím dvě cesty. Jedna z nich využívá upravenou nebo také neupravenou použitou NCS pro postřik uhlí jak na haldách ve skládkách, tak i na vagoněch pro přepravu, proti jeho možnému zmrznutí a tím i ztížené manipulaci při jeho překládce nebo vykládce hlavně v tepelných elektrárnách v zimním období⁶.

Druhá cesta ukazuje možnost použití takové použité NCS jako penetrátora pro vodní roztoky chemických ochranných prostředků na ochranu dřeva. Glykoly zde působí jako pomocné látky, které slouží na zavedení účinných látek hlouběji do dřevné hmoty, obvykle asi 20 % do listnatého a asi 30 % do jehličnanového dřeva. Kromě toho ethylenglykol svojí mírnou toxicitou synergicky zvyšuje fungicidní účinnost použitého chemického přípravku⁷.

LITERATURA

1. Hrdlička Z.: *Automobilové kapaliny*. Grada Publishing, Praha 1996.
2. Grunwald A., Mach M., Fuchs P.: Regenerace použitých nemrznoucích směsí, AO 263 246 (1991), *Chem. Abstr.* 115, 186 602 (1991).
3. Božek F., Urban R., Zemánek Z.: *Recyklace*, Moravia Tisk, Pustiměř 2003.
4. Paulech J., Macho V., Revús M., Malovec J., Hlinšťák K. (Slovnaft): Sposob regenerácie chladiacích nemrznúcich zmesí na báze viacmocných alkoholov, AO 185 702 (1980), *Chem. Abstr.* 95, 65 025 (1981).
5. Fančovič K. (VÚRUP): Sposob regenerácie použitých

nízkotuhných zmesí a zariadenie na vykonávanie tohto spôsobu, AO 284 451 (2005), 1 April 2005, CA t.č. není.

- Inks C. G., Compton J. W. (BASF): Freeze modification agent, US 4 277 520 (1981), Chem. Abstr. 95, 118 231 (1981).
- Kizlink J., Chloupek L., Víchová P., Reháková M., Reinprecht L.: CHEMagazín 14, 12 (2004).

6L-07

VÝVOJ SCREENINGOVÉ METODY PRO SPECIAČNÍ ANALÝZU ORGANOKOVÝCH LÁTEK V RYBÁCH POMOCÍ KOMERČNĚ DOSTUPNÉ INSTRUMENTACE

**LUKÁŠ KOHL^a, MILOSLAV SUCHÁNEK^a
a ZBYNĚK PLZÁK^b**

^a Ústav analytické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha, ^b Ústav anorganické chemie, Akademie věd České republiky, 250 68 Řež u Prahy
lukas.kohl@vscht.cz, miloslav.suchanek@vscht.cz, plzak@iic.cas.cz

Organokovové látky patří do skupiny toxických látek, které se s rozvojem průmyslu dostávají do životního prostředí, nebo se již v životním prostředí vyskytují a působí na daný ekosystém. Z důvodu ochrany veřejného zdraví je důležité znát koncentrace jednotlivých toxických organokovových látek, které se v životním prostředí vyskytují. Organokovové látky v životním prostředí podléhají různým vlivům, při nichž dochází k chemickým reakcím, které změny nejen chemickou strukturu, ale i toxikologické a chemické vlastnosti^{1,2}.

Cílem této práce je vývoj metody, která bude vhodná pro screeningové stanovení organokovových látek v rybí svalovně. Ze skupiny organokovových látek se podrobněji zabýváme látkami, kde na kov (Hg, Pb, Sn) je navázán alkylový nebo arylový zbytek.

Pro speciální analýzu sloučenin rtuť v rybách byl zvolen tandem GC-MS. Nejnáročnější je příprava vzorků a optimalizace jednotlivých kroků přípravy vzorků ke speciální analýze. Uvolnění organokovových látek vázaných v rybí svalovně tak, aby nedošlo i ke změně chemické struktury sledovaných látek. Čímž by došlo k nenávratné ztrátě informace o sledovaných látkách a tím by celá speciální analýza ztratila smysl.

V případě separace organokovových látek na GC je nutno látky derivatizovat vhodným činidlem (tetra-*n*-propylborát sodný), které sledované látky převede na těkavé nepolární sloučeniny a přitom nedojde ke ztrátě informace o chemické struktuře jednotlivých sledovaných látek.

Z prostředí rybí matrice je nutno organokovové látky po derivatizaci extrahovat (HS-SPME, extrakce do nepolárního rozpouštědla). Extrakcí by mělo dojít i k zakoncentrování, protože koncentrace sledovaných látek je na úrovni stopové-ustrastopové analýzy (ng/g). Jednotlivé podmínky a kroky speciální analýzy byly vybrány a optimalizovány tak, aby bylo dosaženo co nejlepších vlastností s ohledem na požadavky screeningových metod.

Tato práce vznikla za podpory grantu ME 652.

LITERATURA

- Adams F., Ceulemans M., Slaets S.: LC/GC Europe September, 2–12(2001).
- Grinberg P., Campos R. C., Mester Z., Sturgeon R. E.: J. Anal. I At. Spectrom. 18, 902 (2003).

6L-08

ACIDOBÁZICKÉ, SORPČNÍ A IONTOVĚ VÝMĚNNÉ VLASTNOSTI MATERIÁLŮ NA BÁZI HUMINOVÝCH LÁTEK

PAVEL JANOŠ^a, SYLVIE GRÖTSCHELOVÁ^a, LIBUŠE MADRONOVÁ^b a JOSEF KOZLER^b

^a Fakulta životního prostředí, Univerzita J. E. Purkyně, Králova Výšina 7, 400 96 Ústí nad Labem, ^b Výzkumný ústav anorganické chemie, Revoluční 84, 400 01 Ústí nad Labem
janos@fzp.ujep.cz

Huminové látky (HS) je souhrnný název pro složité organické sloučeniny vznikající v přírodě procesy degradace organické hmoty (zbytků rostlin, živočichů apod.), ale i syntetickou činností mikroorganismů. HS lze získat alkalickou extrakcí z přírodních surovin¹, v našich podmínkách zejména z určitých druhů mladého hnědého uhlí, tzv. oxyhumolitů. Mezi nejdůležitější vlastnosti HS patří jejich schopnost vázat různé chemické látky, zejména kationty kovů, což je dáno přítomností kyselých funkčních skupin (zejména karboxy-lových a fenolických) ve struktuře HS. Bylo prokázáno, že huminové kyseliny připravené z bilinského oxyhumolitu jsou schopny zachycovat kationty těžkých kovů v množství asi 0,4–1,7 mmol g⁻¹ (cit.²). Samotný oxyhumolit je rovněž schopen vázat některé typy kyselých i bazických barviv z vodných roztoků³ – sorpční kapacita se pohybuje v rozmezí asi 0,07–0,27 mmol g⁻¹. V některých případech může být výhodnější použití solí huminových kyselin s vícevalentními kationty kovů jako pevných sorbentů, neboť tyto látky jsou ve vodných roztocích méně rozpustné než huminové kyseliny. Podobný materiál (humát železa) vznikající jako odpad při výrobě alkalických humátů byl úspěšně použit při zachycování kationtů kovů^{4,5}, bazických barviv^{5,6}, Cr(VI) i méně polárních organických látek jako jsou chlorfenoly⁵.

Výzkum byl realizován za finanční podpory programu Výzkumná centra PP2-DP01 MŠMT prostřednictvím projektu Pokročilé sanační technologie a procesy (IM0554). Autoři děkují SD-Humatex, a. s., Bílina za poskytnutí materiálů na bázi huminových látek.

LITERATURA

- Novák J., Kozler J., Janoš P., Čížková J., Tokarová V., Madronová L.: React. Funct. Pol. 47, 101 (2001).
- Čížková J., Kozler J., Madronová L., Novák J., Janoš P.: React. Funct. Pol. 47, 111 (2001).
- Janoš P., Šedivý P., Rýznarová M., Grötschelová S.: Chemosphere 59, 881 (2005).
- Janoš P., Fedorovič J., Staňková P., Grötschelová S., Rejnek J., Stopka P.: Environ. Technol. 27, 169 (2006).
- Janoš P.: Environ. Chem. 2, 31 (2005).
- Janoš P.: Environ. Sci. Technol. 37, 5792 (2003).

6L-09

PŘÍPRAVA HUMINOVÝCH KYSELIN VYŠŠÍ ČISTOTY

LIBUŠE MADRONOVÁ, JAROMÍR NOVÁK, JOSEF KOZLER a BARBORA ANTOŠOVÁ

Výzkumný ústav anorganické chemie, a. s., Revoluční 84,
400 01 Ústí nad Labem,
libuse.madronova@vuanch.cz

Humínové látky (HS) vzhledem ke své chemické a biologické aktivitě nacházejí široké uplatnění v různých oblastech¹. Perspektivní využití je v humánní a veterinární medicíně jako potravinářské doplňky a léčivé formy. Pro tyto aplikace je třeba, aby HS byly biologicky aktivní, uplatňovaly se jako sorbenty a obsah rizikových prvků splňoval povolené limity.

Z primárních surovin (nejčastěji oxyhumolitů) se alkalickou extrakcí získávají humáty, jejich koagulací minerálními kyselinami se připravují humínové kyseliny (HA).

Čistota získaných HS závisí na charakteru výchozích surovin. Vzorky z různých těžebních lokalit se liší obsahem HS a složením anorganického podílu. Dokládá to průzkum zdrojů HS v ČR². Na čistotu připravených HS má vliv také obsah loužitelných HS (HS_L) v surovině. Nejenže je výtěžek preparací humátů draselného (HK) ze surovin s nízkým obsahem HS_L malý, ale vlivem vyšší potřeby KOH přechází do produktů i značné množství anorganických sloučenin. Produkty mají často vyšší obsah popela než původní suroviny.

Úpravami stávajícího postupu izolace HS, popř. zavedením dalších operací se získají HS vyšší čistoty:

1. Odstředování roztoku alkalického humátu – touto operací se výrazně sníží obsah křemíku a hliníku, během úprav nedošlo k poškození biologické aktivity HS.
2. Expozice oxyhumolitu v kyselém prostředí před alkalickou extrakcí – získá se tak roztok HK o vyšší čistotě a pozitivně se také ovlivní jeho biologická aktivita.
3. Oxidace odpadního uhlí s použitím různých oxidačních činidel – oxidační proces zvýší obsah HS_L a tím umožní zvýšit výtěžek extrakce HS. Při oxidaci uhlí kyselinou dusičnou dochází také k jeho nitraci za vzniku nitrohumátu, což je možno zhodnotit při jejich budoucím využití jako zemědělského hnojiva^{3,4}.

Tato práce vznikla v rámci řešení projektu ev. číslo FT-TA/038 s finanční podporou Ministerstva průmyslu a obchodu České republiky.

LITERATURA

1. Novák J., Kozler J., Madronová L., Kubiček J., Rodová A., Fidler J.: Sborník přednášek 8. konference Aprochem 2005, s. 198–205.
2. Madronová L., Kozler J., Novák J.: Sborník přednášek 8. konference Aprochem 2005, s. 219–222.
3. Machajová Z., Čurillová D., Bežovská M.: Acta Montanistica Slovaca 7, 34 (2002).
4. Sílvia dos Santos Garcia, Daniela Benedita Moro, André Jablonski, Ricardo Munõz da Silva: 12. mezinárodní konference IHSS, São Pedro, 2004. Brazílie, 2004.

6L-10

HODNOCENÍ STIMULAČNÍHO ÚČINKU HUMINOVÝCH LÁTEK NA VYŠŠÍCH ROSTLINÁCH

BARBORA ANTOŠOVÁ, JOSEF KOZLER, JAROMÍR NOVÁK, JAROSLAV KUBÍČEK a LIBUŠE MADRONOVÁ

Výzkumný ústav anorganické chemie, a. s., Revoluční 1521/84,
400 01 Ústí nad Labem
barbora.antosova@vuanch.cz

Humínové látky (HS) jsou využívány ke zvyšování produkce polních i speciálních plodin¹. Podobně jako chemické a fyzikální vlastnosti HS jsou závislé na původu surovin a způsobu izolace, lze očekávat, že stejně mohou být ovlivněny i stimulační schopnosti HS. Byla vyvinuta metoda stanovení stimulačního účinku HS na klíčících semenech různých druhů vyšších rostlin. Pro měření byl ze surovin izolován humát draselný.

Tabulka I

Relativní přírůstky zárodečných kořenů hrachu, kukuřice a pšenice při působení HS a různých stimulatorů vyjádřené v % (po 96 hodinách expozice kořenů v roztoku HS)

Vzorek	Hrách	Kukuřice	Pšenice
Kontrola	100	100	100
HS	113	154	220
Atonic Pro	107	147	175
Hycol R	154	139	153

Tabulka II

Relativní přírůstky zárodečných kořenů kukuřice při působení HS různého původu, způsobu izolace a po dané době od jejich izolace (po 96 hodinách expozice kořenů v roztoku HS)

Vzorek	A	B	C
Kontrola	100	100	100
HUMECO, a. s., Most	92	146	188
Sokolovská uhelná, a. s., Sokolov	99	154	169
SD - Humatex, a. s., Bílina	108	189	168

A - Měření ihned po přípravě vzorků, B- měření s odstupem jednoho roku od přípravy vzorků, C - expozice oxyhumolitu v kyselém prostředí před alkalickou extrakcí, měření ihned po přípravě vzorků

Uvedené výsledky potvrzují předpoklad změny stimulačního vlivu v závislosti na původu, způsobu izolace a době od přípravy HS.

Řešeno s podporou Ministerstva průmyslu a obchodu ČR, evidenční číslo projektu: FT-TA/038.

LITERATURA

1. Novák J., Kozler J., Madronová L., Kubiček J., Antošová B., Rodová A., Fidler J.: Sborník přednášek 14. konference Aproxchem 2005, s. 198–205.

6L-11

RECIPROCAL INTERACTIONS BETWEEN Se, Cd, Zn, Cu AND Pb EVALUATED BY INHIBITION OF PHYSIOLOGICAL PROCESSES AND METALS ACCUMULATION IN SEEDLINGS OF *SINAPIS ALBA* L.

AGÁTA FARGAŠOVÁ and MARIANNA MOLNÁROVÁ

Department of Ecosozology and Physiotactics, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Mlynska dolina B-2, 842 15 Bratislava, Slovak Republic
fargasova@fns.uniba.sk

The aim of our study was assessment of reciprocal interactions between Se, Cd, Zn, Cu and Pb. Metals were added into hydroponic solutions in pair combinations and mustard seedlings (*Sinapis alba* L.) were used as a model subject. Phytotoxicity of individual metals and Se-metal combinations was determined through photosynthetic pigments content (chlorophyll *a*, *b*, total carotenoids). Metal accumulation in the roots and shoots was determined by the AAS method. Se in all metal combinations reduced the unfavourable effects of other metals tested for chlorophylls content, however, for carotenoids primarily the opposite effect occurred. The metal pairs Se + Cu and Se + Zn decreased chlorophyll *b* content more than chlorophyll *a* content. Carotenoids production was in comparison to control more strongly inhibited only in combinations Se + Pb and Se + Cu on 32.0 and 27.5 %, respectively. Selenium uptake from solutions with Se-metal combinations was in both plant parts (roots and first plant leaves) higher and exceeds Se amount uptakes from solution only with Se about 4 (in combination Se + Cu) to 68 % (in combination Se + Cd). In the highest amount was in both plant parts Se accumulated from combination Se + Cd. The strongest inhibition was observed in Pb accumulation (84.9 %) in the shoots. Therefore, Cd, Cu, Zn and Pb increased Se accumulation in *S. alba* young plants. In contrast, Se decreased other metals tested accumulation in both plant parts, except Se + Cd and Se + Cu combinations, when Se increased Cd and Cu accumulation in the roots about 24 and 9 %, respectively. However, Se increased Cu accumulation in the roots, nearly completely reduced its accumulation in the shoots.

Study was supported by the Scientific Grant Agency, Grant No. 1/1312/04 and by Grant of Comenius University UK/116/2006.

6L-12

COMPARISON OF INHIBITORY EFFECTS OF Se(4+) AND Se(6+) COMPOUNDS ON FRESHWATER ALGAE

JANA PASTIEROVÁ^a, AGÁTA FARGAŠOVÁ^a, and IVETA ONDREJKOVIČOVÁ^b

^a Comenius University, Faculty of Natural Sciences, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, ^b Slovak University of Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Radlinského 9, 812 45 Bratislava
pastierova@fns.uniba.sk

However, selenium is an essential nutrient for animals, microorganisms and some other eukaryotes, its essentiality for vascular plants was not confirmed, yet¹. Selenium occurs in natural waters in trace amounts as selenate (SeO₄²⁻) or selenite (SeO₃²⁻)². While plants taken up both, selenites and selenates, selenates are considered the most readily available to plants. However, for algae selenites are the most bioavailable Se form³.

The aim of study was comparison of inhibitory effects of selenium compounds in two oxidation states Se(IV) and Se(VI) (SeO₂, H₂SeO₃, Na₂SeO₃, Na₂SeO₄ and H₂SeO₄(nia)₃) on four algal species – *Scenedesmus quadricauda*, *Chlorella vulgaris*, *Scenedesmus subspicatus* and *Raphidocelis subcapitata*. Observed parameter were algal growth and photosynthetic pigments production (chlorophyll *a* and chlorophyll *b*). Inhibitory effects were expressed as EC₅₀ values and their 95 % confidence intervals (CI).

Chlorophyll content is important parameter on first approximation of biological response on toxic ions for freshwater photosynthesizing organisms. On the basis of estimated EC₅₀ values for all algal species it can be concluded that selenites are more toxic than selenates. It is evident that the strongest inhibitory effect on *S. subspicatus* and *S. quadricauda* algal growth had H₂SeO₃, while on *C. vulgaris* it was SeO₂. The weakest inhibitory effect on algal growth had for *S. subspicatus* H₂SeO₄(nia)₃ and for *S. quadricauda* and *C. vulgaris* Na₂SeO₄.

While for *Selenastrum capricornutum* sublethal effects were observed at 0.1 mg l⁻¹ level, other species are introduced as more tolerant, exhibiting effects at about 1 mg l⁻¹ or more⁵. On the basis of obtained results good agreement with this statements can be confirmed.

Study was performed by VEGA Grants 1/1312/04, 1/2452/05.

REFERENCES

1. Ellis D. R., Salt D. E.: *Curr. Opin. Plant Biol.* 6, 273 (2003).
2. Ohlendorf H. M., in: *Handbook of Ecotoxicology*. CRC Press, 2003.
3. Hamilton S. J.: *Sci. Total Environ.* 326, 1 (2004).
4. Fargašová A.: *Bull. Environ. Contam. Toxicol.* 67, 688 (2001).
5. Knight A. W., Maier K. J., Foe C., Ogle R. S., Williams M. J., Kiffney P., Melton L. A.: *Trace Subst. Environ. Health* 21, 361 (1987).

6L-13**ASSESSMENT OF INHIBITORY EFFECT AND METALS ACCUMULATION (Cd, Zn, Cu, Pb, Se) IN MUSTARD *SINAPIS ALBA* L.****MARIANNA MOLNÁROVÁ and AGÁTA FARGAŠOVÁ***Department of Ecosozology and Physiotactics, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Mlynska dolina B-2, 842 15 Bratislava, Slovak Republic molnarova@fns.uniba.sk, fargasova@fns.uniba.sk*

While some plants are selenium tolerant, for others non-tolerant Se may impair germination and growth and lead to chlorosis¹.

During the tests chronic ecotoxicological effects of Cd, Cu, Pb, Se a Zn on the mustard seedlings (*Sinapis alba* L.), which grew in hydroponic solution, were observed. The phytotoxicity was determined through the root growth inhibition and photosynthetic pigments production (chlorophyll *a*, *b* and total carotenoids). Metal accumulation in the roots and cotyledons was determined by using the AAS method, too. On the basis of IC₅₀ values and their 95 % confidence intervals (CI) the following rank order of inhibition for root elongation can be arranged: Cu > Se > Cd > Zn >> Pb.

The photosynthetic pigments production in cotyledons varied after the treatment by metals in the range from 8 (Se and the total carotenoid content) to 62 % (Pb and chlorophyll *a* content). The strongest inhibitory effect on all three determined pigments was observed especially for Pb and the lowest for Se and Cd. Chlorophyll *a* content was decreased after the metal treatment faster than the chlorophyll *b* content.

The accumulation of all tested metals was higher in the roots than in the hypocotyledons. The highest accumulation in both plant parts was confirmed for Cd when its accumulation in the roots and hypocotyledons reached 13.8 and 5 %, respectively. The Se accumulation (8.3 % in the roots and 3 % in the hypocotyledons) represented only 42.6 % of Cd accumulation. The accumulated amount of metals from hydroponic solution into the roots and hypocotyledons decreased in the order Cd > Zn > Se > Pb > Cu.

Study was supported by the Scientific Grant Agency, Grant No. 1/1312/04 and by Grant of Comenius University UK/116/2006.

REFERENCES

1. Fargašová A., Pastierová J., Svetková K.: Plant Soil Environ. 52, 8 (2006).

6L-14**VEĽMI MALÉ MNOŽSTVÁ POLYETYLÉNOXIDU S MOLEKULOVOU HMOTNOSŤOU 600 000 MODIFIKÁTOROM NIEKTORÝCH ZÁKLADNÝCH TECHNOLOGICKÝCH VLASTNOSTÍ JADROVÝCH ZMESÍ ZLIEVÁRENSKÝCH NA BÁZE ALKALICKÝCH FENOLOVÝCH ŽIVÍC****HAROLD MÄSIAR a NIKOLA KALOFOROV***Fakulta špeciálnej techniky, Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne, Študentská 1, 911 50 Trenčín, Slovensko masiar@tmuni.sk*

Účinok polyetylénoxidu s molekulovou hmotnosťou 600 000 alebo 200 000 (PEO 600 000 alebo PEO 200 000) dodaného do jadrových zlievárenských zmesí na báze alkalických fenolových živíc vo forme prášku je neaditívne vysoký na priedušnosť. Pritom pôsobenie PEO 600 000 je vyššie v porovnaní s PEO 200 000. Neaditívne vysoký účinok na priedušnosť PEO 600 000 je pri takých malých množstvách ako 0,02–0,1 hm.% a v prípade PEO 200 000 je pri 0,1 hm.%. Neaditívnosť účinku rastie od 0,02 až po 0,1 hm.% PEO 600 000.

Pevnosť v rozštepě jadrovej zlievárenskej zmesi na báze alkalických fenolových živíc: pri účinku PEO 600 000 pridaného vo forme prášku je zvýšená pri koncentráciách 0,02 až 0,06 hm.%; z PEO 600 000 pridaného vo forme roztoku je znížená pri 0,04–0,1 hm.%; z PEO 200 000 pridaného vo forme prášku je trochu zvýšená pri 0,02 hm.% a potom znížená.

Vyššie uvedené experimentálne výsledky poukazujú, že účinok malých množstiev PEO je vyšší pri jeho molekulovej hmotnosti 600 000 a pridávanom vo forme prášku do jadrových zlievárenských zmesí na báze alkalických fenolových živíc.

Ekologický význam získaných experimentálnych výsledkov spočíva v tom, že z malých množstiev PEO v pieskových formách sa získava menej splođín s jeho spaľovaním pri odlievaní. Na rozdiel od väčšiny ďalších polymérov používaných vo formovacích či jadrových zmesiach sú veľmi malé množstvá PEO veľmi málo toxické.

6L-15**DETERMINATION OF ORGANIC WOOD SMOKE MARKERS IN AEROSOL SAMPLES****PETRA KOTIANOVÁ, ALEXANDRE CASEIRO, BARBARA ROLLINGER, and HANS PUXBAUM***Institute of Chemical Technologies and Analytics, Vienna University of Technology, Getreidemarkt 9/164-AC, A-1060 Vienna, Austria kotianov@centrum.sk*

The particulate matter in the atmosphere comes from aerosol sources, e.g. vehicle exhaust, vegetative detritus, wood combustion, meat cooking, natural gas combustion, cigarette smoke. The air quality management could be more

effective, if the main contributors to the atmospheric aerosols were known. To estimate the contribution of aerosol sources, the determination of markers in the atmosphere aerosol and aerosol sources is necessary. Markers are chemical species, which are typical for individual aerosol source.

Wood combustion is an important primary source of soot and organic particulate matter. In some regions of central Europe, wood is still commonly used as fuel for space heating in homes. Wood smoke is also produced during garden garbage burning, campfires burning, eventually there could occur local forest burning episodes in summer.

The usual tracers of wood smoke are markers of inorganic character – elemental chlorine and potassium. The usage of organic markers allows to go further and distinguish between wood types (softwood, hardwood). The organic markers of wood combustion are e.g. levoglucosan, retene, abietic acid, pimaric acid, syringol.

The determination of organic compounds in aerosol samples starts with sample collection on the filters. Then, the organic analytes are released from the filter by extraction. After sample-treatment, they are determined via analytical instrumental technique.

The analytical procedures for quantification of organic wood smoke tracers were investigated. The optimized methods of determination of levoglucosan, retene, and abietic acid were applied for analysis of ambient aerosol samples and source samples. Atmospheric aerosols were collected in one urban site and one background site in Vienna during cold season, January-March and October-December 2004. Among aerosol sources, samples from wood smoke, vegetative detritus, cooking, street dust etc. were analysed.

6L-16 EVALUATION OF VIENNA AIR POLLUTION BY DETERMINATION OF SELECTED ORGANIC MARKERS IN AEROSOLS SAMPLES

PETRA KOTIANOVÁ and HANS PUXBAUM

*Institute of Chemical Technologies and Analytics, Vienna
University of Technology, Getreidemarkt 9/164-AC, A-1060
Vienna, Austria
kotianov@centrum.sk*

The monitoring of air quality and aerosol composition is important because solid particles and chemical species present in the atmosphere have negative health effect to human beings. Atmospheric aerosol is in reality a mixture of aerosols produced by different natural and man-made sources. The contribution of individual aerosol sources is often determined by applying the chemical mass balance (CMB) technique¹. The aim of this work is to investigate the contribution of selected aerosol sources in the Vienna atmosphere via determination of selected non-polar and semi-polar organic compounds, which could serve as markers in a CMB model.

The PM₁₀ aerosol fraction was collected daily at four sampling sites throughout Vienna during 2004. The sampling was performed with high-volume sampler on quartz fibre filters. The samples were then divided to the pools according sampling site and mass. The pools were submitted for analysis. Filters were extracted twice with cyclohexane under ultrasonic agitation. After sample treatment, the GC-MS analysis was performed.

The concentration of target analytes was determined in samples collected at two inner-city sampling sites, Rinnböckstrasse and Kendlerstrasse, and two background sites, Schafbergbad and Lobau. The monitored analytes are *n*-alkanes C₂₀–C₃₄ and selected polycyclic aromatic hydrocarbons, which are potential markers of vehicle exhaust, vegetative detritus, wood combustion, and natural gas combustion. The data will be interpreted to show seasonal variations, differences between sampling sites, correlations between some parameters, and estimation of sources contribution.

REFERENCE

1. Cass G. R.: Trends Anal. Chem. 17, 356 (1998).

6P-01
MONITORING OF EUTROPHICATION WATERS
NEAR BRATISLAVA

KATARÍNA AMBRÓOVÁ and AGÁTA FARGAŠOVÁ

Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovakia
 fargasova@fns.uniba.sk

Cyanobacteria are commonly observed in eutrophic waters and pose a serious water quality problems because of the potent toxins that they produce and release in water after their cell lysis¹.

Eutrophication was monitored in four localities near Bratislava – lake Devín (**I**), lake Tomky (**II**) near village Studienka, lake Železná studnička (**III**) and gravel lake Kuchajda (**IV**). Samples were taken away under STN ISO 5667-4 norm² and cyanobacteria species³ and toxicity was determined by using tests with *Thamnocephalus platyurus*⁴, *Vibrio fischeri* and *Daphnia magna*⁵.

The following cyanobacteria species were determined in monitoring waters: **I** – *Microcystis aeruginosa*, *Oscillatoria limnetica*; **II** – *Myrocystis* sp., *O. limnetica*, *O. redekei*, *Anabaena flos-aquae*, *Anabaenopsis* sp., *Merismopedia glauca*; **III** – *Planktothrix agardhii*, *M. aeruginosa*, *Snowella* sp., *Aphanizomenon flos-aquae* var. *clebhanii*, *Anabaena* sp.; **IV** – *Aphanocapsa delicatissima*, *Aphanotheca floccosa*, *Coelomon pusillum*, *Cyanocatenula planctonica*, *Chlorococcus limneticus*, *Merismopedia glauca*, *Radiocystis aphanotectea*, *S. cf. littoralis*, *M. aeruginosa*. Results from toxicity tests are introduced in table I.

Table I
 Toxicity of lake samples determined as EC50 values [ml/l] for *V. fischeri* 30 min test by using extract⁴ and as % of inhibition for *T. platyurus*⁴ and *D. magna*⁵ tests by using water samples³

Locality	I	II	III	IV
<i>V. fischeri</i>	720.6	479.4	907.8	no effect
<i>T. platyurus</i>	10	20	95	no effect
<i>D. magna</i>	10	10	70	20

Obtained results confirmed that combination of analytical, biological and toxicological techniques for identification and risk assessment of hepatotoxic microcystins is comprehensive.

Research was supported by VEGA Grant 1/1312/04.

REFERENCES

- Chorus I., Bartram J. (ed.): *Toxic Cyanobacteria in Water*. E & FN Spon, London 1999.
- STN ISO 5667-4 (75 7051). SUTN, Bratislava 1999.
- Maršálek B., Keršner V., Marvan P.: *Vodní květy sinic. Nadtatio flos-aquae*, Brno 1996.
- TNV 75 7754: Odvětvová technická norma vodního hospodářství ČR, 1997.
- STN 838303. SUT, Bratislava 1999.

6P-02
DETEKCE TĚŽKÝCH KOVŮ ZA POUŽITÍ
ELEKTROCHEMICKÝCH SENZORŮ

JIŘÍ BALOUN^{a,b}, JAN PRÁŠEK^c, MARTIN ADÁMEK^c,
 JAROMÍR HUBÁLEK^c, LIBUŠE TRNKOVÁ^d, PAVEL
 HANUŠTIK^b, VOJTĚCH ADAM^{b,e}, DAVID
 POTĚŠIL^{b,e} a RENÉ KIZEK^b

^a Ústav biologie rostlin a ^b Ústav chemie a biochemie, Agromická fakulta, Mendelova zemědělská a lesnická univerzita v Brně, Zemědělská 1, 613 00 Brno, ^c Ústav mikroelektroniky, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií, Vysoké učení technické v Brně, Údolní 53, 602 00 Brno, ^d Katedra teoretické a fyzikální chemie a ^e Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykovy univerzity v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno
 kizek@sci.muni.cz

Rozvoj průmyslové výroby přináší produkci celé řady škodlivých sloučenin – pesticidů, toxických organických látek a také těžkých kovů. Koncentrace těžkých kovů v životním prostředí je závažným problémem v ochraně lidského zdraví a produkci potravin v řadě zemí. Jednou ze základních podmínek života je udržení stálého prostředí uvnitř organismu – homeostázy, kterou těžké kovy výrazným způsobem ovlivňují a narušují. Při jejím narušení může v organismu velmi rychle docházet k ukončení životně důležitých funkcí. Do organismů těžké kovy vstupují z okolního prostředí nejčastěji potravou, environmentálními polutanty, herbicidy či pesticidy. A proto snadná a rychlá detekce těžkých kovů ve velmi nízkých koncentracích je nezbytná pro zajištění opatření proti akutní intoxikaci. Jednu z velmi slibných a dynamicky se rozvíjejících technologií pro zajištění rychlé detekce těžkých kovů představují elektrochemické senzory a biosenzory^{1,2}. V naší práci jsme pomocí různých elektroanalytických technik detegovali ionty těžkých kovů, jako kadmium, olovo, měď a zinek. Dalším cílem práce bylo vytvoření elektrochemického systému ve spojení s tlustovrstvým mikrosenzorem. Byla optimalizována topologie mikrosenzoru pro dosažení dostatečného detekčního limitu a hledán vhodný materiál pro pracovní elektrody senzorů. Navíc bylo testováno několik grafitových materiálů pro pracovní elektrody. Vedle grafitových past byly vytvořeny a testovány pasty z uhlíkových nanotrubic. Některé pasty z nanotrubic obsahovaly modifikované uhlíkové nanotrubičky, z nichž nanotrubičky dotované kyslíkem prokázaly mnohem lepší odezvu než nanotrubičky bez dotací.

Tato práce vznikla za podpory grantů GA ČR 525/04/P132, GA ČR 202/05/0607, FRVŠ 3313/2006 a MŠM 0021630503.

LITERATURA

- Adam V., Zehnalek J., Petrlova J., Potesil D., Sures B., Trnkova L., Jelen F., Vitecek J., Kizek R.: *Sensors* 5, 70 (2005).
- Adam V., Petrlova J., Potesil D., Zehnalek J., Sures B., Trnkova L., Jelen F., Kizek R.: *Electroanalysis* 17, 1649 (2005).

6P-03

OPTIMALIZACE STANOVENÍ OXIDOVANÉHO GLUTATHIONU, JEHO REDUKOVANÉ FORMY A S-NITROSOGLUTATHIONU POMOCÍ BRDIČKOVY REAKCE

JIRÍ BALOUN^{a,b}, JIRÍ PETŘEK^{a,b}, JAN VÍTEČEK^{a,b}, VOJTĚCH ADAM^{b,c}, DAVID POTĚŠIL^{b,c}, KAREL STEJSKAL^{b,c}, LADISLAV HAVEL^a, MIROSLAVA BEKLOVÁ^d a RENÉ KIZEK^b

^a Ústav biologie rostlin a ^b Ústav chemie a biochemie Agronomická fakulta, Mendelova zemědělská a lesnická univerzita v Brně, Zemědělská 1, 613 00 Brno, ^c Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykovy univerzity v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno, ^d Ústav veterinární ekologie a ochrany životního prostředí, Veterinární a farmaceutická univerzita v Brně, Palackého 1/3, 612 42 Brno
kizek@sci.muni.cz

Molekula glutathionu byla objevena již před 80 lety. V našich experimentech jsme se nejdříve zaměřili na studium základního elektrochemického chování redukováného, oxidovaného a nitroso glutathionu pomocí cyklické voltametrie v borátovém pufru. Na získaných voltamogramech jsme pozorovali, že každý ze sledovaných glutathionů poskytuje charakteristický elektrochemický signál¹⁻³. Zajímalo nás, zda bude možné rozlišit jednotlivé glutathiony také pomocí Brdičkovy reakce. Na získaných DPV voltamogramech byly pozorovány již dříve popsané signály, které odpovídají redukci Co^{2+} na Co^0 ($\sim -1,0$ V), komplexu kobaltu s SH skupinami glutathionů označený jako RS_2Co ($\sim -1,0$ V) a další tři katalytické píky Cat_1 ($-1,1$ V); Cat_2 ($-1,2$ V) a Cat_3 ($-1,4$ V). Z výsledků je zřejmé, že redukční signál kobaltu(II), který je pozorován v základním elektrolytu při potenciálu $-1,2$ V, se posouvá v přítomnosti glutathionu směrem do pozitivních potenciálů. Pozorované změny signálu souvisí s vazbou komplexů kobaltu do struktury glutathionů za vzniku specifického komplexu RS_2Co . Na získaných experimentálních záznamech je možné vidět zcela rozdílné chování jednotlivých glutathionů (redukováný, oxidovaný a nitroso) při vzniku několika dalších doposud nepopsaných píků. Pozorované rozdíly v katalytických signálech pravděpodobně souvisí s rozdílnou strukturou jednotlivých glutathionů (skupina S-S, S-H, S-NO). Zjistili jsme, že signál Cat_3 u studovaných thiolů lineárně závisí na jejich koncentraci. Navržených postupů jsme dále využili pro studium obsahu thiolových sloučenin v rostlinných modelových systémech (explantátové kultury smrku či BY-2 tabákových buněk).

Príspevek vznikl za podpory grantů GA ČR 525/04/P132, MŠMT 6215712402 a Výzkumného centra M06030.

LITERATURA

1. Kizek R., Vacek J., Trnkova L., Klejdus B., Havel L.: Chem. Listy 98, 166 (2004).
2. Petrlova J., Potesil D., Mikelova R., Blastik O., Adam V., Trnkova L., Jelen F., Prusa R., Kuckacka J., Kizek R.: Electrochim. Acta, v tisku.
3. Prusa R., Kizek R., Vacek J., Trnkova L., Zehnalek J.: Clin. Chem. 50, A28 (2004).

6P-04

STUDIUM ROSTLINNÝCH DETOXIKAČNÍCH PEPTIDŮ POMOCÍ ELEKTROCHEMICKÝCH TECHNIK

JIRÍ BALOUN^{a,b}, JITKA PETRLOVÁ^b, JIRÍ PETŘEK^a, LADISLAV HAVEL^a, KAREL STEJSKAL^{b,c}, HELENA VLAŠINOVÁ^a, JOSEF ZEHNÁLEK^b, VOJTĚCH ADAM^{b,c}, LIBUŠE TRNKOVÁ^d, JAROMÍR HUBÁLEK^e a RENÉ KIZEK^b

^a Ústav biologie rostlin a ^b Ústav chemie a biochemie, Agronomická fakulta, Mendelova zemědělská a lesnická univerzita v Brně, Zemědělská 1, 613 00 Brno, ^c Katedra analytické chemie a ^d Katedra teoretické a fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno, ^e Ústav mikroelektroniky, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií, Vysoké učení technické v Brně, Údolní 53, 602 00 Brno
kizek@sci.muni.cz

Rostliny jsou součástí lidského jídelníčku, proto je nutné při jejich pěstování dbát na jejich nutriční hodnotu a obsah a poměr jednotlivých látek. Díky rozvoji těžkého průmyslu se do životního prostředí dostává řada toxických polutantů, jako například těžké kovy. Ionty těžkých kovů do rostlin mohou vstupovat již v průběhu pěstování na pozemcích s jejich vyššími obsahy v půdě. Po vstupu jsou transportovány do rostlinné buňky, kde mohou ovlivňovat celou řadu biologických a biochemických pochodů. Velkým problémem je pak vznik volných kyslíkových radikálů. Zvýšený obsah takových molekul může rostlinu silně poškodit až zahubit. Z těchto důvodů si rostliny byly nuceny vytvořit detoxikační mechanismus, díky němuž eliminují ionty toxických kovů. Je známo, že jedním z velmi významných detoxikačních peptidů je fytochelatin (PC). Zajímavým a dosud ne zcela dokonale popsaným procesem je glutathionem a nebo fytochelatinem katalyzované vylučování vodíku ze základního elektrolytu na rtuťových elektrodách¹. V naší předešlé práci bylo využito katalytických signálů (Brdičkovy reakce) pro studium glutathionu u raných somatických embrií smrku². Pro jsme využili katalytických signálů, v přítomnosti kobaltitých solí³, pro další studium glutathionu a fytochelatinů. Pomocí těchto elektroanalytických technik byly studovány různé fytochelatiny (des-Gly, PC2 a PC5). Na získaných voltamogramech byly pozorovány rozdílné elektrochemické odezvy v závislosti na studovaném thiolu.

Príspevek vznikl za podpory grantů GA ČR 525/04/P132, INCHEMBIOL 0021622412 a Výzkumného centra M06030.

LITERATURA

1. Baloun J., Petrlová J., Petřek J., Havel L., Potěšil D., Zehnalek J., Adam V., Trnková L., Jelen F., Kizek R.: V. Pracovní setkání fyzikálních chemiků a elektrochemiků, 5, 12 (2005).
2. Vacek J., Petrek J., Kizek R., Havel L., Klejdus B., Trnkova L., Jelen F.: Bioelectrochemistry 63, 347–351 (2004).
3. Kizek R., Vacek J., Trnkova L., Klejdus B., Havel L.: Chem. Listy 98, 166 (2004).

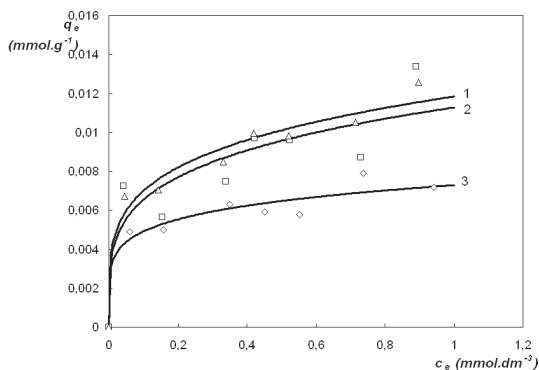
6P-05

PŘÍPRAVA A VYUŽITÍ NETRADIČNÍCH SORBENTŮ V OBLASTI ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ

SYLVIE GRÖTSCHELOVÁ a HANA BUCHTOVÁ

Fakulta životního prostředí, Univerzita Jana Evangelisty Purkyně, Králova Vyššina 7, 400 96 Ústí nad Labem
 grotschelova@jzfp.ujep.cz, buchtova@jzfp.ujep.cz

Sorpce na pevných sorbentech je jedním ze způsobů odstraňování chemických polutantů z různých složek životního prostředí. Nejpoužívanějším průmyslovým sorbentem je aktivní uhlí¹, ale vzhledem k jeho vysoké ceně a obtížné regeneraci je postupně nahrazováno novými netradičními sorbenty. Současný výzkum je zaměřen mj. na aplikaci humátů kovů a popílků. Tzv. „humáty kovů“ jsou sloučeniny, které se dají připravit z huminových látek srážením solí příslušného polyvalentního iontu (Fe^{3+} , Al^{3+} , Zn^{2+} , Ca^{2+} , Mg^{2+})². Popílků vznikají při spalování hnědého uhlí a následně jsou pro potřeby sorpce vysoušeny a homogenizovány.



Obr. 1. Freundlichova izoterma; (1) 2,3-dichlorofenol, (2) 2,4,5-trichlorofenol, (3) 2-chlorofenol

Na popílek byly sorbovány mono-, di- a tri- chlorfenoly. Humáty kovů byly použity k sorpci kyselých a bazických barviv.

Z naměřených hodnot je patrné, že popílek či humáty kovů mají viditelné sorpční schopnosti a lze je využít např. k čištění odpadních vod.

Výzkum byl proveden v rámci projektu Pokročilá sanační technologie a procesy č. 1M0554 programu Výzkumná centra PP2-DP01 MŠMT.

LITERATURA

1. Ponec V., Knor Z., Černý S.: *Adsorpce na tuhých látkách*. SNTL, Praha 1968.
2. Grötschelová S.: *Acta universitatis Purkynianae*, v tisku.

6P-06

EXTRAKCE 4-NONYLFENOL MONOETHOXYLÁTŮ Z VODY MAGNETICKOU TUHOU FÁZÍ

TOMÁŠ HUBKA^a, MARTINA KANDELOVÁ^a, KAREL KOMÁREK^a, MIROSLAVA ŠAFAŘÍKOVÁ^b a IVO ŠAFAŘÍK^b

^a Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Nám. Čs. Legií 546, 532 10 Pardubice, ^b Ústav ekologie krajiny AV ČR, Na sádkách 702/7, 370 05 České Budějovice
 karel.komarek@upce.cz

Tento příspěvek je zaměřen na stanovení výtěžnosti extrakce magnetickou tuhou fází zvoleného zástupce neionických tenzidů, jímž je nonylfenol monoethoxylát (NP1EO) z vodných modelových i reálných vzorků.

Oxyethylenované produkty tvoří většinu celosvětové produkce tenzidů, ale jejich biologická rozložitelnost je problematická¹. Navíc tyto látky vykazují rušivé vlivy na endokrinní systém živočichů (mají estrogenní účinky)². Proto je potřeba sledovat jejich obsah ve vodách.

Extrakce magnetickou tuhou fází (MSPE) je metoda na předúpravu vzorků vycházející z extrakce tuhou fází (SPE). Sorpce je založena na interakci mezi analyty a sorbenty s magnetickými vlastnostmi. V našem případě bylo k zmagnetizování použito aktivní uhlí Chezacarb B a jako magnetická látka oxidy železa.

Celý postup MSPE je třeba zoptimalizovat. Hlavní je optimalizace třech kroků extrakce, a to doby sorpce analytu na magnetický sorbent, doby desorpce (eluce) analytu ze sorbentu a počtu elučních kroků. Postup je tedy následující: k vodnému vzorku je přidána suspenze magnetického sorbentu v destilované vodě a vzorek je třepán na přístroji typu Vortex. Při tom dochází k sorpci analytu na sorbent. Poté je sorbent oddělen od vodné fáze pomocí magnetického separátoru. K sorbentu je přidáno eluční činidlo, v našem případě methanol, zkumavka je opět třepána a dochází k eluci analytu ze sorbentu. Poté je sorbent opět oddělen pomocí magnetického separátoru a methanolyvý extrakt je analyzován kapilární plynovou chromatografií.

Po zoptimalizování podmínek byla vypočtena výtěžnost extrakce. Optimální čas sorpce byl 1 minuta, desorpce 0,5 minuty, počet extrakčních kroků byl 3×1 ml methanolu. Při těchto podmínkách byla dosažena výtěžnost kolem 97 % (cit.³).

Tyto podmínky byly aplikovány i na reálné vzorky. V našem případě jsme použili filtry vzorků po biologickém rozkladu oxyethylenovaných nonylfenolů s různým počtem oxyethylenových jednotek. Pro srovnání byly tyto vzorky podrobeny i kapalinové extrakci s toluenem. Bylo zjištěno, že výtěžnost metody je srovnatelná s kapalinovou extrakcí a oproti ní je metoda podstatně rychlejší a s menší spotřebou rozpouštědel.

Tato práce vznikla za podpory grantů GA ČR 203/03/1028 a 203/03/1070.

LITERATURA

1. Ahel M., Hršek D., Giger W.: *Arch. Environ. Contam.*

- Toxicol. 26, 540 (1994).
- Dodds E. C., Lawson W.: Proc. Royal Soc. Lon. B. 125, 222 (1938).
 - Kandelová M.: *Diplomová práce*. Univerzita Pardubice, 97 (2005).

6P-07
TECHNOLOGIE ODSTRAŇOVÁNÍ CO₂ Z PLYNŮ
VYUŽITELNÉ V PRŮMYSLVÉM MĚŘÍTKU

EVA JUROVÁ a KAREL CIAHOTNÝ

Ústav plynárenství, koksochemie a ochrany ovzduší, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6

Eva.Jurova@vscht.cz, Karel.Ciahotny@vscht.cz

Vzrůstající obsah CO₂ v atmosféře způsobený lidskou činností bývá diskutován v souvislosti s klimatickými změnami a je kladen důraz na snižování jeho koncentrace v ovzduší. K částečnému snížení emisí CO₂ může dojít vhodnou volbou používaných paliv a technologických procesů, pro další snížení je nutné čištění odpadních plynů. Požadavek na účinné odstraňování CO₂ vzrostl 16. února 2005, kdy vstoupil v platnost Kjótský protokol a pro ČR vyvstal závazek snížení emisí skleníkových plynů o 8 % oproti roku 1990.

Pro snižování emisí CO₂ z technologických zařízení se v současnosti v průmyslovém měřítku používají absorpční metody, pracující s rozpouštědly na bázi organických aminů nebo uhličitánů. Mají však řadu nevýhod, jako nevhodnost pro vyšší teploty, finanční i energetickou náročnost a problémy s korozí. Proto je dnes pozornost zaměřována na hledání jiných postupů pro odstraňování CO₂ ze spalin.

Pro čištění spalin se jeví vhodné využití adsorpčních procesů díky jejich jednoduchosti, možnosti aplikace i za vyšších teplot, snadné regulaci procesu, nižším investičním i provozním nákladům a jednoduché regeneraci adsorbentů.

Naše pracoviště se zaměřilo na testování adsorbentů a možností jejich využití pro záchyt CO₂. Vedle komerčně dodávaných adsorbentů byly použity i adsorbenty na bázi přírodních zeolitů, které jsou zajímavé svými vlastnostmi a zejména nízkými pořizovacími náklady.

V laboratorních podmínkách byly provedeny testy separace oxidu uhličitého z modelových směsí CO₂–vzduch. Byl sledován vliv teploty (20–160 °C) a koncentrace oxidu uhličitého v plynu (8–20 obj.%) na účinnost adsorpce. Dalším sledovaným parametrem byl vliv obsahu vodní páry ve vstupní směsi.

Další část experimentů je zaměřena na možnosti desorpce, a to zvýšením teploty (TSA), snížením tlaku (PSA), kombinací obou zmíněných (PTSA) a využitím mikrovlnného záření.

Paralelně probíhají experimenty na pilotním adsorpčním zařízení, konstruovaném pro vysoké průtoky plynů a vysoké teploty s náplní přibližně 12 kg adsorbentu, které je schopné simulovat podmínky pro záchyt odpadních plynů za provozních podmínek.

Řešení této problematiky bylo realizováno za finanční podpory vyčleněné z prostředků výzkumného záměru MSM 6046137304 řešeného na Fakultě technologie ochrany prostředí VŠCHT Praha.

6P-08
VYUŽITÍ EXTRAKCE MAGNETICKOU TUHOU FÁZÍ
JAKO PREKONCENTRAČNÍ METODY PŘI
STANOVENÍ ALIFATICKÝCH UHLOVODÍKŮ,
LETECKÉHO PETROJELE A NAFTY VE VODĚ

MARTINA KANDELOVÁ^a, KAREL KOMÁREK^a,
MIROSLAVA ŠAFAŘÍKOVÁ^b a IVO ŠAFAŘÍK^b

^a *Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Nám. Čs. Legií 565, 532 10 Pardubice,* ^b *Ústav ekologie krajiny AV ČR, Na sádkách 702/7, 370 05 České Budějovice*
m.kandel@seznam.cz

Principem extrakce magnetickou tuhou fází je obvykle adsorpce cílové sloučeniny na magnetické částice a následné odstranění vytvořeného komplexu ze studovaného systému pomocí vnějšího magnetického pole. Závěrečným krokem této extrakce je eluce analytu pomocí rozpouštědla¹.

Tato práce se zabývá extrakcí magnetickou tuhou fází jako jednoduché možnosti extrakce ropných látek z vody. Při hledání optimálních podmínek extrakce byl použit modelový vodný vzorek homologické řady alifatických uhlovodíků C10 až C13. Optimální podmínky extrakce byly aplikovány na extrakci modelových vodných vzorků kerosínu a nafty.

Pro extrakci ropných látek z vody byly testovány tyto sorbenty: magnetický derivát Chezacarbu S, Chezacarbu B, Tenaxu TA a Tenaxu GC.

Všechny extrakty byly analyzovány kapilární plynovou chromatografií.

Tabulka I
 Výťažnosti extrakce ropných látek magnetickými sorbenty za jejich optimálních podmínek

Ropné látky	c [mg/l]	Magnetický sorbent / Výťažnost [%]			
		Chezacarb		Tenax	
		B	S	GC	TA
Kerosín	80,0	97,7	97,8	-	-
Nafta	80,0	98,9	96,5	-	-
n-Dekan	3,10	59,9	60,6	59,8	53,1
n-Undekan	3,15	78,8	84,3	75,3	71,1
n-Dodekan	3,18	95,5	92,7	79,6	78,2
n-Tridekan	3,21	102,3	96,1	83,2	82,1

Z důvodu nižších výtěžností Tenaxu TA a GC nebyly tyto magnetické sorbenty použity pro extrakce leteckého kerosínu a nafty.

Jako nevhodnější sorbent byl ze získaných výsledků pro extrakci ropných látek z vody vyhodnocen magnetický derivát Chezacarbu B, popř. magnetický Chezacarbu S.

Metoda se ukázala jako nenáročná nejen na použití instrumentaci, ale zejména i na spotřebované množství rozpouštědla.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky – grant č. 203/03/1070.

LITERATURA

1. Šafaříková M., Šafařík I.: Chem. Listy 89, 280 (1995).

6P-09

THREE CITIES INTERCOMPARISON OF *N*-ALKANES AND POLYAROMATIC HYDROCARBONS IN THE ATMOSPHERIC AEROSOLS

PETRA KOTIANOVÁ^{a,b}, HANS PUXBAUM^a, HEIDI BAUER^a, and GABRIEL ČÍK^b

^aInstitute of Chemical Technologies and Analytics, Vienna University of Technology, Getreidemarkt 9/164/AC - Analytical Chemistry, A-1060 Vienna, Austria, ^bInstitute of Chemical and Environmental Engineering, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava, Slovak Republic
kotianov@centrum.sk

One part of environment protection is care about ambient air quality. It is important from the point of view of potential health effects to living organism. Nowadays, there exists a EU short term standard for the concentration of particulate matter in the atmosphere. The standard value for PM10 is 50 $\mu\text{g m}^{-3}$ daily mean which may not be exceeded more than 35 times a year. At many urban sites the EU PM10 daily mean is exceeded. The knowledge about individual source contribution could help to reduce air pollution by more effective regulation of emission sources.

Selected potential aerosol sources markers were quantified in atmospheric aerosols from three Austrian cities in samples from days, when the concentration of particulate matter in the atmosphere exceeded the EU short term standard for PM10. PM10 samples were collected daily on quartz fibre filters at one background and one inner-city sampling site in Vienna, Graz, and Salzburg during 2004. The samples which exceeded EU short term limit for PM10 were from the cold season. From individual filters pools were made according to the PM10 concentration and sampling period. The target analytes were released from samples by extraction with cyclohexane in ultrasonic bath. After sample treatment, the determination of organics was performed with gas chromatograph connected to mass spectrometer. In the samples polyaromatic hydrocarbons (benzo[e]pyrene, benzo[ghi]pyrene, coronene) and pattern of *n*-alkanes (C20–C38) as tracers of vehicle exhaust, retene to watch the contribution of wood combustion, and benzo(de)anthracene-7-one as natural gas combustion marker were determined. The monthly mean concentrations of analysed *n*-alkanes and polyaromatic hydrocarbons in pooled samples from background and inner-city sampling site in Vienna, Graz, and Salzburg allow us to weight air pollution in those towns and to see a contribution of selected aerosol sources to ambient urban aerosol.

6P-10

STABILITA A DEGRADACE HUMINOVÝCH KYSELIN

**JIŘÍ KUČERÍK*, MILOSLAV PEKAŘ
a JIŘÍ KISLINGER**

Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno
kucerik@fch.vutbr.cz

Huminové látky představují největší podíl organicky vázaného uhlíku v půdních systémech. Vznikly biologickou degradací odumřelých těl rostlin a živočichů a následná abiotická transformace pak ještě zvýšila jejich stabilitu v porovnání s původním substrátem. Z toho pak logicky vyplývá, a výzkumy to potvrzují, že huminové látky jsou zodpovědné za kvalitu půdy jako takové. Slovo „kvalita“ má však v tomto případě širší význam. Zahrnuje širokou škálu vlastností jako třeba autoregenerační schopnost substrátu, jeho fyzikální i chemické vlastnosti atp. Možností upřesnění její definice se naskýtá hned několik. Přístup mikrobiologický, analytický nebo fyzikálně-chemický.

V této práci byly analyzovány huminové kyseliny extrahované z lignitu, rašeliny, půdy a říčních sedimentů; byly použity metody termické analýzy (simultánní termogravimetrie a diferenční termická analýza) a data byla zpracována za pomoci tzv. isokonverzních metod umožňujících výpočet termo-degradačních charakteristik jednotlivých huminových kyselin a jejich stability. Pro evaluaci termo-oxidačního profilu byl použit postup dle Friedmana¹ a pro stabilitu postup navržený Šimonem². Tento přístup byl již dříve navržen jako jedna z možných metod rychlého monitoringu huminových kyselin a humifikovaných substrátů³. V některých případech byly k doplnění údajů použity také fulvokyseliny extrahované ze stejného zdroje.

Data byla vyhodnocována s ohledem na původ huminových kyselin a jejich chemické složení. Cílem bylo upozornit na možnosti využití termo-degradačního profilu jako měřítka představujícího rychlý a přesný evaluační nástroj při studiu huminových látek případně humifikovaných substrátů. Dále je naznačena možnost využití této metodiky pro predikci chování zkoumaných látek, což by mohlo v budoucnu významným způsobem obohatit a zefektivnit monitoring nejen půdních ekosystémů.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 104/05/P513 a MŠMT ČR 0021630501.

LITERATURA

1. Friedman H. L.: J. Polym. Sci. 6C, 183 (1965).
2. Šimon P.: J. Therm. Anal. Cal. 76 123 (2004).
3. Kučerík J., Kovář J., Pekař M., Šimon P.: Naturwissenschaften 92, 336 (2005).

6P-11**MODIFIKACE ENZYMOVÉ HYDROLÝZY
PROTEINOVÝCH ODPADŮ S CÍLEM
OPTIMALIZACE FILTRAČNÍHO PROCESU****PAVEL MOKREJŠ, DAGMAR JANÁČOVÁ, MILAN
MLÁDEK, KAREL KOLOMAZNÍK a FERDINAND
LANGMAIER***Ústav inženýrství polymerů, Fakulta technologická, Univerzita
Tomáše Bati ve Zlíně, nám. TGM 275, 762 72 Zlín
mokrejs@ft.utb.cz*

Námi vyvinutý dvoustupňový proces enzymové hydrolyzy chromočiněných odpadních postružin za mírných reakčních podmínek je v prvním stupni charakterizován alkalickým rozrušením chromem zesíťované proteinové matrice, která je následně rozložena v druhém stupni za použití enzymu. V prvním stupni dojde k získání vysokomolekulární proteinové želatinové frakce s distribucí molekulových hmotností od 75 000 do 200 000 Da a zbylého filtračního koláče. Ve druhém stupni je filtrační koláč zpracován za použití enzymu za účelem získání proteinu prostého chromitého koláče a nízkomolekulární peptidové směsi (hydrolyzát) s distribucí molekulových hmotností od 10 000 do 20 000 Da.

Filtrační proces a jeho časová náročnost je jedním z hlavních ukazatelů posuzovaných při zavádění technologického procesu do praxe, neboť významně ovlivňuje efektivitu a ekonomiku celého procesu. Z experimentů bylo zřejmé, že doba filtrace představovala negativní jev při tomto způsobu zpracování odpadů, protože se pohybovala v rozmezí několika hodin až dnů. Proto jsme se zaměřili na možnost optimalizace filtračního procesu. Ze série provedených experimentů je zřejmé, že kromě vlivu hustoty filtračního papíru je doba filtrace významně ovlivněna průběhem technologického procesu enzymové hydrolyzy. Vyšší přídavky alkalického činidla, stejně jako vyšší přídavky roztoku enzymu do reakce, přináší zkrácení filtračních časů. Filtrace byla rovněž urychlena tím, že heterogenní směs byla filtrována za zvýšené teploty (60 °C). Kromě toho jsme modifikovali proces zpracování proteinového odpadu zavedením 3. stupně, v němž jsme experimentovali s úpravou pH heterogenní směsi. Zjistili jsme, že úprava směsi do mírně kyselé oblasti se projeví výrazným zkrácením filtračních časů. Při pH 8,5 byla doba filtrace 15 h, při pH 8,0 14 h, při pH 7,0 klesla doba filtrace na 12 h, při pH 6,0 pouze na 1h 45 min a při pH 5,0 se zkrátila na pouhých 35 min.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM 7088352102.

6P-12**SELENIUM EFFECTS ON LIVING ORGANISMS****MARIANNA MOLNÁROVÁ and AGÁTA
FARGAŠOVÁ**

*Department of Ecosozology and Physiotactics, Faculty of
Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Mlyn-
ska dolina B-2, 842 15 Bratislava, Slovak Republic*

molnarova@fns.uniba.sk; fargasova@fns.uniba.sk

Selenium is an essential trace element for animals and bacteria, but whether it is essential for plants remains controversial. Some plants are selenium tolerant and they have high bioaccumulation potential. In non-tolerant plant species Se compounds may impair germination and growth and lead to chlorosis¹. Many anthropogenic activities can accelerate the release of selenium from geologic sources and made them available to wildlife in aquatic and terrestrial ecosystems around the globe.

Toxic effect of selenium is connected with production of superoxide following with thiol oxidation and with very similar chemical structure like sulfur structure. Algae prefer selenium in the form of selenite unlike terrestrial plants for which is more available selenate as a source of selenium. Se(IV) can be harmful to plants even at quite low concentrations². Selenite and selenate are accepted by plants where selenium is binding into selenomethionine during the detoxification process³.

In animals there are three levels of biological activity of selenium: a) trace concentrations are required for normal growth and development; b) moderate concentrations can be stored and homeostatic functions maintained; and c) elevated concentrations can result in toxic effects.

Therefore selenium is interesting also from the environmental point in the frame of the species level, and biomagnification within various trophic levels.

Study was supported by the Scientific Grant Agency, Grant No. 1/1312/04 and by Grant of Comenius University UK/116/2006.

REFERENCES

1. Fargašová A., Pastierová J., Svetková K.: Plant Soil Environ. 52, 8 (2006).
2. Fargašová A.: Bull. Environ. Contam. Toxicol. 61, 762 (1998).
3. Pastierová J., Fargašová A., Ondrejkočiová I.: Acta Environ. Univ. Comeniana (Bratislava), in press.

6P-13**VYUŽITÍ LIGNITU JAKO SORBENTU
PŘI FOTOKATALYTICKÉM ODSTRAŇOVÁNÍ
MĚDNATÝCH IONTŮ****PETRA MOŽÍŠKOVÁ*, LENKA KUČEŘÍKOVÁ
a MICHAL VESELÝ**

*Ústav fyzikální a spotřební chemie, Fakulta chemická, Vysoké
učení technické v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno
moziskova@fch.vutbr.cz*

Měď se může v přírodě vyskytovat jak ve vodách sladkých, tak i mořských, činností člověka vzniká i voda odpadní a to zejména z průmyslu elektrotechnického, stavebního, strojního, vojenského a průmyslu elektrolytického pokovování. Je toxická v koncentracích vyšších jak 100 ppm a je označena jako největší znečišťovatel podle US EPA. Podle nařízení vlády č. 61/2003 Sb. je přípustné znečištění pro měď

v odpadních vodách v ČR 1 mg dm^{-3} .

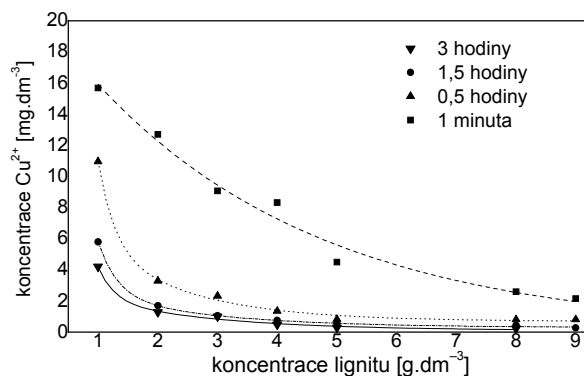
K odstraňování měďnatých iontů se obvykle používají metody elektrolytické, iontové výměnné, adsorpční na aktivním uhlí, srážecí, reverzibilní osmóza nebo extrakční. Ale všechny tyto metody nejsou dostatečně efektivní při nízkých koncentracích. Pro tyto koncentrace se osvědčilo odstraňování měďnatých iontů pomocí fotokatalytického procesu, který využívá jako fotokatalyzátor oxid titaničitý, lignit a jako donor elektronů ethanol. V této práci byly využity sorpční vlastnosti lignitu a jeho kombinací s TiO_2 vzniká tzv. směsný katalyzátor.

Cílem této práce bylo odstranit měďnaté ionty z roztoku pod hranici přípustného obsahu tohoto iontu v odpadních vodách za pomoci přídavku lignitu do směsi a najít takový poměr lignitu a TiO_2 , který by tyto ionty trvale odstraňoval z roztoku bez možnosti úpravy pH roztoku. Při běžné fotochemické redukci Cu^{2+} iontů bez ovlivňování pH během reakce byl dosažen úbytek těchto iontů z původních 30 mg dm^{-3} na 15 mg dm^{-3} v reaktoru, což není dostačující. Proto byl do systému přidán lignit, který byl využit jako sorpční materiál zbylých iontů po reakci.

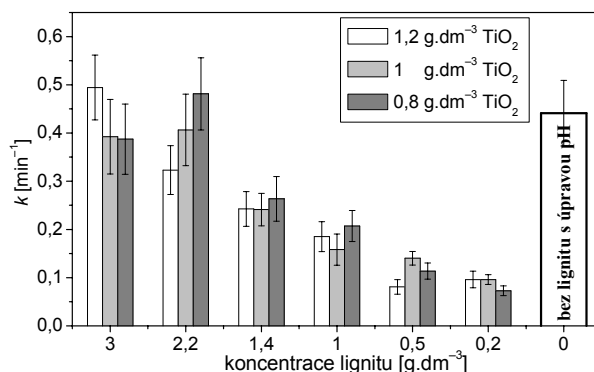
Stanovení koncentrace měďnatých iontů bylo provedeno kolorimetrickou metodou s kuprizonem. Před samotným kolorimetrickým stanovením byl zjištěn optimální objem reakčního roztoku, který byl odebírán z reaktoru pro stanovení koncentrace. Poté byla sestavena kalibrační křivka. Pro stanovení měďnatých iontů během reakce bylo pipetováno 7 ml reakčního roztoku.

Nejprve bylo třepáním na třepačce stanoveno optimální množství lignitu. Stanovení množství lignitu vytřepáváním bylo provedeno ve 250 ml odměrných baňkách s 50 ml roztoku s 30 mg dm^{-3} měďnatých iontů ($\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{ H}_2\text{O}$) a s různým množstvím lignitu. Výsledná závislost je patrná z obr. 1. Nejvhodnější koncentrace lignitu se jeví v rozmezí $2\text{--}3 \text{ g dm}^{-3}$. Vyšším množstvím lignitu nijak výrazně nevzroste sorbce měďnatých iontů a navíc při vlastní fotochemické redukci způsobuje větší množství lignitu stínící efekt průchodu UV záření a tedy snížení účinnosti vlastní fotochemické redukce Cu^{2+} iontů.

V dalším kroku ze začala studovat fotochemická redukce s lignitem, bez lignitu, s úpravou pH, bez úpravy pH. Jako modelová látka nám sloužil pentahydrát síranu měďnatého o koncentraci 30 mg dm^{-3} , roztok ethylalkoholu o koncentraci $0,05 \text{ mol dm}^{-3}$. Množství lignitu a oxidu titaničitého bylo



Obr. 1. Stanovení množství lignitu vytřepáváním



Obr. 2. Formální rychlostní konstanty 1. řádu redukce Cu^{2+} s proměnným množstvím lignitu a TiO_2 a jejich intervaly spolehlivosti

různé. Reakce byly uskutečňovány v ponorném fotochemickém reaktoru, který byl ozařován střednětlakou rtuťovou výbojkou 125 W. Objem reakčního roztoku v reaktoru byl 370 ml.

Při porovnání formálních rychlostních konstant 1. řádu obr. 2, je patrné, že rychlostní konstanty reakce s úpravou pH a rychlostní konstanty reakcí s přídavkem lignitu o koncentraci $2,2$ a 3 mg dm^{-3} jsou srovnatelné. Jako nejlepší se tedy jeví použití $2,2 \text{ g dm}^{-3}$ lignitu a $0,8 \text{ g dm}^{-3}$ TiO_2 ve fotokatalytické reakci po dobu 60 min.

6P-14 SORBENTY PRO VYSOKOTEPLTNÍ ODSIŘOVÁNÍ PLYNU Z BIOMASY PRO POUŽITÍ V PALIVOVÉM ČLÁNKU

**ILONA PASKOVÁ, VÁCLAV KOZA, SERGEJ
SKOBLJA, PETR CHALUPA a BOŽENA
KREMANOVÁ**

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

V technologiích vysokoteplotních palivových článků pracujících při teplotách vyšších než $650 \text{ }^\circ\text{C}$ je třeba pro přímé použití energoplynu v palivovém článku zbavit plyn síry sorpcí na vhodném sorbentu. Adsorpční materiály používané k odstraňování H_2S z energoplynu jsou buď čisté nebo směsné oxidy kovů, případně ukotvené na inertním nosiči¹. Pro testy odsiřování byly laboratorně připraveny sorbenty, jejichž základem je ZnO , Fe_2O_3 , CuO a MnO_2 a nosičem alumina nebo silika. Také byly zkoušeny průmyslově vyráběné katalyzátory na bázi Cu-Mg-Ca-Fe , Cu-Zn , Ni , Ti , Co-Mo .

Odsiřovací schopnost sorbentů byla měřena na aparatuře s křemenným reaktorem, kde byl umístěn sorbent a zahříván na teplotu $200\text{--}800 \text{ }^\circ\text{C}$ (cit.²). Do reaktoru byl na vrstvu sorbentu přiváděn plyn simulující energoplyn a voda ve formě vodní páry³. Plyn, který prošel přes sorbent, byl vyhodnocován chromatograficky plamenově fotometrickým detektorem

(FPD) a byla měřena koncentrace H_2S a COS. Výstupní signál byl snímán a vyhodnocován v systému Clarity. Výstupem měření byla závislost koncentrace H_2S a COS (ppm) na čase. Výpočtem byla zjištěna kapacita sorbentu.

Bylo provedeno několik sérií měření: měření laboratorně připravených sorbentů, měření komerčních katalyzátorů, kde byla měřena teplotní závislost (200–800 °C v krocích 100 °C), závislost na obsahu vody (0, 7, 14, 20 % vody), závislost na koncentraci sulfanu a celkové srovnání komerčních katalyzátorů za stejných podmínek měření.

Měřením bylo zjištěno, že nejlepší odsiřovací schopnost má komerční sorbent na bázi Cu-Zn. Ze závislosti na obsahu vody vyplývá, že při vyšším obsahu vody (14 %) je COS hydrolyzován na H_2S .

Tato práce vznikla za podpory grantu EU – Green Fuel Cell 503122.

LITERATURA

1. Študent V.: *Diplomová práce*. VŠCHT, Praha 2005.
2. Hartman M., Svoboda K, Trnka O., Veselý V.: Chem. Listy 93, 99 (1999).
3. Solich M.: *Diplomová práce*. VŠCHT, Praha 2004.

6P-15

EKOTOXIKOLOGICKÝ ÚČINOK Se(VI) A Cd(II) KOMPLEXOV S HETEROCYKLIKÝM N-DONOROVÝM LIGANDOM NIKOTÍNAMIDOM (nia) NA RIASU *Scenedesmus quadricauda*

JANA PASTIEROVÁ^a, AGÁTA FARGAŠOVÁ^a a IVETA ONDREJKOVIČOVÁ^b

^a Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, SK-842 15 Bratislava, ^b Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava; Slovensko pastierova@fns.uniba.sk

Cd a Se majú podobne ako mnohé iné kovy tendenciu vchádzať vo vodnom prostredí a živých organizmoch do interakcií s mnohými biologicky aktívnymi látkami, akými môžu byť aj heterocyklické zlúčeniny dusíka. Pri interakciách často dochádza ku chelatacii alebo komplexácii kovov, čím sa mení veľkosť molekuly, biologická účinnosť a penetrácia do buniek¹.

Práca hodnotila ako väzba na biologicky aktívny N-donorový ligand ovplyvňuje účinok viazaného kovu na rast a produkciu chlorofylu *a* a *b* v riasie *Scenedesmus quadricauda*. Účinky komplexov Cd(NCS)₂(nia)₂ (**I**), Cd(NCSe)₂(nia)₂ (**II**), H₂SeO₄(nia)₃ (**III**) sa porovnávali s účinkami anorganických zlúčenín obidvoch kovov – CdCl₂ · 2,5 H₂O (**IV**) a Na₂SeO₄ (**V**).

Všetky zlúčeniny Cd boli pre hodnotené parametre rádo-vo 10× toxickejšie ako zlúčeniny Se(VI). Na základe probitovou metódou stanovených IC₅₀ hodnôt a ich 95% intervalov spoľahlivosti¹ sa dá pre všetky sledované parametre zostaviť zostupný inhibičný rad: **IV**>**I**>**II**>**V**>**III**. Testy potvrdili vysokú toxicitu zlúčenín Cd a relatívne nízku toxicitu zlúče-

nín Se, ktoré sa v prírodných vodách vyskytujú len v stopových množstvách vo forme Se(IV) a Se(VI). Riasy uprednostňujú Se(IV), čo vysvetľuje nízku toxicitu testovaných zlúčenín Se(VI) (cit.²). Viazanie obidvoch kovov do komplexov s heterocyklickým N-donorovým ligandom nia ich toxicitu výrazne znižovalo. Nahradením NCS⁻ anionickej skupiny v Cd(II) komplexe skupinou NCSe⁻, ktorá obsahovala aj druhý testovaný kov Se, sa inhibičné účinky Cd výrazne znížili, pri raste o 1/3 pri fotosyntetických pigmentoch až o 1/2. Výsledky potvrdili, že toxicita testovaných kovov je ovplyvňovaná nielen aktívnymi absorpčnými centrami, ktoré sa nachádzajú na povrchu bunkovej steny rias, ale aj priestorovou štruktúrou komplexu a veľkosťou jeho molekuly^{1,2}.

Práca bola podporovaná VEGA Grantom 1/1312/04 a 1/2452/05.

LITERATÚRA

1. Fargašová A., Ondrejkočičová I, Melník M., v knihe: *Advances in Coordination, Bioorganic and Inorganic Chemistry*, s. 42. STU Press, Bratislava 2005.
2. Pastierová J., Fargašová A., Ondrejkočičová I., Vrždáková M.: Zbor. Vodárenská biologie 2006, s. 209. Vodní zdroj EKOMONITOR, Chrudim 2006.

6P-16

EPR SPEKTROSKOPIE HUMINOVÝCH KYSELIN A FULVOKYSELIN

PAVEL STOPKA a EVA ŠEBESTOVÁ

Ústav anorganické chemie Akademie věd České republiky, Laboratoř bioanorganické chemie, 250 68 Řež 1001 stopka@iic.cas.cz

Studovali jsme huminové kyseliny a fulvokyseliny izolované extrakcí z hnědého uhlí ze severočeských nalezišť: důl Josef, Antonín a Anežka. Vzorky byly studovány metodou spektroskopie elektronové paramagnetické (spinové) rezonance. Ve vzorcích byly zjištěny komplexy vysokospinového Mn(II), nízkospinového oktaedrického Fe(III), dále Fe(III) v tetraedrickém okolí a komplexy VO(II) a Cu(II). Vzorky obsahují stabilní organický radikál, zakotvený na skeletu huminových kyselin. Ve vzorcích byly zjištěny další stabilní organické radikály, vykazující hyperjemné štěpení. Tyto radikály jsou pravděpodobně meziprodukty oxidačního rozkladu huminových kyselin. V uvedených vzorcích se podle nalezišť a míst odběru měnilo poměrné zastoupení uvedených složek. EPR spektroskopie je vhodná metoda pro charakterizace huminových kyselin a fulvokyselin. Ozařováním viditelným světlem a ultrafialovým světlem se na povrchu huminových kyselin generují reaktivní kyslíkové částice (ROS), které způsobují baktericidní vlastnosti huminových kyselin. Tato vlastnost se nabízí pro aplikaci uvedených kyselin ve filtrech proti organickým toxickým sloučeninám v roztoku od laboratorního až po průmyslové využití. Další aplikací je možnost čištění plynů. Aplikace roztoků těchto kyselin jako ochranné postřiky rostliny souvisí s jejich generováním ROS na povrchu ošetřených rostlin. Zcela unikátní možností je aplikace huminových kyselin a fulvokyselin pro

fotochemické (solární) generování hydroxylových radikálů a superoxidových anion-radikálů. Sledování rozkladu těchto kyselin přízemním ozonem i jako modelovou reakci v laboratoři má význam v ekologii pro studium postupné ztráty půdních huminových kyselin vlivem toxických plynů v atmosféře.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky, grantu GA ČR 525-06-1757.

LITERATURA

1. Káfuňková E., Stopka P., Křížová J.: Chem. Listy 99, 215 (2005).

6P-17

VYUŽITIE PRÍRODNÝCH ZEOLITOV A BIOTECHNOLOGICKÝCH POSTUPOV V ENVIRONMENTÁLNEJ OBLASTI

**MÁRIA REHÁKOVÁ^a, MÁRIA KUŠNIEROVÁ^b,
LUCIA GABEROVÁ^a, ĽUBICA FORTUNOVÁ^a
a SILVIA ČUVANOVÁ^b**

^a Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, 041 54 Košice, ^b Ústav geotechniky SAV, Watsonova 45, 043 53 Košice, Slovensko
maria.rehakova@upjs.sk

Prírodný zeolit typu klinoptilolitu z východoslovenského ložiska v Nižnom Hrabovci bol študovaný z hľadiska jeho ďalších možností aplikácie v environmentálnej oblasti v kombinácii s využitím biotechnologických postupov. Zámerom tohto štúdia bolo zvýšenie sorpčného povrchu klinoptilolitu pôsobením mikroorganizmov, a tým získanie efektívnejších výsledkov jeho využívania pri znižovaní obsahu reziduí ťažkých kovov a iných toxických látok v priemyselne kontaminovaných pôdach.

Táto etapa štúdia naväzovala na predchádzajúce štúdiá¹⁻² využitia prírodného klinoptilolitu (CT) pri znižovaní obsahu reziduí ťažkých kovov a polychlorovaných bifenyllov (PCB) v kontaminovaných pôdach priemyselných oblastí. Prírodný klinoptilolit sorboval do svojich voľných priestorov ťažké kovy a iné toxické látky, a tým blokoval ich príjem do rastlín. Analýzou rastlinného materiálu² sa zistilo, že najnižší obsah ťažkých kovov (Zn, Cu, Pb, Cd a Cr) a PCB sa stanovil v rastlinách pestovaných na kontaminovaných pôdach s aplikáciou CT. Obsah niektorých ťažkých kovov² i PCB bol nižší takmer o polovicu v porovnaní s rastlinným materiálom pestovaným na kontaminovaných pôdach bez ošetrovania.

Vplyvom mikroorganizmov, predovšetkým baktériami *Acidithiobacillus ferrooxidans* a *Aktinomycetami* sa študovali zmeny povrchu, celkového objemu dutín CT ako aj biolúhovanie na modelovej forme prírodného CT s obsahom mednatých kationov. Výsledky analýz veľkosti povrchu a objemov pórov CT pred a po kultivácii poukazujú na zmeny spôsobené aplikovanými mikroorganizmami. Analogicky výsledky analýz biolúhovania medi, ale aj ďalších analýz poukazujú, že v prítomnosti mikroorganizmov došlo k určitému zväčšeniu povrchu a zmenám zeolitického povrchu. Kombinácia využitia prírodných zeolitov a bioremediačných technológií, využí-

vajúcich biologické postupy, predovšetkým metabolickú činnosť mikroorganizmov, sa javí ako perspektívna ekologická alternácia degradácie kontaminantov.

Táto práca vznikla za podpory Vedeckej grantovej agentúry Slovenskej republiky, grant č. 1/1385/04, 1/1373/04 a štátneho programu č.: SP 260280C01.

LITERATURA

1. Reháková M., Čuvanová S., Gaval'ová Z., Rimár J.: Chem. Listy 5, 260 (2003).
2. Reháková M., Čuvanová S., Dzivák M., Rimár J., Gaval'ová Z.: Cur. Opin. Solid State Mater. Sci. 8, 397 (2004).

6P-18

VYUŽITIE MLETEJ ODSEPAROVANEJ MAGNEZITOVEJ HORNINY AKO HOREČNATÉHO HNOJIVA

JÁN TOMÁŠ, TOMÁŠ TÓTH a PETER LAZOR

Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovenská poľnohospodárska univerzita, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, SR
Jan.Tomas@uniag.sk

Rozhodujúcim znakom horečnatých, horečnato-vápenatých a vápenatých hnojív popri zrnitosti je obsah účinnej zložky. Znamená to v prvom rade obsah horčička ako živiny, spôsob jeho väzby, ktorá determinuje rozpustnosť a tým i agrochemickú účinnosť.

Podľa platnej normy STN je odseparovaný poloprodukt jemne mletej horniny vhodný na použitie ako horečnaté hnojivo na pôdy s nízkym obsahom horčička. Posudzovaný produkt obsahuje 84,64 % MgCO₃ a 8,30 % CaCO₃, čo zodpovedá 40,46 % MgO a 4,65 % CaO. Z uvedených analýz vyplýva, že v sledovanom odpadnom produkte sú veľké zásoby horčička v uhličitanovej forme, (ktoré by bolo možné využiť pre riešenie horčíkovej podvýživy pôd a následne i podvýživy horčíkom u obyvateľstva a hospodárskych zvierat). Hodnotené materiály môžu byť zdrojom pomaly pôsobiaceho horčička v pôdach spolu s určitým zdrojom vápnika. Platí to nielen pre intenzívnu poľnohospodársku výrobu, v ktorej prevláda deficit horčička (viacej horčička sa z pôdy odoberá ako sa do pôdy pridáva), ale i v alternatívnom poľnohospodárstve, v ktorom sa usiluje o výrobu produktov s nezastupiteľným dostatočným obsahom horčička. Táto možnosť aplikácie pre zásobenie pôd horčíkom predstavuje veľkú možnosť pre agrochemické využívanie ako pomaly pôsobiaceho horečnatého hnojiva.

Popri význame záujmových medziproduktov a surovín ako zdroja horčička je potrebné hodnotiť jeho neutralizačnú hodnotu (NH), ktorá sa môže využívať na udržiavanie pôdnej reakcie na úrovni hodnôt blízkych optimálnym pre jednotlivé poľnohospodárske plodiny. Keď pri hodnotení neutralizačnej hodnoty vezmeme za základ CaCO₃, ktorého NH označíme ako 100 %, dostaneme tzv. relatívnu NH. Pri hodnotení sledovaného odpadného produktu s horečnatým obsahom uhličitanov a oxidov potom relatívna NH je 108,76 %. O vhodnosti využitia odpadného produktu sa odporúča určiť modul CS (calcium silikátový modul). Modul CS vyjadruje

pomer medzi CaO a SiO₂ a súvisí s rozpustnosťou medzi produktov a surovín. Ak je tento modul väčší ako 2, ide o magnezit vápenatý, ak je menší ako 2, je to modul kremičitý. V našom produkte bola určená hodnota CS modulu 2,68, čo znamená, že ide o magnezit vápenatý, čo vytvára predpoklady pre relatívne vyššiu rozpustnosť, vyššiu neutralizačnú hodnotu a relatívne vyšší príjem horčička rastlinami ako v prípade typu kremičitého magnezitu. Uvoľňovanie horčička a vápnika do roztoku priamo ovplyvňuje stabilita chemickej väzby a agresivita rozpúšťadla. V kyslom prostredí 1 % kyseliny citrónovej sa po 1 hodine pretrepávaní rozpustilo v priemere 13,46 % CaO a 0,56 % MgO z ich celkového obsahu. Pre agrochemickú účinnosť je však určujúca rozpustnosť v pôdnom roztoku. V tomto prostredí sa rozpúšťanie uskutočňuje jednak fyzikálne ako aj chemicky. Vyššia je rozpustnosť chemická, ktorá sa uskutočňuje hlavne vplyvom rozposteneho CO₂ v pôdnom roztoku. V tejto súvislosti však je potrebné uviesť, že hoci rozpustnosť je v priamej závislosti od veľkosti častíc, je významne ovplyvňovaná aj chemickým a mineralogickým zložením ich tvarom a vzájomným usporiadaním (štruktúra a textúra hornín, z ktorých sa získavajú), čo súvisí so vznikom hornín v určitom historicko-geologickom období.

Podľa platnej legislatívy z cudzorodých (rizikových) látok sú v prípade uhličitanových hnojív určené najvyššie prípustné množstvá pre Cd, Cr, Hg a Pb. V hodnotenom produkte sú obsahy týchto ťažkých kovov v podstatne nižšie ako sú legislatívne určené najvyššie prípustné množstvá.

Celkové a mobilizovateľné obsahy biologicky významných mikroelementov Cu, Zn, Co a Mn môžu pri aplikácii do pôdy substituovať nedostatok týchto elementov v pôde a ich možnosť príjmu rastlinami. Relatívne vysoký obsah sa stanovil u celkového mangánu 1643,68 mg kg⁻¹, ale mobilizovateľný obsah predstavuje len 0,3 % celkového obsahu mangánu. Aj určujúca časť ďalších biologicky významných mikroelementov sa nachádza vo formách, ktoré nie sú pre rastliny prístupné.

LITERATÚRA

1. Bajčan D.: Kontaminácia poľnohospodárskych pôd a plodín rizikovými prvkami na vybranom území. In: *III. Ved. konf. štud. a dokt., Nitra 2005.* – Zb. Abstr.SPU, Nitra 2005.
2. Bajčan D., Timoracká M., Melicháčová S.: Možnosti znižovania obsahu rizikových prvkov v potravinách, v: *Výživa a potraviny pre 3. tisícročie*, SPU, Nitra 2004.
3. Balík J., Tlustoš P., v: *Horčik a jeho význam v zemědelství*. ČZU, Praha 1995.
4. Fecenko J., Ložek O.: *Výživa a hnojenie poľných plodín*. Nitra 2000.
5. Stanovič R., Bystrická J. : Vplyv organických sorbentov na fytoxicitu kadmia a arzenu., v: *Aktuálne problémy riešené v agrokomplexe, X. ročník medz. ved. seminára. Nitra 2004*. Nitra 2004.
6. Vaněk V.: *Rostlinolékař 7*, (1996).

6P-19

VPLYV BIOKALOV ZÍSKANÝCH KONTINUÁLNOU KOFERMENTÁCIU ŽIVOČÍŠNYCH ODPADOV NA STAV PŮDNEJ HYGIENY A KVALITU DOPESTOVANÝCH PLODÍN

TOMÁŠ TÓTH, JÁN TOMÁŠ, PETER LAZOR, DANIEL BAJČAN a LADISLAV LAHUČKÝ

Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovenská poľnohospodárska univerzita, Tr. A. Hlinku2, 949 76 Nitra, SR

Tomas.Toth@uniag.sk

Využívaním alternatívnych zdrojov energie sa získava aj značné množstvo vedľajšieho produktu, ako je biokal. Biokal, vyhnutý substrát, je produktom, ktorý vzniká pri výrobe bioplynu po kontinuálnej kofermentácii živočíšnych exkrementov a rastlinných zvyškov. Takto získaný biokal je možné aplikovať na pôdu ako alternatívne hnojivo, ktoré má svoje charakteristické vlastnosti, ale aj riziká. Z pohľadu odberateľa, rozhodujúce vlastnosti kalov spočívajú v ich priaznivom hnojivom účinku vplyvom obsahu: organickej hmoty, makroelementov, mikroelementov. S aplikáciou biokalu súvisí aj možné riziko vstupu rizikových prvkov do pôdy. Ich množstvo a forma v súčinnosti s pôdnymi vlastnosťami môže predstavovať riziko ich vstupu do rastlinných komodít, pestovaných na týchto pôdach.

Mikroelementy zastúpené v kaloch môžu priaznivo ovplyvňovať ich zásobu v pôde. V praxi však predstavujú riziko, nakoľko, obsah mikroelementov je často vysoký (Cu, Zn, Mo). To isté platí pre Pb, Cr, Ni, Hg, Cd a As. Práve obsah ťažkých kovov a toxických prvkov limituje použiteľnosť biokalov, ako hnojivého substrátu.

Činnosťou mikroorganizmov v pôde dochádza k bioakumulácii kovov v rastlinách, cez krmoviny sa ťažké kovy následne dostávajú do živočíšnych organizmov. Bioakumuláciou dochádza často k fyzikálnym zmenám, napríklad k redukcii alebo oxidácii kovov (As, Mn, Se, Tc), ale aj k ich metylácii (Hg, Cd, Pb, Te), čím sa výrazne menia ich fyziologické účinky. V zmesiach sa toxické účinky jednotlivých kovov môžu navzájom zosilňovať (synergizmus Cd+Zn, Ni+Zn, Hg+Cu a ďalšie), ale tiež zoslabovať (antagonizmus Se+Cd, Se+Hg...).

Na ornú pôdu je možné priamo aplikovať tekuté, alebo odvodnené kaľy podľa nárokov poľnohospodárskych plodín. Pôdy musia vyhovovať kritériám, t.j. vhodné pH, sorpčná kapacita, obsah škodlivín v pôde i v kaloch a pod.

Výskum vplyvu aplikovaného biokalu na stav pôdnej hygieny sa uskutočnil na výskumnej báze SPU Nitra – Kolíňany. Biokal sa aplikoval v dávke 50 t ha⁻¹. Účinok biokalu sa sledoval v 3 pokusných variantoch : A – nehnojený variant, B – aplikácia biokalu na jeseň, C – aplikácia biokalu na jar. Sledovali sme obsah Cd, Cu, Zn, Pb, Ni, Co a Cr v biokale, v pôde a v dopestovaných rastlinách. V rámci pokusu sme pestovali plodiny: jačmeň siaty jarný, slnečnica ročná, cukrová repa, kukurica siata.

Z analýzy biokalu na obsah ťažkých kovov vyplýva, že ich obsah je pod legislatívne stanovenou limitnou hodnotou a biokal je vhodný na aplikáciu do pôdy.

Tabuľka I

Obsah ťažkých kovov v aplikovanom biokale [mg kg⁻¹]

Sušina, %	Zn	Cu	Cd	Pb	Cr	Ni	Co
4,92	8,98	1,35	0,03	0,48	0,74	0,54	0,23

Tabuľka II

Obsah ťažkých kovov v pôde v porovnaní s limitnou hodnotou [mg kg⁻¹]

Var	pH	Cd	L	Pb	L	Zn	L	Ni	L
A	4,59	1,16		35,2		71,5		40,2	
B	5,02	1,24	0,8	31,6	35	69,4	140	41,6	35
C	5,09	1,20		36,4		70,8		42,8	

L – limitná hodnota prvku v pôde stanovená legislatívou

Kôli rozsahu príspevku sme vyhodnotili len obsah kadmia, olova, zinku a niklu v pôde. Zo zistení vyplýva, že obsah Cd v pôde prekračuje limitnú hodnotu vo všetkých troch variantoch pokusu, aplikáciou biokalu sa jeho obsah v pôde zvýšil o 6,8 % (var. B) a o 3,4 % (var. C) v porovnaní s nehnojeným variantom A. Celkový obsah olova je nižší ako je limitná hodnota len vo variante B. Aplikáciu biokalu neprišlo k jeho nárastu v pôde. Celkový obsah zinku je nižší ako je legislatívna limitná hodnota a aplikácia biokalu zvýšila jeho obsah v pôde. Vo všetkých troch variantoch pokusu je obsah niklu v pôde vyšší ako je limitná hodnota, a aplikáciu biokalu prišlo k zvýšeniu jeho obsahu v pôde o 3,4 % (var. B) a o 6,7 % (var. C).

Táto práca vznikla za podpory grantu MŠ SR VEGA č. 1/1345/04, 1/2434/05 a GA SPU 709/05130.

LITERATÚRA

1. Chlpík J., Pospíšil R.: *Plošná charakteristika mechanických a chemických vlastností pôdy na výskumnej báze*. SPU, Koliňany. Acta fytotechnica, č. 1 (2004).
2. Jomová K., Hegedusová A., Vollmannová A.: Chem. Listy 96 (2002).
3. Musilová J., Stanovič R., Bystrická J., Trebichalský P.: ChemZi 1/1, 110 (2005).
4. Pariláková K.: Sediments of small multi purpose water reservoirs in agricultural landscape, v: Sb. referátu s mez. konferencie – *Bioklimatologie současnosti a budoucnosti. Křtiny u Brna, 2005*. Brno 2005.
5. Petrová J.: *Dizertačná práca*. SPU (2005).

6P-20

ELEKTROCHEMICKÉ STANOVENÍ BROMADIOLONU

JAN VÍTEČEK^{a,b}, SOŇA KRÍŽKOVÁ^a, VERONIKA ŠUPÁLKOVÁ^{a,b}, RADKA MIKELOVÁ^c, LIBUŠE TRNKOVÁ^c, VOJTĚCH ADAM^{a,d}, MIROSLAVA BEKLOVÁ^c, JIŘÍ PIKULA^c, MICHAL SVOBODA^a a RENÉ KIZEK^a

^a Ústav chemie a biochemie a ^b Ústav biologie rostlin, Agromická fakulta Mendelovy zemědělské a lesnické univerzity v Brně, Zemědělská 1, 613 00 Brno, ^c Katedra teoretické a fyzikální chemie a ^d Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno, ^e Ústav veterinární ekologie a ochrany životního prostředí, Veterinární a farmaceutická univerzita v Brně, Palackého 1/3, 612 42 Brno
kizek@sci.muni.cz

Bromadiolon(3-(3-(4'-brom-1,1'-bifenylyl)-3-hydroxy-1-fenylpropyl)-4-hydroxy-kumarin) je běžně užívaný rodenticid komerčně dostupný jako Lanirat. Působí jako antikoagulant již ve velmi nízkých koncentracích a jeho účinky jsou kumulativní. Jeho rezidua v přírodě mohou být příčinou úhynu jak domácích, tak volně žijících živočichů, a to nejen přímých, ale i následných konzumentů. Hlavním orgánem podílejícím se na jeho metabolizaci a skladování jsou játra. V naší práci jsme vyvinuli nový způsob jeho detekce založený na použití vysokoúčinné kapalinové chromatografie s elektrochemickým detektorem (HPLC-ED). Metoda byla optimalizována a následně použita pro stanovení bromadiolonu v biologické matrici živočišného původu. Zkoumaným materiálem byly žížaly (*Eisenia fetida*) chované v přítomnosti přípravku bromadiolonu. Těmito žížalami byli krmeni hraboši (*Microtus arvalis*), jejichž játra jsme analyzovali. Dále jsme analyzovali i játra hrabošů krmených přímo granulemi tétož rodenticidního přípravku. Následně jsme námi vypracovanou metodu použili pro stanovení bromadiolonu v játrech a obsahu žaludku uhynulých zajíců, u kterých bylo podezření na otravu touto látkou. Díky použité detekční technice jsme schopni rychle a přesně analyzovat bromadiolon např. v životním prostředí a tedy se podílet na sledování dopadu jeho působení v přírodě.

Práce na tomto projektu byla podporována granty: GA ČR 525/04/P132, INCHEMBIOL 0021622412, MŠMT 6215712402.

LITERATURA

1. Fuyu G.: J. Chrom., B. 731, 155 (1999).
2. OECD: Earthworm, acute toxicity tests. OECD guideline for testing of chemicals, No 2007 (1984).
3. Krizkova S., Supalkova V.: Study of bromadiolone content at model organisms by means high performance liquid chromatography with electrochemical detection. X. Pracovní setkání biochemiku a molekulárních biologů, Brno 2006. Masarykova univerzita, Brno 2006.

6P-21

**STANOVENÍ THIOLOVÝCH SLOUČENIN
V DOZRÁVAJÍCÍCH SOMATICKÝCH EMBRYÍCH
SMRKU PICHLAVÉHO (PICEA PUNGENS)
OVLIVNĚNÝCH KADMIEM**
**JAN VÍTEČEK^a, DANIELA ŠIGUTOVÁ^a, JIŘÍ PETŘEK^a,
JITKA PETRLOVÁ^b, LADISLAV HAVEL^a,
JIŘÍ BALOUN^a, VOJTĚCH ADAM^{b,c} a RENÉ KIZEK^b**

^a Ústav biologie rostlin a ^b Ústav chemie a biochemie, Agromická fakulta, Mendelova zemědělská a lesnická univerzita v Brně, Zemědělská 1, 613 00 Brno, ^c Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno
kizek@sci.muni.cz

Velmi významnou metodou pro rychlé množení *in vitro* jehličnatých i listnatých stromů je somatická embryogeneze, při které dochází k vytvoření rostlin ze somatických embryí. V počátečních fázích embryogeneze se embryogenní buňky pěstované na živných médiích dělí a později vytváří bipolární somatická embrya s diferencovanými růstovými vrcholy a základy kořínků. Pro experimenty byla vybrána kultura raných somatických embryí (RSE) smrku pichlavého^{1,2}. Celý proces od odvození embryogenní kultury až po získání nových rostlin lze rozdělit do několika fází: indukce (iniciace) z primárního explantátu, proliferace embryogenní kultury a multiplikace základních embryonálních struktur, maturace RSE za pomoci abscisové kyseliny, převedení vyvinutých rostlinek do substrátu. V naší práci jsme se zaměřili na vliv kadmia na maturaci somatických embryí, sledovali jsme růst a životnost kultury, množství vytvořených zralých somatických embryí a na závěr jsme zjistili obsah thiolových sloučenin (glutathion a fytochelatin), kterými se kultura brání proti působení těžkých kovů. Stanovení thiolových sloučenin bylo provedeno pomocí adsorptivní přenosové rozpouštěcí diferenční pulzní voltametrie metodou Brdičkovy reakce. Pro experimenty byla vybrána kultura RSE smrku pichlavého, klon PE 14. Sledovali jsme především vliv různých koncentrací kadmia na schopnost kultury tvořit zralá somatická embrya po dobu osmi týdnů. U nejnižší aplikované koncentrace (50 μM) byla tvorba zralých somatických embryí minimální. U vyšších koncentrací kadmia se již embrya netvořila. Životnost³ byla stanovena v prvních čtyřech týdnech experimentu a byl zjištěn očekávaný průběh, tedy maximální toxicita u nejvyšší aplikované koncentrace. Obsah studovaných thiolových sloučenin ve SRSE rostl se zvyšující se koncentrací těžkého kovu v kultivačním médiu a s dobou kultivace.

Príspevek vznikl za podpory grantu GA ČR 525/04/P132 a Výzkumného centra M06030.

LITERATURA

- Petek J., et al.: Anal. Bioanal. Chem. 383, 576 (2005).
- Potesil D., Petrlova J., Adam V., Vacek J., Klejdus B., Zehnalek J., Trnkova L., Havel L., Kizek R.: J. Chrom. A 1084, 134 (2005).
- Vitecek J., Adam V., Petrek J., Babula P., Novotna P., Kizek R., Havel L.: Chem. Listy 99, 496 (2005).

6P-22

**KUMULÁCIA MEDI A KADMIA ALTERNATÍVNymi
PLODINAMI**
**ALENA VOLLMANNOVÁ^a, TOMÁŠ TÓTH,
LADISLAV LAHUČKÝ, JANETTE MUSILOVÁ
a KLAUDIA JOMOVÁ^b**

^a Katedra chémie FBP SPU, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra,
^b Katedra chémie FPV UKF, Tr. A. Hlinku 1, 949 01 Nitra,
Slovensko
Alena.Vollmannova@uniag.sk

Výživa je jedným z faktorov vonkajšieho prostredia, ktorý sa môže uplatňovať nielen v prevencii, ale aj pri vzniku mnohých civilizačných ochorení. Pseudocereálie a minoritné obilniny, (ku ktorým sa zaraďujú aj pohánka, ovos, láskavec a proso), sú charakteristické mimoriadne vysokým obsahom plnohodnotných bielkovín, obsahom tukov s významným podielom nenasýtených mastných kyselín, obsahom kvalitnej vlákniny a škrobu, vyváženým zastúpením minerálnych látok, obsahom niektorých vitamínov, ako aj ďalších látok s chemoprotektívnym účinkom a sú teda vhodnými surovinami pre výrobu funkčných potravín.

V našej práci sme sledovali vzájomný vzťah vysokého pôdneho obsahu Cu a Cd a obsahu živín a toxických kovov v konzumných častiach alternatívnych poľnohospodárskych plodín pestovaných na metalicky zaťaženej pôde z oblasti Štiavnických vrchov, ktorá patrí k 12 oblastiam Slovenska s pôdami kontaminovanými rizikovými prvkami.

V oblasti Štiavnických vrchov sa vyskytujú pôdy s často až extrémnymi obsahmi rizikových prvkov¹ v dôsledku bývalej intenzívnej banskej činnosti v Banskej Štiavnici a okolí. Ďalším faktorom, ktorý výrazne ovplyvňuje obsah ťažkých kovov v pôde v tejto lokalite, sú aj geochemické anomálie.

V nádobovom vegetačnom pokuse sme použili pôdu z lokality Dudince (oblasť Štiavnických vrchov). V pôde sa stanovili obsahy prístupných živín (Mehlich II.), % humusu (Ťurin), pôdna reakcia (pH/KCl), celkový obsah Cu a Cd a obsah ich tzv. potenciálne mobilizovateľných foriem vo výluhu 2M-HNO₃ (tab. I, II). Analytická metóda stanovenia bola plameňová AAS. Získané výsledky boli vyhodnotené podľa „Rozhodnutia MP SR č. 531/1994-540“. Obsahy Cu a Cd v zrne testovaných plodín (tab. III) boli stanovované po predchádzajúcej mineralizácii suchou cestou metódou AAS. Údaje sme vyhodnotili v zmysle platnej legislatívy (Potravínový kódex SR 2003 č. 414/2003-100).

Použitá pôda sa vyznačovala slabou kyslou pôdnou reakciou, dobrým obsahom prístupného K, stredným obsahom Mg a P a malou zásobou humusu.

Obsah Cu v pôde prekročil o 22,4 % a obsah Cd o 100 % referenčnú hodnotu B (kontaminácia pôdy bola ana-

Tabuľka I

Pôdna reakcia, obsah humusu [%] a obsah prístupných živín [mg kg⁻¹]

Lokalita	pH/KCl	Humus	P	K	Mg
Dudince	5,9	1,9	65,4	202,0	218,0

Tabuľka II

Obsah Cu a Cd v pôde [mg kg⁻¹]

Kov	Totálny obsah	2M-HNO ₃	Ind. hodnota B
Cu	122,4	81,5	100
Cd	10,0	9,45	5

Tabuľka III

Obsah Cu a Cd v zrne plodín [mg kg⁻¹]

Kov	Láskavec	Pohánka	Ovos	Proso	PK SR
Cu	19,2	11,8	8,15	10,1	10,0
Cd	3,25	1,87	5,43	1,14	0,1

lyticky preukázaná).

Použitie zrna uvedených plodín na potravinárske účely je rizikové. Vo všetkých prípadoch s výnimkou Cu v zrne ovsu boli prekročené hygienické limity určené Potravinovým kódexom SR (PK SR). Prekročenie obsahov Cu sa pohybovalo v rozmedzí 10 % (v zrne prosa) až po 92 % (v zrne láskavca). Rizikovým kovom je najmä Cd, ktorého obsah extrémne prevyšoval v zrne všetkých plodín hygienický limit (od 11,4 násobku v zrne prosa až po 54,3 násobok v zrne ovsu). V prípade pestovania potravinových surovín v uvedenej oblasti je nutné minimalizovať riziká vstupu toxických kovov do potravinového reťazca² tak, aby výsledná potravinová komodita spĺňala hygienické limity pre potravinovú bezpečnosť.

Výsledky potvrdzujú nutnosť stáleho monitoringu obsahu rizikových kovov v konzumných častiach dopestovaných plodín, ako aj v pôdach v závislosti od ich vlastností³ a vo vzťahu k potravinovej bezpečnosti. Je potrebné v prípade rizika ich vstupu do potravinového reťazca toto riziko minimalizovať (úprava pôdnej reakcie kyslých pôd, zvýšenie obsahu organickej hmoty, zvýšenie sorpčnej kapacity pôdy a i.), prípadne použiť iné spôsoby (miešanie zrna s vysokým obsahom kovov s vysokohodnotným zrnom plodín s minimálnym obsahom kovov), resp. pestovať v zaťaženej oblasti technické plodiny.

Práca vznikla s finančnou podporou grantu VEGA 1/3455/06

LITERATÚRA

1. Bajčan D., Melicháčová S., Tomáš J.: Vplyv banskej činnosti na kvalitu rastlinnej produkcie v Hontianskom regióne, v: *MendelNet '05 Agro. Brno 2005*, s. 84. MZLU, Brno 2005.
2. Tomáš J., Bajčan D., Lazor P., Pariláková K., Noskovič J., Kováčik P.: *ChemZi 1/1*, 285 (2005).
3. Dobříková E., Stanovič R., Bystrická J.: The utilisation of some cations in plant nutrition in decreasing of cadmium phytotoxicity, v: *Aktuálne problémy riešené v agroekosystéme*, str. 11. SPU, Nitra 2003.

6P-23

BIODEGRADACE NĚKTERÝCH ORGANO-POLUTANTŮ POMOCÍ LIGNINOLYTICKÝCH HUB

PAVEL ZACHAŘ^a a ČENĚK NOVOTNÝ^b

^a Vysoká škola chemicko-technologická Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, ^b Mikrobiologický ústav AV ČR, Videňská 1083, 142 20 Praha 4
Pavel.Zachar@vscht.cz

Dřevokazné houby, zejména druhy, které rozkládají lignin (ligninolytické houby – houby bílé hniloby), se v poslední době staly předmětem zájmu i v oblasti environmentálních biotechnologií. Tyto houby produkují enzymy schopné rozkládat kromě ligninu (složitá struktura substituovaných polyfenolů) i jiné organopolutanty s aromatickou strukturou, jako polyaromatické uhlovodíky (PAH), polychlorované bifenylly (PCB), polychlorované dibenzodioxiny (PCDD), polychlorované dibenzofurany (PCDF), chlorfenoly (CP), syntetická barviva, pesticidy a další látky.

Většinu praktickému využití ligninolytických hub dosud brání malá znalost mechanismů degradace organopolutantů. Při odbourávání organopolutantů se uplatňuje několik rozdílných mechanismů jako působení ligninolytických enzymů, cytochrom P 450 oxygenázy či radikálový mechanismus.

Soustavný výzkum fyziologie a biochemie hub v laboratořích MBÚ vedl k izolaci řady dobře rostoucích kultur kmenů s výraznými biodegradačními schopnostmi. Jako jedna z hub s nejvyššími biodegradačními účinky byla vybrána houba bílé hniloby IRPEX LACTEUS.

U stacionárních kultur Irpex Lacteus imobilizovaných na pevném nosiči byl sledován vliv experimentálních podmínek (teplota, pH, typ pevného nosiče, koncentrace organopolutantu) na průběh biodegradace. Při zvolených podmínkách pak byly v této etapě práce sledovány dekolorizační schopnosti kultury Irpex Lacteus pro vodné roztoky různých typů syntetických organických barviv pocházejících z odpadních vod textilního průmyslu. Při biodegradaci barviv mohou jako degradační produkty vznikat i látky, které jsou toxickejší než výchozí barviva, a proto je nutné v průběhu dekolorizace (tj. odbourávání výchozího barviva) sledovat i vznikající degradační produkty.

Z každé skupiny barviv, která jsou používána v textilním průmyslu, byla vybrána jedna typická látka a byly analyzovány produkty vznikající při biodegradaci. Ze skupiny azobarviv bylo sledováno odbourávání červené barvy Reactive Orange 16, antrachinonová barviva byla zastoupena modrou barvou Disperse Blue 3 a ftalocyaninová barviva modrou barvou Pigment Blue 15.

Vodný roztok příslušného barviva a vznikajících degradačních produktů byl extrahován vhodným organickým rozpouštědlem a po příp. derivatizaci byl extrakt analyzován plynovou nebo kapalinovou chromatografií a vznikající degradační produkty byly identifikovány hmotnostní spektrometrií.

Tato práce vznikla za podpory grantu AV ČR IAA6020411.

6P-24**DEGRADACE BIOLOGICKY A ENVIRONMENTÁLNĚ VÝZNAMNÝCH SLOUČENIN – MODELOVÁNÍ PŮSOBNÍ ENZYMU CYTOCHROM P 450****PAVEL ZACHAŘ, VLADIMÍR KRÁL, VOJTĚCH A. BOREK a LIBĚNA KODÝMOVÁ***Vysoká škola chemicko-technologická Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
Pavel.Zachar@vscht.cz*

Cytochromy, vedle hemoglobinu a mioglobinu, patří do skupiny hemoproteinů – bílkovin vázaných s hemem, metaloporfyrinem obsahujícím centrální atom železa. Cytochromy, mezi nimiž cytochrom P 450 patří k nejvýznamnějším, působí jako katalyzátory buněčného dýchání a podílejí se v organismu na zneškodňování cizorodých látek jako jsou léky, jedy, metabolity hormonů a další látky. Cytochromy působí zejména na látky nerozpustné ve vodě, na látky lipofilního charakteru a uplatňují se zejména v játrech. Tyto látky (typu nasycených, nenasyčených a aromatických uhlovodíků, aminů, etherů, karboxylových kyselin a jejich derivátů) jsou působením cytochromu P 450 obvykle oxidovány na epoxydy nebo alkoholy a poté podléhají dalším biotransformačním a degradačním procesům.

Jiné biologicky důležité metaloporfyriny obsahující jako centrální kov hořčík (chlorofyl) nebo kobalt (součást kobalaminu, vitamínu B 12) plní v živých organismech řadu dalších významných katalytických funkcí.

Využití katalytických schopností metaloporfyrinů při odbourávání environmentálně významných toxinů za „normální pokojové teploty“ a studovat mechanismy odbourávání biologicky významných sloučenin je jedním z dílčích úkolů činnosti laboratoře molekulárního rozpoznávání ústavu analytické chemie VŠCHT.

V této laboratoři byly syntetizovány analogy porfyrinových skeletů s různými substituenty (pentafluorofenyl aj.), kde jako centrální kovový atom byl vedle Fe(III) použit Mn (III), Mn(II), Co(III), Co(II) a Zn(II). Místo vazby na bílkovinu byl porfyrinový skelet imobilizován vazbou na aminopropylsilikagel nebo funkcionalizovaný kopolymer styren – divinylbenzen (Merrifieldova pryskyřice).

Takto připravené katalyzátory byly použity k oxidaci (degradaci) některých pesticidů (Simazin, Atrazin). Byla sledována kinetika působení jednotlivých katalyzátorů a vyhodnocena jejich účinnost.

U vybraných aktivních katalyzátorů byl studován mechanismus jejich působení na biologicky významné sloučeniny (cholesterol, cholesterolacetát) sledováním působení na skupinu isomerních cholestenů (2, 3, 4, 6) s identifikací vznikajících produktů, především ketonů s přesnou lokalizací ketonického kyslíku.

Analýzy reakčních produktů byly prováděny s použitím plynové chromatografie s hmotnostně spektrometrickou detekcí.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru MSM 6046137307.

6P-25**DETEKCE KAPSAICINU V PAPRICE (*CAPSICUM ANNUM*) KAPALINOVOU CHROMATOGRÁFIÍ S ELEKTROCHEMICKOU DETEKČÍ****ONDŘEJ ZÍTKA^{a,c}, VERONIKA ŠUPÁLKOVÁ^{a,b}, HELENA STAVELÍKOVÁ^c, SOŇA KRÍŽKOVÁ^a, RADKA MIKELOVÁ^d, LIBUŠE TRNKOVÁ^d, ALEŠ HORNA^f, LADISLAV HAVEL^b a RENÉ KIZEK^a**

^a Ústav chemie a biochemie, ^b Ústav biologie rostlin, Agromická fakulta, Mendelova zemědělská a lesnická univerzita v Brně, Zemědělská 1, 613 00 Brno, ^c Výzkumný ústav rostlinné výroby, Oddělení genové banky, pracoviště Olomouc, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc-Holice, ^d Katedra teoretické a fyzikální chemie a ^e Katedra biochemie Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita v Brně, Kotlářská 2, 611 37 Brno, ^f Radanal s.r.o., Okružní 613, 530 03 Pardubice kizek@sci.muni.cz

Paprika (*Capsicum*, *Solanaceae*) je rostlina pocházející z Jižní a Střední Ameriky, která se stala běžnou součástí našeho jídelníčku. Z potravinářského hlediska můžeme papriku považovat jak za potravinu, tak za koření. Její pálivá chuť je způsobena přítomností dusíkaté sloučeniny ze skupiny fenylalkylamidových alkaloidů – kapsaicinu. Pravděpodobně nejpálivějším druhem papriky je habanero (*Capsicum chinense*). V naší práci jsme vyvinuli nový způsob detekce kapsaicinu založený na použití vysokoúčinné kapalinové chromatografie s elektrochemickým detektorem (HPLC-ED, Coulchem III)^{1,2}. V našich experimentech jsme se nejdříve zaměřili na studium základního elektrochemického chování čistého kapsaicinu pomocí cyklické voltametrie. Na základě experimentálních výsledků z cyklické voltametrie jsme se zaměřili na navržení nevhodnějších podmínek pro průtokovou analýzu kapsaicinu. Ze závislosti výšky signálu a aplikovaného potenciálu jsme sestrojili hydrodynamický voltamogram, pomocí kterého jsme vybrali nevhodnější potenciál aplikovaný na pracovní elektrodu (750 mV). Na pozorovanou elektrochemickou odpověď měl také výrazný vliv průtok mobilní fáze. Při nízkých průtocích byly píky méně vyvinuté a symetrické. Se zvyšující se rychlostí průtoku mobilní fáze byly píky symetrické a velmi dobře vyvinuté. Pro sestrojení kalibrační závislosti jsme zvolili optimální parametry. Získaná závislost byla striktně lineární $y = 6829,4x + 19,257$, $R^2 = 0,9951$. Limit detekce kapsaicinu se pohyboval kolem 9 nM. Zjistili jsme, že námi používaná metoda je rychlá, senzitivní a umožňuje stanovit i stopová množství kapsaicinu. Navíc jsme navrženu metodiku aplikovali při analýze rozdílů v obsahu kapsaicinu u jednotlivých sbírkových odrůd papriky. Nejvyšší obsahy kapsaicinu byly pozorovány v semeníku.

Příspěvek vznikl za podpory grantu VURV 1/2006.

LITERATURA

- Supalkova V., Stavelikova H., Krizkova S., Mikelova R., Horna A., Havel L., Kizek R.: Toxcon 2006, (2006).
- Supalkova V., Stavelikova H., Krizkova S., Mikelova R., Horna A., Havel L., Kizek R.: Pracovní setkání fyzikálních chemiků a elektrochemiků I, (2006).

7L-01
ANTIOXIDAČNÍ AKTIVITA VÍN ŽERNOSECKÉ
VINAŘSKÉ OBLASTI ROKU 2005. SROVNÁNÍ
METOD.

MILOSLAV ŠULC a MAREK SCHILLA

*Katedra chemie, FAPPZ, Česká zemědělská univerzita,
 Kamýčká 129, 165 21 Praha 6
 sulcm@af.czu.cz*

Fenolické antioxidanty obsažené ve víně mají pozitivní vliv na zdraví člověka. Jedním ze způsobů, jak evaluovat dietní hodnotu fenolických antioxidantů, je měření jejich anti-oxidační aktivity, tj. schopnosti těchto látek inaktivovat volné radikály. Volné radikály mohou v organismu způsobovat oxidativní stres a podílejí se na vzniku a progresi závažných onemocnění (např. kardiovaskulární, neurodegenerativní onem., rakovina) a poškozují DNA, lipidy a proteiny. Svoji významnou úlohu sehrávají volné radikály i při stárnutí¹. Existuje mnoho metod, jak evaluovat antioxidační aktivitu mnoha látek. Každá z těchto metod používá jiný typ umělého radikálu a jeho geneze. Většinou jde o spektrofotometrické metody. Jedněmi z nejrozšířenějších jsou ABTS, DPPH a DMPD-test².

Cílem práce bylo zjistit celkovou antioxidační aktivitu (CAA) čtyřech odrůd vín v procesu jejich výroby od začátku listopadu 2005 do poloviny dubna 2006 ve vínech z obce Žernoseky v týdenních intervalech.

Ze studie, která byla provedena, můžeme konstatovat, že u DPPH-testu mají bílá vína přibližně 10× nižší CAA v porovnání s červenými víny. V šestém týdnu sledování došlo k velkému vzrůstu CAA. CAA vín před lahováním byla vyšší v porovnání s CAA moštu před kvašením, což může mít zajisté pozitivní dopad na zdraví. Statisticky významně se liší bílá a červená vína. K podobným závěrům jsme dospěli i při vyhodnocení výsledků měřených ABTS-testem. V absolutních hodnotách poskytují ABTS i DPPH-test rozdílné výsledky, což je dáno schopností použitých radikálů různě reagovat s antioxidanty. Vína bohužel nebyla testována DMPD-testem na CAA, protože tato metoda, tak jak je popsána jejím autorem³, poskytuje nereprodukovatelné výsledky, v důsledku nemožnosti stabilizace radikálu DMPD, což bylo potvrzeno i jinými autory.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT 6046070901.

LITERATURA

1. Palace V. P., Khaper N., Qin Q., Singal P. K.: *Free Rad. Biology and Med.* 26, 746 (1999).
3. Roginsky V., Lissi E. A.: *Food Chem.* 92, 235 (2005).
2. Fogliano V., Verde V., Randazzo G., Ritieni A.: *J. Agric. Food Chem.* 47, 1035 (1999).

7L-02
ANTIOXIDANTY A VOLNÉ RADIKÁLY
V PŘÍRODNÍCH PRODUKTECH

PAVEL STOPKA a JANA KŘÍŽOVÁ

*Ústav anorganické chemie Akademie věd České republiky,
 Laboratoř bioanorganické chemie, 250 68 Řež 1001
 stopka@iic.cas.cz*

V přírodním prostředí i v technologických systémech dochází ke generování volných radikálů, které reagují zpravidla oxidativním mechanismem. Volné radikály zanikají převážně interakcí s přírodními i syntetickými antioxidanty. Nejdůležitější jsou reaktivní kyslíkové částice (ROS), ke kterým patří hydroxylové radikály, superoxidové anion-radikály, peroxid vodíku a další peroxidy, singletový kyslík a ozon. Obdobnou roli mají reaktivní dusíkové částice (RNS), mezi které patří nitroxidové radikály, oxid dusnatý, aminové radikály a další.

Metodou EPR spektroskopie jsme studovali antioxidační kapacitu červených vín. Zjistili jsme antioxidační kapacitu a kinetiku reakcí antioxidantů.

Jehličí stromů napadených škodlivinami z ovzduší vykazuje ROS. Fotochemickým ozařováním se tento proces urychluje.

Sledovali jsme generování volných radikálů na povrchu sinic pocházejících z přírodních vod. Nebezpečnost sinic pro lidský organismus vysvětlujeme generováním ROS na povrchu sinic. Jejich koncentrace rychle vzrůstá slunečním ozařováním a ultrafialovým ozařováním. Obdobná situace je u bolševníku velkolepého.

Zjistili jsme, že v procesu zrání studovaných pylů, způsobujících alergie u lidí, dochází k nárůstu koncentrace volných radikálů, které pravděpodobně způsobují zdravotní problémy.

Studovali jsme huminové kyseliny a fulvokyseliny izolované ze severočeského hnědého uhlí. Zjistili jsme, že na základě rozdělení jejich koncentrací lze určit příslušnost určité geologické vrstvy podle jejího stáří.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky, grant GA ČR.

LITERATURA

1. Shah V., Verma P., Stopka P., Gabriel J., Baldrian P., Nerud F.: *Appl. Catal., B* 46, 287 (2003).
2. Souček P., Gut I., Stopka P.: *Chem.-Biol. Interact.* 126, 45 (2000).

7L-03

TEST OXIDAČNEJ STABILITY NIEKTORÝCH RASTLINNÝCH TUKOV METÓDAMI ZRÝCHLENEJ OXIDÁCIE**LUCIA ZAHRADNÍKOVÁ*, ŠTEFAN SCHMIDT a STANISLAV SEKRETÁR***Oddelenie potravinárskej technológie, FCHPT, STU, Radlinského 9, Bratislava, Slovensko
lucia.zahradnikova@stuba.sk*

Stále častejšie sa dostáva do popredia otázka zdravej výživy. Čoraz viac ľudí si osvojuje zásady správnej životosprávy a správnych stravovacích návykov. Hľadajú „zdravé potraviny“, pričom tento trend neobišiel ani tukový priemysel.

Nezastupiteľné miesto v našej výžive majú aj rastlinné oleje. Sú zdrojom energie, obsahujú vitamíny A, D, E, K a esenciálne mastné kyseliny. Táto práca bola zameraná na skúmanie oxidačnej stability niektorých rastlinných olejov metódami zrýchlenej oxidácie, konkrétne metódami Oxidograph a Rancimat. Oxidačná stabilita bola sledovaná u nasledovných olejov: slnečnicový, repkový, pupalkový, kukuričný, orechový, tekvicový, sójový a kľúčkový, pričom slnečnicový a repkový olej slúžili ako porovnávacie vzorky. Stabilita olejov sa sledovala pri teplote 80 °C, 110 °C a 120 °C. Analýzou nameranej teplotnej závislosti vyplynulo, že oxidačná stabilita rastlinných olejov so stúpajúcou teplotou prudko klesá exponenciálnym radom. Najstabilnejším olejom sa ukázal byť tekvicový (IP pri 80 °C – 85,86 h), kukuričný (IP pri 80 °C – 58,25 h) a repkový (IP pri 80 °C – 46,15 h), čo môže byť odôvodnené vysokým obsahom tokoferolov. Najmenej stabilným olejom je orechový olej (IP pri 80 °C – 12,51 h). Výsledky namerané metódou Oxidograph a Rancimat vykazujú porovnateľné výsledky.

Táto práca bola podporovaná štátnym podprogramom výskumu a vývoja „VEGA 1/2392/05 – Metódy riadenia kvality potravín a výrobkov pre ochranu zdravia. Methods for control of quality of food and health care products.

LITERATÚRA

1. Velíšek J.: *Chemie potravin 1*. 1.vyd. s. 352. OSSIS, Tábor 1999.
2. STN 58 8756: *Živočišne a rastlinné tuky a oleje: Stanovenie kyslosti a čísla kyslosti*. 1995.
3. STN 58 0130-4: *Živočišne a rastlinné tuky a oleje: Stanovenie peroxidového čísla*. 1995.

7L-04

OXIDATION STABILITY OF EDIBLE FATS EXPOSED TO MICROWAVE HEATING**STANISLAV SEKRETÁR, ŠTEFAN SCHMIDT, LUCIA ZAHRADNÍKOVÁ, and LUKÁŠ JANÁČ***Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava, Slovak Republic
stanislav.sekretar@stuba.sk*

Some studies have been published on the effects of microwaves on edible fats¹⁻⁷ and its constituents². The objective of this study was to determine the effects of microwave heating on lard, sunflower and rapeseed oils with and without addition of antioxidants.

Lard, sunflower and rapeseed oils with and without antioxidants were exposed to 10 and 20 min microwave heating respectively and their oxidation stability was determined. Peroxide value, *p*-anisidine value and UV spectroscopy were used for the monitoring of oxidation. While the conventional heating at 155 °C causes only slow increase in peroxide value (PV) of samples after 10 min of treatment, microwave heating rapidly increases PV of all samples. This effect starts only if the temperature of samples rise over 100 °C (approx. after 6 min of heating). When the samples were kept below this temperature (2 min resp. 5 min breaks after each 2 min of heating), oxidation did not proceed. Addition of 0,1 % of natural antioxidant formulation (based on rosemary or sage extracts) as well as BHT retarded the oxidation of lard and the resulting PV is in the range of conventional heating one. In the case of vegetable oils the addition of antioxidants was not so effective, because of high content of tocopherols. No significant effect was observed for rapeseed oil and the only slight effect was observed for sunflower oil. The influence of contact surface with the air was evaluated on lard samples. Increasing the surface caused more intensive heat dissipation and the rise of PV of samples was not proportional.

This work was supported by the VEGA 1/2392/05 grant of Slovak Grant Agency for Science.

REFERENCES

1. Farag R. S.: *Fat. Sci. Technol.* 96, 215 (1994).
2. Ruiz-Lopez M. D., Artacho R., Fernandez Pineda A., Lopez Garcia de la Serrana H., Lopez Martinez M. C.: *Lebensm. Wiss. Technol.* 28, 644 (1995).
3. Sekretár S., Zelenka M., Schmidt Š.: *Chem. Listy* 91, 711 (1997).
4. Albi T., Lanzón A., Guinda A., Pérez-Camino M. C., León M.: *J. Agric. Food Chem.* 45, 3000 (1997).
5. Albi T., Lanzón A., Guinda A., León M., Pérez-Camino M. C.: *J. Agric. Food Chem.* 45, 3795 (1997).
6. Sekretár S., Schmidt Š., Niklová I., Kováč M.: *Olaj, Szapan, Kozmetika* 48, 262 (1999).
7. Sekretár S., Schmidt Š., Niklová I., Kováč M.: *Czech J. Food Sci.* 18 (Special Issue), 127 (2000).

7L-05 NATURAL ANTIOXIDANT FUNCTIONALITY DURING FOOD PROCESSING

ŠTEFAN SCHMIDT^a, JAN POKORNÝ^b,
and STANISLAV SEKRETÁR^a

^a Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava, Slovak Republic,

^b Faculty of Food and Biochemical Technology, Prague Institute of Chemical Technology, Prague, Czech Republic
stefan.schmidt@stuba.sk

Raw materials used for food preparation already contain various components which are able to inhibit lipid oxidation, but other synthetic or natural antioxidants may be added before processing as well. Much interest has developed during the last few decades in naturally occurring antioxidants because of the adverse attention received by synthetic antioxidants and because of the world wide trend to avoid or minimise the use of artificial food additives¹.

One disadvantage of natural antioxidants is their low resistance against oxygen, particularly under exposure to light, high temperature and drying. Antioxidant changes continue during storage of food products. The most important food processing technologies are listed in Table I. Despite the great importance of the course of these processes, relatively little has been published on changes in antioxidants, their interactions with other food components, and the effect of these changes on food resistance against oxidation. In general, the activity of natural antioxidants is greatly affected by complex interfacial phenomena in emulsions and multicomponent foods.

Table I
Types of food processing which affect antioxidants and oxidative stability of foods

Temperature	Type of process	Examples
Elevated temperature	water as heat transfer medium	blanching
		pasteurisation sterilisation evaporation extrusion
	air as heat transfer medium	drying roasting baking
	oil as heat transfer medium	frying deep-frying
	waves giving energy	microwave and infrared heating
Ambient temperature	effect of enzymes	fermentation
	effect of chemicals	curing smoking
	effect of time	storage

Table II
Oxidative destruction of antioxidants in food

Reaction type	Examples
Oxidation with lipid oxidation products	lipidic free radicals ROO• or RO• lipid hydroperoxides ROOH lipid dioxolanes
Oxidation with singlet oxygen	presence of chlorophyll pigments
Oxidation with triplet oxygen	antioxidant free radicals A• formation of quinones from phenolics
Oxidation with heavy metals	metal ions in higher oxid. state

The most important losses of antioxidant activity occur as a result of chemical changes in antioxidants present in food materials. Naturally, the most pronounced changes result from oxidation reactions occurring rapidly on heating or slowly in storage (Table II). Antioxidants are oxidised either by lipid oxidation products (mainly hydroperoxides) or directly by oxygen, either dissolved in lipidic and aqueous phases or absorbed from the air. Tocopherols have been oxidised by ferric ions and hydroperoxides even in absence of oxygen with formation of tocopherones and their mixed dimers with the polyunsaturated acid residue². Reaction products of antioxidants may retain antioxidant activity, for example *tert*-butylated hydroquinone (TBHQ) is oxidised either in an inactive quinone or in 2,2-dimethyl-5-hydroxy-2,3-dihydro-benzofuran, which is a strong antioxidant³. Other changes are mostly neglected even when they affect food resistance more than oxidation processes, such as removal of water or evaporation of volatile antioxidants or pro-oxidants. Modification of a recipe during preparation of foods or ready meals improves the stability against oxidation especially the addition of spices.

Changes in synthetic antioxidants during food processing and storage are relatively well known, as are the interactions of their oxidation products with other food components. However, modern consumers ask for natural products, free of synthetic additives. Therefore, the application of natural antioxidants will probably continue even in future⁴, and it will be necessary to study their changes and interactions in more detail. The best known and most widely used compounds with antioxidant activity will remain tocopherols, carotenoids and ascorbic acid. They have been the object of numerous studies, but usually only their changes in edible fats and oils, and in model systems were investigated. Their behaviour in such complex mixtures as foods and ready meals is far less well understood. Plants such as rosemary, sage, thyme, savory, thyme, nutmeg, evening primrose and ginger contain different phenolic compounds possessing antioxidant activities. Their structures and antioxidant activities were studied in detail^{5,6}, but the course of their oxidation and their interactions with other food components should also be studied in future.

Consumers believe that foods rich in antioxidants may afford a degree of protection against free radical damage not

only in foods, but also in the human body, protecting against cardiovascular diseases, damage of nucleic acids, and other deteriorative processes. The absorption of tocopherols and carotenoids into the blood stream is well known, but much less has been published on the fate of other antioxidants and their reaction products. Some antioxidants may not be re-sorbed in the intestinal tract at all, even when they are active in foods.

A concerted effort should be made to eat a well-balanced diet, which includes a range of foods and beverages rich in natural antioxidants, such as fruit, vegetables, cereals, nuts, tea or wine. It is a very serious challenge for the food industry to produce a new generation of food products with enriched content of natural antioxidants^{7,8}.

This work was supported by the VEGA 1/2392/05 grant of Slovak Grant Agency for Science.

REFERENCES

1. Frankel E. N., in book: *Lipid Oxidation*, chapter Antioxidants, p. 209–258. Oily Press, Bridgewater 2005.
2. Yamauchi R., Yamamoto N., Kato K.: *Lipids* 30, 395 (1995).
3. Kurechi T., Aizawa M., Kunugi A.: *J. Am. Oil Chem. Soc.* 60, 1878 (1983).
4. Pokorný J.: *Trends Food Sci. Technol.* 2, 223 (1991).
5. Niklová I., Schmidt Š., Habalová K., Sekretár S.: *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* 103, 299 (2001).
6. Schmidt Š., Niklová I., Pokorný J., Farkaš P., Sekretár S.: *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* 105, 427 (2003).
7. Pokorný J., Schmidt Š., in book *Antioxidants in Food*, chapter Natural antioxidant functionality during food processing, p. 331–354. Woodhead Publishing, Cambridge 2001.
8. Schmidt Š., Turková G., Sekretár S.: *Chem. Listy*, 91, 709 (1997).

7L-06

KINETIKA FOTOKATALYTICKÉ DESINFEKCE VODY

MÁRIA VESELÁ, MICHAL VESELÝ a JANA CHOMOUCKÁ

*Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno
vesela@fch.vutbr.cz*

Většina současných experimentů využívající antimikrobiální efekt TiO₂ je zaměřována na bakterie, avšak na mnoha místech bývá voda kontaminována i ostatními mikroorganismy jako jsou viry, kvasinky a plísně. Proto jsme naše experimenty zaměřily na kvasinky. Jsou dobře mikroskopicky pozorovatelné a stejně jako bakterie mají silnou a pevnou buněčnou stěnu, která chrání buňku před vnějšími vlivy. V dnešní době se velmi často setkáváme s nemocemi způsobenými kvasinkovými mikroorganismy jako jsou kandidózy. Tyto nemoci způsobují kvasinky rodu *Candida*, mezi které patří nejen známá *Candida albicans*, ale také *Candida tropicalis* a dal. a vyskytují se hlavně v bazénových vodách. Mož-

ným způsobem úpravy těchto vod je fotokatalytický systém využívající umělého zdroje záření a slunečního záření.

Absorbované záření s energií vyšší či rovnou energii zakázaného pásu fotokatalyzátoru je absorbováno polovodičovou částicí. Elektron z valenčního pásu přejde do vodivostního pásu a zároveň se ve valenčním pásu generuje díra h⁺ a dojde tak k separaci náboje. Pokud je přítomen akceptor, donor nebo povrchový defekt, který by zachytil elektron nebo díru, rekombinaci nosičů náboje se zabrání a může proběhnout redoxní reakce, poskytující zejména vysoce reaktivní hydroxylový radikál.

Byl studován proces fotokatalytické desinfekce vody obsahující kvasinky *Candida tropicalis* a *Hansenula anomala* v trubkovém průtočném fotokatalytickém reaktoru. Na vnitřní stěny reaktoru byla nanášena vrstva TiO₂. K ozařování byla použita Hg-výbojka, intenzita ozařování byla volena mezi 0,6 a 1,3 mW cm⁻² a průtok byl 82 ml min⁻¹. Prokázala se různá citlivost kvasinek *Candida tropicalis* a *Hansenula anomala*. *Candida tropicalis* byla citlivější a dokonce i při nejnižší intenzitě byla fotokatalytická inaktivace buněk účinná. Naproti tomu byla *Hansenula anomala* vůči fotokatalytickým produktům reakce rezistentnější a pro účinnou fotokatalytickou inaktivaci byla nutná vyšší intenzita a delší doba ozařování.

Pro vyhodnocení kinetiky reakcí byl vybrán poměr počtu buněk v čase *t* a počtu buněk na počátku reakce, nazývaný koeficient přežití. Počet buněk byl stanoven přímou metodou na membránovém filtru epi-fluorescenčním mikroskopem a barvením buněk Akridinovou oranží. Tato analýza eliminuje shlukování buněk, které může vést ke zkreslení výsledků u tradiční nepřímé metody. Vyšetřením počáteční rychlosti fotokatalytické desinfekce byl analyzován řád reakce 1,102 ± 0,212. Vypočítaný řád reakce podporuje tvrzení, že kinetika zabíjení buněk na povrchu TiO₂ je konzistentní s kinetikou 1. řádu.

LITERATURA

1. McLoughlin O. A.: *Solar Energy* 77, 625 (2004).
2. Sunada K.: *J. Photochem. Photobiol.*, A 156, 227 (2003).

7L-07

STANOVENÍ POČTU BUNĚK POMOCÍ FRAKTÁLNÍ ANALÝZY

PETRA JEŘÁBKOVÁ, OLDŘICH ZMEŠKAL a MÁRIA VESELÁ

*Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno
jerabkova@fch.vutbr.cz*

V mikrobiologickém výzkumu se často setkáváme s nezbytností stanovit počet mikroorganismů ve vzorku. Tyto metody slouží k posouzení kinetiky růstu nebo nám např. dávají představu o mikrobiálním znečištění surovin a výrobků či nás přesvědčují o účinnosti sterilizace¹.

K přímému stanovení počtu buněk se běžně používá přímé mikroskopické počítání v počítacích komůrkách (Thomově, Bürkerově, atd.). Nepřímo můžeme počet buněk mikroorganismů stanovit nejčastěji pomocí kultivace, kdy

předpokládáme, že z jedné životaschopné buňky vyroste jedna kolonie, které potom spočítáme. Ke zjištění definovaných objektů (např. kvasinek) bez toho, aniž by je bylo nutno počítat lze také využít obrazovou analýzu, konkrétně fraktální analýzu.

V této práci byla využita waveletová transformace při fraktální analýze obrazu tzv. metodou počítáním čtverců sítě (box counting method). Množství buněk x bylo stanoveno za předpokladu, že obrazy buněk jsou kruhového tvaru, podobné velikosti a jsou rozlišitelné na pozadí dle vztahu

$$x = \frac{N_{BW}^2}{4\pi(N_B + N_{BW})}$$

kde N_B je počet černých a N_{BW} počet černobílých čtverců o velikosti $\varepsilon \times \varepsilon$ pixelů. Výsledný počet buněk x je dán maximální hodnotou x , protože fraktální struktura je nejvhodněji ohraničena při dané velikosti políček.

Pro rozlišení živých a mrtvých buněk kvasinek byla použita různá fluorescenční barviva (akridinová oranž, fluorescein diacetát, LIVE/DEAD Yeast Viability kit). Pro záznam obrázků bylo využito spojení episkopického fluorescenčního mikroskopu a digitálního fotoaparátu. Získané obrázky byly analyzovány pomocí programu HarFA (cit.²).

Fluorescenční mikroskopie ve spojení s obrazovou analýzou se ukázala být vhodnou metodou pro počítání buněk kvasinek. Při počítání živých a mrtvých buněk různých druhů kvasinek pomocí fraktální analýzy bylo zjištěno, že průměrná chyba stanovení počtu buněk z 35 obrázků je menší než 10 % při počtu buněk v obrázku do 20. Tato chyba je způsobena nestejnou velikostí buněk a tvaru kvasinek, rozdíly v barevnosti jednotlivých buněk a kvalitou zaznamenaného obrázku.

LITERATURA

1. Kocková-Kratochvílová A.: *Kvasinky ve výzkumu a praxi*. 1. vyd. Academia, Praha 1986.
2. Zmeškal O., Nežádal M., Bžatek T.: HarFA 5.2., *Harmonic and Fractal Image Analyzer*, <http://www.fch.vutbr.cz/lectures/imagesci>, Brno 2005.

7L-08

DETEKCE OXIDU DUSNATÉHO V ROSTLINNÝCH SYSTÉMECH

JAN VÍTEČEK^a, ANDREA WŮNSCHOVÁ^a, LUCIA OBÁLOVÁ^{a,b}, RENÉ KIZEK^b a LADISLAV HAVEL^a

^a Ústav Biologie rostlin a ^b Ústav chemie a biochemie, Agronomická fakulta, Mendelova zemědělská a lesnická univerzita v Brně, Zemědělská 1, 613 00 Brno
havel@mendelu.cz

Stresová reakce rostlin patří mezi jevy s dalekosáhlými důsledky v rostlinných biotechnologiích. Na její regulaci se podílí celá řada látek včetně oxidu dusnatého (NO), který svými vlastnostmi (plyn, radikál) představuje naprosto jedinečnou signální molekulu, jejíž funkce u rostlin byla objevena teprve nedávno. Nabízí se tedy možnost jeho využití jako markeru stresové reakce nebo i pro cílené ovlivňování rostlin-

ných kultur za účelem získání biotechnologicky významných látek^{1,2}.

Pro detekci NO je v současné době používána široká škála různých metod lišících se citlivostí a především cenovou dostupností. Pro rutinní použití v biotechnologických aplikacích je třeba spolehlivá metoda, která pokud možno není zatížena vysokými náklady na její provoz. Z potenciálně vhodných metod jsme vybrali fluorimetrickou detekci pomocí fluorescenční sondy diamino fluoresceinu a metodu založenou na oxidaci NO a následné jednoduché spektrofotometrické detekci dusitanu. Obě metody byly nejdříve testovány na modelových vzorcích (plynný NO nebo jeho roztok ve vodě) a ověřeny pomocí standardně používané elektrochemické detekce pomocí uhlíkového vlákna. Limity detekce činily 0,01 nmol NO pro diamino fluoresceinovou metodu a 0,1 nmol NO pro metodu založenou na sledování produktů oxidace NO. Diamino fluoresceinová metoda se ukázala být silně závislá na podmínkách reakce diamino fluoresceinu a NO, zatímco metoda založená na sledování produktů oxidace NO umožnila díky prostorovému oddělení zdroje NO a detekční reakce spolehlivé stanovení NO. Obě metody byly dále aplikovány na modelový systém představující buněčnou suspenzi tabáku ovlivněnou různými elicitory. Dalším významným údajem bylo sledování životnosti buněk ovlivněných NO. Pro tento účel bylo využíváno sledování aktivity intracelulárních esterů pomocí fluorimetrické detekce^{3,4}.

Příspěvek vznikl za podpory grantu GA ČR 525/04/P132 a Výzkumného centra M06030.

LITERATURA

1. Vítěček J., Kizek R., Havel L.: *BMC Plant Biol.* 5 (Suppl 1), S34 (2005).
2. Vítěček J., Petřelová J., Adam V., Petrek J., Havel L., Kramer K. J., Kizek R.: *Biol. Plant.*, v tisku.
3. Vítěček J., Adam V., Petrek J., Babula P., Novotná P., Kizek R., Havel L.: *Chem. Listy* 99, 496 (2005).
4. Petrek J., Vítěček J., Vlasinová H., Kizek R., Kramer K. J., Adam V., Klejdus B., Havel L.: *Anal. Bioanal. Chem.* 383, 576 (2005).

7L-09

OBRAZOVÁ ANALÝZA POTRAVIN A VIRTUÁLNÍ REALITA

ROMAN UVÍRA a FRANTIŠEK PUDIL

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

Digitalizace reálných dat (např. obrazových) a jejich uložení v počítači dovoluje uchovávat studovanou realitu v elektronické podobě i tehdy, kdy již nebude reálně k dispozici. Toto je první krok k virtuální realitě, ve které je vytvořen digitalizovaný odraz či model existující reality, ale lze jej prezentovat již jen s využitím počítačových zobrazovacích technik. Takto mohou vznikat např. elektronické archivy mikroskopických snímků, které s využitím specializovaného software a počítače dovoluji realizovat virtuální mikroskopii

tj. prohlížet si mikroskopické snímky již neexistujících preparátů, vybírat zvětšení objektivu, procházet preparátem apod. Lze při tom využít i dalších možností, které při zkoumání původní reality nebyly možné, například tzv. 3D-zaostřování. Jeho podstatou je sloučení zaostřených částí obrazů ze sekvence snímků postupně proostřovaného mikroskopického preparátu do jednoho výsledného obrazu. Takový obraz (virtuálně) prezentuje zkoumaný preparát s několikanásobně větší hloubkou ostrosti než má optika mikroskopu při reálném mikroskopování. Tento obraz zobrazuje realitu a je zároveň virtuální, protože nemůže být prezentován jinak než pomocí počítačových zobrazovacích technologií.

S pomocí nejnovější verze obrazového analyzátoru LUCIA G 5.0 (Laboratory Imaging, Česká republika) s modulem Rozšířené hloubky ostrosti byla vytvořena virtuální obrazová dokumentace vybraných potravinářských materiálů v makro nebo mikro rozlišení. Bylo vyzkoušeno tzv. 3D-zaostřování na makrosnímčích koření a plodnic hub a mikrosnímčích plísni a houbových výtrusů. Další působivou možností obrazového analyzátoru LUCIA G 5.0 je vytváření virtuálních prostorových anaglyfů.

Je zřejmé, že význam těchto technik pro zobrazování např. kvalitativních ukazatelů různých materiálů je dalekosáhlý. Elektronická virtuální realita může být již dnes přímo využita pro posuzování kvality potravinářských materiálů a pro zbožiznalství. Prvním krokem je shromáždění a vytvoření dostatečně velké databáze virtuálních (ale samozřejmě reálných) dat. Lze předpokládat, že další rozvoj technologií virtuální reality přinese mnoho dosud netušených možností.

7L-10

ANALÝZA MASTNÝCH KYSELIN V ČOKOLÁDĚ METODOU PLYNOVÉ CHROMATOGRAFIE

EVA VÍTOVÁ, BLANKA LOUPANCOVÁ, HANA ŠTOUDKOVÁ, JANA ZEMANOVÁ a IVANA MACKŮ

*Fakulta chemická VUT v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno
evavitova@post.cz*

Základními surovinami pro výrobu čokolád jsou cukr, kakaové boby, sušené mléko, kakaové máslo a emulgátory. Kakaové máslo je surovina nedostatková a poměrně drahá a tudíž vznikla potřeba nahradit ho levnějšími rostlinnými oleji. Pro hovoří i skutečnost, že tyto tuky mohou příznivě ovlivnit reologické vlastnosti a skladovatelnost čokolád.

Současná legislativa v České republice je plně slučitelná s platnou legislativou Evropské unie. Umožňuje přidávat do čokolády povolené rostlinné tuky, maximálně však do 5 % z celkové hmotnosti konečného výrobku. Čokoláda, do níž byl přidán rostlinný tuk, musí být označena na obale „obsahuje rostlinné tuky“. Výrobek obsahující více než 5 % náhrad nesmí být prodáván pod pojmem „čokoláda“.

Metody vhodné pro detekci náhrad kakaového másla jsou založeny především na analýze mastných kyselin, triacylglycerolů a některých minoritních složek tuků. Jejich skutečný obsah se však zatím nepodařilo stanovit¹.

Cílem této práce bylo ověřit jednoduchou a rychlou metodu analýzy mastných kyselin, vhodnou pro použití při identifikaci rostlinných tuků v čokoládě. Analyzovány byly

3 různé druhy čokolád (Hořká čokoláda Figaro, Figaro na vaření, Kakaová poleva na vaření Kaumy), jež se od sebe liší obsahem kakaového másla. Hořká čokoláda Figaro obsahuje podle údajů uvedených na obale pouze kakaové máslo. Čokoláda Figaro na vaření obsahuje do 5 % náhrad kakaového másla a kakaová poleva na vaření Kaumy je vyrobena pouze ze ztuženého palmového oleje.

Celkový tuk byl ze vzorků extrahován petroletherem. Mastné kyseliny byly převedeny na methylestery s použitím methanolickeho roztoku KOH jako katalyzátoru a analyzovány plynovou chromatografií. Tato metoda je nenáročná na aparaturu a chemikálie a poskytuje srovnatelné výsledky s normovanou metodou používající toxický BF₃.

V čokoládách bylo identifikováno celkem 16 mastných kyselin, z nichž kvantitativně nejvýznamnější byly kyseliny palmitová, stearová, olejová a linolová. Přídavek rostlinného tuku způsobil změny v obsahu jednotlivých mastných kyselin.

LITERATURA

1. Čopíková J., Nováková H., Tůma J., Sinica A.: Chem. Listy 95, 288 (2001).

7L-11

RYCHLÁ CHROMATOGRAFICKÁ METODA PRO SCREENING MIKROORGANISMŮ PRODUKUJÍCÍCH TOXICKÉ BIOGENNÍ AMINY V POLOTVRDÉM SÝRU

VLASTIMIL DOHNAL, RADKA BURDYCHOVÁ, HANA DVOŘÁČKOVÁ a TOMÁŠ KOMPŘDA

*Ústav technologie potravin, Agronomická fakulta, Mendelova zemědělská a lesnická univerzita v Brně, Zemědělská 1,
613 00 Brno
burdycho@node.mendelu.cz*

V práci byla optimalizována chromatografická HPLC metoda pro rychlý screening mikroorganismů s dekarboxylázovou aktivitou v polotvrדם sýru. Schopnost tvořit biogenní aminy (BA) jako tyramin, histamin, putrescin a kadaverin ve fermentovaných potravinách typu sýru již byla popsána u velkého počtu laktobacilů, enterokoků i koliformních bakterií. Jsou mezi nimi zástupci startovacích kultur nebo jde o kontaminující mikrofloru, ale tvorba biogenních aminů byla určena i u řady sbírkových kmenů.

Mikrobiologická analýza vzorku sýra byla provedena použitím normovaných metod. Stanoveny byly laktobacily, enterokoky, koliformní a anaerobní bakterie. Z Petriho misek, které obsahovaly 15–300 počítatelných kolonií, byl pro statistický test schopnosti těchto mikroorganismů produkovat vybrané biogenní aminy vybrán definovaný počet kolonií. U těchto mikroorganismů byla testována produkce vybraných biogenních aminů metodou HPLC, po jejich předchozí kultivaci v médiu s prekurzory biogenních aminů (amino-kyselinami).

K vlastnímu screeningovému stanovení HPLC vybraných biogenních aminů byla optimalizována stávající metoda, taktéž vyvinutá na našem pracovišti, která ve své nové podobě výrazně zkracuje dobu analýzy (asi 5×). Metoda je založena na využití tzv. „rapid resolution high throughput“ kolon

s velmi malou velikostí částic a vysokého průtoku mobilní fáze. Biogenní aminy jsou vzhledem k absenci chromoforu před analýzou derivatizovány *o*-ftalaldehydem a po separaci detegovány fluorimetricky. Tento proces zaručuje velmi vysokou selektivitu a citlivost při stanovení těchto látek.

Uvedenou metodou byla zjištěna produkce vysokého množství tyraminu u dvou monitorovaných mikroorganismů kontaminující mikroflory. Tyto mikroorganismy byly následně identifikovány pomocí biochemických testů jako zástupci rodu *Enterococcus*.

7L-12

VYUŽITÍ SEPARAČNÍCH METOD V ANALÝZE NÁHRADNÍCH SLADIDEL ROSTLINNÉHO PŮVODU

**MILENA VESPALCOVÁ^a, JANA ZEMANOVÁ^a
a PAVEL ŘIHÁK^b**

^a Ústav chemie potravin a biotechnologií, Fakulta chemická VUT v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno, ^b Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta Palackého univerzity, třída Svobody 26, 771 46 Olomouc
vespalcova@fch.vutbr.cz

Náhradní sladidla jsou skupinou potravinářských aditiv, která jsou v posledních letech intenzivně rozšiřována a využívána. Výrobky se sníženým obsahem energie jsou na trhu potravin stále více žádané. Tato skutečnost je dána prudkým nárůstem obezity populace a s ní souvisejícími civilizačními chorobami.

Náhradní sladidla se dělí na syntetická a přírodní. Prvně jmenovaná (např. sacharin, cyklamát, aspartam) jsou levná, a proto i velmi rozšířená. Při dlouhodobé konzumaci však mohou přinášet určitá zdravotní rizika (např. sacharin) nebo nejsou vhodná pro některé zdravotní rizikové skupiny obyvatelstva (např. aspartam). Náhradní sladidla přírodního původu jsou sloučeniny nejrůznější struktury izolované z rostlin. Zpravidla pro lidské zdraví nenesou rizika žádná. Mezi takové látky patří neohesperidin dihydrochalkon, steviosid a thaumatín, které jsou předmětem našeho výzkumu.

Neohesperidin dihydrochalkon je vyráběn z prekurzorů izolovaných z citrusových slupek. Na českém trhu je tato flavonoidní sloučenina využívána především ke slazení cukrovinek. Ke stanovení neohesperidinu dihydrochalkonu v potravinách pro diabetiky jsme využili kapalinovou chromatografii, kapilární elektroforézu a kapilární izotachoforézu.

Rostlina Stévie cukerná může být úspěšně pěstována i v našich klimatických podmínkách jako balkonová hrnková rostlina. Především v listech obsahuje sladké terpenické sloučeniny steviosid a rebaudiosidy. Potravinářské výrobky slazené extraktem ze stévie se objevily před časem i na našem trhu. Ke stanovení steviosidu v čajích jsme použili kapalinovou chromatografii a kapilární elektroforézu.

Thaumatín je označován za nejsladší známou látku, je asi 3000× sladší než sacharosa. Je to směs několika velmi podobných bílkovinných řetězců s molekulovou hmotností kolem 22 kDa. V ČR je jeho použití do potravin povoleno příslušnou vyhláškou. Dosud byl separován pouze elektroforézou v plošném uspořádání. K jejímu dělení jsme využili některé techniky kapilární elektroforézy.

7L-13

ANALÝZA OBSAHU γ -LINOLENOVÉ KYSELINY V OLEJI PUPALKY DVOULETÉ

HANA ŠTOUDKOVÁ^a, JANA ZEMANOVÁ^a, IRENA ŠVARCOVÁ^a, MIRIAM POPELKOVA^b a BLANKA LOUPANCOVÁ^a

^a Fakulta chemická VUT v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno, ^b Aromatica, v.o.s., Masarykovo nám. 101/3, 664 51 Šlapanice
stoudkova@fch.vutbr.cz

Olj pupalky dvouleté je v posledních letech považován za velmi účinný potravní doplněk. Je vysoce hodnotný především pro svůj obsah tzv. vitamínu F, což je název pro směs nenasycených mastných kyselin. Zvláště cenné jsou pak kyselina linolenová a γ -linolenová. Tyto mastné kyseliny jsou součástí fosfolipidů, které tvoří stavební jednotky buněčných membrán. Z nenasycených mastných kyselin si tělo syntetizuje prostaglandiny, které přímo ovlivňují např. funkci respiračního, srdečně-cévního, gastrointestinálního systému aj. Pupalový olej může kladně působit při řadě onemocnění, např. onemocnění kůže, Diabetes mellitus (cukrovka) a s ním spojené komplikace, poruchy reprodukce, premenstruační syndrom, kardiovaskulární onemocnění, virové infekce, rakovina, alkoholismus.

Oxidace lipidů vyvolává další chemické změny v potravinách, které negativně ovlivňují jejich výživovou, hygienicko-toxikologickou a senzorkou hodnotu. Kvůli vysokému stupni nenasycenosti oleje pupalky dvouleté by měla být věnována pozornost maximalizaci účinků přidávaných antioxidantů.

Tato práce se zabývá obsahem γ -linolenové kyseliny (GLA) v oleji pupalky dvouleté. Byl použit pupalový olej o různém stáří a s přísadkou různých antioxidantů (vitamín E, β -karoten, koenzym Q₁₀). Po provedení hydrolyzy a následné esterifikace byl pomocí plynové chromatografie s FID detektorem zjištěn obsah jednotlivých methylesterů mastných kyselin. Následně bylo porovnáno množství GLA ve vzorcích.

Procentické zastoupení GLA bylo podobné pro všechny sledované vzorky (6–9 %). S prodlužující se dobou skladování se obsah GLA pozvolna snižoval. Největší ztráty vykazoval pupalový olej nestabilizovaný a uchovávaný za laboratorních podmínek. Naopak nejnižší úbytek byl pozorován ve vzorku pupalového oleje se stabilizátorem OriganoxTM. Během doby skladování byl zaznamenán výraznější pokles GLA u vzorků, které obsahovaly přísadku antioxidantů. U vzorků čistého pupalového oleje byly hodnoty GLA srovnatelné. Zatímco způsob uchování vzorku se pro obsah GLA jeví důležitý, použití antioxidantů vliv zřejmě příliš nemá.

LITERATURA

1. Khan M. A., Shahidi F.: Food Chem. 75, 431 (2001).
2. Christie W. W.: Ind. Crops Prod. 10, 73 (1999).
3. Ziboh V. A., Miller C. C., Cho Y.: Am. J. Clin. Nutr. 71, 361S-6S (2000).

7L-14

ČESKÉ PIVO – KAŽDODENNÍ FENOMÉN

TOMÁŠ ZOUFALÝ a PETR BRYNYCH

*Výzkumný ústav pivovarský a sladařský, a.s., Lípová 15, 120 44 Praha 2
zoufaly@beerresearch.cz*

Ve světě se vyrábí škála piv nejrůznějších chuťových profilů, s užším, či širším, spektrem příznivců.

ČR vyznačuje své specifikum tím, že se zde vyrábí pivo charakterizované jako pivo českého typu se svým vyhraněným charakterem, který si získal oblibu po celém světě.

Otázka existence, či neexistence, piva českého typu není na místě a odpověď je předem jasná. Pivo českého typu je odlišné od piv ostatních a lze je charakterizovat jako světlé pivo (nejčastěji ležák) s chmelovou vůní (pocházející z českého chmele), silným řízem a plností, a se silnou intenzitou hořkosti poněkud drsnějšího charakteru. Charakteristickým rysem je zlatavá barva, jiskrná čirost a bohatá a kompaktní pěna. Celková vůně piva českého typu je sladěna v harmonický celek tak, aby žádná vůně nevyunikala. Plnost chuti je dána pocitem hutnosti, kdy se v ústech uplatňují vjemny hmatových receptorů. Pivo českého typu má střední až silnou plnou chuť. Říz je způsoben uvolňováním bublinek kvasného oxidu uhličitého, což vyvolává v ústech příjemně štiplavý pocit s osvěžujícím účinkem a v trávicím traktu vykazuje příznivé digestivní účinky. V hořkosti piva musí být v rovnováze její intenzita (kriterium: hodně – málo) a charakter (kriterium: jemné – drsné). Docílení tohoto spočívá v alchymii chmelení a je jedním z nejceněnějších výrobních tajemství. Správně českým chmelem chmelené pivo vyvolává touhu po dalším napití. Právě tato touha po dalším napití, také zvaná „pitelnost“, je stěžejní vlastností piva českého typu.

Jedním ze základních charakteristických znaků piva českého typu je přítomnost určité části neprokvašeného extraktu v rozmezí 3–8 hm.% (zahraniční piva pod 1 hm.%). Piva českého typu mají vyšší barvu vyjádřenou kvantitativně v průměru 11 j.EBC (zahraniční piva 7 j.EBC). Piva českého typu obsahují více hořkých látek (průměrně 30 j.EBC) oproti pivům ostatním (jejich průměrná hořkost při srovnatelné „stupňovitosti“ ležáku je 23 j.EBC a méně). Dále piva českého typu vykazují o cca 30 % vyšší obsah polyfenolů a vyšší pH.

Vyšší barva, vyšší obsah polyfenolů a obsah neprokvašeného extraktu je důsledkem použitého technologického postupu ve varně pivovaru. Pro výrobu piva českého typu se používá tzv. dekokční postup rmutování. Podstatou dekokčního rmutování je postupné spouštění dílčích rmutů (částí vystřeného díla) z vystírací kádě do rmutovací pánve, kde se zcukřují a povařují. Po vrácení do vystírací kádě s hlavní částí díla se docílí potřebné zvýšení teploty. Podle počtu dílčích rmutů (opakování operací spouštění) rozlišujeme jedno, dvou až tři rmutové postupy. V ČR je nejrozšířenější dvou rmutový dekokční postup, který je vhodný pro výrobu piv českého typu při zpracování středně rozluštěných českých sladů. Dekokční varný postup se projevuje v sensorické charakteristice piva českého typu, zejména v jeho „pitelnosti“, vyšší plnosti chuti, hořkosti a čistotě chuti.

Se zachováním tradiční technologie souvisí význam ma-

lých a středních pivovarů, jenž je pro zachování charakteru piva českého typu dostatečně dobře známý. S udržením prosperity malých a středních pivovarů úzce souvisí zachování pestrosti nabídky českých piv i nenahraditelnosti českého sladu.

Láska k pivovarnickému řemeslu generací českých pivovarníků a sladovníků, spolu s vysokou erudicí sládků a dalších odborníků jsou pevnými základy udržení fenoménu českého piva i pro budoucnost.

Problematika českého piva je předmětem řešení Výzkumného záměru podporovaného MŠMT ČR 6019369701 „Výzkum sladařských a pivovarských surovin a technologií“ a Výzkumného centra pro studium obsahových látek ječmene a chmele 1M6215648902.

LITERATURA

1. Čejka P., v knize: *Pivovarský kalendář 2001*, kap. 5, s. 142. VUPS, Praha 2000.

7L-15

ZPRACOVÁNÍ OVČÍ VLNY NA KERETINOVÝ HYDROLYZÁT

PAVEL MOKREJŠ, SVATOPLUK SUKOP, DAGMAR JANÁČOVÁ, MILAN MLÁDEK, FERDINAND LANGMAIER a KAREL KOLOMAZNÍK

*Ústav inženýrství polymerů, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, nám. TGM 275, 762 72 Zlín
mokrejs@ft.utb.cz*

Keratin se dlouhodobým varem s alkáliemi nebo kyselinami odbourává na rozpustné keratosy. Je značně odolný vůči proteolytickým enzymům, teprve odbouraný keratin (keratosa) lze štěpit pepsinem nebo trypsinem¹.

Experimenty zaměřené na rozklad ovčí vlny byly provedeny v laboratorních podmínkách. Vypracovali jsme metodu 2-fázového rozkladu, při níž v 1. fázi dojde k otevření struktury vlny a ve 2. fázi k enzymovému rozkladu. Před hydrolyzou byla ovčí vlna očištěna, nastříhána a odtučněna.

Vlastní experimenty rozkladu vlny byly provedeny dvouúrovňovými faktorovými pokusy se třemi sledovanými experimentálními proměnnými a se dvěma centrálními experimenty. V 1. fázi byla vlna předzpracována redukčním činidlem (0,1M 2-merkaptóethanol) inkubací při 60 ± 1 °C 24 hodin s krátkým zamícháním po 1 h. Ve 2. fázi byla vlna podrobena enzymové hydrolyze za stanovených podmínek při pH 8,9 až 9,1 s krátkým zamícháním po 30 min. Jako enzymový preparát byla použita proteináza Savinase Ultra 16L (výrobce NovoNordisk, Dánsko).

Experimentální proměnné: doba 2. stupně enzymové hydrolyzy (2–5–8 hodin), teplota 2. stupně enzymové hydrolyzy (50–60–70 °C), dávka enzymu (0,5–1,75–3 %, vztaženo na hmotnost vlny). Po ukončení rozkladu byla zbylá nerozložená vlna a kapalná fáze (keratinový hydrolyzát) oddělena a gravimetricky se zjistilo % nerozložené vlny.

Výsledky byly statisticky vyhodnoceny v programu Statgraphics verze 6.0. Z výsledku statistické významnosti sledovaných experimentálních proměnných vyplývá, že teplota

2. stupně enzymové hydrolyzy je statisticky nejméně významný faktor. Zjistili jsme, že následující podmínky 2. stupně enzymové hydrolyzy vedou k nízkému % zbylé nerozložené vlny (cca 17 %): dávka enzymu = 3 % (vztaženo na hmotnost vlny), doba hydrolyzy = 8 h, teplota = 60 °C.

Předmětem navazujícího výzkumu bude optimalizace podmínek enzymového rozkladu ovčí vlny. Předpokládáme, že keratinový hydrolyzát by mohl najít uplatnění v obalové technice, např. na výrobky domácí chemie, při enkapsulaci aktivních substancí v zemědělství atd.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM 7088352102.

LITERATURA

1. Fahnestock S. R., Steinbüchel A., v knize: *Biopolymers*, kap. 7, s. 185. Wiley-VCH, Weinheim 2003.

7L-16

MOŽNOSTI ZTEKUCENÍ BÍLKOVIN AMARANTOVÉ MOUKY

PAVEL MOKREJŠ, DAGMAR JANÁČOVÁ, KAREL KOLOMAZNÍK, MILAN MLÁDEK a FERDINAND LANGMAIER

*Ústav inženýrství polymerů, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, nám. TGM 275, 762 72 Zlín
mokrejs@ft.utb.cz*

Amarantové zrno má velmi malé rozměry, v průměru 1 až 1,5 mm, malou váhu (1000 semen na g), barvy od bělavé do béžové, hnědavé až černé. Mimořádný zájem o amarant pramení především z vysoké nutriční hodnoty jeho semen i listů. Z dietetického hlediska je významný vysoký podíl kvalitních bílkovin v semenech a dobrá skladba aminokyselin. Unikátní je zastoupení lysinu, leucinu a tryptofanu, které jsou v bílkovinách obilnin zastoupeny v menší míře. Bílkovina amarantu je tím proto velmi podobná bílkovině živočišné^{1,2}.

Experimenty zaměřené na možnosti ztekucení bílkovin amarantové mouky byly provedeny v laboratorních podmínkách. Za tímto účelem byly vybrány následující enzymy (proteiny): Alcalase 2.5 L Type DX, Polarzyme 12 T, Esperease 8.0 L, Everlase 16 L, Type EX, Savinase Ultra 16 L (výrobce NovoNordisk, Dánsko). Jedná se o enzymy produkované submerzní fermentací mikroorganismů *Bacillus*. Cílem experimentů bylo posoudit možnosti oddělení bílkovin a škrobu amarantové mouky.

Vlastní experimenty byly provedeny dvouúrovňovými faktorovými pokusy se dvěma sledovanými experimentálními proměnnými. Experimentální proměnné: doba enzymové hydrolyzy (1–5 h), teplota enzymové hydrolyzy (30–50 °C). Hydrolyza bílkovin byla provedena podle následujícího postupu: Do baňky k 5 g sušiny mouky se přidalo 100 ml předehřáté destilované vody a obsahem se krátce zamíchalo (cca 20 sekund) a přidalo se 0,1 % enzymu (vztaženo na sušinu mouky). Obsah se míchal po předepsanou dobu při předepsané teplotě hřídelovým míchadlem. Poté se směs ihned odstředila při 6000 ot. min⁻¹, 10 min a oddělila se kapalná fáze (hydrolyzát bílkovin) a zbylá tuhá fáze. Z sušiny byla prove-

dena analýza na celkový obsah dusíku (stanovení podle Kjeldahla). Výsledky byly statisticky vyhodnoceny v programu Statgraphics verze 6.0, byla provedena diskuse výsledků, grafické a tabulární zpracování a bilanční kontrola (sušina, dusík).

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM 7088352102.

LITERATURA

1. Jarošová J., v knize: *Pěstování a využití amarantu*, s. 10. Ústav zemědělských a potravinářských informací, Praha 1997.
2. Coimbra S., Daleka R.: *Ann. Bot.* 74, 373 (1994).

7L-17

PROBLEMATIKA OBSAHU A ZACHOVANIA SELÉNU PRI PESTOVANÍ KULTÚRNYCH RASTLÍN

ONDREJ HEGEDÚS^{a,b}, ALŽBETA HEGEDÚSOVÁ^b, KLAUDIA JOMOVÁ^b, ANDREA VARGOVÁ^b a SILVIA ŠIMKOVÁ^b

*^a Regionálny úrad verejného zdravotníctva so sídlom v Nitre, Štefánikova 58, 949 36 Nitra, ^b Fakulta prírodných vied Univerzity Konštantína Filozofa, Tr. A.Hlinku 1, 949 74 Nitra, Slovensko
hegeduso@zoznam.sk, ahegedusova@ukf.sk,
kjomova@ukf.sk, andrea.vargova@post.sk, ssimkova@ukf.sk*

V súčasnosti sa venuje zvýšená pozornosť pôsobeniu voľných kyslíkových radikálov a ich vzťahu k mnohým ochoreniam. Voľné kyslíkové radikály sa podieľajú na procese starnutia organizmu, vzniku a vývoji diabetes, nádorových ochorení, ischémie a pod. Voľné radikály podnecujú zmeny, ktoré vedú k ukladaniu LDL cholesterolu v tepnách, čo má v mnohých prípadoch za následok vznik srdcových chorôb, alebo infarktu. Vysoká hladina antioxidantných vitamínov a minerálnych látok, nielenže zabraňuje zužovaniu tepien, ale pravdepodobne chráni aj DNA (genetický materiál v chromozómech) pred poškodením. Selén sa vyznačuje výraznými antioxidantnými vlastnosťami. Pri nedostatku selénu v potrave organizmus nie je schopný vytvárať ochranné enzýmy, následkom čoho sa kyslíkové radikály a ich škodlivé produkty nekontrolovane rozmnožujú¹. Väčšina pôd obsahuje 0,1–0,2 mg kg⁻¹ celkového Se. Bežná hladina Se v pôdach bohatých na selén je v rozpätí 1–6 mg kg⁻¹. Pôdy na Slovensku sú na selén chudobné, čím je úzko spojená aj jeho hlboký deficit vo výžive obyvateľstva. Na zvýšenie príjmu Se pre ľudský organizmus sa využíva fortifikácia pôd selénom cestou zakomponovania Se do hnojivových prípravkov². Výhodou tohoto spôsobu suplementácie je, že anorganický selén je biopristupný a mení sa na organicky viazaný selén.

Pre zvýšenie obsahu selénu v jedlých častiach vybraných zeleninových druhov sa využila fortifikácia pestovateľského substrátu selénom. Vegetačné pokusy sa robili v modelových podmienkach s pôdnym substrátom so slabozásaditou a kyslou pôdnou reakciou. Selén sa pridával do upraveného pôdneho substrátu vo forme roztoku selénanu sodného (do pôdy s pH 7,3) a seleničitanu sodného (do pôdy s pH 4,8) v concen-

tráciach 1,0; 2,0 a 3,0 mg kg⁻¹ substrátu. Jako pokusný zeleninový druh sa použili hrach záhradný odrody Oskar, kapusta odrody Ramada F1 a rajčiak odrody Pavlína.

V sledovaných vzorkách sa selén stanovoval metódou HG-AAS³, pričom sa sledoval jeho celkový obsah a obsah prítomný v izolovanej proteínovej frakcii⁴.

Prídavok Se (3 mg kg⁻¹ pôdy) vo forme selénanu mal za následok zvýšenie jeho celkového obsahu v zrnách hrachu o viac ako 24 násobok oproti kontrole. Prídavkom seleničitanu do pôd sa zistila nižšia kumulácia Se ako vplyvom selénanu. Toto zistenie je v súlade s literárnymi údajmi, ktoré uvádzajú, že seleničitany sú ťažko prístupné pre rastlinu. V semenách hrachu sa okrem celkového obsahu selénu sledoval aj jeho obsah viazaný v proteínoch. Zistilo sa, že prevažná časť semenami prijímaného selénu je prítomná v proteínovej frakcii. To znamená, že pridávaním anorganickej formy Se možno získať potravinu s vysokým obsahom organicky viazaného Se, ktorý podľa mnohých autorov je dobre využiteľnou formou v ľudskom organizme.

V modelových pokusoch sledovania transferu Se z fortifikovanej pôdy do rastlinných častí sa zistila aj ďalšia skutočnosť. Najvyššia aplikovaná koncentrácia selénanu sodného výrazne brzdí rast hrachu záhradného v zásaditej pôde. Tento fakt sa objavil hneď po vzídení, a oneskorený rast sa pozoroval až do konca vegetačného obdobia. Brzdený rast hrachu sa nepozoroval po aplikácii seleničitanu sodného v kyslej pôde. Nakoľko prídavok 3 mg Se na 1 kg pôdy vo forme selénanu pôsobilo už fytotoxicky, pridané množstvo Se do pôdy by nemalo prekročiť hodnotu 2 mg kg⁻¹ pôdy. Podľa dosiahnutých výsledkov aj v takomto prípade je možné dosahovať cca 10 násobné zvýšenie celkového obsahu v zrnách hrachu záhradného, čo môže mať veľký spoločenský význam.

Vplyv fortifikácie pôdy, podobne ako v prípade hrachu záhradného, aj v prípade hlávkovej kapusty spôsobuje zvýšenie jeho celkového obsahu. Prídavok Se (3 mg kg⁻¹ pôdy) vo

forme selénanu má za následok zvýšenie jeho celkového obsahu v hlávkovej kapuste skoro 30 násobne oproti kontrole, pričom nepôsobilo fytotoxicky, na vývoji rastlín neboli pozorované žiadne zmeny oproti kontrole. V prípade prídavku seleničitanu sa zistilo zvýšenie kumulácie obsahu Se, ale v absolútnej hodnote menej ako v prípade fortifikácie selénanom. Z výsledkov analýz vyplýva, že zvýšenie jeho obsahu je prevažne v proteínovej frakcii. To znamená, že pridávaním anorganickej formy Se aj v tomto prípade sa výrazne zvýši podiel organicky viazaného Se.

Prídavok Se (3 mg kg⁻¹ pôdy) vo forme selenanu má za následok zvýšenie jeho celkového obsahu aj v plodoch rajčiakov. Kumulácia je viac ako 60 násobok oproti kontrole. Prídavok 3 mg Se na 1 kg pôdy vo forme selénanu v prípade pestovania rajčiakov nepôsobil fytotoxicky, na vývoji rastlín neboli pozorované žiadne zmeny oproti kontrole. Po prídavku seleničitanu sa aj v prípade rajčiakov zistila nižšia kumulácia Se. Analýzou proteínovej frakcie rajčiakov sa zistilo, že zvýšenie obsahu Se v priemere na 73 % predstavuje formu viazanú v proteínovej frakcii. To znamená, že pridávaním anorganickej formy Se aj v tomto prípade sa výrazne zvýši podiel organicky viazaného Se.

Z dosiahnutých výsledkov vyplýva, že fortifikácia pôdneho substrátu selénanom je účinnou formou obohatenia sledovaných zelenín selénom.

LITERATÚRA

1. Greger J. L.: *Nutrition Today* 36, 97–99 (2001).
2. Maďarič A., Kadrabová J.: *Bull. Potravn. Výsk.* 1, 11 (1998).
3. Hegedüs O., Hegedüsová A., Gašparík J., Ivičičová A.: *Chem. Listy* 99, 518 (2005).
4. Hegedüs O., Hegedüsová A., Vargová A.: *ChemZi*, 1/1, 111 (2005).

7P-01

TEPLOTNÁ ZÁVISLOST OPTICKÉHO
KYSLÍKOVÉHO SENZORU V BIOFILME

JURAJ BOLYÓ a GABRIELA KUNCOVÁ

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

Množstvo kyslíka sa sleduje v odvetviach priemyslu zameraných na biotechnológiu, potravinárstvo, farmáciu a v poslednej dobe najmä pri sledovaní znečistenia životného prostredia. Kyslík sa najbežnejšie sleduje pomocou kyslíkovej (Clarkovej) elektródy, ďalej sa využívajú rôzne analytické metódy (oxidačno-redukčné) a svoje miesto si vydobyli i optické senzory.

Fluorescencia rady komplexov kovov je zhasaná kyslíkom. Závislosť dynamického zhasania fluorescence komplexu na koncentrácii kyslíka popisuje Sternov-Volmerov vzťah¹:

$$I_{\max}/I_{\min}=1+K_{SV}\cdot p\text{O}_2$$

I_{\max} predstavuje intenzitu fluorescence pri nulovej koncentrácii kyslíka a I_{\min} pri najvyššej koncentrácii kyslíka. Konštanta K_{SV} je závislá najmä na teplote a na matrici.

Ako vrstvu citlivú na kyslík sme používali ruténiový komplex [Tris(1,10-fenantrolín)-ruténium(II)chlorid hydrát] (obr. 1) imobilizovaný v ORMOCER[®], ktorý sme naniesli na kremenné sklo a vytvrdili pod UV.

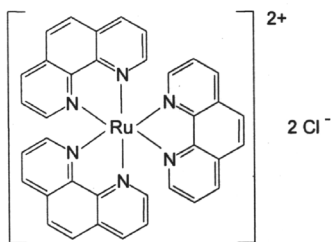
Pomocou kyslíkového senzora sme sa snažili nájsť odpoveď na tieto dve základné otázky: Ako sa mení hodnota fluorescence Ru-komplexu imobilizovaného v ORMOCER[®] v závislosti na teplote? Aká je hladina (množstvo) kyslíka v prietochnej cele, ktorá je používaná na sledovanie viability imobilizovaných buniek?

Intenzitu fluorescence Ru komplexu imobilizovaného v ORMOCER[®] sme merali fluorescenčným spektrofotometrom Hitachi F-4500 pri excitačnej vlnovej dĺžke 460 nm a pri emisnej vlnovej dĺžke 580 nm, v prietochnej kyvete, v škále teplôt 25–30 °C, keď sme prúdiace Horvathovo-Spanglerovo médium naprv prebublávali vzduchom (I_{\min}) a potom prebublávali dusíkom (I_{\max}) (obr. 2).

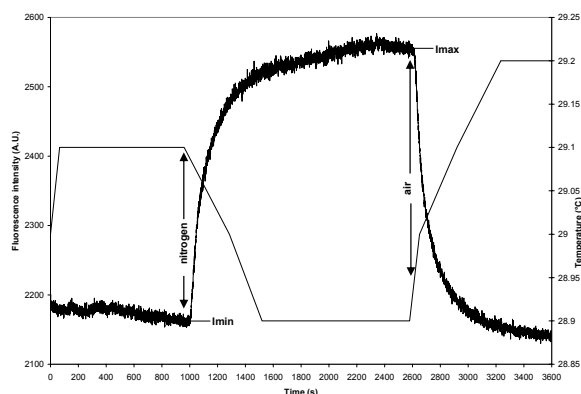
Zistili sme, že závislosť K_{SV} (ppm) Ru komplexu, imobilizovaného do tenkej vrstvy ORMOCER[®], na teplote (°C) je lineárna a jej priebeh vyjadruje rovnica priamky:

$$K_{SV} = 0,0019 \cdot \text{teplota} - 0,0291$$

Ďalšími experimentami sme preukázali, že existuje gradient kyslíka v kremičitej a kremičito-alginátovej vrstve imobilizovaných buniek o hrúbke vrstvy 0,5 mm, aj napriek neustálemu prísunu oksyloženého média.



Obr. 1. Tris(1,10-fenantrolín)-ruténium(II)chlorid hydrát



Obr. 2. Priebeh merania na fluorescenčnom spektrofotometri

Táto práca vznikla za podpory grantu GA ČR 104/05/2637 a 203/06/1244.

LITERATÚRA

1. Lakowicz J. R.: *Principles of Fluorescence Spectroscopy*, kap. 8, s. 237. 1. vyd. Kluwert Academic, New York 1999.
2. Thiele B.: Measuring oxygen in biofilms and biofilm components using fiber optics.
3. <http://www.arp-manchester.org.uk/MATINOES.htm>
4. <http://www.oceanoptics.com>

7P-02

ČESKÉ PIVO OBJEMEM A KVALITOU TRADIČNĚ
DOBÝVÁ SVĚT

PETR BRNYNCH a TOMÁŠ ZOUFALÝ

Výzkumný ústav pivovarský a sladařský, a.s., Lípová 15,
120 44 Praha 2
brnynychy@beerresearch.cz

Výzkumný ústav pivovarský a sladařský, a.s., věnuje kontinuálně pozornost statistickým přehledům výroby piva v ČR.

V roce 2005 byly na území ČR v činnosti 53 aktivní pivovary sdružené v Českém svazu pivovarů a sladoven. V přehledu v sestupné řadě podle výstavu piva pivovar na 1. pozici vystavil v roce 2005 téměř 5 milionů hektolitřů piva a pivovar na 53. pozici ve stejném období cca 150 hektolitřů piva. Dále pivo vyrábí, jsou ve výstavbě, nebo pozastavili výrobu, dalších cca 35 restauračních minipivovarů.

Mezi českými pivy zaujímá výsadní postavení pivo světlé (cca 97 % celkového výstavu). Při členění výstavu podle obalů pro tuzemský trh 51 % piva je v KEG sudech a 44 % v lahvích. Toto členění koresponduje s oblibou pití piva v restauracích a typickou českou kulturou konzumace piva.

Celkový výstav piva v ČR v roce 2005 překročil 19 mil hektolitřů piva a export piva překročil poprvé v historii samo-

statné ČR 3 mil hektolitřů (největší dovozce piva z ČR je SRN). Je zřetelný trend vzestupu výstavu nealko piva.

Největším světovým výrobcem piva je od roku 2002 Čína.

7P-03

IMOBILIZACE BIODEGRADÉRŮ METHYL *tert*-BUTYL ETHERU (MTBE)

**PAVLA GAVLASOVÁ^a, GABRIELA KUNCOVÁ^a,
JURAJ BOLYO^a, JINDŘICH KARBAN^a, MILUŠE
VOŠAHLÍKOVÁ^b a JARMILA PAZLAROVÁ^b**

^a Ústav chemických procesů AV ČR, Rozvojová 135, 165 02 Praha 6-Suchbát, ^b Ústav biochemie a mikrobiologie, Fakulta potravinářské a biochemické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6

Methyl *tert*-butyl ether (MTBE) je často používané oxidační činidlo v benzinech, při únicích pohonných hmot tak dochází ke kontaminaci spodních a povrchových vod, kde MTBE způsobuje již ve velmi nízkých koncentracích hořkou pachuť. Biodegradace je environmentálně šetrným způsobem odstraňování těchto polutantů z životního prostředí, avšak přestože tyto látky nevykazují vysokou akutní toxicitu, jsou mikroorganismy jen velmi pomalu odbourávány. Imobilizace mikroorganismů umožňuje jejich zakonzentrování pro efektivní biodegradaci. Anorganické nosiče vzhledem ke své chemické inertnosti mohou být použity pro přípravu biologických bariér pro odstraňování následků úniků pohonných látek. Výhodou je, že tyto bariéry vzhledem ke své chemické podstatě (SiO₂) nemusí být po skončení své funkce odstraňovány. V této práci bylo bakteriální konsorcium potenciálně degradující MTBE, izolované z vody kontaminované MTBE v Lipsku imobilizováno adsorpcí na povrch Siranových® kuliček a enkapsulováno do předpolymerizovaného TMOS.

Siranové kuličky byly umístěny do náplňové kolony, křemičitý gel s buňkami byl vytvářen do křemičité vrstvy na dně Erlenmayerovy baňky. Imobilizované buňky rostly na methanolu a MTBE jako jediném zdroji uhlíku. Během dlouhodobé tří měsíční kultivace docházelo ke změnám ve složení konsorcia. Bakteriální nárůst byl sledován pomocí několika metod, sledování mikroorganismů podle počtu kolonií na misce (CFU-colony forming units) přepočtené na sorbent, fluorescence tryptofanu a sledováním optické hustoty média. Z počátku byly pozorovány pouze 3 bakteriální druhy, po dvou měsících kultivace se začaly objevovat další kmeny, které začaly původně pozorované bakterie přerůstat. Bakteriální kmeny byly izolovány, bylo stanoveno barvení podle Grama a byla provedena 16S rDNA analýza. Byla provedena imobilizace bakterií do křemičitého gelu¹⁻³, čímž byly bakterie koncentrovány pro degradaci, nicméně vrstvy byly mechanicky málo odolné.

Tato práce byla sponzorována z grantu GA ČR 104/05/2637.

LITERATURA

1. Kuncová G., Podrazký O., Ripp S., Trögl J., Sayler G. S., Demnerová K., Vaňková R.: J. Sol-Gel Sci. Technol. 31, 335 (2004).

2. Vaňková R., Kuncová G., Podrazký O., Gaudinová A., Vaněk T.: Chem. Industry J. 57, 632 (2003).
3. Trögl J., Ripp S., Kuncová G., Sayler G. S., Demnerová K.: Chem. Ind. 57, 596 (2003).

7P-04

ÚČINEK ORGANICKÝCH KYSELIN NA VYBRANÉ MIKROORGANISMY

**LEONA ČECHOVÁ, DANIELA KRAMÁŘOVÁ,
MAGDA JANALÍKOVÁ, EVA KAŠPÁRKOVÁ
a MARTINA LUKEŠOVÁ**

Ústav potravinářského inženýrství, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Nám. TGM 275, 762 72 Zlín janalikova@ft.utb.cz

Onemocnění způsobená mikroorganismy, které kontaminují potraviny, jsou celosvětovým zdravotním problémem. Z tohoto důvodu se hledají stále nové a vhodnější metody, jak snižovat bakteriální kontaminaci potravin. Jednou z možností je využít antibakteriální účinek organických kyselin, který je již dobře známý. Tato studie byla zaměřena na kyselinu kaprylovou; vyskytující se v kozím, kravském a mateřském mléce a mléce kokosových ořechů, a na kyselinu mléčnou; která je běžně používaným prostředkem v potravinářské výrobě.

Byl sledován vliv zmiňovaných organických kyselin a jejich případná nejnižší inhibiční koncentrace na potravinářsky významných, potencionálně patogenních mikroorganismech: *Escherichia coli*, *Salmonella typhimurium*, *Pseudomonas fluorescens*, *Serratia marcescens*, *Staphylococcus aureus*, *Micrococcus luteus*, *Bacillus subtilis* a *Bacillus cereus*. Stanovení bylo provedeno inkubací v bujonech, použité koncentrace kyseliny mléčné a kaprylové byly od 0,1 do 1 % (w/v), u *B. subtilis* a *B. cereus* do 3 % (v/w).

Z celkového pohledu na antibakteriální účinky kyselin nelze říci, že by existoval rozdíl mezi skupinou gramnegativních a grampozitivních bakterií. Na základě výsledků bylo zjištěno, že k úplné inhibici *E. coli* dochází při 0,5% koncentraci kyseliny mléčné. Při stejné koncentraci této kyseliny došlo k absolutní inhibici také u *P. fluorescens* a *S. aureus*. Na *S. typhimurium* a *M. luteus* má kyselina mléčná mikrobicidní účinek při koncentraci 0,25 %, a růst *S. marcescens* byl ukončen již při aplikaci 0,125% kyseliny. Nejcitlivější vůči kyselině kaprylové byly grampozitivní koky. Celková inhibice růstu byla u *S. aureus* zjištěna po aplikaci 0,25% kyseliny kaprylové, stejně jako u *S. typhimurium* a *M. luteus*. U *P. fluorescens* byla tato hodnota rovna 0,5 %, u *E. coli* 0,75 % a u *S. marcescens* 2 %. V případě bacilů nebyla stanovena koncentrace, při které dochází k totální inhibici. Byl stanoven pouze statisticky významný úbytek v počtu bakterií po aplikaci 2 a 3 % (v/w) kyseliny kaprylové a mléčné, v porovnání s kontrolou.

7P-05**APLIKACE ORGANICKÝCH KYSELIN NA POVRCH
CHLAZENÉ DRŮBEŽE A JEJICH VLIV
NA MIKROFLÓRU****MAGDA JANALÍKOVÁ^a, EVA LUKÁŠKOVÁ^a,
ZUZANA MOLATOVÁ^a, VERONIKA ŠTEKLOVÁ^a
a MILAN MAROUNEK^b**

^a Ústav potravinářského inženýrství, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Nám. TGM 275, 762 72 Zlín, ^b Ústav živočišné fyziologie a genetiky Akademie věd České republiky v Praze, Videňská 1083, 142 20 Praha 4 – Krč
janalikova@ft.utb.cz

Spotřeba drůbežího masa u nás podle dosavadních průzkumů neklesá, a proto je velmi důležitá bezpečnost chlazené drůbeže. Od 1. 1. 2006 u nás platí zákaz používání antibiotik jako růstových stimulatorů, což sebou přináší zvýšené riziko kontaminace povrchu drůbeže patogenními mikroorganismy. Z toho důvodu je velmi aktuální testování účinků antimikrobiálních látek pro zajišťování mikrobiální nezávadnosti potravin. Kůže chlazené drůbeže má optimální podmínky pro růst řady proteolytických, lipolytických, ale i patogenních mikroorganismů. Nejvhodnější organické kyseliny s antimikrobiálními účinky, využívané k dekontaminaci masa, jsou kyseliny: mléčná, octová, olejová a citrónová.

Hlavním cílem této studie bylo prokázat antimikrobiální účinek organických kyselin (citrónová, kaprylová) na mikroflóru kůže chlazené drůbeže během 4 dnů skladování (záruční doba). Kyseliny byly použity v různých koncentracích, a to v rozmezí 0,5–10 % (w/v).

S rostoucí koncentrací kyseliny se zvyšovalo ovlivnění bakteriální mikroflóry povrchu chlazené drůbeže. Nejúčinnější redukce počtu aerobních mezofilních a koliformních bakterií byla pozorována při použití 3% a 4% (w/v) kyseliny kaprylové, přesto, že nedošlo k výraznému snížení pH. Rozdíl v úbytku počtu bakterií mezi účinky různých koncentrací kyseliny citrónové (2–10 % w/v) je pravidelný prvních 24 hodin po aplikaci, ale po více než 48 h se účinnost srovnává, což je v korelaci se vzrůstajícím pH vzorků. Vliv obou kyselin na kvasinky a plísně byl rozdílný. Pro kyselinu kaprylovou, na rozdíl od kyseliny citrónové, platilo, že úbytek kvasinek byl pozorovatelný až po 48 h skladování, a po 72 h byl nejnižší počet kvasinek zaznamenán na povrchu kuřat ošetřených 1%, 2% a 3% (w/v) kyselinou kaprylovou. Přesto, že pH bylo optimální pro růst kvasinek, došlo po aplikaci 4% a 6% (w/v) kyseliny citrónové ke konstantnímu desetinasobnému úbytku kvasinek oproti kontrole v průběhu všech 4 dnů skladování.

LITERATURA

1. Hinton A. Jr, Ingram K. D.: J. Food Prot. 63, 1282 (2000).
2. Pipek P., Houška M., Hoke K., Jeleníková J., Kýhos K., Šikulová M.: J. Food Engineer. 74, 224 (2006).
3. Sakhare P. Z., Sachindra N. M., Yashoda K. P., Narasimha Rao D.: Food Control 10, 189 (1999).
4. Tamblin K. C., Conner D. E.: Food Microbiol. 14, 477 (1997).

7P-06**VLIV MONOACYLGLYCEROLŮ NA INHIBICI
NEŽÁDOUCÍ MIKROFLÓRY POTRAVIN****LEONA ČECHOVÁ, MAGDA JANALÍKOVÁ, LUCIE
KULEDOVÁ, MICHAELA MIKULCOVÁ a JIŘÍ
KREJČÍ**

Ústav potravinářského inženýrství, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Nám. TGM 275, 762 72 Zlín
janalikova@ft.utb.cz

V posledních letech se zvýšil zájem o studium monoacylglycerolů (MAG) z hlediska přípravy, vlastností a aplikací. Rozsáhlé je zejména využití v průmyslu potravinářském, kosmetickém a farmaceutickém. Roste i jejich použití v průmyslu plastikářském a textilním. Největším producentem a také spotřebitelem MAG je v současné době potravinářský průmysl. MAG patří mezi nejužívanější potravinářské emulgátory, a to zejména díky jejich schopnostem snižovat mezipovrchové napětí na rozhraní dvou nemísitelných kapalin o značně rozdílné polaritě.

MAG byly připraveny adicí příslušných mastných kyselin na glycidol za katalýzy Chromium (III) acetať hydroxidu. Poté byly MAG C_{8:0}, C_{12:0}, C_{16:0} a C_{18:0} v koncentracích 0,1% a 0,25% (w/w) aplikovány na strojně oddělené maso (SOM). Maso bylo skladováno 24 h při pokojové a chladničkové teplotě. V určitých časových intervalech byl vzorek masa odebrán a byl proveden mikrobiologický rozbor SOM. Kromě SOM byly MAG použity také za účelem sledování inhibice růstu vybraných plísní na pečivu. Na pečivo byly aplikovány 1% vodné roztoky MAG C_{8:0} a C_{10:0}, a to před pečením, po pečení a před i po pečení. Poté byl sledován růst plísní přirozeně kontaminujících pečivo a plísní, které byly na toto pečivo zaočkovány.

U vepřového SOM skladovaného při pokojové teplotě docházelo k menšímu nárůstu mikroorganismů než u drůbežího SOM. Počty mikroorganismů na vepřovém a drůbežím SOM skladovaném při chladničkové teplotě byly srovnatelné. Mikrobiologický rozbor dále prokázal, že SOM je závislé na době zpracování. Již po 6 hodinách byl zaznamenán větší nárůst mikroorganismů. Zvolené monoacylglyceroly nemají výraznější inhibiční vliv na růst aerobních a fakultativně anaerobních bakterií, včetně *E. coli*, na strojně odděleném mase. Účinky MAG na pečivo byly znatelné u všech aplikací. Nejmenší inhibiční účinek v růstu byl zaznamenán u aplikace MAG před i po pečení, kdy růst plísní nebyl tak hojný jako u kontrolní série, avšak ke striktní inhibici růstu nedošlo. Výsledky růstu plísní u chlebů, kde aplikace MAG byla potěrem příslušným roztokem před pečením jsou srovnatelné jako u předchozí aplikace. Série vzorků potíraná roztoky MAG po pečení vykazovala největší inhibiční aktivitu vůči očkovaným plísním i plísním, které by běžně tyto vzorky kontaminovaly. U této aplikace se vůči všem plísním jevil účinnější potěr chlebů roztokem MAG C_{8:0}, kdy byl potlačen růst všech očkovaných plísní.

7P-07

DETERMINATION OF ASCORBIC ACID BY HPLC WITH ELECTROCHEMICAL DETECTION**SOŇA ŠKROVÁNKOVÁ, DANIELA KRAMÁŘOVÁ, KAMILA ŠIMÁNKOVÁ, and IGNÁC HOZA***Dept. of Food Engineering, Faculty of Technology, Tomas Bata University, 275 Nám. T.G.Masaryka, 762 72 Zlín skrovankova@ft.utb.cz*

Vitamin C is considered to be the most important vitamin for human nutrition which could be best supplied by fruits and vegetables. The main biologically active form of vitamin C is L-ascorbic acid (AA). As a effective antioxidant, AA has the capacity to eliminate free toxic radicals and other reactive oxygen species, formed in cell metabolism, which are associated with several forms of tissue damage and disease and also with the process of ageing.

Keeping in view its importance, the analysis of food products containing this vitamin assumes great significance. Several analytical methods have been reported. The preferred choice for AA determination is liquid chromatography (HPLC) with UV-visible or electrochemical detection^{3,4}. HPLC is quite popular because avoids the problems of non-specific interference and offers the advantages of low detection limits with high selectivity.

For accurate dietary exposure determination we determined ascorbic acid in fruits and vegetables, commonly consumed in spring in the Czech Republic, using HPLC with electrochemical detection (ECD). The Coulochem III electrochemical detector was designed for the detection of electroactive species in the eluent. For these reasons, new quick reliable method for determination ascorbic acid was found. Because of very simple matrices such as tropical fruits, vitamin C could be extracted directly by mobile phase during the time of 15 minutes at laboratory temperature. Obviously, the samples were store in such a way to be kept from sunlight.

Chromatographic conditions for EC-detection of vitamin C were specific:

Sample preparation: filtration (0,45 µm, PTFE)

Injection volume: 20 µl

Mobile phase: filtration (0,20 µm), (isocratic elution)

CH₄:H₃PO₄:H₂O = 99:0,5:0,5

Column: Supelcosil LC-8, 5 µm, [4,6 × 150 mm]

Flow rate: 1,1 ml min⁻¹

Temperature of column: 30 °C

Detector: ECD Coulochem III, type of cells 5010A

We determined that grapefruit contained 9,17 ± 0,191 mg 100g⁻¹, in orange 6,62 ± 0,415 mg 100g⁻¹, in lemon 12,38 ± 0,198 mg 100g⁻¹ and in strawberry 8,62 ± 0,310 mg 100g⁻¹.

REFERENCES

1. Hernández Y., Lobo M. G., González M.: Food Chem. 96, 654 (2006).
2. Arrigoni O., De Tullio M. C.: Biochim. Biophys. Acta 1569, 1 (2002).
3. Arya P., Mahajan M., Jain P.: Anal. Chim. Acta 417, 1 (2000).
4. Iwase H., Ono I.: J. Agric. Food Chem., 45, 4664 (1997).

7P-08

DETERMINATION OF RIBOFLAVIN USING HPLC WITH UV DETECTION IN MEAT PRODUCTS**DANIELA KRAMÁŘOVÁ, SOŇA ŠKROVÁNKOVÁ, MAGDA HÁBOVÁ, and IGNÁC HOZA***Dept. of Food Engineering, Faculty of Technology, Tomas Bata University in Zlín, Nám. 275T.G.Masaryka, 762 72 Zlín kramarova@ft.utb.cz*

Vitamin B₂ (riboflavin) is a water-soluble essential vitamin needed in metabolism of amino acids and fats which activate vitamin B₆ and folic acid, and helps convert carbohydrates into the fuel the body runs on – ATP. This nutrient is also to use in the health of hair, nails and skin. Under some conditions, vitamin B₂ can act as an antioxidant. In foodstuffs, the vitamin B₂ may be presented in free and phosphorylated forms, tightly bound but non-covalently to proteins.

The extraction of the vitamin B₂ usually consists of an acid hydrolysis (hydrochloric acid treatment) and an enzymatic treatment which are essential to denature the proteins and to release the vitamins from their association with the proteins. For determination of this vitamin several methods have been reported (microbiological assay, electrochemical method, HPLC). The most widely used method in the determination of vitamin B₂ is HPLC with fluorometric, turbidimetric or UV detection.

For exposure determination in the Czech diet we determined vitamin B₂ in commonly consumed meat and entrails (e.g. pork, beef, liver) using HPLC with UV detection.

By reason of complicated matrices based on protein-polysaccharides, the first step was isolation of vitamin B₂ by extraction with 0,1M HCl and 80 % (w/v) HCOOH at 95 °C. Precipitated proteins and glycogen from livers were out using filtration crucible. All samples were kept from light because of photostability of vitamin B₂, light-resistant container was prepared.

Chromatographic conditions for UV-detection of vitamin B₂ were following:

Sample preparation: filtration (0,45 µm, PTFE)

Column: Supelcosil LC-8, 5 µm, [4,6 × 150 mm]

Mobile phase: methanol/sodium acetate (gradient techniques)

Flow rate: 0,8 ml min⁻¹

Temperature of column: 30 °C

Injection volume: 20 µl

Detector: UV-DAD, detection wavelength: 270 nm.

There was found that amount of riboflavin in joint of pork is 14,02 ± 0,312 mg 100g⁻¹, in beef shoulder is 21,81 ± 0,300 mg 100g⁻¹ and in pork liver is 29,24 ± 0,342 mg 100g⁻¹.

REFERENCES

1. Ames B. N., Shigenaga M. K., Hagen T. M.: Proc. Natl. Acad. Sci. 90, 7915 (1993).
2. Ndaw S., Bergaentzlé M., Aoudé-Werner D., Hasselmann C.: Food Chem. 71, 129 (2000).
3. van den Berg H., van Schaik F., Finglas P. M., de Froidmont-Görtz I.: Food Chem. 57, 101 (1996).

7P-09

DETERMINATION OF EXTRANEOUSLY COMPOUNDS IN THE LACTIC ACID FERMENTED VEGETABLE JUICES BY CAPILLARY ISOTACHOPHORESIS**ZLATICA KOHAJDOVÁ, JOLANA KAROVIČOVÁ, MÁRIA GREIFOVÁ, GABRIEL GREIF, and JARMILA LEHKOŽIVOVÁ***Institute of Biotechnology and Food Science, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic
zlatica.kohajdova@stuba.sk*

The lactic acid fermentation of vegetable products, applied as a preservation method for the production of finished and half-finished products, is again being ranked as an important technology and it is being further investigated because of the growing amount of raw materials processed in this way in the food industry¹.

Biogenic amines, the so-called natural amines with physiological significance, belong to this group of substances. Their amounts are usually increased during controlled or spontaneous microbial fermentation of food or in the course of food spoilage².

This work describes using of ITP for determination of biogenic amines in the lactic acid fermented vegetable juices. The biogenic amines were determined in the cabbage, cabbage-carrot (2:1, 3:1, v/v), cabbage-celery (3:1, v/v), cabbage-carrot-celery (3:2:1, v/v/v), cabbage-red beet (2:1, v/v) fermented by *Lactobacillus plantarum* 92H (of concentration 10⁶ CFU ml⁻¹) during 144 h or 150 h at 22–24 °C and in the cabbage, cabbage-carrot (1:1, 2:1, v/v) juices that were spontaneously fermented or fermented by *L. plantarum* 92H (of concentration 10⁶ CFU ml⁻¹) or mixture culture *L. plantarum* 92H and *S. cerevisiae* C11-3 (of concentration 10⁶ CFU ml⁻¹ and 10³ CFU ml⁻¹) during 216 h at 21 °C.

Isotachophoretic measurements were realised on the isotachophoretic analyser ZKI 01 with conductivity detector. For identification and determination of biogenic amines (histamine, cadaverine, tyramine, putrescine) the electrolytic system of following composition was applied: LE: 10⁻² mol l⁻¹ KOH, valine, pH 9,9 and TE: 2 · 10⁻² mol l⁻¹ TRIS, HCl, pH 8,3. The samples were analysed at the driving current of 150 µA. The biogenic amines were present in cabbage-celery (3:1), cabbage-carrot-celery (3:2:1), cabbage-beetroot (2:1), spontaneously fermented cabbage juice, cabbage and cabbage-carrot juices (1:1, 2:1) fermented by mixture started culture (from 2,11 to 202,78 mg l⁻¹).

This work was supported by the Slovak Grant Agency for Science VEGA (Grant No.1/3546/06).

REFERENCES

1. Karovičová J., Kohajdová Z., Šimko P., Lukáčová D.: *Nahrung/ Food* 47, 188 (2003).
2. Karovičová J., Kohajdová Z., Hybenová E.: *Chem. Pap.* 56, 267 (2002).

7P-10

PHYSICAL-CHEMICAL PARAMETERS OF SOME COMMERCIAL TOMATO KETCHUPS**JARMILA LEHKOŽIVOVÁ, JOLANA KAROVIČOVÁ, and ZLATICA KOHAJDOVÁ***Institute of Biotechnology and Food Science, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic
jarmila.lehkozivova@stuba.sk*

The aim of this study was determination of the selected physical-chemical parameters in ketchup samples and their comparison with the AIJN and the Decree of Slovak Republic. In the samples of ketchup were analysed following parameters: pH, content of soluble solids (refraction), formol number (titration), glucose, fructose, saccharose (HPLC), hydroxy-methylfurfural (HPLC), citric acid, ascorbic acid (CITP) and biogenic amines (CITP). It contains not less than 7 or 10 % of tomato solids in total refractive solid content, which is less than or more over 30 °Brix for tomato ketchup and tomato ketchup labelled Prima, Extra, Special, respectively¹.

The pH values of analysed samples ranged from 3,6 to 4,3. The content of soluble solids was from 14,6 to 32,7 °Brix. Formol number ranged from 24 to 46,5 ml 0,1 M NaOH in 100 ml of the sample.

Isotachophoretic measurements were realised on the isotachophoretic analyser ZKI 01 with conductivity detector. The composition of electrolytic system for identification and determination of citric and ascorbic acid is presented in literature². The content of citric acid was in the range from 29,72 to 94,91 mg kg⁻¹. The ascorbic acid was determined only in 2 samples (101,57 and 167,32 mg kg⁻¹). For identification and determination of biogenic amines (histamine, cadaverine, tyramine, putrescine) the electrolytic system was applied according to authors².

The HPLC analysis of saccharides was realised according to the Watrex Chromatographic applications. The samples of ketchup contained 2,09–12,06 % of glucose, 1,51–9,06 % of fructose and 0,68–15,55 % of saccharose.

This work was supported by VEGA (Grant No.1/3546/06) and APVT č. 20-002904.

REFERENCES

1. Decree of Slovak Republic No. 787/1/2001-100 relating to processed fruit and processed vegetable (2001).
2. Karovičová J., Kohajdová Z., Šimko P., Lukáčová D.: *Nahrung/Food* 47, 188 (2003).
3. Watrex Praha, s.r.o.: *Chromatographic applications – Alcohols and sugars*. http://www.watrex.cz/en-download/applisty/Polymer_IEX_EtOH.pdf, received 12.2.2006.

7P-11

**ZMĚNY ORGANOLEPTICKÝCH VLASTNOSTÍ
STERILOVANÝCH TAVENÝCH SÝRŮ
V ZÁVISLOSTI NA DOBĚ A ZPŮSOBU SKLADOVÁNÍ****BLANKA LOUPANCOVÁ^a, EVA VÍTOVÁ^a, HANA
ŠTOUDKOVÁ^a, FRANTIŠEK BUŇKA^b a JANA
ZEMANOVÁ^a**^a *Fakulta chemická VUT v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno,*^b *Fakulta technologická UTB ve Zlíně, Nám. T.G.Masaryka
588, 760 01 Zlín**blankaloupancova@seznam.cz*

Ze spotřebitelského hlediska je důležitá hlavně trvanlivost a organoleptické vlastnosti výrobků. Naše práce se zabývala změnami organoleptických vlastností tavených sýrů, v závislosti na době a teplotě skladování. Vzhledem k tomu, že se jedná o nekyselý potravinu, jedinou možností, jak prodloužit dobu použitelnosti, je použití termosterilace.

Tavené sýry byly vyrobeny tavením směsi přírodních sýrů, másla, vody a tavicích solí. Po pasteraci byla následně část sýrů ošetřena sterilací při teplotě 117 °C s výdrží 20 sekund. Doba do dosažení sterilizační teploty byla 10 minut a doba zchlazení na cca 25 °C činila 20–25 minut.

Takto vyrobené tavené sýry byly na základě senzorickeho hodnocení porovnány se stejnou šarží sýrů neošetřených sterilizačním zásahem. Sýry byly dále rozděleny do tří skupin a po dobu trvanlivosti uchovávány za různých podmínek. První teplota byla chladirenská (8 ± 2 °C), druhá normální (23 ± 2 °C) a poslední zátěžová (40 ± 2 °C). Z takto skladovaných sýrů byly cca po dvou a čtyřech měsících odebrány vzorky, které byly opět podrobeny senzorickeému hodnocení.

Senzorický dotazník se skládal ze stupnicové a párové porovnávací zkoušky. Sedmibodový stupnicový test obsahoval základní charakteristiky: tedy vzhled, barvu, lesk, konzistenci, chuť, vůni a celkové hodnocení. V párové zkoušce byly porovnávány dvojice sýrů, z nichž první byl vždy nesterilovaný a druhý sterilovaný. Hodnotitelé vyslovovali své preference z hlediska barvy, konzistence a chuti.

Nesterilovaný sýr byl ve všech vlastnostech hodnocen lépe, než sýr sterilovaný. Sýry skladované při vyšší teplotě byly hodnoceny hůře, a to ve všech charakteristikách. Lze tedy usuzovat, že sterilizační záhřev a také stoupající teplota skladování způsobuje zhoršení senzorickeé jakosti. Dále můžeme předpokládat snižování senzorickeé kvality se vzrůstající dobou skladování.

LITERATURA

1. Pokorný J., Valentová H., Panovská Z.: *Senzorická analýza potravin*, s. 96. VŠCHT Praha, Praha 1999.
2. Ingr I.: *Základy konzervace potravin*, s. 150. MZLU Brno, Brno 2005.
3. Carić M., Kaláb M., v knize: *Cheese: Chemistry Physics and Mikrobiology* p. 467–505. Elsevier Applied Science, London 1997.

7P-12

**SHIITAKE (*Lentinus edodes*) JAKO ZDROJ
BIOLOGICKY A SENZORICKY AKTIVNÍCH LÁTEK****FRANTIŠEK PUDIL, ROMAN UVÍRA a VÁCLAV
JANDA***Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5,
166 28 Praha 6**roman.uvira@vscht.cz, pudilf@vscht.cz, jandav@vscht.cz*

Shiitake (*Lentinus edodes* někdy též *Lentinula*, v překladu houba z dubu, česky Houževnatec jedlý) je dřevokazná houba pěstovaná v Japonsku a Číně přes dva tisíce let. V současnosti je to po žampionech druhá nejpěstovanější houba. Je prokázáno, že syrová houba produkuje formaldehyd v množstvích stovek mg na kilogram plodnic. Při tepelných úpravách formaldehyd mizí a reaguje s cysteinem za vzniku kyseliny 4-thiazolidinkarboxylové, u které byla prokázána schopnost odstraňovat dusitany z organismu prostřednictvím vlastní nitrosace. Tato látka se intenzivně studuje a využívá. Může být příčinou protinádorových aktivit houby. Při tepelných úpravách vznikají mimo jiné těkavé sírné látky (dithiolan, trithiolan, pentathiepan – lentionin a další), které pravděpodobně působí antimikrobiálně. (Extrakty z houby se medicínsky využívají proti akné). Kromě toho se významně uplatňují chuťově. Chuť připomínají masový vývar. Tyto a další sírné látky vznikají i enzymově při narušení tkáně z netěkavých prekurzorů sírných látek podobně jako v česneku nebo cibuli. Další skupina biologických účinků shiitake souvisí s netěkavými látkami sacharidické povahy (glukany), které ovlivňují imunitní systém. V této souvislosti jsou studovány lentinany.

Těkavé látky z čerstvých, rozdrčených, usušených nebo vařených plodnic hub shiitake vypěstovaných podle návodu z pěstebních bloků dodaných firmou Damycel (Počernická 473, Praha, ČR) byly analyzovány metodou GC-MS s SPME dávkováním. Byly sledovány změny ve složení těkavých látek izolovaných metodou SPME a extrakční destilací při varu ve vodném prostředí.

Čerstvé plodnice mají sice příjemnou houbovou vůni, ale obsahují jen velmi malé množství těkavých látek. Charakter aroma je zřejmě určován hlavně obsahem 1-okten-3-olu a dalších C8 složek 1-okten-3-onu a 3-oktanolu. Při narušení tkáně dochází díky působení enzymů k intenzivnímu uvolňování těkavých látek zejména s obsahem jednoho nebo více atomů síry. Celá řada stejných produktů vzniká i při varu nebo sušení plodnic. V tepelně upravených plodnicích se vyskytují další terpenické a fenolické látky.

Pokrmu připravené z dnes již běžné na trhu dostupných čerstvých nebo sušených plodnic houby shiitake mohou být vhodným zpestřením našeho jídelníčku ve všech ročních obdobích. Vzhledem k výrazným změnám ve složení během kulinárních úprav může být konzumace syrových plodnic (přestože je v Asii běžná) z hygienického hlediska diskutabilní.

LITERATURA

1. http://www.meridianmedical.org/about_us/raymond_articles_01.htm
2. <http://www.shopware.cz/shiitake/>

7P-13

**PŘÍPRAVA PROTEINOVÝCH HYDROLYZÁTŮ
A STANOVENÍ JEJICH MOLEKULOVÉ HMOTNOSTI****SVATOPLUK SUKOP, PAVEL MOKREJŠ a KAREL
KOLOMAZNIK***Ústav chemie, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati
ve Zlíně, nám. TGM 275, 762 72 Zlín
sukop@ft.utb.cz*

Jeden ze způsobů využití tuhých odpadů koželužské výroby je příprava proteinových hydrolyzátů. Tyto odpady mohou být jak nečiněné, tak činěné. Rovněž tak některé odpady potravinářského (masného) průmyslu lze zpracovat stejným způsobem. Vyvinuté postupy pro zpracování těchto tuhých odpadů jsou založeny na jejich hydrolytickém rozkladu zásadami, kyselinami nebo enzymy¹.

Cílem práce byla příprava proteinových hydrolyzátů a stanovení jejich molekulové hmotnosti, kterou pro některé aplikace hydrolyzátů je nutné znát. Proteinové hydrolyzáty byly připraveny z chromočiněných postružin (TAREX, s.r.o. Otrokovice) a odpadů z výroby jedlých umělých střev (Cutizin) dvoustupňovou enzymovou hydrolyzou resp. kyselou hydrolyzou pomocí H₂SO₄. Molekulová hmotnost byla u 8 připravených hydrolyzátů stanovena jak metodou osmotrickou, tak gelovou elektroforézou (SDS-PAGE)².

Bylo zjištěno, že připravené hydrolyzáty vykazují velmi širokou distribuci molekulových hmotností (M_w), nelze však připravit pomocí běžných enzymových přípravků hydrolyzáty s molekulovou hmotností nižší než 1 kDa, které jsou nezbytné pro přípravu tenzidů lameponového typu. Chemická modifikace vlastností hydrolyzátů je komplikována širokou distribucí molekulových hmotností jejich frakcí. Proto je dáována přednost využití hydrolyzátů jako ekologické dusíkatoorganické hnojivo, popř. jako komponent krmivových směsí pro hospodářská zvířata. Dále mohou být užity v adhezivech, kosmetice, fotografických preparátech a syntéze roubovaných kopolymerů. Pro výrobu tenzidů lameponového typu je však dodatečná kyselá hydrolyza hydrolyzátů nevyhnutelná.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM 7088352102.

LITERATURA

1. Heideman E., v knize: *Fundamentals of Leather manufacturing*, kap. 4, s. 139. Eduard Roether KG, Darmstadt 1993.
2. Hames B. D., Rickwood D., v knize: *Gel Electrophoresis of Proteins*, kap. 1, s. 16. Oxford University Press, Oxford 1990.

7P-14

**SENSORY ACTIVE COMPOUNDS – IMPROVEMENT
OF HERBAL TEA FLAVOUR****SOŇA ŠKROVÁNKOVÁ and DANIELA KRAMÁŘOVÁ***Dept. Food Engineering, Faculty of Technology, University of
T. Baťa, nám. T.G.Masaryka 275, 762 72 Zlín
skrovankova@ft.utb.cz*

The sensory active compounds (SAC) are substances (e.g. with sweet, sour, salty taste) which can vary original flavour. As there is an increasing trend in the requirement of healthy food consumption we should try to improve their flavour¹. Foods with the addition of herbs are beneficial due to herbs potential health effects, antioxidant and antimicrobial properties. Despite of large use of herbs in foods, the major and most popular way of their application is in form of herbal teas². The flavour (meaning the taste and aroma) of herbal teas is a fundamental attribute for consumer, so sensory analysis is legitimate. As bitter and astringent tastes (belonging to basic tastes)³ considerably affect herbal tea flavour, we evaluated teas with addition of SAC such as sucrose and honey (sweet taste) to decrease adverse taste perception.

The sensory analysis of herbal teas (decoctions) was performed according to ISO standard 3103 (ref.⁴). A profile analysis (non-structured scale) was used for flavour evaluation (taste, palatability) and to rate the bitterness and astringency of seven bitterer herbal teas of Slovak and Czech herb production – agrimony (*Agrimonia eupatoria*), blessed thistle (*Cnicus benedictus*), elecampane (*Inula helenium*), lavender (*Lavandula officinalis*), mugwort (*Artemisia vulgaris*), sage (*Salvia officinalis*) and sweet flag (*Acorus calamus*).

The mugwort tea was assessed as the bitterest (98 % of intensity scale) followed by blessed thistle, sweet flag and elecampane teas (91–87 %). The above four teas were also assessed as the most astringent – 93–79 % (mugwort, sweet flag, elecampane, blessed thistle). Sucrose or honey addition resulted in a masking effect on both assessed tastes for all teas. For bitterness it was evident especially in case of elecampane (decreasing with sucrose by 72 %, with honey by 62 %) and lavender (by 48 % and 57 %) teas. Astringency was mostly reduced in elecampane tea with SAC by 62 and 63 % followed by sweet flag tea (by 46 % and 58 %). These effects consequently resulted in increasing of the palatability of all herbal teas with SAC addition (rising: by 5–37 % with sucrose – mostly sage tea and by 10–39 % with honey – mostly elecampane tea).

REFERENCES

1. Stein L. J., Nagai H., Nakagawa M., Beauchamp G. K.: *Appetite* 40, 119 (2003).
2. Elvin-Lewis M.: *J. Ethnopharm.* 75, 141 (2001).
3. Drewnowski A., Gomez-Carneros C.: *Am. J. Clin. Nutr.* 72, 1424 (2000).
4. ČSN ISO 3103. Čaj – Příprava nálevu pro senzoričké hodnocení. (1997).

7P-15**VLIV OBSAHU OLEJE NA REOLOGICKÉ A TEXTURNÍ VLASTNOSTI MAJONÉZ****PETR ŠTERN^a, JAN POKORNÝ^b, KAMILA MÍKOVÁ^b
a ZDENKA PANOVSÁ^b**^a Ústav pro hydrodynamiku AV ČR, 166 12 Praha 6, ^b Ústav chemie a analýzy potravin, Vysoká škola chemicko-technologická, 166 28 Praha 6

Majonézy patří k běžným složkám evropské stravy. Pro stanovení přijatelnosti potravinářských výrobků spotřebitelem jsou důležité hlavně senziorické a texturní vlastnosti, ale v případě majonéz je pro technologii výroby i aplikace významné rovněž stanovení reologických parametrů. Tradiční majonézy obsahovaly nejméně 80 % oleje, ale dnes je dávana přednost majonézám s nižším obsahem oleje.

Zkoumali jsme proto majonézy s obsahem 66–82 % oleje, vyrobené na poloprovozním zařízení Stephan UMC5 Electronic. Vlastnosti byly měřeny při 10 a 25°C, reologické parametry na reoviskozimetru Rotovisco RT 10 (Thermo Haake), senziorická textura za podmínek, stanovených mezinárodními normami ISO. O viskoelasticitě výrobků bylo referováno dříve^{1,2}, v tomto sdělení jsou podány výsledky vztahů mezi reologickými vlastnostmi a texturou.

Výsledky reologických stanovení závisely na teplotě, ale při senziorické analýze nebyl vliv teploty průkazný. Závislosti mezi reologickými a senziorickými parametry byly lineární nebo málo odchylné od linearit s vysokými hodnotami korelačních koeficientů. Senziorická viskozita po vložení do úst korelovala s mezi toku, závislost mezi senziorickou přijatelností textury a mezi toku byla exponenciální. Rovněž mezi texturou vnímanou při manipulaci se vzorkem na talířku a po vložení do úst byla funkční závislost exponenciální.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA AV ČR IAA2060404.

LITERATURA

- Štern P., Valentová H., Pokorný J., Panovská Z.: Relations between the rheological parameters and the textural characteristics of mayonnaise samples containing different levels of oil phase. Proc. of the 6th European Conference on Rheology, Erlangen, 2002, SRN, s.597. Erlangen 2002.
- Štern P., Míková K., Pokorný J., Valentová H.: Vliv obsahu oleje na viskoelasticitu majonézy. Sborník XXXIV. Symp. o nových směrech výroby a hodnocení potravin, Skalský Dvůr, 2003, s.15. Skalský Dvůr 2003.

7P-16**MULTIMEDIÁLNÍ OBRAZOVÉ DATABÁZE****ROMAN UVÍRA a FRANTIŠEK PUDIL**Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
roman.uvira@vscht.cz, pudilf@vscht.cz

Využití multimediálních objektů (obrazové dokumenta-

ce, animací a videoklipů) v odborných potravinářských databázích přináší mnoho nových aspektů pro posuzování kvality potravin a potravinářských materiálů. Digitální forma dat umožňuje spojení s databázovými technologiemi, pomocí kterých lze pak takové materiály vystavovat na webových stránkách a využívat je on-line kdekoliv prostřednictvím Internetu.

Obrazová dokumentace je cenná pro uchování charakteristických znaků vzácných nebo neudržných potravinářských materiálů, např. čerstvých hub, koření, aj. a pro mnoho jiných podobných komodit.

Dosud nepříliš rozšířenou formou prezentování dat jsou animace. Pomocí animací lze interpretovat nejrůznější dynamické děje, jako např. vícestupňové chemické reakce, složitější schémata nebo z reálných obrázků sestavený názorný přehled změn. Vysokou informační obsažnost mohou mít animace, v nichž se kombinují reálné obrázky z několika různých zdrojů, např. makro a mikro snímky nebo snímky z elektronového mikroskopu s chemickými strukturami, případně textovými informacemi, ať už ve statické nebo dynamické podobě.

Přestože natočení filmu je záležitostí profesionálních filmářských týmů, je možno i s využitím amatérské nebo poloprofesionální digitální videotekniky zhotovit na specializovaných vědeckých pracovištích unikátní videoklipy z probíhajících procesů, které mohou být dále využity pro dokumentační, vědecké i pedagogické účely.

V příspěvku jsou prezentovány příklady statických i dynamických multimediálních objektů z oblasti potravinářství vytvořené s využitím softwarového balíku Macromedia Studio 8 (Adobe Systems, USA).

Na příkladu vznikající databáze potravinářských materiálů je vidět snadný přístup ke komplexním datům z různých oblastí, a to jak pro vzdělávací účely, tak i pro přímé posuzování kvalitativních znaků.

7P-17**TĚKAVÉ LÁTKY HADOVKY SMRDUTÉ (Phallus impudicus)****FRANTIŠEK PUDIL, ROMAN UVÍRA a VÁCLAV JANDA**Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
pudilf@vscht.cz, roman.uvira@vscht.cz, jandav@vscht.cz

Hadovka smrdutá (*Phallus impudicus*), starším jménem jelenka, je dobře známá houba. Ve zralém stavu se vyznačuje intenzivním nepříjemným pachem připomínajícím hnijící maso, šířícím se po lese stovky metrů od naleziště. Přestože není považována za jedovatou, je nepoživatelná. V raných stádiích vývoje, kdy se plodnice vyskytuje pod zemí v podobě uzavřeného vajíčka, je některými houbaři vyhledávána jako lahůdka, která se nejčastěji konzumuje v podobě pikantních řízků.

Metodou GC-MS s SPME dávkováním byly analyzovány těkavé látky z plodnic hadovky smrduté v různých stádiích zralosti. Charakteristický pach zralých plodnic je určován skupinou sirných látek vznikajících až při dozrávání. Zejména

jsou to dimethyldisulfid a dimethyltrisulfid, detegován byl i dimethyltetrasulfid a další sírné látky. Tato skupina látek se v ranných stádiích nerozvinutého vajíčka vůbec nevyskytovala.

V neporušeném čerstvém vajíčku byl obsah těkavých látek velmi nízký. Ve stopách byl nalezen *p*-dimethoxybenzen, 3-oktanon a 2-hexanon. Po narušení tkáně se významně zvyšovaly obsahy kyseliny octové, 3-hydroxy-2-butanonu, 2,3-butandiolu, 2-fenylethanolu, fenylethylacetátu, některých terpenických složek. Dále byla detegována série methylketonů a některých aldehydů. Kromě stopových množství di-

methyltrisulfidu nebyly za těchto podmínek nalezeny další sírné sloučeniny.

Množství látek vzniklých enzymatickými a chemickými přeměnami v rozrušených tkáních vajíčka řádově převyšovalo obsah původních těkavých látek. Je zřejmé, že sensorické vlastnosti materiálu v tomto případě určují sekundární aromatické látky.

LITERATURA

1. Velenovský J., v knize: *České houby*, s. 797. Česká botanická společnost, Praha 1920.

8L-02

ANALÝZA A MODELOVÁNÍ HYDROGENACE
STYRENU VE ZKRÁPĚNÉM REAKTORU

MARTINA ŠIMÍČKOVÁ^a, VRATISLAV TUKAČ^a, JIŘÍ
HANÍKA^{a,c}, VÁCLAV CHYBA^a, JAROMÍR LEDERER^b
a JIŘÍ KOLENA^b

^a Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-
technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6,

^b Unipetrol, a.s., VUANCH, 436 70 Litvínov, ^c Ústav chemických procesů, Akademie věd České republiky, 165 02 Praha 6
martina.simickova@vscht.cz, jaromir.lederer@vuanch.cz,
hanika@icpf.cas.cz

Jedním z významných procesů, ve kterém se používají reaktory se zkrápěným ložem katalyzátoru, je selektivní hydrogenace dienů a některých olefinů přítomných v pyrolyzním benzínu, neboť tyto látky jsou prekurzory tvorby uhlíkatých úsad a působí problémy v navazujících katalytických procesech. Pyrolyzní benzin je jedním z vedlejších produktů tepelného rozkladu těžších ropných frakcí, pyrolýzy na ethylen a propylen a obsahuje C5–C12 uhlovodíky, se značnou koncentrací dienů, olefinů a aromátů. Typickou polymerující složkou je styren, který byl vybrán jako modelová látka v této studii. Hydrogenace se obvykle provádí na palladiových katalyzátorech s aktivní složkou soustředěnou v povrchové vrstvičce. Reakce je značně tepelně zabarvená, stav reaktoru je blízký adiabatickým podmínkám a jeho výkon a selektivita jsou ovlivněny transportními jevy. Reaktory se zkrápěným ložem katalyzátoru se v chemickém průmyslu používají především pro rafinační hydrogenace, hydrokrakování nebo oxidace. V těchto reaktorech proudí plynná a kapalná fáze souprůdně přes pevné lože částic katalyzátoru. Výhodou těchto reaktorů je jednoduchá konstrukce, velká zpracovatelská kapacita a možnost provozování i za vysokých tlaků a teplot. Nevýhodou je závislost jejich výkonu na hydrodynamice a transportních jevech. Cestou, jak překonat tento nedostatek, je periodická modulace nástřiku kapalné suroviny do reaktoru, která může vést k navýšení výkonu i bezpečnosti provozování zkrápěného reaktoru. Záměrem této práce bylo porovnání průběhu hydrogenace typické složky pyrolyzního benzínu, styrenu, v reaktoru pilotního měřítka s volně naspaným a zředěným ložem katalyzátoru s průběhem hydrogenace v poloprovozním zkrápěném reaktoru jak za ustáleného, tak za periodického režimu.

Tato práce vznikla za dílčí podpory grantu MPO-FT-TA/039 ČR.

8L-03

VLIV ROZPOUŠTĚDLA NA KINETIKU
HYDROGENACE SUBSTITUOVANÝCH CHINONŮ

VOJTĚCH FAJT, LADISLAV KURC a LIBOR
ČERVENÝ

Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-
technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
vojtech.fajt@vscht

Cílem předložené práce bylo bližší studium vlivů rozpuštědel uplatňujících se při hydrogenaci derivátů anthra-9,10-chinonu a příbuzných látek (schéma 1).

Hydrogenace byly prováděny v laboratorním vsádkovém reaktoru při teplotě 40 °C a atmosférickém tlaku v přítomnosti komerčního palladiového nosičového katalyzátoru MGS5. Modelovým substrátem pro hydrogenaci byl 6-ethyl-1,2,3,4-tetrahydroanthra-9,10-chinon, který byl vybrán z důvodů vysoké selektivity při hydrogenaci a relativně dobré rozpustnosti v široké škále rozpouštědel.

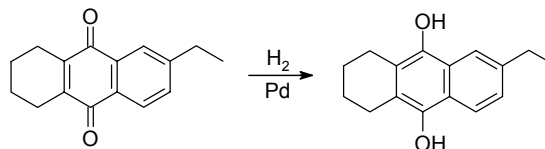


Schéma 1

Zjištěné trendy v reakčních rychlostech ve dvaceti vybraných rozpouštědlech byly popsány pomocí dvou pětiparametrických modelů odvozených s využitím principů lineárních vztahů solvatačních energií¹. Vliv rozpouštědla na hydrogenaci byl kvantifikován technikou vícerozměrné lineární regrese s využitím modelů Abrahama-Kamleta-Tafta² (AKT) a Koppela-Palmeho³ (KP). Pomocí vybraných diagnostických nástrojů pro interaktivní analýzu regresního tripletu byly vyhodnoceny nejvýznamnější vlastnosti rozpouštědla ovlivňující kinetiku studované hydrogenace. U modelu AKT se jednalo o protonakceptorní schopnost rozpouštědla. V případě použití modelu KP byly shledány nejvýznamnějšími vlastnostmi charakteristiky elektrofilní a nukleofilní solvatační schopnosti rozpouštědla. Kromě těchto veličin se uplatňovala Hildebrandova kohezivní energetická hustota, definovaná jako výparná enthalpie při teplotě 25 °C vztážená na jednotku objemu, která byla obsažena v obou modelech. Obdobných závěrů bylo dosaženo i při hydrogenaci dalších substrátů.

Tato práce vznikla za podpory grantu Grantové agentury ČR 203/03/H140.

LITERATURA

1. Bekárek V., Nevěčná T., v knize: *Rozpuštědlové vlivy v chemii a jejich hodnocení*, kap. 5, s. 128. Academia, Praha 1992.
2. Kamlet M. J., Abboud, J.-L. M., Abraham M. H., Taft R. W.: *J. Org. Chem.* 1983, 2877.
3. Koppel I. A., Palm V. A., v knize: *Advances in Linear Free Energy Relationships*, kap. 5, s. 203. Plenum Press, London 1972.

8L-04 SELEKTIVNÍ KRAKOVÁNÍ VYŠŠÍCH ALKENŮ NA PROPYLEN

**JIRÍ KOLENA^a, PAVEL MORÁVEK^a, OLEG
BORTNOVSKÝ^a, VRATISLAV TUKAČ^b
a JIRÍ HANIKA^{b,c}**

^a VÚAnch a.s., Revoluční 84, 400 01 Ústí n. Labem

^b Ústav organické technologie, VŠCHT, Technická 5, 166 28
Praha 6, ^c ÚCHP AV ČR, 165 02 Praha 6 Ji-
ri.kolena@vuanch.cz

Vývoj postupů katalytického krakování alkenů o čtyřech a více uhlíkových atomech v řetězci je jedním z možných způsobů pokrytí poptávky po propylenu, jejíž významný nárůst je v příštích letech očekáván. Zvýšenou poptávku po propylenu nebude možno v blízké budoucnosti zajistit intenzifikací klasických zdrojů, tedy pyrolýzy a katalytických krakovacích procesů. Zdá se tedy být nevyhnutelná realizace nových technologií výroby propylenu. Vedle metathese, která však spotřebovává jako jednu ze surovin ethylen, je větší naděje vkládána do vývoje procesů, které produkují propylen selektivním katalytickým krakováním méně ceněných průmyslových frakcí vyšších alkenů.

Krakování vyšších alkenů probíhá iontovým mechanismem. Je známo, že dostatečně selektivně a s vysokým výtěžkem žádaného propylenu probíhá na zeolitových katalyzátorech s vysokým poměrem Si : Al, obvykle vyšším než 180. Vyšší obsahy hliníku a s nimi spojená vyšší kyselost by byly příčinou vysokého uplatnění vedlejších reakcí, vedoucích jednak k nežádoucím produktům, např. aromátům, jednak způsobujícím deaktivaci katalyzátoru tvorbou polymerů a postupně až úsad elementárního uhlíku.

V literatuře nejčastěji doporučovaným typem katalyzátoru pro krakování alkenů je silikalit s poměrem Si/Al minimálně 200. Tento zeolit má koncentraci aktivních center takovou, že zaručuje dostačující aktivitu při krakování při vyhovující selektivitě. Silikalit byl úspěšně vyzkoušen i v rámci této práce. Vedle toho byl modifikován i běžný ZSM5 s vysokým poměrem Si : Al tak, aby byl použitelný v procesu krakování alkenů. Tento zeolit byl použit po částečném převedení z Na⁺ do H⁺ formy. Standardní ZSM5 v H⁺ formě má příliš vysokou koncentraci aktivních center, takže při kontaktu s alkeny za vysoké teploty katalyzuje celou řadu nežádoucích reakcí, včetně vzniku oligomerů a jiných prekurzorů tvorby koksu.

Tabulka I

Přehled katalyzátorů použitých pro krakování vyšších alkenů a charakteristika jejich kyselosti

Typ katalyzátoru	Si : Al	Na : Al (akt. složka)	Broenstedova centra (extrudát) [mmol/g]	Lewisova centra (extrudát) [mmol/g]
silikalit	280	–	0,01	0,01
ZSM 5	14–40	0,96–2,57	0,02–0,07	0–0,01
ZSM 5 + Ce	21	0,63–1,15	0,05–0,07	0,02

Základní charakteristiky katalyzátorů použitých při výzkumu procesu katalytického krakování vyšších alkenů jsou uvedeny v tabulce I.

Vyvinutý katalyzátor na bázi ZSM5, částečně převedený do H⁺ formy, jehož příprava je levnější než příprava silikalitu, má při srovnatelné aktivitě vyšší selektivitu na propylen než silikalit. Modifikace cerem selektivitu dále mírně zlepšuje. Katalyzátor na bázi ZSM5 modifikovaný cerem lze považovat za perspektivní.

Byl formulován matematický model krakování alkenů v programu Aspen Plus. Tento model při značném zjednodušení reakčního schématu uspokojivě popisuje výsledky experimentů krakování alkenů. Byly vyčísleny průměrné rychlostní konstanty jednotlivých reakcí modelu krakování. Krakování je ovšem ovlivněno deaktivací katalyzátoru, kterou lze zpomalit přidáním vody, ale nelze ji zcela eliminovat. Proto je žádoucí, aby matematický model zahrnoval i vliv deaktivace. Byl analyzován vliv deaktivace katalyzátoru na rychlost krakování výchozích alkenů i rychlosti vzniku hlavních produktů. Deaktivace byla popsána pomocí mocninové rovnice 1. řádu. Byla stanovena počáteční aktivita katalyzátorů a rychlostní konstanty deaktivace.

Výzkum byl financován Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky v rámci projektu č. LN00B142.

LITERATURA

- Kolena J., Morávek P., Hanika J.: Krakování vyšších alkenů, Sborník 10. konference chem. technologie, *APROCHEM 2001*, str. 89.
- Bortnovsky O., Sazama P., Gábová V., Wichterlová B.: Role of topology, strength, concentration and distribution of acid sites of zeolites in C5 olefins cracking to propylene and ethylene; *EUROPACAT 2003*.
- Kolena J., Morávek P., Bortnovsky O., Gonsiorová O., Tukač V., Hanika J.: Katalytické krakování vyšších alkenů, Sborník 12. konference chem. technologie, *APROCHEM 2003*, str. 106.
- Fogler H.Scott: *Elements of Chemical Reaction Engineering*. Prentice Hall, New Jersey 1999.

8L-05 NOVINKY VE VÝVOJI POLYSTYRENOVÝCH PLASTŮ, POLYMERNÍCH SMĚŠÍ A NANOKOMPOZITNÍCH MATERIÁLŮ

RADEK PJATKAN a MAREK PRAJER

*Kaučuk a.s., O. Wichterleho 810, 278 52 Kralupy nad Vltavou
radek.pjatkan@kaucuk.cz, marek.prajer@kaucuk.cz*

Vývoj na trhu polystyrenových plastů současnosti nutí Kaučuk a.s. jako jediného tuzemského výrobce k neustálému technickému vývoji v rámci svého sortimentu. Jedná se jak o inovaci klasických výrobků produktové řady Krasten (ledničkové typy HPS, nové vstřikovací typy), tak i o nové výrobky založené na polystyrenových plastech (polymerní směsi, nanokompozitní materiály). Cílem sdělení je stručné seznámení s novými typy v produktové nabídce a také s probíhajícími vývojovými projekty a postupy používanými při

jejich řešení.

Vývoj nové generace vstřikovacích typů HPS je jedním z projektů, které jsou v současnosti velmi aktuální. Trend v současnosti směřuje k typům, které umožňují vysoké zpracovatelské rychlosti (požadavek dobrého toku materiálu při zpracování) při zachování velmi dobrých mechanických vlastností a vysokého lesku výsledného produktu. Rozborem charakteristických vlastností současných komerčně dodávaných typů byly stanoveny cílové hodnoty základních charakteristik požadovaného typu (index toku taveniny, vrubová houževnatost Charpy a lesk) a snahou vývoje je dosáhnout těchto vlastností v co nejlepší možné kombinaci. Na základě literárních poznatků a patentových řešerší se ukazuje, že takovéto kombinace vlastností lze dosáhnout několika cestami. Patří mezi ně např. zavedení peroxidicky iniciované polymerace v kombinaci s „nastavením“ požadované molekulové hmotnosti, nebo využití vlastností vybraných typů elastomerů v kombinaci s iniciovanou polymerací. Z hlediska optimalizace reologie taveniny je pak vhodné zmínit i využití aditivace pomocí vhodných aditiv (např. kapalných polybutenů, interních lubrikantů) v kombinaci s iniciovanou polymerací. Projekt je v současnosti ve stadiu provozních zkoušek inovovaných receptur a předpokládá se jeho dokončení v roce 2006 zavedením nového typu HPS do trvalé výroby.

Dalším cílem vývoje byl projekt blokového houževnatého polystyrenu pro tzv. chladničkové aplikace, vyžadující vysokou houževnatost a odolnost proti působení stávajících polyuretanových nadouadel, tedy odolnost proti korozi za napětí v tenzoaktivním prostředí (ESCR) cyklopentanu. Při vývoji tohoto typu HPS byly využity znalosti získané při řešení projektu POL-24/2004 Výzkumného centra pro komplexní zpracování ropy. Projekt je ve fázi provozního ověřování a v k dispozici je provozně vyráběný zkušební produkt.

Vývoj bezhalogenově retardovaných plastů byl v Kaučuku a.s. zahájen již v roce 2004 jako reakce na požadavky zákazníků (dodavatelů pro elektrotechnický průmysl). Tento požadavek vystupuje do popředí při vstřikování velkoobjemových televizních skeletů pro plazmovou nebo LCD technologii. Mezi hlavní komponenty pro bezhalogenovou retardaci Krastenů patří deriváty kyseliny fosforečné a komponenty, které zvyšují tepelnou odolnost výsledného materiálu. Koncentrace derivátů kyseliny fosforečné je zvolena tak, aby bylo minimalizováno odkapávání hořící taveniny. Současně deriváty kyseliny fosforečné příznivě působí při zpracování směsi a změnou jejich koncentrace je možno regulovat reologické vlastnosti.

Kromě inovací v sortimentu „klasických“ polystyrenových hmot jsou vyvíjeny i nové typy polymerních směsí. Jedním z příkladů je inovovaný Krasten FB 28 (polymerní směs HIPS/Polyolefín). Materiál vykazuje zlepšenou teplotu měknutí podle Vicata B, vysokou úroveň rázové houževnatosti při zachování dobré zpracovatelnosti, a zachování vynikajících bariérových vlastností. Zajímavým výrobkem je i polymerní směs HIPS/termoplastický elastomer, u níž bylo dosaženo velmi výrazného zlepšení a rázové houževnatosti.

Posledním představeným trendem ve vývoji polystyrenových plastů jsou nanokompozitní materiály na bázi styrenových plastů. Jedná se o řešení jednoho z problémů při bezhalogenové retardaci plastů, a to sice výrazné omezení odkapávání hořícího materiálu. Jedním z prostředků pro dosažení této materiálové vlastnosti je právě aplikace vhodných nano-

plniv. Při vývoji byla využita komerčně dostupná nanoplňniva na bázi modifikovaného montmorillonitu. Vhodný výběr typu nanoplňniva a technologie přípravy nanokompozitního materiálu pak umožnily, aby mechanické vlastnosti výsledných polymerních nanokompozitů zůstaly na původní úrovni nemodifikovaných směsí. Pozitivní vliv nanoplňniva se pak naplno projevil v oblasti požárně technických charakteristik, kdy bylo výrazně omezeno odkapávání hořící taveniny.

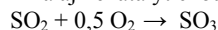
Z uvedeného stručného přehledu je zřejmé, že Kaučuk a.s., jako monopolní výrobce polystyrenových plastů v ČR, věnuje pozornost rozvoji a zlepšování vlastností jak tzv. základních typů (K 336 M, K 552 M, K 562 E), tak i trendům v oblasti speciálních plastů na bázi houževnatých polyvinylaromatických materiálů.

8L-06 NOVÉ MOŽNOSTI VYUŽITIA GUMOVEJ DRVINY V PARCIÁLNEJ SUBSTITÚCII KAUČUKOV V GUMÁRENSKEJ ZMESI

VENDELÍN MACHO^a, BRANISLAV CÍBIK^b, MILAN
OLŠOVSKÝ^a a JAROSLAV MICHÁLEK^c

^a *Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov,* ^b *Vípotest, s. r. o, T. Vansovej 1054/45, 020 32 Púchov,* ^c *Výskumný ústav gumárenský – Matador, a. s, T. Vansovej 1054/45, 020 32 Púchov*
macho@fpt.tnuni.sk

S nárastom produkcie automobilov a tým aj automobilových plášťov a ďalších gumárenských výrobkov strmo vzrástá množstvo už opotrebovaných vulkanizátov, ktoré v najmenej priaznivých prípadoch znečisťujú životné prostredie, alebo sa využívajú len ako menej hodnotné palivo, hlavne v cementárňach, ale aj ako fortifikujúci komponent. Vzhľadom na vyšší obsah síry v opotrebovaných gumárenských výrobkoch, sa dajú spaľovať bez exhalácií toxických nečistôt, najmä oxidov síry. V značnej miere sa totiž dá práve využiť aditívacia zlúčeninami vápnika, ktoré môžu viazať¹ do popola nielen oxid siričitý, ale aj oxid sírový, ktorý pri teplote nad 800 °C vzniká aj nekatalytickou dooxidáciou oxidu siričitého:



ktorý reaguje so zlúčeninami vápnika na pomerne termostabilný siran vápenatý. Systematická pozornosť vyššiemu zhodnoteniu gumárenského odpadu sa začala venovať až v druhej polovici minulého storočia^{2,3}. Venuje sa pozornosť porovnaniu doterajších spôsobov s akcentom na vytvorenie medzifázy na gumovej drvine pred zapracovaním do gumárskej zmesi kaučuk-drvina. Potom na devulkanizáciu, pri ktorej dochádza k štiepeniu sírných mostíkov vo vulkanizáte chemickými, fyzikálnymi alebo fyzikálno-mechanickými metódami. Pri chemickej devulkanizácii napr., pri teplote 80 °C, kedy sa ešte neštiepia väzby C-C makromolekul kaučukov, ale už sa štiepia sírne mostíky heteropolárnym mechanizmom, pričom potrebnú energiu na vytvorenie elektrónových medzier znižuje aplikácia látok s voľnými elektrónovými párami. Tak zásaditý charakter umožňuje nukleofilné reakcie na síre pri di- až polysulfidoch. K takým patria nukleofilné látky na báze dusíka (amíny), kyslíka (hydroxidy) alebo síry (tioly)⁴.

V nadväznosti na⁵ sa prezentujú výsledky hlavne devul-

kanizácie s využitím bežných gumárenských chemikálií a dostupných modifikátorov devulkanizácie, ako vyšších karboxylových kyselín, 2-butanolu i ďalších alkoholov za spolupôsobenia vyššej teploty (150–300 °C), alebo mechanického namáhania. Devulkanizačná zmes pozostáva napr. zo zinočnatých solí tiokarbamátov a 2-merkaptobenzotiazolu, rozdispergovaných v diole, pričom aktivovaná kyselinou stearovou, oxidom zinočnatým, prípadne aj sírou, ktorá napomáha pri revulkanizácii. Táto zmes (6 hmot. častí) sa primieša v mixéri alebo na dvojalci so 100 hmot. časťami gumovej drviný. Pôsobením mechanických napätí, už počas niekoľkých minút sa sírne mostíky trhajú, bez zhrubovania kaučuku. Takú zmes možno použiť aj formou „batchu“, t. j. zamiešania do surového kaučuku v pomere 10 až 40–60 a až potom zmiešať s gumovou drvinou. Produkt si uchová 50–85 % pôvodných vlastností kaučuku.

Prezentujú sa konkrétne výsledky, s akcentom na vplyv promótorov (okrem dietylenglykolu) na aktivitu takto modifikovanej gumovej drviný a jej aplikáciu, na fyzikálno-mechanické vlastnosti v modifikovaných, ako aj v reálnych bočnicových zmesiach autoplášťov.

LITERATURA

1. Hartman M., Svoboda M., Macho V.: CS 217 642 (1984).
2. Nordsiek K. H., Wohwinke K.: Kautschuk, Gummi, Kunststoffe 18, 566 (1965).
3. Scheirs J.: *Polymer Recycling*. John Wiley and Sons, New York 1998.
4. Büschlef H. J.: *Plaste und Kautschuk* 6, 205 (1990).
5. Sekhar B. C., Kromer V.: *Tire Technology International* 1996, 87.

8L-07

TEXTILE MATERIALS FROM THE POINT OF VIEW OF AN EVALUATION OF THEIR PHYSIOLOGY AND COMFORT

The abstract of the paper is dedicated to the 55th anniversary of the founding of the chemical fibres specialization at Slovak Technical University in Bratislava.

ANNA MURÁROVÁ

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak Technical University in Bratislava, Radlinského 9, 81237 Bratislava, SR
anna.murarova@stuba.sk

Textile materials have recently regained their importance due to new chemical, technological and textile – construction procedures. New textile materials have properties with high added value. There are new criteria and evaluative procedures for textile materials of a high accuracy focusing on the physiology and comfort of humans while wearing them. Physiology and Comfort is a young scientific domain dealing with the complex evaluation of textile materials from the point of view of their physiology and comfort. This scientific domain examines “human being – textile material – climate” interactions. The paper deals with the transport and barrier properties of heat, humidity and UV radiation depending on the composition of textile materials and the increased activation of their surfaces.

This paper was created with the financial support of the VEGA grant agency 1/2451/05 of the Slovak Republic.

REFERENCES

1. Murárová A., Jambrich M.: *Textil* 48, 83 (1993).
2. Murárová A.: *Fibres Textiles in Eastern Europe* 5, 5 (1997).
3. Mecheels J.: *Körper- Klima-Kleidung*. Verlag Schiele und Schon, Berlin 1998.
4. Murárová A., Jambrich M., Krištofič M.: *Textil* 49, 377 (2000).
5. Murárová A.: *Vlákna a textil* 8, 48 (2001).

8L-08

ŠPECIÁLNE TYPY VLÁKNITÝCH MATERIÁLOV PRE BYTOVÉ TEXTÍLIE

JARMILA SÝKOROVÁ^a, MARTIN JAMBRICH^a, EUBA HAJDUCHOVÁ^a, IVAN KOPAL^a, ANNA MURÁROVÁ^b a MICHAL ŠIARNIK^c

^a *Fakulta priemyselných technológií TnU AD, I. Krasku 491/3, 020 01 Púchov*, ^b *Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava*, ^c *Quiltex a.s., Garbiarska 678, 631 01 Liptovský Mikuláš, Slovakia*
sykorova@fpt.tnuni.sk, m.jambrich@post.sk,
hajduchova@fpt.tnuni.sk, kopal@fpt.tnuni.sk,
anna.murarova@stuba.sk, miso@quiltex.sk

Vlákňité materiály sprevádzali ľudstvo už 6000 r.p.n.l. S počiatku to boli vlákňité materiály prírodného zloženia (bavlna, vlna, perie). V súčasnosti tento sortiment rozširujú aj materiály chemického zloženia (PO, PES, PAN, PA, celulózy). Tieto vlákňité materiály sa vyrábajú priemyselne a v procese výroby môžeme meniť ich štruktúru a vlastnosti (pozdlžnu aj priečnu geometriu). Tým rozširujeme sortiment i spektrum ich úžitkových vlastností³.

Jednou z oblastí využitia vlákňitých materiálov sú bytové textílie. Tieto vplyvajú aj na zdravie človeka z hľadiska fyziologických vlastností tým, že môžu vytvárať vhodné prostredie pre prítomnosť rozličných mikroorganizmov (hlavne prírodné materiály). Výlučky mikroorganizmov sa dostávajú do vzduchu a sú príčinou rozličných alergických reakcií (astma, chronická nádcha). Preto sa pomaly prechádza z niektorých prírodných vlákňitých materiálov na chemické vlákňité materiály a ich kombinácie (PES, PAN, PP, celulózy). Ich vlastnosti brzdia rozmnožovaniu mikroorganizmov a majú tepelne-izolačné vlastnosti (dôležité hlavne pre prikrývky) podobné prírodným vláknam. Pre tento účel sa používajú vlákna pozdlžne tvarované, s rôznou priečnou geometriou, duté, ktoré sú spracované do vlákňitého produktu – rúna. Výrobky (prikrývky) z nich sa lepšie ošetrujú a sú lacnejšie ako z prírodných materiálov.

Väčšina klasických polymérov je vyrobená z neobnoviteľného zdroja – ropy. V tomto období sa venuje veľká pozornosť príprave vlákien z obnoviteľných zdrojov surovín poľnohospodárskych plodín (kukurica, cukrová repa, zemiaky) pre prípravu mikrobiálnych typov vlákien – biodegradovateľných¹.

V našej práci sa venujeme rúnam určených ako výplň

do prikrývk, ktoré boli pripravené zo syntetických (polyesterových) a mikrobiálnych vlákien (polylaktidových) a sledujeme molekulovú, nadmolekulovú, morfológickú i makromorfológickú štruktúru ich prípravy a zmenu úžitkových vlastností vlákniťých materiálov v závislosti od podmienok.

Táto práca bola vytvorená za podpory slovenskej grandovej agentúry Vega 2/6131/6.

LITERATÚRA

1. Jambrich, M., Gunzová, M.: Príprava a vlastnosti mikrobiálnych typov vlákien. Tn U AD – študijný materiál, 2005.
2. Fourne, F.: *Synthetic Fibres*. Hanser Publisher, Munich 1998.
3. Jambrich, M., Marcinčin, A., Budzák, D.: *História rozvoja výroby chemických vlákien na Slovensku a v Čechách*. KP CHTF STU, Bratislava, 1996.
4. Sýkorová, J., Jambrich, M., Sroková, I., Šiarník, M., Murárová, A.: The structure and properties of fibre materials from special technical PET fibres. In: 4th Central European Conference 2005, Liberec, Technická Univerzita, areál kolejí Harcov, p.73.

8L-09

MODIFICATION OF THE SURFACES OF TEXTILE MATERIALS AND ITS EFFECT ON THE TRANSPORT PROPERTIES

The abstract is dedicated to the 55th anniversary of the founding of the chemical fibres specialization at Slovak Technical University at Bratislava.

**ANDREJ RUSNÁK^a, ANNA MURÁROVÁ^a,
and VLADIMÍR DŮRMAN^b**

*Slovak Technical University, ^a Faculty of Chemical and Food Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ^b Faculty of Electrical Engineering and Informatics, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovak Republic
andrej.rusnak@stuba.sk*

The paper evaluates the properties of the modified surfaces of textile materials and fibres based on polyester and polypropylene. These are modified by special water dispersions containing nano-pigments based on carbon, metal powders, and metal oxides, which are fixed by heat and microwave radiation. The aim of the modification is to achieve a change in the transfer properties (heat, liquids and electric charge transfer).

The created surface layer indicates totally different transport and barrier properties compared to the original textile materials.

The surface modification is registered by optic microscopy in a falling light and a subsequent scanning electron microscopy. The stability of the covered layer is examined by an evaluation of the wearing of the textile (according to the norms) and the stability of washing.

In order to quantify the barrier properties we used a measurement of the permeability of the UV radiation, the

angle of the wetting and the kinetics of drops, the transport of different wetting substances on the textile. At the same time we evaluated the change in the thermal transport properties of the modified materials. We are mainly interested in the method of measuring the inner and surface resistivity, discovered by measuring the flow power on the surface or through the layer of the textile material evaluated at a constant voltage (according to the norms).

Based on the results we can say that the type of nanopigment, its concentration, type of fixation reagent and method of fixation significantly affect the properties of the modified material. The stability of the applied layer is affected more by the type of pigment than the fixation reagent.

This paper was created with support of the VEGA project 1/12451/05.

REFERENCES

1. norm: STN 01 34 6460
2. Maršalková M., Ledrová Z.: http://centrum.vslib.cz/centrum/centrum/3Aplikace/3.1_zaverecne_zpravy/%5B3.1.01%5D.pdf

8L-10

APLIKACE ČINÍCÍCH CHROMITÝCH BŘEČEK V TECHNOLOGICKÉM KOŽELUŽSKÉM PROCESU PŘI VÝROBĚ VEPŘOVICOVÝCH USNÍ

PAVEL MOKREJŠ, MILAN MLÁDEK, DAGMAR JANÁČOVÁ, KAREL KOLOMAZNÍK a FERDINAND LANGMAIER

*Ústav inženýrství polymerů, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, nám. TGM 275, 762 72 Zlín
mokrejs@ft.utb.cz*

Bylo připraveno celkem 5 různých chromitých břeček za použití chromitého koláče z hydrolyzovaných postružin. Těmito břečkami byly vyčiněny vzorky holiny. K provozním zkouškám byly vybrány vepřovicové kůže, které se zpracovávají ve firmě TAREX s.r.o. Otrokovice. Sled výroby usní byl rozdělen do následujících úseků:

1. Zpracování surových kůží na holinu. Provádělo se v nerezové nádobě se šnekovým míchadlem s možnostmi přívodu a ohřevu vody, a možností prát surovinu na průtoku vody a měnit chod míchadla.
2. Převedení holiny na useň – činění. Provádělo se v koželužském sudu s přívodem, odtokem a ohřevem vody a možností měnit otáčky v sudu. Vyčiněné a vyprané usně se po vyjmutí ze sudu ukládaly na stojany (koželužské kozy) a ponechaly se zaležet po dobu 48 h, aby proběhly dočiňovací procesy. Zaležené usně byly zbaveny části vody ždímáním na vratném lisu a potom byla upravena jejich tloušťka na hodnotu 0,7–0,9 mm na postruhovacím stroji. Vypostruhované usně se zvážily – zjistila se tak postruhovaná hmotnost, na kterou se poté vypočítaly navážky chemikálií pro další operace.
3. Předúprava usní. Prováděla se v koželužském sudu.
4. Úprava usní. Vybarvené a vymazané usně se nechaly zaležet, poté se lisováním zbavily části vody a potom se

sušily ve vakuové sušárně při teplotě 70 °C. Po vyjmutí ze sušárny se uložily na hromadu a ponechaly se zaležet 3 dny. Potom se ovlhčily vodou na vlhkost 35–45 % relat. a uložily se na hromadu na dobu 16–20 h. Zavlhčené usně se změkčovaly tlčením v sudě přes noc. Potom se napnuly do plochy a dosušily na požadovanou vlhkost v sušárně Quick. Následovalo žehlení usní na hydraulickém stroji (Famosa) při teplotě 50 °C za tlaku 0,5 MPa. Hotové usně se roztřídily podle využitelnosti, změnila se jejich plocha a odváděly se do skladu.

Kvalita vyčínění usní (zesíťování struktury kolagenu) byla kontrolována stanovením teploty smrštění (TS). U čistého kolagenu je TS v rozmezí 58–68 °C (podle druhů kůže). Naproti tomu u chromočiněných usní, v závislosti na způsobu chromočinění a druhu použití chromité břečky, je TS v rozmezí 77–100 °C. Usně vyčíněné námi připravenými břečkami vykazovaly hodnotu TS v rozmezí 89–97 °C, což je dostatečným důkazem jejich praktické použitelnosti.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM 7088352102.

8L-11 VZTAH VEŘEJNOSTI K CHEMICKÉMU PRŮMYSLU, JEHO VLIV NA PODMÍNKY PODNIKÁNÍ V EVROPĚ A MOŽNOSTI JEHO OVLIVNĚNÍ

JOSEF HORÁK

*Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5,
166 28 Praha 6
josef.horak@vscht.cz*

Přesto, že většina obyvatel používá chemické výrobky bez zábran, jsou podniky chemického průmyslu vnímány jako jistý zdroj rizika pro jejich okolí. Toto riziko je možné rozdělit na dvě složky: riziko trvalých úniků látek do okolí a riziko havárie. Tlak veřejnosti na chemický průmysl je možné rozdělit na dvě složky: celostátní a celoevropská legislativní opatření a místní zpřísnění podmínek pro chemickou výrobu v některých regionech a požadavky aktivistických skupin obyvatel v místě výroby.

Charakteristika vývoje legislativy: požadavky na ochranu životního prostředí a na zajištění bezpečnosti chemických výrob se stále zpřísňují. Evropa je pro chemický průmysl velmi náročným podnikatelským prostředím. Legislativa však vychází z technického odborného zázemí oboru. Například, základním požadavkem je zachycování všech škodlivých příměsí z odpadních plynů z chemických výrob, požadavek třídění odpadních vod, jejich předúprava a v konečném stupni jejich vedení do biologického stupně čistírny odpadních vod, čistírny podniku nebo čistírny městské. Stále rostou i požadavky na zajištění skládek tuhých odpadů.

Charakteristiky požadavků skupin obyvatel: požadavky mají někdy intuitivní charakter, skupinám obyvatel někdy chybí pro diskuse odborné technické zázemí. Středem pozornosti mohou být např. pachové, ale jinak neškodné látky, hluk, intenzita dopravy, někdy je středem zájmu intuitivní představa nebezpečí havárie, přesto, že zkušenosti z chemického průmyslu ukazují, že i při závažných haváriích

je důsledkem především velká materiální škoda pro výrobce, zatímco počet obětí na životech je nízký a vliv havárie na okolí výroby je malý. Klíčovým problémem je analýza rizika havárie, jejíž součástí je i analýza důsledků možné havárie na okolí. Odhad důsledků je nutně velmi nejistý, a může se měnit, často podle zaměření instituce či osoby, která analýzu zpracovala od výpovědi, že havárie má velmi malý vliv až po předpověď katastrofickou.

Metody využitelné pro zlepšení vztahu mezi výrobcí a obyvateli v okolí: řešením je především informační otevřenost výrobních podniků a spolupráce vedení podniků s veřejnou správou v informování občanů. Tyto aktivity je možné rozdělit do dvou oblastí:

Profesionální informace, tj. informace o vlivu podniku na okolí, informace obyvatel o rizikových objektech v podniku, informace o možných důsledcích havárie v podniku na okolí, včetně instrukcí občanů a vytváření informačního systému pro případ havárie.

Vytváření přátelského vztahu mezi občany a podnikem, do této oblasti patří organizace dnů otevřených dveří, návštěvy odborníků závodu ve školách, podpora studentů, podpora daného regionu a další aktivity.

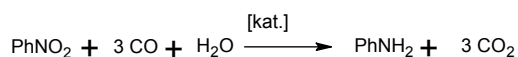
Jak dokazují časopisy podniků chemického průmyslu, jsou u obou těchto oblastech výrobci aktivní, a to zejména výrobci, jejichž výrobní podniky byly postupně obklopeny městskou zástavbou.

8L-13 VÝSKUMNÉ A PRIEMYSELNÉ VYUŽITIE KARBONYLAČNEJ REDUKCIE A REDUKTÍVNEJ KARBONYLÁCIE ORGANICKÝCH NITRO- A NITRÓZOZLÚČENÍN

VENDELÍN MACHO^a, MIROSLAV KAVALA^b, MILAN OLŠOVSKÝ^a a MILAN KRÁLÍK^c

^a *Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov,* ^b *VÚP, a. s., Nábřežná 4, 971 04 Prievidza,* ^c *VÚCHT, a. s., Nobelova 34, 836 03 Bratislava
macho@fpt.tnuni.sk*

Prezentujú sa výsledky karbonylačnej redukcie a reduktívnej karbonylácie organických nitro- alebo nitrózozlúčenín oxidom uhoľnatým za prítomnosti vody v prípade karbonylačnej redukcie alebo alkanolu, či inej organickej zlúčeniny s voľným vodíkom, v prípadoch reduktívnej karbonylácie. Reakciu možno katalyzovať zlúčeninami paládia a Lewisových báz alebo sírou, či selénom v zásaditom prostredí a prítomnosti päťmocného vanádu. Prezentované sú výsledky dosiahnuté katalytickým systémom, hlavne na báze síry, pričom sa skúma aj vplyv ostatných komponentov katalytického systému¹⁻³, na karbonylačnú redukciu nitrobenzénu



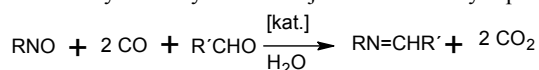
na anilín:

Tiež na reduktívnu karbonyláciu za prítomnosti hlavne meta-

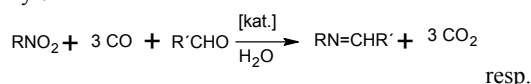


nolu na metyl-*N*-fenylylkarbamát:

Porovnáva sa tento katalytický systém so všeobecne známym^{3,4} na báze paládia, versus prednosti a problémy z potenciálne technologického a environmentálneho hľadiska. Účinnosť sírnej zložky katalytického systému klesá takto: COS > H₂S >> CS₂ > S. Prezентuje sa aj reakčný mechanizmus. Viac pozornosti venujú autori využitiu redukčívnej karbonylácie na prípravu aromatických izokyanátov a diizokyanátov bez potreby fosgénu, napr.⁵ z dinitrotoluénu a CO za prítomnosti metanolu, s nasledovným termickým štiepením intermediárneho dimetyl-*N,N'*-toluyléndikarbamátu na^{2,4} toluyléndiizokyanát. Redukčívnu karbonyláciu nitrobenzénu s CO v metanole vznikajúci metyl-*N*-fenylylkarbamát kyslokatalyzovanou kondenzáciou s formaldehydom dáva dimetyl-4,4'-difenylylkarbamát, ktorý termicko-katalyticky pri teplote nad 200 °C sa štiepi na cenný 4,4'-difenylylmetyléndiizokyanát (MDI), vhodný na výrobu širokej palety polyuretánov. Potom výsledky intramolekulovej redukčívnej karbonylácie 2-nitroanilínu s CO na 2(3H)-benzimidazolónu⁷, nitrobenzénu s CO a dietylaminom poskytuje *N,N*-dietyl-*N'*-fenylylmočovinu, a pri použití vody namiesto dietylaminu vzniká *N,N'*-difenylylmočovina. Konjugovanou karbonylačnou redukciou aromatických nitro- alebo nitrozoamín s CO, za prítomnosti vody a aldehydov vznikajú Schiffove bázy – príslušné



imíny⁶:



Navrhujú aj ďalšie možnosti využitia týchto reakcií v potenciálnych výrobných procesoch.

LITERATURA

1. Macho V., Vojček L., Schmidtová M. a Haruštiak M.: J. Mol. Catal. 88 (2), 177 (1994).
2. Macho V., Králik M., Bojsová E.: Collect. Czech. Chem. Commun. 62, 325 (1997).
3. Jan Ju. B., Nefedov B. K.: *Sintezy na osnove oksidov uglerode*, s. 119–136. Moskva „Chimija“ (1987).
4. Ragacini F., Cenini S.: La Chim. Industria 78, 421 (1996).
5. Macho V., Cingelová J., Cibik B., Komora L.: Ropa, uhlie, plyn a petrochémia 45 (1–2), 75 (2003).
6. Macho V., Králik M., Hudec J., Cingelová J.: J. Mol. Catal. 209, 69 (2004).

8L-14

ZHODNOCENÍ TUZEMSKÝCH KAOLINŮ NA PRODUKTY S VYSOKOU PŘIDANOU HODNOTOU

PETR KOUTNÍK^a, PAVEL ROUBÍČEK^b, JINDRA DROTTNEROVÁ^c, JIŘÍ MALÁČ^d a JOSEF KŘIVÁNEK^e

^a Výzkumný ústav anorganické chemie, a. s., Revoluční 1521/84, 400 01 Ústí nad Labem, ^b České lupkové závody, a. s., 171 01 Nové Strašecí, ^c Výzkumný ústav stavebních hmot, a. s., Hněvkovského 65, 617 00 Brno, ^d Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, nám. T. G. Masaryka 275, 762 72 Zlín, ^e Polymer Institute Brno, spol. s r. o., Tkalcovská 2, 656 49 Brno
petr.koutnik@vuanch.cz

Kaolin je plastická reziduální hornina. Obsahuje kaolinit Al₂Si₂O₅(OH)₄, křemen SiO₂ a příměsi, z nichž významné jsou oxidy titanu a železa. Surové kaoliny jsou po těžbě purifikovány (rozplavení, sedimentace, flotace, magnetická separace, atd.) a distribuovány ve formě prášku, aglomerátu (nudliček) či vodné suspenze. V roce 2005 bylo celosvětově vytěženo 44,5 mil tun kaolinu, z toho v ČR cca 4 mil tun¹. ČR tedy patří k významným producentům kaolinu.

Plavený kaolin je používán především pro výrobu papíru, nátěrových hmot a keramiky a po výpalu při teplotách vyšších než 1250 °C k produkci žáruvzdorných materiálů. Ceny těchto kaolinů se pohybují v řádu jednotek Kč za kilogram. Vhodně zvolenými postupy kalcinace, následného mletí a případně dalšími úpravami je možné z kaolinu připravit produkty uplatnitelné na trhu za ceny několikanásobně vyšší. Do této kategorie spadají kalcinované kaoliny pro výrobu stavebních hmot („metakaoliny“), plniva pro kaučuky a plasty, kalcinované kaoliny s vysokým stupněm bělosti určené k částečné náhradě TiO₂ při výrobě nátěrových hmot, kaoliny pro výrobu katalyzátorů a pro farmaceutický průmysl.

V laboratorním měřítku byly studovány změny fázového složení, objemové hmotnosti, nasákavosti, ztráty žíháním, měrného povrchu, bělosti a struktury kaolinu na teplotě kalcinace. Na základě těchto experimentů a výsledků aplikačních pokusů byly navrženy postupy přípravy dvou výrobných řad kalcinovaných kaolinů – pucolánů pro průmysl stavebních hmot a plniv pro výrobu plněných plastů a kaučuků. Tyto postupy byly úspěšně aplikovány v Českých lupkových závodech v Novém Strašecí. Provozně připravené pucolány významně zvýšily pevnost a trvanlivost betonů, zlepšily vlastnosti sklovláknobetonových kompozitů a vápenných omítek vhodných pro rekonstrukce historických budov. Plniva se uplatnila především v kaučucích a polyolefinech. V těchto aplikacích vykazovala lepší či srovnatelné vlastnosti s analogickými, avšak dražšími plnivými, která jsou do ČR dovážena.

Tato práce vznikla při řešení projektu „Vývoj technologie tepelného a mechanického zpracování kaolinu a lupku za účelem využití vzniklých materiálů v gumárenském a plstičkářském průmyslu a v průmyslu stavebních hmot“, ev. č. FD-K3/043“, který byl realizován za finanční podpory ze státních prostředků prostřednictvím Ministerstva průmyslu a obchodu.

LITERATURA

1. Virta R. L.: Mineral Commodity Summaries, U.S. Geological Survey (2006).

8L-15 VÝROBA SYNTETICKÝCH PRYSKYŘIC VE SPOL- CHEMII – SOUČASNOST A PERSPEKTIVY

**PŘEMYSL KARÁSEK, STANISLAV MACHOVSKÝ
a LUBOŠ KNECHTL**

*Spolchemie, Ústí nad Labem
knechtl@spolchemie.cz*

Požár provozu umělých pryskyřic v listopadu 2002, který připravil Spolchemii o více jak třetinu výrobních kapacit pro výrobu syntetických pryskyřic, urychlil rozhodnutí postavit nové výroby s novými, ekonomičtějšími, bezpečnějšími a k životnímu prostředí ohleduplnějšími technologiemi.

Prvním krokem bylo přesunutí výrob do stávajících výrobních kapacit, kdy se s minimálními náklady a ve velice krátkém čase tyto provozu adaptovaly k převzetí alespoň části výrobního sortimentu.

Následovala příprava a výstavby jednotky na výrobu nízkomolekulárních epoxidových pryskyřic (LER), pro kterou nebyla k dispozici žádná náhradní výrobní kapacita a jednotka na výrobu výšemolekulárních epoxidových pryskyřic (SER), jejíž stávající jednotka měla kapacitu nedostatečnou. Výroba v novém provozu LER byla zahájena 16.10. 2004 a výroba v provozu SER byla zahájena 10.1. 2005. Jednotka na výrobu LER s kapacitou 30 kt/rok byla postavena podle licence japonských společností Dainippon Ink & chemicals a Mitsui.

Další investicí, která řešila nedostatečnou výrobní kapacitu syntetických pryskyřic, je jednotka na výrobu polyesterů (nenasyčené polyesterové pryskyřice a alkydové pryskyřice) s celkovou kapacitou 25 až 30 kt rok⁻¹. Tato jednotka byla uvedena do provozu 14. 2. 2006.

V současné době je v přípravě výstavba další jednotky na výrobu LER opět s kapacitou 30 kt rok⁻¹ a s předpokládaným termínem nájezdu v září 2007. Ve výrobně polyesterů je připraven prostor pro instalaci dalších výrobních linek podle vývoje požadavků trhu. Pro zajištění surovin ke zvýšené výrobě LER je zároveň ve výstavbě výrobní jednotka na zvýšení výroby epichlorhydrinu ze stávajících 10 kt rok⁻¹ na 25 kt rok⁻¹. Toto zvýšení bude zajištěno novou linkou výroby ECH s výchozí surovinou glycerinem, která využívá proces vyvinutý ve Spolchemii. Nájezd této jednotky se předpokládá v prosinci 2006.

8L-16 INVESTIGATION OF PROPERTIES OF PSA CONTAINING METALLIZED PARTICLES

**ŠTĚPÁN FLORIÁN, IGOR NOVÁK, VLADIMÍR
POLLÁK, and MÁRIA ŠIVOVÁ**

*Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta
9, 842 36 Bratislava, Slovenská republika
upoflor@savba.sk*

The pressure-sensitive adhesives (PSA) with electrical properties are widely used in light-current electro technical engineering. The electrically conductive PSA are necessary for production of modern electrical and electronic components in the field of electromagnetic shielding, computer pro-

duction or cosmic technology. The preparation of valuable electrically conductive PSA is rather complicated because of contradictory requirements put forward. The concentration of electrically conductive filler in PSA must be reasonably low for obtaining appropriate electrical conductivity and PSA must show suitable cohesive properties.

The electrical properties of polyacrylate-based PSA containing PA 6 metallized filler are dependent on the size and shape of used particles, as well as on its concentration in polymeric matrix. The percolation threshold in the case of silver/PA 6 particles was reached at 45 wt.%, in the case of silver PA 6 fibres at 30 wt.% of the filler in PSA.

The adhesive joints having a higher electrical conductivity and higher strengths to aluminum require using of the silver/PA 6 fibres which are more appropriate for electrically conductive PSA in comparison with PA 6 particles. Like the preparation of electrically conductive PSA containing carbon particles, the preparation of PSA containing silver-coated PA 6 filler requires compromise solution of the problem with reference to selection of adhesive and electrical parameters of the investigated system.

This work was supported by grant VEGA 2/4042/04.

8L-17 INVESTIGATION OF ADHESIVE AND SURFACE PROPERTIES OF ISOTACTIC POLYPROPYLENE GRAFTED BY MALEIC ANHYDRIDE IN QUASI-SOLID STATE

**IGOR NOVÁK, EBERHARD BORSIG, EUDMILA
HRČKOVÁ, AGNES FIEDLEROVÁ, VLADIMÍR
POLLÁK, and ANGELA KLEINOVÁ**

*Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta
9, 842 36 Bratislava, Slovenská republika
upolnovi@savba.sk*

An efficient method to improve the adhesion of isotactic polypropylene (iPP) to more polar polymers is linking of polar carboxylic acid or anhydride to iPP backbone by e.g. grafting of acrylic acid, acid, maleic acid and their anhydrides in the presence of suitable organic peroxides. The main chain and the branch polar chains in grafted iPP are usually thermodynamically incompatible so they are usually on the surface of the polymeric coil and so active in the interface. These kinds of grafting of iPP improve its compatibility, adhesion, and dyeing, mechanical and thermal properties of more components iPP systems. To the most used chemical methods for improving of adhesive properties of polyolefin is grafting of iPP by maleic anhydride (MA) in melt or in quasi-solid state as an efficient method for increasing of both the polarity of polymer and value of its surface energy. Most methods of iPP grafting by MA (iPP-g-MA) are based on grafting in polymeric melt using some sorts of organic peroxides but the grafting methods in quasi-solid state found also technical application.

The surface energy and its polar component of iPP-g-MA copolymer increases significantly with the rise of the grafted MA concentration in the copolymer. The interfacial tension in

the system iPP-g-MA – polyvinyl acetate decreases with the increasing concentration of MA in grafted iPP-g-MA copolymer. After an initial sharp decrease of the interfacial tension, approximately stabilized at the 0.8 wt.% content of MA has been observed. The interfacial work of adhesion in the system iPP-g-MA – polyvinyl acetate increases from 60 mJ m^{-2} to 77 mJ m^{-2} for 1.4 wt.% of MA grafted in copolymer. The significant increase from 1.2 mJ m^{-2} to 19 mJ m^{-2} for the polar component of the interfacial work of adhesion has been observed. A rapid decrease of the interfacial tension versus mechanical work of adhesion was found. The grafting of MA to iPP led to the decrease of the interfacial tension in the adhesive joint iPP-g-MA copolymer – polyvinyl acetate and the mechanical work of adhesion in spite of this increases.

This work was supported by grant VEGA 2/4042/04.

8L-18 ÚČINOK VEĽMI MALÝCH MNOŽSTIEV POLYETYLÉNOXIDU NA VYBRANÝCH DRUHOCH FORMOVACÍCH ZMESÍ Z VÝROBY

HAROLD MÄSIAR^a, NIKOLA KALOFOROV^b
a JOZEF KASALA^a

^a *Fakulta špeciálnej techniky, Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne, Študentská 1, 911 50 Trenčín,*
^b *Dôchodca, Heyrovského 13, 841 03 Bratislava, Slovenská republika*

V tomto príspevku je uvedený nami odskúšaný účinok veľmi malých množstiev polyetylénoxidu (PEO) na technologických vlastnostiach a jeho ovplyvnenie z druhu vybranej formovacej zmesi ako aj z energie zhustenia (9.81 J a 19.62 J) skúšobných vzoriek. Vykonalo sa to na grafickej závislosti získaných troch technologických vlastností (priedušnosti, väznosti a voľnej tekutosti) od vlhkosti. Väznosť bola posudzovaná podľa pevnosti v tlaku a formovateľnosť zmesi – podľa voľnej tekutosti.

PEO sa pridával do formovacej zmesi pomocou vodného roztoku.

Vybrali sa dva druhy formovacích zmesí z výroby:

1. Modelová formovacia zmes so zložením
92 hm.d. Zlievarenský piesok Šajdíkové Humence KI-27-D, STN 72 1205
5 hm.d. Bentonit Štandard 650
3 hm.d. Kamenouhoľná múčka KUM A.
2. Formovacia zmes pre automatickú formovacu linku (AFL), ktorá mala obdobné východzie zloženie ako modelová formovacia zmes ale obsahovala aj časť použitej zmesi z AFL.

Pri modifikovanej s PEO formovacej zmesi pre AFL pri energii zhustenia $19,62 \text{ J}$ ako aj pri $9,81 \text{ J}$ skúšobných vzoriek väznosť je zvýšená a priedušnosť je neaditívne vysoká. Táto modifikovaná s PEO zmes zdanlivo sa chovala ako suchšia pri rovnakom obsahu vody v porovnaní s nemodifikovanou zmesou. Pritom zmes mala posunutú vrcholy kriviek väznosti a priedušnosti smerom doprava k vyšším relatívnym vlhkostiam a energiách zhustenia $9,81 \text{ J}$ a $19,62 \text{ J}$ skúšobných vzoriek v porovnaní s nemodifikovanou zmesou. Krivky tejto

modifikovanej s PEO zmesi boli strmšie a ich zvýšené technologické vlastnosti sa dosahovali v užších intervaloch relatívnej vlhkosti v porovnaní s nemodifikovanou zmesou.

Pri modelovej formovacej zmesi sa získali menej posunuté vrcholy kriviek väznosti a priedušnosti smerom doprava k vyšším relatívnym vlhkostiam nemodifikovanej zmesi v porovnaní s modifikovanou zmesou. Krivka väznosti modifikovanej s PEO zmesi bola strmšia a jej zvýšená väznosť sa dosahovala v užších intervaloch relatívnej vlhkosti v porovnaní s nemodifikovanou zmesou. Krivka priedušnosti modifikovanej s PEO zmesi mala menšiu strmosť a jej zvýšená priedušnosť sa dosahovala v širšom intervale relatívnej vlhkosti v porovnaní s nemodifikovanou zmesou.

Z dvoch vybraných druhov formovacích zmesí z výroby lepšie výsledky na zlepšenie technologických vlastností sa dosahovali pri účinku PEO pri formovacej zmesi pre AFL. Okrem toho dobré výsledky sa dosahovali pri modelovej formovacej zmesi.

Vyššie uvedené zvýšenie priedušnosti umožňuje použitie merných tlakov pri strojovom formovaní.

8L-19 VEĽMI MALÉ MNOŽSTVÁ POLYETYLÉNOXIDU MODIFIKÁTOROM TECHNOLOGICKÝCH VLASTNOSTÍ ZLIEVARENSKÝCH FORMOVACÍCH ZMESÍ AKTIVOVANÉHO BENTONITU

HAROLD MÄSIAR^a a NIKOLA KALOFOROV^b

^a *Fakulta špeciálnej techniky, Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne, Študentská 1, 911 50 Trenčín,* ^b *Dôchodca, Heyrovského 13, 841 03 Bratislava, Slovenská republika*

V predkladanom príspevku uvedieme nami študované zlepšenie v názve uvedených vlastností pri pridaní veľmi malých množstiev polyetylénoxidu (PEO) do aktivovaného bentonitu.

Výrobca aktivovaného bentonitu Keribent R je Keramost – Obrnice, Most, ČR.

V literatúre nie sú dostupné poznatky o tejto problematike.

Skúšobné zmesi s aktivovaným bentonitom a kremičitým pieskom boli modifikované PEO o koncentráciách 0,05, 0,1 a 1,0 hm.%. Boli vykonané stanovenia technologických vlastností nevyžihanej a vyžihanej zmesi. Stanovenia vlastností vyžihanej zmesi boli potrebné, aby sa preukázali zmeny vlastností zmesi v % pri zvýšených teplotách ($500 \text{ }^\circ\text{C}$ v priebehu 2 hodín) voči nevyžihanej zmesi.

Stanovenia nevyžihanej zlievarenskej zmesi

Priedušnosť rastie progresívne so zvyšovaním koncentrácie od 0,05 do 1,0 hm.% PEO.

Väznosť v kondenzačnej zóne vody nevyžihanej zmesi mierne rastie so zvyšovaním koncentrácie od 0,05 do 0,1 hm.% PEO.

Stanovenia vyžihanej zlievarenskej zmesi

Väznosť v kondenzačnej zóne vody vyžihanej zmesi sa znižuje v porovnaní s väznosťou v kondenzačnej zóne vody nevyžihanej zmesi. Preto sa znižuje aj termostabilita v kondenzačnej zóne vody vo vzťahu k väznosti

v kondenzačnej zóne vody vyžihanej zmesi.

Pevnosť v ťahu v kondenzačnej zóne vody vyžihanej zmesi sa zvyšuje v porovnaní s pevnosťou v ťahu v kondenzačnej zóne vody nevyžihanej zmesi. Preto sa zvyšuje aj termostabilita v kondenzačnej zóne vody vo vzťahu k pevnosti v ťahu v kondenzačnej zóne vody vyžihanej zmesi.

Skúškami termostability sa modelujú podmienky pri reálnom odlievaní, a preto im treba venovať zvýšenú pozornosť najmä vo vzťahu k väznosti a k pevnosti v ťahu

v kondenzačnej zóne vody. Podľa predpisu výrobcu pre Keribent R so skúšobným kremičitým pieskom nemá klesnúť termostabilita pod 65 %. Pri našich skúškach sa osvedčilo, že uvedená väznosť a najmä pevnosť v ťahu v kondenzačnej zóne vody majú hodnoty značne vyššie ako 65 % v prípade modifikácie s veľmi malými množstvami PEO aktivovaného bentonitu. Teda tento druh modifikácie možno aplikovať pri reálnom odlievaní.

8P-01**THE TRANSESTERIFICATION OF HYDROXY-ETHYLCELLULOSE UNDER MICROWAVE ENERGY****SLÁVKA MINÍKOVÁ^a, IVA SROKOVÁ^a, ANNA EBRINGEROVÁ^b, and VLASTA SASINKOVÁ^b**

^a Department of textile and clothing, Faculty of Industrial Technologies, TnU of A. Dubček, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov, ^b Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovak Republic minikova@fpt.tnuni.sk, srokova@fpt.tnuni.sk, chemebri@savba.sk, chemsasi@savba.sk

The contribution deals with preparation of biosurfactants by transesterification of HEC under microwave irradiation.

The reactions were carried out in system H₂O/DMF with MELA (MERO), „solvent – free“ conditions by high temperature (177 °C) as described Girardeau et al., 1999 (ref.¹) and under the microwave irradiation to Antova et al., 2004 (ref.²).

All experiments were realized in a domestic microwave oven under 600 W power output.

The water – soluble esters of hydroxyethylcellulose were characterized by FT-IR spectroscopy in KBr pellets.

The surface – active properties were determined (surface tension of water, emulsifying efficiency, foamability, washing performance, antiredeposition efficiency).

The prepared esters of HEC are: lowered surface tension of water, have excellent emulsifying activity, can be compared with Tween 20, very good foamability, excellent washing power, compared to sodium dodecylsulfate (LaSO₃Na), very good antiredeposition action exceeding HEC and CMC, which is used as protective colloid.

This work was supported by the Slovak Grant Agency VEGA, project No. 2/6131/6 and the Agency for Support and Technique, project APVT – 20 – 017304.

REFERENCES

- Girardeau S., Aburto J., Vaca-Garcia C., Alric I., Borredon E.: *IV European Symp. In Industr. Crops and Prod.*, Bonn 1999. P129 (Zborník), Bonn 1999.
- Antova G., Vasvasova P., Zlatonov M.: *Carbohydr. Polym.* 57, 131 (2004).
- Rooney M. L.: *Polymer* 17, 555 (1976).

8P-02**ZKOUŠKY VEPŘOVICOCVÝCH USNÍ VYČINĚNÝCH BŘEČKAMI PŘIPRAVENÝMI Z CHROMITÉHO KOLÁČE PO HYDROLÝZE POSTRUŽIN****PAVEL MOKREJŠ, MILAN MLÁDEK, DAGMAR JANÁČOVÁ, KAREL KOLOMAZNÍK a FERDINAND LANGMAIER**

Ústav inženýrství polymerů, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, nám. TGM 275, 762 72 Zlín mokrejs@ft.utb.cz

Vepřovicové usně vyčinené v poloprovozních podmínkách břečkami připravenými z chromitého koláče po enzymové hydrolyze chromočiněných postružin byly podrobeny sérii chemických a fyzikálně-mechanických zkoušek. Hodnoceno bylo pět usní a jedna vyrobená useň podle technologie TA-REX s.r.o. Otrokovice byla hodnocena jako srovnávací. Požitě metody hodnocení a podstata zkoušek:

- Tloušťka. Měřila se tloušťkoměrem.
- Pevnost v tahu. Zkouškou se zjišťovala odolnost usně vůči jednoosé tahové deformaci.
- Tažnost. Stanovila se na trhacím stroji typu Shopper. Zkušební tělesa se vysekla ve směru A (podélná osa zkušebního tělesa rovnoběžná s hřbetní částí usně).
- Pevnost v roztržení šterbiny. Stanovila se na trhacím stroji za použití přídavného zařízení pro upevnění vyseknutého zkušebního tělesa. Výsledek se vyjádřil v N.
- Stálobarevnost při stírání – zapouštění. Provádělo se za mokra a za sucha plstí. Zabarvení plstěného tělesa se vyjádřilo stupněm podle šedé stupnice pro hodnocení zapouštění.
- Propustnost pro vodní páru. Je to schopnost usně propouštět vodní páru z prostředí o vyšší relativní vlhkosti do prostředí s nižší relativní vlhkostí.
- Adsorpce vodní páry. Stanovovala se kelímkovou metodou. Zjistil se přírůstek hmotnosti zkušebního tělesa. Výsledek zkoušky se vyjádřil v mg cm⁻².
- Odolnost proti oděru. Ke zkoušce se používal přístroj typu Veslic s přídavným zařízením a třecí hlavou s upevněným třecím elementem. Zkouška se prováděla u suché a vlhké usně za definovaných podmínek. Za daných podmínek nesmí být lic usně porušen.
- pH vodného výluhu. Podstatou zkoušky bylo vyloužení navážky vzorku usně vodou za předepsaných podmínek.
- Odolnost proti opakovanému ohybu. Odolnost usně vůči opakovanému ohybu se vyjádřila počtem cyklů a slovním závěrem porušeno nebo neporušeno.
- Obsah látek vyloužitelných vodou. Navážka usně nařezaná na drobné kousky se vyluhovala vlažnou vodou za předepsaných podmínek za použití třepačky.
- Stanovení šestimocného chromu. Podstata stanovení spočívala v tom, že se případně volný chrom za předepsaných podmínek vyluhoval z usně. Limitní hodnota není stanovena, nicméně přítomnost Cr⁶⁺ v usni není žádoucí. Výsledky byly tabelárně zpracovány.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM 7088352102.

8P-03**THE ADAPTATION OF A METHOD FOR THE MEASUREMENT OF THE THERMAL CONDUCTIVITY OF FIBRES IN A PERPENDICULAR DIRECTION**

The abstract of the paper is dedicated to the 55th anniversary of the founding of the chemical fibres specialization at Slovak Technical University in Bratislava.

ANNA MURÁROVÁ, SILVIA PODOBEKOVÁ, and ANDREJ RUSNÁK

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak Technical University in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, SR,

anna.murarova@stuba.sk

The thermal conductivity of textile materials mainly depends on the macromorphological structure of textile material which is composed of fibres and air is kept between the fibres. The setting ratio of fibres to the thermal conductivity of textile material is useful from the point of view of preparing new types of fibres additives with different thermal sensors. The measuring method on an Alambeta machine was adapted in order to evaluate the thermal conductivity of fibres in a perpendicular direction to the longitudinal direction of the fibre. Instead of area fibre materials such as hosiery and non-woven fabric textiles we used an area formation made of closely packed fibres with the same angle of laying on a special frame. After reaching the specific limit thickness of the package, the thermal conductivity stopped changing due to the fact that the air fibre ratio in this macromorphological structure of the fibre layer while measuring the thermal conductivity was negligible and did not significantly affect the thermal conductivity of the polymer material. The thermal conductivity set by such a procedure defines the thermal conductivity of fibres during heat transfer by convection in a perpendicular direction to the longitudinal axis of the fibre. When it comes to the fibres additives by thermal sensors, such a procedure can evaluate the dependency from the concentration of additives in a polymer matrix to the thermal conductivity and area resistance of the heat transfer. The method is suitable for measuring fine fibres. The reproducibility of the method expressed by the variation coefficient was 7.5 %.

The paper was created with the financial support of the VEGA scientific grant agency Project No.1/2451/05, and the Agency for the Support of Science and Research Project No. 20011404 in Slovakia.

REFERENCE

- Hes L., Balcaříková V.: *Vlákna a textil* 9, 149 (2002).

8P-04**ZMÁČATEĽNOSŤ POVRCHOVO UPRAVENÝCH TEXTILNÝCH MATERIÁLOV**

ANNA MURÁROVÁ, SILVIA PODOBEKOVÁ a ZUZANA JAKUBÍKOVÁ

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, SR
anna.murarova@stuba.sk

Zmäčateľnosť povrchov textilných materiálov závisí od mnohých faktorov. Sú to najmä chemické zloženie textilného materiálu, jeho makromorfologická štruktúra a druh kvapaliny, ktorou je povrch zmáčaný. Cieľenou úpravou povrchov textilných materiálov sa môže ich zmáčateľnosť kvalitatívne zmeniť.

V našej práci sme sa zaoberali úpravou povrchov polyesterových a polypropylénových tkanín s anorganickými pigmentami a ich účinnosťou proti zmáčaniu. Špeciálna vodná disperzia s anorganickými pigmentami sa naniesla na povrch tkaniny a tepelne sa fixovala. Pri povrchovej úprave sa využila účinná mikrovlnná energia a ultrazvuk.

Tkaniny sú tuhé, heterogénne textilné materiály s anizotropnými a vysoko členitými povrchmi. Povrchovú úpravu anorganickými pigmentami, ktoré majú veľkosť častíc na úrovni mikrorozmerov až nanorozmerov, sa zvyšuje porozita a drsnosť povrchu na úrovni mikromorfologickej štruktúry, zodpovedajúcej veľkosti anorganických častíc. Povrchová úprava tkanín týmto postupom vykazuje vplyv na zmáčanie vodou a glycerínom. Zmäčanie a kinetika zmáčania sa monitorovali videokamerou a stanovil sa experimentálne uhol zmáčania a povrchová energia metódou podľa Owens-Wendtovu-Kaelble.

Tento príspevok vznikol s podporou grantovej agentúry VEGA 1/2451/05 a APVV 20011 404.

8P-05**CHARAKTERISTIKA BUILDROVÝCH SYSTÉMU**

LENKA POLÁKOVÁ, JANA SVOBODOVÁ, JAN ŠMIDRKAL a VLADIMÍR FILIP

Ústav technológie mlieka a tuků, Vysoká škola chemicko-technologická, 166 28 Praha 6
lenka.polakova@vscht.cz, jana.svobodova@vscht.cz,
jan.smidrkal@vscht.cz, vladimir.filip@vscht.cz

V súčasnosti je väčšina tenzidov práškových pracích prostriedkov (dodecylbenzensulfonát sodný, oxyetylenovaný masťný alkohol) vyrobená z ropy. Zdroje ropy nie sú obnoviteľné a za predpokladu súčasného objemu ťažby vystačia známe zásoby asi na ďalších 40 rokov. Preto je nutné hľadať a používať tenzidy, ktoré je možné vyrobiť z obnoviteľných zdrojov. Medzi tieto tenzidy patrí sodné mydlo a alkylypolyglykozid. Ich ďalšou výhodou je i to, že sú dokonale biologicky odbúrateľné.

Ďalší problém v práškových pracích prostriedkoch predstavujú fosfáty, ktoré spôsobujú eutrofizáciu povrchových vôd. Fosfáty z pracích prostriedkov sa na celkovom znečistení vôd fosforom podieľajú asi z 12,5 %. Ministerstvo životného prostredia ČR preto vydalo vyhlášku č. 109/2005 Sb., ktorá udáva, že práce prostriedky pre pranie textilu v domácnostiach s koncentráciou fosforu vyššou než 0,5 hm.% sa od 1.7.2006 nesmú uvádzať na trh a od 1.10.2006 sa nesmú uvádzať do obehu. Ide o novelu vyhlášky č. 221/2004 Sb., ktorou sa stanovujú zoznamy nebezpečných chemických látok a nebezpečných chemických prípravkov, ktorých uvádzanie na trh je zakázané alebo ktorých uvádzanie na trh, do obehu alebo používanie je obmedzené. Z tohoto dôvodu je nutné nájsť najvhodnejšiu alternatívu fosfátov.

Cieľom tejto práce bolo navrhnúť optimálny tenzidový a builderový systém, ktorý je na bázi obnoviteľných surovín. Bola porovnaná práca účinnosť troch tenzidových systémov (oxyetylenovaný masťný alkohol (AE) – sodné mýdlo – dodecylbenzensulfonát sodný (LAS), oxyetylenovaný masťný alkohol – sodné mýdlo, alkylypolyglykosid (APG) – sodné mýdlo), a to v kombinácii s builderovým systémom, ktorého základ tvoril vrstvený dikremičitan sodný. Ako kobuilder bol použitý citrónan sodný, iminodijantarán sodný alebo glukonát sodný. Pre optimálny tenzidový a builderový systém bola zostavená celková receptúra detergentu (vrátane bieliaceho systému a enzýmov). Táto receptúra bola porovnaná s komerčnými pracími prostriedkami.

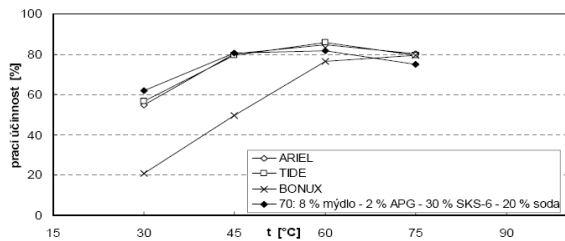
Pracia účinnosť je u všetkých testovaných tenzidových systémoch (AE – mýdlo – LAS, AE – mýdlo, APG – mýdlo) pre rovnaký builderový systém zrovnateľná. Receptúry s tenzidovým systémom APG – mýdlo vykazujú výrazne nižší obsah inkrustov v porovnaní s receptúrami na báze tenzidových systémov AE – mýdlo – LAS a AE – mýdlo. Najvhodnejším tenzidovým systémom je teda APG – mýdlo, ktorý je na bázi obnoviteľných surovín.

Ďalej bol testovaný vplyv rôzneho množstva tenzidov, buildrov a kobuildrov na praciú účinnosť a tvorbu inkrustov. Zníženie množstva tenzidov v receptúre detergentu nemá za daných podmienok prania vplyv na praciú účinnosť. So znižujúcim sa obsahom tenzidov v receptúre dochádza k znižovaniu množstva inkrustov.

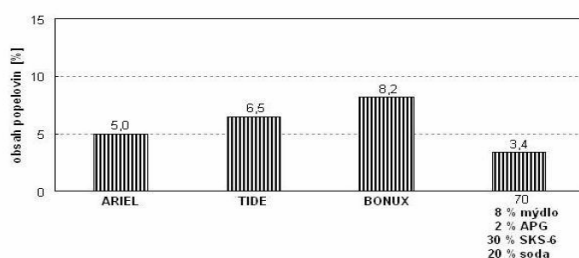
Pracia účinnosť receptúr závisí na použitom buildere a klesá v poradí fosfát, zeolit, dikremičitan. Množstvo inkrustov potom klesá v poradí zeolit, dikremičitan, fosfát.

S rastúcim obsahom builderov v receptúre detergentu rastie pracia účinnosť a súčasne klesá množstvo inkrustov.

Zníženie obsahu uhličitanu sodného v receptúre detergentu vedie k výraznému zníženiu praciej účinnosti a súčasne k zníženiu obsahu inkrustov. Najvyššiu praciú účinnosť vykazuje



Obr.1. Porovnanie praciej účinnosti navrhnujetej receptúry detergentu a komerčných pracích prostriedkov (3 g l^{-1} , 10°N , BAPES)



Obr. 2. Porovnanie obsahu inkrustov navrhnujetej receptúry detergentu komerčných pracích prostriedkov (3 g l^{-1} , 20°N , bavlna, SKS-6 granulát)

zuje receptúra s 20 % uhličitanu sodného. Zníženie obsahu inkrustov vplyvom zníženia obsahu uhličitanu sodného v receptúre detergentu z 20 % na 10 % nie je významné.

Využitie citrátu, glukonátu ani iminodijantaránu ako kobuilderu k dikremičitanu sodnému sa neosvedčilo. Prídavok citrátu zvyšuje obsah inkrustov.

Navrhnutý optimálny tenzidový a builderový systém detergentu je 8 % mýdlo – 2 % APG – 30 % dikremičitan sodný granulát – 20 % uhličitan sodný.

Na základe optimálneho tenzidového a builderového systému bola zostavená celková receptúra detergentu (vrátane enzýmov, bieliaceho systému a pomocných látok). Pracia účinnosť tejto receptúry sa vyrovná praciej účinnosti komerčných pracích prostriedkov (ARIEL, TIDE).

V porovnaní s komerčnými pracími prostriedkami vykazuje navrhnutá receptúra tiež nižší obsah inkrustov.

LITERATÚRA

1. Vyhláška MŽP č. 109/2005 Sb. o stanovení seznamů nebezpečných chemických látek a nebezpečných chemických přípravků, jejichž uvádění na trh je zakázáno nebo jejichž uvádění na trh, do oběhu nebo používání je omezeno. Sbirka zákonů 2005, částka 35 (2005).

8P-06

ELECTRICAL CONDUCTIVITY OF THE PET AND PP TEXTILE MATERIALS WITH MODIFIED SURFACES
Abstract of the paper is dedicated to the 55th anniversary of the founding of the chemical fibres specialization at Slovak Technical University in Bratislava.

ANDREJ RUSNÁK, ANNA MURÁROVÁ, KATARÍNA OLEJNÍKOVÁ, and PAVOL FEDORKO

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak Technical University in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, SR

andrej.rusnak@stuba.sk

Polyethylenterephthalat and polypropylene are fibre-forming polymers. They are insulators because of their electric properties. Modification of the basic polymer versus its surface can significantly affect this property. One of the ways to enable the transfer of an electric charge to the surface of polyester and polypropylene textile materials is the modifica-

tion of the surfaces of these materials with electro-conducting particles. The electro-conducting layer creates an environment on the substrate suitable for the electric charge transfer.

The paper deals with the modification of PET and PP textile material surfaces covered by different kinds of pigments and aims to increase their electric conductivity and retard the creation of an electrostatic charge. During the experiment, we used the Printex L-6 black pigment and graphite, white pigment based on TiO₂ Hombitec S-100 and Al-powder.

The area electric conductivity σ [S] of the modified PET and PP textile materials was evaluated using a simple standard four-contact method under laboratory conditions (temperature of 23 °C and relative air humidity 55 %). We discovered an important effect of pigments and their concentration as well as the effect of the fixation conditions of pigments to area conductivity.

The paper was sponsored by the SR VEGA 1/2451/05 and APVV 1/2021/05 scientific grant agencies.

REFERENCE

1. Marcinčin A., Hricová P., Fedorko P., Olejníková K.: *Vlákna a textil* 12, 98 (2005).

8P-07

SAMONOSNÝ PYROLYTICKÝ ROZKLAD HNOJIV NPK

LENKA SEMENYŠÍNOVÁ^a a LADISLAV SVOBODA^b

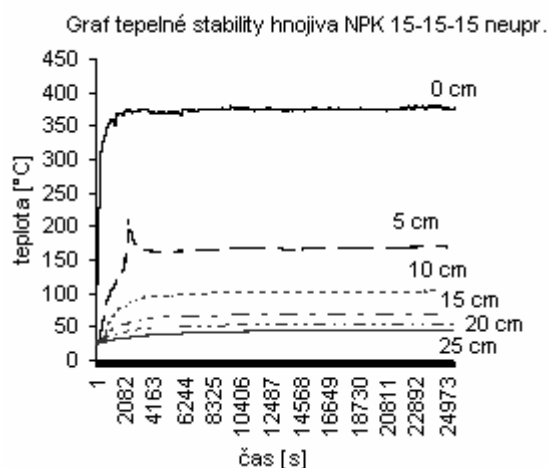
^a Chemopetrol a.s., Litvínov – Záluží 1, 436 70 Litvínov,

^b Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice
lenka.semenysinova@chemopetrol.cz

Výrobci průmyslových hnojiv na bázi dusičnanu amonného nabízející své produkty na trzích Evropské unie jsou povinni hodnotit nejen jejich kvalitu, ale i pyrolytické vlastnosti. Tato povinnost se proto dotkla i jediného českého velkovýrobce hnojiv firmy Lovochemie a.s., která vyrábí více-složková hnojiva NPK dvěma způsoby, vymrazovací technologií (hnojiva kombinovaná) a granulací směsi jedno-, event. dvousložkových hnojiv (hnojiva směsná). Na laboratorním zařízení zkonstruovaném podle požadavků směrnice EU¹ byla testována vybraná hnojiva, u nichž byla stanovena rychlost hoření, charakteristická teplota reakčního čela a charakter procesu pyrolýzy.

Byly analyzovány 2 typy kombinovaného hnojiva NPK, a to NPK 15-15-15 a NPK 13,5-18-18, oba s povrchovou úpravou i bez ní, kde je dusík přítomen v nitrátové formě. Dále byly zkoušeny 4 typy směsných hnojiv, NPK 9-14-14+10S, NPK 9-20-20+9S, NPK 10-10-10+13S a NPK 8-13-11, v nichž je dusík obsažen v podobě amoniakální. První tři z těchto hnojiv obsahují také síru.

Bylo prokázáno, že samonosnému pyrolytickému rozkladu omezenému na vzdálenost necelých 5 cm od místa tepelné iniciace podléhají pouze hnojiva na bázi dusičnanu amonného. K pyrolýze dochází tzv. doutníkovým hořením, rychlost postupu reakčního čela činila $4 \cdot 10^{-5} \text{ m s}^{-1}$, jeho charakteristické



Obr. 1. Časové závislosti teploty hnojiva NPK 15-15-15 (bez povrchové úpravy) v různých vzdálenostech od místa tepelné depozice

ká teplota pro NPK 15-15-15 byla 351 °C, pro NPK 13,5-18-18 266 °C. U hnojiv směsných docházelo k jejich rozkladu pouze v místě tepelné depozice. Příklad záznamu z testu hnojiva NPK 15-15-15 uvádí obr. 1.

Tato práce vznikla za podpory MŠMT ČR projektu MSM0021627501.

LITERATURA

1. Draft Commission Regulation adapting for the first time Annex 1 of Regulation (EC) No 2003/2003 relating to fertilisers (EDDHA and triple superphosphate), EEC/64 8. 6. 2004.
2. Kiiski H: Self Sustaining Decomposition of Ammonium Nitrate Containing Fertilisers, Lemura Agro Oy

8P-08

VLIVY UPLATŇUJÍCÍ SE PŘI REAKCI FOSFÁTU S KYSELINOU TRIHYDROGENFOSFOREČNOU

JAN VÍDENSÝ, DAVID GABRIŠ a IVONA SEDLÁŘOVÁ

Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
Jan.Vidensky@vscht.cz

Procesy spojené s rozkladem fosfátových surovin kyselinou trihydrogenfosforečnou mají značný průmyslový význam při výrobě umělých hnojiv. Práce se zabývá studiem vlivu velikosti zrn apatitu Kola super na průběh reakce s kyselinou trihydrogenfosforečnou. Jedná se o reakci mezi kapalnou a pevnou fází, vedenou tak, že při ní dochází k rozpuštění vznikajících produktů. Všechny experimenty byly prováděny ve vsádkovém izotermním míchaném reaktoru s frakcemi částic apatitu o velikosti 0,160–0,200 mm, 0,200–0,250 mm, 0,250–0,315 mm, 0,315–0,400 mm a 0,400–0,500 mm

v rozmezí teplot 293 až 323 K. K rozkladu byla použita kyselina trihydrogenfosforečná o koncentraci 102,4 až 10 900 mol m⁻³ v takovém přebytku, že se její koncentrace během reakce prakticky neměnila. Průběh rozkladu byl sledován vážením nezreagovaného zbytku apatitu po přerušení reakce v různých časových intervalech. Výsledkem provedených měření jsou závislosti stupně konverze na čase. Experimentální údaje o vlivu velikosti zrn apatitu a reakční teploty byly zpracovány pomocí vztahů odvozených z modelu nezreagovaného jádra s použitím kinetické rovnice mocninného typu.

Z provedených měření vyplývá, že rychlost reakce v závislosti na koncentraci kyseliny trihydrogenfosforečné vykazuje maximum. Bylo zjištěno, že hodnota řádu reakce roste se zvyšující se teplotou. Řád reakce vzhledem ke kyselině trihydrogenfosforečné se pohyboval v rozmezí 0,27 až 0,50 pro frakci 0,160–0,200 mm a 0,28 až 0,51 pro frakci 0,315–0,400 mm. Řád reakce vzhledem ke koncentraci H₃O⁺ iontů se pohyboval v rozmezí 0,51 až 0,92 pro frakci 0,160–0,200 mm a 0,53–0,96 pro frakci 0,315–0,400 mm. Z teplotní závislosti reakce byly vyhodnoceny zdánlivé aktivační energie, jejichž hodnoty se pohybují v rozmezí 29,2 až 45,5 kJ mol⁻¹ pro frakci

0,160–0,200 mm a 30,9 až 46,1 kJ mol⁻¹ pro frakci 0,315–0,400 mm. Z vyhodnocených kinetických parametrů je zřejmé, že jejich hodnota není závislá na velikosti částic apatitu. Ze získaných údajů rychlosti reakce apatitu s kyselinou trihydrogenfosforečnou, vztaženou na jednotku reakční plochy, vyplývá jejich nezávislost na velikosti použitého zrna. Toto zjištění má velký význam pro výpočet průmyslových rozkladných zařízení, neboť výchozí apatitová surovina je představována souborem částic různých velikostí.

Tato práce vznikla v rámci výzkumných záměrů MSM 6046137301.

LITERATURA

1. Lakota V.: Chem. Prum. 22 (2), 65 (1972).
2. Cívín J., Glaser V., Vosolsobě J.: Chem. Prum. 28 (6), 289 (1978).
3. Jambor J., Beránek J.: Chem. Prum. 34 (6), 289 (1984).
4. Dorozhkin S.: Ind. Eng. Chem. Res. 35, 4328 (1996).
5. Dorozhkin S.: J. Coll. Interface Sci. 191, 489 (1997).
6. Mgaidi A., Brahim F., Oulahna D., El Maaoui M., Dodds J.: Ind. Eng. Chem. Res. 42 (10), 2067 (2003).

PŘEHLED PLENÁRNÍCH PŘEDNÁŠEK

PL 1	<i>Ch. Näther</i>	News from old drugs: Investigations on the polymorphism of glucocorticoids
PL 2	<i>F. Tureček, M. H. Gelb, C. R. Scott, Y. Li, D. Wang</i>	Mass spectrometry in clinical enzymology: Toward newborn screening of inborn errors of metabolism
PL 3	<i>V. Křen, R. Gažák, D. Walterová, J. Ulrichová, V. Šimánek</i>	Sylibin a silymarin – nové možnosti aplikace v biomedicině, aneb starého psa lze (někdy) naučit i novým kouskům
PL 4	<i>Z. Kejík, K. Záruba, D. Michalík, J. Šebek, J. Dian, S. Pataridis, K. Volka, V. Král</i>	Optical sensing system for ATP using porphyrin–alkaloid conjugates
PL 5	<i>J. Šmidrkal, V. Filip</i>	Tenzidy
PL 6	<i>J. Moravcová</i>	Sacharidy
PL 7	<i>P. Zuman</i>	Polarografie organických látek

PŘEHLED PŘEDNÁŠEK A VÝVĚSKOVÝCH SDĚLENÍ PODLE SEKČÍ

Sekce 1 - Analytická a fyzikální chemie

Přednášky

1L-01	<i>J. Barek, K. Čížek, J. Fischer, K. Pecková</i>	Využití netradičních elektrodových materiálů pro voltametrické stanovení submikromolárních koncentrací vybraných pesticidů
1L-02	<i>T. Navrátil, M. Petr, Z. Šenholdová, K. Přistoupilová, T.I. Přistoupil, M. Heyrovský, D. Peclová, E. Kohlíková</i>	Využití elektrochemie ke studiu účinků suplementovaného kreatinu na lidský metabolismus
1L-03	<i>P. Zuman, M.S. Baymak</i>	Experimentální důkaz vzniku karbinolaminu při reakci benzaldehydu s hydrazinem. Rovnováhy a kinetika
1L-04	<i>Z. Navrátilová, L. Vaculíková</i>	Elektrody modifikované jílovými minerály
1L-05	<i>R. Kodým, H. Bergmann, K. Bouzek</i>	Studie vlivu geometrie elektrod v cele pro přímou elektrochemickou desinfekci pitné vody na celkovou proudovou účinnost vývoje aktivního chlóru
1L-06	<i>T. Navrátil, B. Yosypchuk</i>	Automatizace elektrochemických měření
1L-07	<i>T. Bystrouň, K. Bouzek, F. Lapičque</i>	Studie elektrochemické methoxylace 4-methylanisolu na uhlíkové elektrodě
1L-08	<i>J. Ludvík, P. Štěpnička</i>	Studium intramolekulárních elektronických interakcí a distribuce elektronů pomocí “redoxních sond” na bázi ferrocenu
1L-09	<i>A. Langauf, H. Horáková, R. Vespalec</i>	Elektroforetický výzkum použitelnosti cyklodextrinů pro chirální separace nabitých klastrových sloučenin boru
1L-10	<i>M. Krčmová, R. Vespalec</i>	Zeslabení ultrafialového světla roztoky biologických pufrů
1L-11	<i>R. Ovádeková, J. Labuda</i>	Carbon nanotubes, gold nanoparticles and nanohybrids based DNA biosensors
1L-12	<i>O. Fischer, E. Fischerová</i>	Tvorba kovových nanovrstev – technika UPD
1L-13	<i>J. Chovancová, Ch. Guillard, E. Puzenat, M. Veselý</i>	Preparation of TiO ₂ thin films using sol-gel methods and study of their photocatalytic, hydrophilic and optical properties
1L-14	<i>P. Chuchvalec, J.P. Novák</i>	Predikční postup stanovení kritických veličin uvnitř homologických řad
1L-15	<i>M. Zábranský, Z. Kolská, V. Růžička</i>	Teplotní kapacity: aktualizace a doplněk databáze kriticky zhodnocených a doporučených dat pro čisté kapaliny

- 1L-16 *A. Trilčová, I. Imrichová, A. Synytsya, M. Maryška, J. Čopíková* Fázové přechody v kandytech
- 1L-17 *J. Trögl, J. Hálková, G. Kuncová, L. Kubíková, P. Pařík, K. Demnerová, S. Ripp, G.S. Sayler* Kvantitativní vztahy mezi strukturou a aktivitou (QSAR) polutantů pomocí binárních fingerprint deskriptorů
- 1L-18 *K. Flórián, J. Hassler, S. Ružičková, V. Boková* Moderné metody priamej (bezrozkladovej) atómovej spektrometrie: je možný návrat oblúkových výbojov do spektrochemických laboratórií popri ETV-ICP-OES?
- 1L-19 *V. Slovák, R. Maršálek, B. Taraba* Změny na povrchu částice uhlí při nízkoteplotní oxidaci
- 1L-20 *M. Aranyosiová, D. Chorvát, A. Chorvátová, C. Bíro, M. Kopáni, J. Jakubovský, M. Michalka, D. Velič* Spektroskopie a chemická vizualizácia povrchov biologických vzoriek
- 1L-21 *Z. Plzák* Management jakosti jako součást výuky analytické chemie
- 1L-22 *J. Labuda, J. Barek* Aktuální úlohy v činnosti Divize analytické chemie Evropské asociace pro chemické a molekulární (DAC/EuCheMS – Division of Analytical Chemistry of the European Association for Molecular and Chemical Science) a Divize analytické chemie IUPAC (ACD/IUPAC - Analytical Chemistry Division of IUPAC)
- 1L-23 *O. Blažtík, M. Svoboda, H. Binková, Z. Horáková, R. Salzman, V. Adam, R. Kizek* Vztah obsahu metalothioneinu k průběhu nádorového onemocnění
- 1L-24 *O. Blažtík, M. Svoboda, H. Binková, Z. Horáková, R. Salzman, V. Adam, D. Potěšil, R. Kizek* Proces vytváření rezistence vůči platinovým cytostatikům

Vývěsková sdělení

- 1P-01 *V. Boková, J. Hassler, P. Barth, M. Matherny, K. Flórián* Exploratórna analýza výberu spektrálnych čiar tandemovej metódy kombinácie elektrotermickej atomizácie a budenia v indukčne viazanej plazme.
- 1P-02 *V. Boková, J. Hassler, P. Barth, K. Flórián* Vývoj novej metódy na priamu analýzu SiC technikou ETV-ICP-OES v priemyselnej praxi.
- 1P-03 *T. Bystroň, K. Bouzek* Studie elektrochemické methoxylace 4-methylanisolu v prostředí methanolu a 1-ethyl-3-methylimidazolium ethylsulfátu
- 1P-04 *H. Čechlovská, N. Fasurová, M. Pekař, J. Kučerík* Fluorescence huminových kyselin s ohledem na jejich supramolekulovou strukturu
- 1P-05 *K. Čížek, J. Barek, M. Ersöz, J. Zima* Využití různých druhů uhlíkových elektrod pro stanovení stopových množství 3-nitrofluoranthenu a 3-aminofluoranthenu
- 1P-06 *A. Daňhel, J. Barek* Voltametrické stanovení vybraných chemických karcinogenů
- 1P-07 *H. Dejmková, J. Zima, M. Ersöz, J. Barek* Voltametrické stanovení aminonitrofenolů na uhlíkové pastové elektrodě
- 1P-08 *N. Fasurová, I. Novotná* Using of pyrene and perylene fluorescent probes to the study of humic acids
- 1P-09 *Z. Fečková* Voltampérometria imobilizovaných mikročástic – Fe prášky s modifikovaným povrchem
- 1P-10 *J. Fischer, L. Vaňourková, J. Barek, B. Yosypchuk, T. Navrátil* Stříbrná pevná amalgamová elektroda a její využití pro voltametrické stanovení agrochemikálií
- 1P-11 *A. Zymelka, M.L. Goniewicz, J. Czogala, B. Koszowski* A review of analytical methods for the determination of benzene in environmental samples
- 1P-12 *A. Zymelka, M.L. Goniewicz, J. Czogala, B. Koszowski* Chromatographic determination of benzene after its direct extraction to solid phase from main and sidestream tobacco smoke
- 1P-13 *M. Heželová* Vplyv pH podmienok na redukciu dusičnanov pomocou elementárneho železa

- 1P-14 D. Hynek, P. Šimon Stability of PMMA ternary nanocomposites
- 1P-15 J. Chomoucká, L. Bierská, P. Dzik, M. Veselý Nanášení transparentních vrstev TiO₂ a jejich fotokatalytické vlastnosti
- 1P-16 D. Ivánová, J. Kavuličová, J. Durišín Termodynamická analýza fázových diagramů železo-prímes
- 1P-17 V. Kanický, K. Novotný, M. Holá, L. Zao-
rálková, T. Čtvrtníčková, A. Hrdlička,
T. Vaculovič, M. Pištěková, M. Galiová,
V. Možná, A. Staňková, V. Otruba. Plazmová spektrometrie s využitím laseru pro prvkovou analýzu
a chemické mapování
- 1P-18 J. Kavuličová, D. Ivánová, J. Durišín Chemické potenciály fáz železa a ich použitie v termodynamike binár-
nych sústav železo-prímes
- 1P-19 M. Klučáková, F. Krčma, J. Vrajová Plazmochemická úprava huminových kyselin a jejich komplexů
- 1P-20 R. Knob, V. Maier, J. Petr, J. Horáková,
J. Ševčík Chirální seperace kapilární elektroforézou s využitím bezkontaktní
vodivostní detekce
- 1P-21 R. Kodým, K. Bouzek, D. Šnita,
J. Thonstadt Studie rozložení lokálních hodnot potenciálů a proudových hustot
podél bipolární elektrody
- 1P-22 R. Ovádeková, S. Jantová, K. Špirková,
Š. Stankovský, J. Labuda Carbon nanotubes based DNA biosensor for the detection of DNA
damage caused by quinazolines
- 1P-23 R. Maršálek Zeta potenciál jílových minerálů
- 1P-24 K. Mičková, A. Trilčová, A. Synytsya,
P. Blafková, J. Ederová, J. Čopíková Studium chitin-glukanového komplexu mycelia *Aspergillus niger* me-
todami termické analýzy
- 1P-25 D. Mišičák, P. Ševčík, L. Adamčíková Oscilačný systém aspirín - bromičnan a hydrolýza aspirínu
- 1P-26 F. Novák, O. Koukol, R. Hrabal,
I. Bartošová, J. Kalčík Determination of Pogr species in fungus *Xerocomus badius* by ³¹P
NMR spectroscopy
- 1P-27 S. Oplušíl, P. Barták, M. Rulík,
D. Chrastina, L. Čáp Analýza fosfolipidových biomarkerů plynovou chromatografií
- 1P-28 J. Oslanská, M. Aranyosiová,
E. Chmielewska, D. Chorvát, D. Velič SIMS charakterizácia: hydrofobizácia a karbonizácia zeolitov
- 1P-29 K. Pecková, J. Zima, J. Berek Extrakčně-voltametrické stanovení nitrovaných derivátů naftalenu
- 1P-30 M. Pekař, P. Zedníčková, I. Koutník Acidobazické vlastnosti jihomoravského lignitu
- 1P-31 L. Pikna, L. Trnková Eliminačná voltampérometria - sledovanie vplyvu koncentrácie
chloridových iónov a pH elektrolytu na anodické rozpúšťanie Fe prášku
- 1P-32 L. Rábara, D. Velič Supramolekulové komplexy kumarínu s cyklodextrínmi študované
fluorescenčnou spektroskopiou a hmotnostnou spektrometriou
- 1P-33 D. Remeteiová, E. Sminčáková, R. Rusnák Štúdium možnosti využitia ultrazvuku vo frakcionačnej analýze
prašných spadov
- 1P-34 S. Ružičková, M. Matherny Kalibračný postup pri optimalizácii novej spektrometrickej tandemovej
techniky
- 1P-35 S. Ružičková, M. Matherny,
D. Remeteiová Štatistické hodnotenie analytických výsledkov pri spektrometrickej
optimalizácii
- 1P-36 J. Soukupová, L. Kvítek, A. Panáček Study of silver nanoparticle stability
- 1P-37 H. Strnadová, L. Kvítek Studium fyzikálně-chemických vlastností povrchově aktivních látek
v roztocích polymerů za různých podmínek
- 1P-38 M. Stupavská, M. Aranyosiová, D. Velič,
D. Chorvát Matricový efekt v systéme 1,6-difeny-1,3,5-hexatrién-β-cyklodextrín /
fulerén
- 1P-39 M. Valach, J. Katrlík Aplikácia mikrobiálneho biosenzora na stanovenie etanolu vo FIA
systéme
- 1P-40 K. Vítková, J. Mydlová, I. Skačáni, L. Čáp,
P. Barták, J. Krupčík Analysis of the dimethyl and diethyl 2,3-pentadiendioate compounds
with gas chromatographic methods
- 1P-41 J. Vojtěchovská, L. Kvítek Studium smáčení a povrchové energie Si/SiO₂ metodou dynamického
kontaktního úhlu
- 1P-42 A. Vránková, Z. Jůzová, J. Widimský,
T. Zelinka, J. Škrha Příprava metody stanovení volných plazmatických metanefrinů
vysokoučinnou kapalinovou chromatografií s elektrochemickou detekcí

1P-43	<u>V. Vyskočil, J. Barek, J. Zima</u>	Polarografické a voltametrické stanovení stopových množství 2,7-dinitro-9-fluorenonu
1P-44	<u>L. Wolfová</u>	Chemical degradation of paintfilms and solubility parameters of polymers
1P-45	<u>M. Zapadlo, J. Drábková, K. Vítková, L. Čáp, P. Barták</u>	Stanovení fenolů v pevných matricích metodou GC/MS
1P-46	<u>W. Zielinská – Danch, W. Wardas, A. Sobczak, I. Szoltysek-Boldys</u>	Determination of urinary cotinine and 1-hydroxypyrene and blood carboxyhemoglobine as the biomarkers of tobacco smoke exposure
1P-47	<u>O. Zítka, J. Petrlová, V. Beňová, L. Trnková, R. Mikelová, V. Adam, L. Havel, R. Kizek</u>	Stanovení streptavidinu pomocí voltametrických metod
1P-48	<u>M. Žitňan, J. Bďžoch, I. Bugár, V. Szöcs, T. Pálszegi, M. Janek, D. Chorvát, D. Velič</u>	Fluorescence dynamics of coumarin in montmorillonite structure
1P-49	<u>A. Langauf a R. Vespalec</u>	Platnost interakčního modelu 1:1 pro komplexaci α -cyklodextrinu a chrálních aniontů s jedním <i>nido</i> -7,8-dikarbaun-dekakarborátovým klastrem

Sekce 2 - Anorganická a materiálová chemie

Přednášky

2L-01	<u>Z. Janoušek, R. Dostál, J. Macháček, D. Hnyk, B. Štibr</u>	Azadikarbaboran arachno-1,6,9-NC ₂ B ₈ H ₁₃ a jeho <i>N</i> -alkyl deriváty a C-haloderiváty
2L-02	<u>J. Lukáč, M. Klementová, J. Šubrt, S. Bakardjiev, L. Szatmáry, V. Štengl, P. Bezdička</u>	Characterization of Zr ⁴⁺ -doped TiO ₂ prepared by homogenous co-precipitation method with emphasis on photocatalytic degradation of 4-CP
2L-03	<u>P. Mošner, J. Pospíšil, L. Koudelka</u>	Borofosfátová skla hořečnatá
2L-04	<u>M. Kadlečiková, A. Vojáčková, K. Jesenák, J. Breza, V. Luptáková, P. Szabó</u>	Testing the catalysts of the growth of carbon nanotubes using HF CVD technology
2L-05	<u>V. Parchanski, B. Frumarová, M. Frumar</u>	Optické vlastnosti tenkých vrstev systému (As ₂ Se ₃) _{80-x} (As ₂ Te ₃) _x (SnTe) ₂₀
2L-06	<u>K. Jesenák, L. Kuchta, G. Plesch, B. Kozlovská, A. Pleceník, P. Kůš</u>	Sensoric structures based on TiO ₂ films prepared by sol – gel methods
2L-07	<u>P. Štěpnička</u>	Ferrocenové fosfinkarboxylové ligandy
2L-08	<u>M. Malárová, K. Štěpánková, I. Popa, Z. Trávníček</u>	Novel ruthenium(III)-based compounds involving cytokinin derivatives: synthesis, characterization and cytotoxicity
2L-09	<u>M. Dušek, M. Erben, J. Merna</u>	Příprava a struktura polosendvičových titaničitých komplexů s halogenosilylovými substituenty na cyklopentadienylovém kruhu
2L-10	<u>M. Erben, M. Dušek</u>	Příprava cyklopentadienylových komplexů titanu s elektronově akceptorovými substituenty
2L-11	<u>A. Klaničová, Z. Trávníček, I. Popa, J. Vančo, Z. Šindelář</u>	Cu(II) komplexy s purinovými deriváty, vlastnosti a antiradikálová aktivita
2L-12	<u>J. Mikulík, Z. Trávníček, I. Popa, R. Zbořil, V. Kryšrof</u>	Komplexy Fe ^{III} s N ⁶ -substituovanými deriváty adenosinu: příprava, spektrální a magnetické vlastnosti, cytotoxicita
2L-13	<u>Z. Šindelář, M. Čajan, R. Zbořil, Z. Trávníček</u>	Syntéza a charakterizace Fe(III)-komplexů se Schiffovými bázemi obecného složení [Fe(salen)(L')] a [Fe(saloph)(L')]
2L-14	<u>R. Šipoš, M. Izakovič, J. Šima</u>	Effect of organic fluoroligand and/or fluoride on photoredox stability of iron(III) complexes
2L-15	<u>Z. Mácová, K. Bouzek</u>	Vliv poměru Na ⁺ a K ⁺ v silně alkalickém elektrolytu na kinetiku rozpouštění Fe anody
2L-16	<u>M. Nádherná, J. Reiter, J. Vondrák</u>	Iontová vodivost lithných solí v PMMA polymerních gelových elektrolytech

- 2L-17 Z. Mácová, K. Bouzek Porovnání vlivu křemíku a uhlíku přítomného ve struktuře železné anody na účinnost elektrochemické přípravy železnanu
- 2L-18 L. Vaculíková, E. Plevová, Z. Navrátilová Characterization of mixed-layer clay minerals using FTIR spectroscopy and thermal analysis (TG/DTA)
- 2L-19 V. S. Fajnor, M. Čákyová Příprava tetraoktylamonium-montmorillonitu

Vývěsková sdělení

- 2P-01 M. Ambrová, J. Jurišová, V. Danielík Elektrochemické vlastnosti fluoridových systémů obsahujících La_2O_3
- 2P-02 M. Bakardžiev, J. Holub, B. Štíbr Carborane chemistry. The preparation of some halogen derivatives of *arachno*-4- CB_8H_{14}
- 2P-03 Z. Weishauptová, V. Vrtílková, V. Machovič, L. Borecká Korozní zirkoniových slitin - vlastnosti korozní vrstvy oxidu zirkoničitého
- 2P-04 V. Brožek, M. Matoušek, M. Liška Diagnostika teplotních polí ve vodou stabilizovaném plazmatu
- 2P-05 V. Brožek, J. Matějček, K. Neufuss Wolframové a wolframkarbidové filtry a membrány
- 2P-06 M. Čajan, L. Štajgerová, Z. Trávníček Struktura a spektrální vlastnosti komplexů Fe(III) s deriváty 6-(benzyl-amino)purinu: DFT analýza
- 2P-07 V. Danielík, J. Gabčová, V. Khandl Fázové rovnováhy v ekologických hnojivách
- 2P-08 J. Domlátil, V. Brožek Využití plazmového emitru UV-záření při fotokatalýze směsi WO_3 - MoO_3
- 2P-09 M. Drábík, S. Balkovic, L. Gáliková Potential of Portland cements for specific (MDF) composites
- 2P-10 V. F. Fajnor, J. Hrachová, P. Billík Mechanochemické premeny montmorillonitu
- 2P-11 A. Fišerová, M. Vlček Tvorba difrakčních prvků v tenkých vrstvách amorfních chalkogenidů
- 2P-12 J. Gabčová, V. Danielík, P. Fellner, V. Khandl Ekologické hnojivá s obsahem síry
- 2P-13 S. Galková, I. Ondřejkovičová Příprava a studium vlastností izotokyanoželezitých komplexů s deriváty pyridínu
- 2P-14 J. Holub, M. Bakardžiev, D. Hnyk, I. Císařová, B. Štíbr The preparation and molecular structure of new azacarbaborane 7-^tBu-7,1,5,12- $\text{NC}_3\text{B}_8\text{H}_{12}$
- 2P-15 A. Hovorková, D. Bachan, Č. Drašar, P. Lošťák Příprava a vlastnosti monokrystalů $(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_{1-x}(\text{As}_2\text{Se}_3)_x$
- 2P-16 K. Jesenák, L. Kuchta, V. Š. Fajnor Příprava a vlastnosti anorganických aerogelů
- 2P-17 J. Jiráček, L. Koudelka, P. Mošner Studium skel systému $\text{ZnO-Bi}_2\text{O}_3\text{-P}_2\text{O}_5$
- 2P-18 K. Kotková, H. Tichá Optické vlastnosti skel systému $15\text{ZnO-xPbO-(85-x)P}_2\text{O}_5$
- 2P-19 V. Kovačič, J. Mílitký, J. Grégr Kontinuální čedičová vlákna
- 2P-20 I. Králová, M. Veselý Characterisation of "smart" media for inkjet printing industry
- 2P-21 D. Kramářová, J. Brandštetr, K. Rusín Waste protein materials like binders of foundry sands
- 2P-22 J. Kuchár, J. Černák, W. Massa $\text{Cu(en)}_2\text{Cu}_2\text{Cd}(\text{CN})_6$ and $\text{Cu(men)}_2\text{Cu}_2\text{Cd}_{12}(\text{CN})_6$: two organic-inorganic hybrid materials based on cyano ligands
- 2P-23 L. Kvítek, A. Panáček, R. Prucek, J. Soukupová, R. Novotný, M. Kolář Nanočástice stříbra - od katalýzy po bakterie
- 2P-24 M. Lamač, I. Císařová, P. Štěpnička Příprava, charakterizace a koordinační vlastnosti nových ferrocenových fosfinkarboxylových kyselin
- 2P-25 J. Luxová, P. Šulcová, M. Trojan Korozně-inhibiční vlastnosti perovskitových sloučenin ABO_3
- 2P-26 O. Lyutakov, L. Huttel, V. Švorčík Index lomu tenkých polymerních vrstev
- 2P-27 V. Machovič, L. Kopecký, F. Kolář, J. Svítlová Studium vlastností kompozitu cement - polyethylentereftalátová vlákna Ramanovou spektroskopií a elektronovou mikroskopou
- 2P-28 J. Malo, P. Segla, D. Mikloš, M. Melník Spectral and structural study of copper(II) 2,6-pyridinedicarboxylates
- 2P-29 M. Matuchová, K. Zdansky, J. Zavadil Study of lead iodide crystals for X-ray detection

- 2P-30 S. Nagynová, S. Čuvanová, M. Reháková ¹H NMR organomodifikovaných mednatých foriém syntetického zeolitu ZSM5
- 2P-31 Z. Ondrušová, P. Olejníková, M. Koman, M. Melník, D. Hudecová Biologické účinky novosyntetizovaných biokoordinačných zlúčenín medi
- 2P-32 J. Palarčík, L. Svoboda Stanovení isoelektrického bodu TiO₂
- 2P-33 A. Panáček, L. Kvítek, M. Kolář, R. Večeřová Antibakteriální aktivita nanočástic stříbra
- 2P-34 V. Pavlík, E. Jóna, K. Nemčeková Vplyv oxidu zirkoničitého na termickú stabilitu lítokremičitých skiel
- 2P-35 L. Pekárek Syntéza a růst monokystalů indium fosfidu pro detektory záření
- 2P-36 L. Píknová, K. Gyoryová, J. Kovářová, J. Chomič, D. Hudecová, D. Mudroňová, V. Zeleňák, Z. Vargová *Příprava a štúdium vlastností 2-chlórbenzoátov zinočnatých s bioaktívnymi ligandmi*
- 2P-37 E. Plevová, V. Šugárková Vliv anizotropie a minerálního složení na dilataci hornin
- 2P-38 J. Pospíšil, L. Koudelka, P. Mošner Vlastnosti a struktura skel o složení 50MO-10B₂O₃-40P₂O₅ a 50MO-10B₂O₃-40P₂O₅+16TiO₂, M=Ca²⁺, Pb²⁺, Zn²⁺
- 2P-39 O. Procházková, J. Grym, J. Zavadil, M. Kopecká Rare earth elements and oxides in liquid phase epitaxy
- 2P-40 M. Otyepka, E. Otyepková, Č. Gregor, R. Prucek, R. Zbořil Catalytic decomposition of hydrogen peroxide on iron oxides
- 2P-41 M. Sapietová, E. Jóna, K. Jesenák, L. Kuchta Štúdium interakcie imidazolu s Ni(II) A Fe(III) formami montmorillonitu v celom rozsahu pH vodných roztokov tejto organickej bázy
- 2P-42 J. Siegel, V. Kotál, P. Slepíčka, V. Švorčík Příprava tenkých kovových vrstev na polymerech
- 2P-43 M. Liptáková, V. Slovák Vliv CuCl₂ na kinetiku oxidace oxidačně alterovaného uhlí
- 2P-44 F. Šrobár, O. Procházková A model of gettering effects of rare-earth elements in III-V compounds
- 2P-45 M. Tůma, P. Šulcová, M. Trojan Příprava sloučenin typu A_{2-(x+y)}Y_xLn_yO₃
- 2P-46 J. Zavadil, J. Pedlíková, J. Kalužný, D. Ležal Special glasses for IR applications
- 2P-47 D. Halamová, V. Zeleňák, M. Burčák Template removal from the surfactant-templated mesostructured silicas: comparative study of extraction and calcination route
- 2P-48 M. Žabčík, L. Beneš, P. Lošťák, Č. Drašar, Z. Zhou, C. Uher Preparation of novel magnetic semiconductors based on vanadium-doped Sb_{2-x}Bi_xTe₃ crystals

Sekce 3 - Organická a farmaceutická chemie

Přednášky

- 3L-01 J. Padevět, D. Dvořák Karbenové komplexy chromu jako nukleofily při enantioselektivní palladiem-katalyzované allylové substituci
- 3L-02 P. Szolcsányi, T. Gracza, K. Hraboňová, N. Prónayová Pd(II)-katalyzované cyklizácie aminoalkenitolov
- 3L-03 D. Nečas, M. Turský, M. Kotora Niklem katalyzovaná aktivace: tvorba vs. štěpení C-C vazeb
- 3L-04 M. Pour Karbonylaktivní laktonizace katalyzovaná Pd(0): vývoj metodologie a syntetické aplikace
- 3L-05 J. Pytela Výroba a vývoj kapalných polybutadienů ve firmě Sartomer
- 3L-06 I. Fryšová, J. Slouka Syntéza některých vícejaderných NH kyselin s benzo[g]chinoxalinovým a [1,2,4]triazinovým cyklem
- 3L-07 K. Zelenka, T. Trnka, P. Drašar Příprava steroidních derivátů porfyrinu pro studium jejich vlastností v polárním prostředí
- 3L-08 P. Klímková, Nguyen Thi Thu Huong, J. Šauliová, P. Drašar Syntéza spiroanelovaného oligopyrrolového macrocyklu odvozeného od lithocholové kyseliny

- 3L-09 *T. Pilarčík, J. Hájiček* K totální syntéze schizozygínu: neočekávaný oxidativní přesmyk sekoschizozyganového skeletu
- 3L-10 *P. Kutschy, Z. Čurillová, A. Salayová, K. Monde, M. Khlifa, M. Pilátová, J. Mojžiš* Syntéza, absolutní konfigurácia a protinádorová aktivita spiroindolínových fytoalexínů a ich analógov
- 3L-11 *S. Man, M. Nečas, J.-P. Bouillon, Ch. Portella, M. Potáček* Intra-intermolecular criss-cross cycloadditions of nonsymmetrical allenylazines with fluorinated enone
- 3L-12 *A. Klásek, A. Lyčka, M. Holčapek* Přesmyky imidazo[4,5-c]chinolin-2,4-dionů
- 3L-13 *N. Pavlíková, P. Klán* Dithiokarbonát jako linker pro fotolabilní chránící skupiny
- 3L-14 *M. Remko* Využitie teoretických metod pri vývoji nových liečiv
- 3L-15 *K. Musilek, K. Kuča, D. Jun, M. Doležal, V. Dohnal* Preparation and antimycobacterial activity of hydrozonoformamide derivatives of isoniazid
- 3L-16 *J. Matyk, K. Waisser, J. Kaustová* Cílený výzkum antituberkulotik: V acylové části halogenované *N*-(4-alkylfenyl)salicylamidy a odpovídající 3-(4-alkylfenyl)benzoxazin-2,4(3H)-diony
- 3L-17 *J. Stýskala, J. Slouka* Syntéza kondenzovaných 1,2,4-triazinů metodou cyklizace hydrazono karbamátů
- 3L-18 *V. Langer, D. Gyepesová, E. Scholtzová, J. Lustoň, J. Kronek, M. Kooš* Štruktúra 2-(4-hydroxyfenyl)-4,4-dimetyl-2-oxazolínu

Vývěsková sdělení

- 3P-01 *A. Andicsová, M. Štefko, D. Věgh* Molecularly ordered p- conjugated oligomers networks: synthesis of fluorene-oxadiazole containing oligomere
- 3P-02 *W. Baran* The comparison of photocatalytic activity of TiO₂ and Fe(III) salt during sulfa-drugs photodegradation
- 3P-03 *W. Baran, J. Sochacka* The chemical mechanism of sulfa-drugs photocatalytic degradation with TiO₂/UV and FeCl₃/UV
- 3P-04 *R. Doležal, K. Waisser, L. Kubicová, J. Kaustová* *N*-benzylthiosalicylamidy, nová skupina účinných antimykobakteriálních látek
- 3P-05 *P. Drašar, T. Trnka, P. Štěpánek, D. Monti, G. Mancini, K. Zelenka* Příprava a studium samoskladných vlastností porfyrinů se steroidní a cukernou *meso*-substitucí
- 3P-06 *I. Fryšová, J. Slouka* Studium závislosti reakčních podmínek při anomální reakci formazylglyoxylových kyselin s aromatickými diaminy
- 3P-07 *I. Fryšová, A. Lyčka, J. Slouka* Syntézy vícejaderných NH kyselin a řešení jejich struktury
- 3P-08 *A. Imramovský, J. Vinšová, J. Jampilek* Preparation and antimycobacterial activity of hydrazonoformamide derivatives of isoniazide
- 3P-09 *J. Jampilek, A. Imramovský, J. Vinšová, J. Dohnal* Hydrophobic properties of new hydrazonoformamide derivatives of isoniazide
- 3P-10 *R. Vícha, V. Ježková, I. Kuřitka* Distribuce produktů nitrace ketonů substituovaných 1-adamantylem a fenylem
- 3P-11 *P. Kubizna, P. Szolcsányi* Pd(II)/CuCl₂ -katalyzované cyklizácie aminohexenitolové
- 3P-12 *V. Milata, R.M. Claramunt, P. Cabildo, M. D. Santa Maria, P. Cornago, L. Infantes, F.H. Cano, M.C. Carrión, A. Rodriguez, A. Guerrero, F.A. Jalón, B.R. Manzano, A. de la Hoz, J. Elguero* Preparation and properties of 2,4,6-Tris[(benz)azol-1-yl]-1,3,5-triazines
- 3P-13 *P. Mokrejš, D. Janáčová, K. Kolomazník, M. Mládek, F. Langmaier* Vlastnosti filmů připravených z hydrolysátu škrobu amarantové mouky
- 3P-14 *K. Musilek, K. Kuča, D. Jun, V. Dohnal, M. Doležal* Syntéza nových asymetrických bispyridiniových sloučenin s xylenovým spojovacím řetězcem a jejich schopnost *in vitro* reaktivovat organofosfáty inhibovanou acetylcholinesterasu

- 3P-15 *P. Petrik, P. Zimčík, J. Soukup* Vliv centrálního kovu na spektrální a fotochemické vlastnosti azaftalocyaninů
- 3P-16 *D. Gyepesová, P. Mach, E. Scholtzová, M. Sališová, A. Boháč, B. Gašpár, V. Langer* Anti-2-hydroxy-2-metyl-1-tetralón oxím
- 3P-17 *T. Solčán, P. Jakubec, V. Milata* Behaviour of enamidomalonates and enaminalomalonates under various reductive conditions. A novel synthetic approach to n-acetyl-n-aryl β -amino acids
- 3P-18 *M. Repovská, A. Sýkora, M. Žáková, E. Halža, P. Kuitschy, J. Mojžiš* Glyoxylové analogy brasinínu, brasinínu a 1-metoxylbrasinínu B
- 3P-19 *D. Věgh, T. Solčán, K. Hrnčariková, J. Kozíšek* New synthesis and synthetic utilisation of pentafluorobenzaldehyde and tetrafluoroterephthalic aldehyde

Sekce 4 - Petrochemie a polymery

Přednášky

- 4L-01 *M. Stejskal, V. Suchý, J. Kroufek, G. Šebor* Povrchové projevy hluboko uloženého ložiska ropy ve středních Čechách
- 4L-02 *G. Šebor, M. Pospíšil* Využití kapalných biopaliv pro pohon motorových vozidel
- 4L-03 *M. Pospíšil, G. Šebor* Alternativní plynná paliva v dopravě
- 4L-04 *J. Černý* Nová generace motorových olejů.
- 4L-05 *J. Blažek* Perspektiva využití bitumenových písků a kerogenních hornin při výrobě pohonných hmot
- 4L-06 *S. Skobliá, D. Tenkrát, M. Vosecký, M. Pohořelý, M. Lisý, M. Balaš, O. Prokeš* Využití biomasy jako obnovitelného zdroje energie
- 4L-07 *O. Prokeš* Energetické využití vodíku v ČR a ve světě
- 4L-08 *D. Římanová, O. Prokeš* Využití LPG v České Republice
- 4L-09 *K. Cíahotný, O. Prokeš* Technologie sušení a čištění zemního plynu používané v průmyslovém měřítku
- 4L-10 *M. Solich, O. Prokeš* Uskladnění zemního plynu a vyrovnávání odběrových křivek
- 4L-11 *D. Tenkrát, O. Prokeš* Plynná paliva z alternativních (obnovitelných) zdrojů a možnosti jejich přepravy a distribuce ve stávající plynovodní síti
- 4L-12 *T. Herink, Z. Bělohav, P. Zámotný, J. Lederer, J. Doskočil* Výzkum procesu pyrolýzy v a.s.Chemopetrol
- 4L-13 *J. Lederer, T. Herink, P. Fulín* Využití vedlejších produktů ethylenové jednotky
- 4L-14 *L. Starkbaumová, P. Zámotný, Z. Bělohav* Reaktivita cyklických a acyklických uhlovodíků při pyrolýze
- 4L-15 *D. Kubička, J. Lederer* Možnosti průmyslového zpracování aromatických uhlovodíků na složky motorových paliv a surovinu pro pyrolýzu
- 4L-16 *J. Šimek, J. Lederer, V. Krystl, J. Kolena* Průmyslový proces katalytické hydrodealkylace - kinetika a modelování
- 4L-17 *N. Kaloforov, H. Mäsiar* On explanation the non-additive high effect of very small polyethylene oxide quantities on increased of properties of foundry moulding mixtures
- 4L-18 *J. G. Drobny* Fluoropolymery, materiály s mimořádnými vlastnostmi
- 4L-19 *E. Bolhová, A. Ujhelyiová, K. De Clerck, A. Marcinčin* Vplyv distribúcie PES fibril na vyfarbitelnosť zmesných PP/PES vláken klasickým postupom
- 4L-20 *V. Dočkalová, J. Šimek* Možnosti recyklace binárních směsí PA 12 a PP

4L-21	<u>P. Sysel</u> , <u>H. Kompertová</u> , <u>R. Čechová</u> , <u>M. Traxmandlová</u> , <u>M. Fryčová</u>	Vysoce větvené polyimidy kombinované s lineárními polyimidy
4L-22	<u>P. Dzik</u> , <u>M. Veselý</u>	UV-síťovatelné deriváty polyvinylalkoholu
4L-23	<u>D. Berek</u>	Liquid chromatography of macromolecules under limiting conditions of enthalpic interactions

Vývěsková sdělení

4P-01	<u>M. Černý</u> , <u>J. Příkryl</u>	Barvení polyesterových vláken pomocí homologických disperzních barviv
4P-02	<u>Š. Chmela</u> , <u>L. Hřečková</u>	"Živá" radikálová polymerizácia styrénu riadená fluorescenčne značeným regulátorom.
4P-03	<u>F. Kolář</u> , <u>J. Svítlová</u>	Kinetika a mechanismus vytvrzování systémů epoxy/ anhydrid
4P-04	<u>Š. Kuruc</u> , <u>I. Novák</u> , <u>M. Števiar</u> , <u>I. Chodák</u>	Štúdium povrchových vlastností niektorých konštrukčných polymérov
4P-05	<u>D. Mošková</u> , <u>I. Chodák</u>	Nanokompozity na báze biodegradovateľnej polymérnej matrice
4P-06	<u>Z. Nógellová</u> , <u>I. Chodák</u>	Vplyv nanoplínů na vlastnosti kompozitů s kaučukovou matricou
4P-07	<u>I. Novák</u> , <u>M. Števiar</u> , <u>I. Chodák</u> , <u>Š. Kuruc</u>	Study of surface properties and aging of polyethylene terephthalate modified by discharge plasma
4P-08	<u>M. Števiar</u> , <u>I. Novák</u> , <u>I. Chodák</u> , <u>Š. Kuruc</u>	Study of surface energy and adhesive properties of Polyamide 12 modified by discharge plasma
4P-09	<u>V. Šugárková</u> , <u>E. Plevová</u> , <u>L. Vaculíková</u>	Příprava a vlastnosti mezofáze ze vzorků černouhelné smoly

Sekce 5 - Výuka, informatika a historie chemie

Přednášky

5L-01	<u>Procházka</u>	150 let chemické výroby ve Spolchemii a další budoucnost
5L-02	<u>O. Švajgl</u>	Výroba motorových paliv z mosteckého hnědého uhlí v Záluží
5L-03	<u>P. Holý</u>	Ke stému ročníku Chemických listů
5L-04	<u>H. Čtrnáctová</u>	Současnost chemického vzdělávání v České republice a Evropské unii
5L-05	<u>J. Barek</u> , <u>P. Drašar</u>	Eurobakalář chemie
5L-06	<u>M. Klečková</u> , <u>R. Holubová</u> , <u>V. Kainzová</u>	Integrace v přírodovědném vzdělávání - studium východisek
5L-07	<u>R. Šulcová</u> , <u>D. Pisková</u>	Chemie kolem nás – vzdělávání v projektech
5L-08	<u>J. Halbych</u> , <u>S. Hybelbauerová</u> , <u>D. Pisková</u> , <u>R. Šulcová</u>	Problematika aromaticity v učivu organické chemie
5L-09	<u>P. Koloros</u>	Projektování výuky chemie prostřednictvím experimentů
5L-10	<u>P. Opatrný</u> , <u>M. Bílek</u>	Školní chemické experimenty s reversibilními a ireversibilními kapesními ohřívači
5L-11	<u>J. Hrdlička</u> , <u>J. Huspeka</u>	Jednoduchý polarograf s počítačovým řízením
5L-12	<u>E. Urválková</u> , <u>P. Šmejkal</u> , <u>H. Čtrnáctová</u>	Laboratorní experimenty řízené multifunkčním přístrojem
5L-13	<u>M. Klečková</u>	Výběr témat pro další vzdělávání učitelů – co zajímá učitele chemie
5L-14	<u>P. Silný</u>	Súčasně problémy výučby chémie na Slovensku
5L-15	<u>O. Pytela</u>	Program OPchem a jeho využití při výuce
5L-16	<u>P. Drašar</u>	Grafické znázornění chiralit
5L-17	<u>J. Grégr</u> , <u>B. Jodas</u> , <u>J. Perný</u> , <u>J. Příhonská</u> , <u>M. Slavík</u>	Rozvoj prostorové představivosti v chemii
5L-18	<u>M. Bílek</u> , <u>M. Ulrichová</u>	WebQuest – virtuální prostředí pro projektovou výuku chemie
5L-19	<u>J. Kmeťová</u> , <u>H. Drobková</u>	Edukačná klíma na hodinách chémie v základných školách na Slovensku

- 5L-20 *M. Nič, J. Jiráť, B. Košata, M. Božoň, I. Hoskocvová, P. Matějka, J. Svoboda, D. Kohoutová, A. Kozlová, Z. Valentová* Projekt "Studijní opory pro studium chemie"
- 5L-21 *J. Kizlink* Výuka v předmětu "Technologie chemických látek"
- 5L-22 *R. Vícha, P. Kulhánek, M. Kovář, V. Mrkvička, D. Stará, S. Kafka* Systém Kerberos ve výuce Organické chemie
- 5L-23 *M. Navrátil* Zkušenosti s vedením chemicky orientovaných výzkumných a vývojových programů v průmyslovém prostředí
- 5L-24 *Z. Kolská, J. Rejnek* Inovace úloh laboratorního cvičení v předmětu Fyzikálně chemická cvičení
- 5L-25 *K. Kopecký, Z. Musil, P. Zimčík* Základní principy fotodynamické terapie v pregraduální výuce
- 5L-26 *N. Fasurová, L. Wolfová* Innovation of subject Laboratory classes from coloristics and colorimetrics
- 5L-27 *L. Palek, J. Dvořák, M. Doležal* Zavedení přípravy 3-chlorpyrazin-2,5-dikarbonitrilu do praktických cvičení předmětů Farmaceutická chemie a Technologie syntetických léčiv oboru farmacie na FaF UK v Hradci Králové

Vývěsková sdělení

- 5P-01 *M. Klučáková* Výuka chemie na Fakultě strojního inženýrství VUT v Brně
- 5P-02 *J. Grégr, B. Jodas, H. Schejbalová, M. Slavík* Voda okolo nás
- 5P-03 *J. Jiráť, M. Nič, B. Košata, E. Dibuszová, L. Šmidová, J. Znamenáček* Portál elektronických studijních opor VŠCHT Praha
- 5P-04 *A. Imramovský, J. Vinšová, J.M. Ferriz* Využití Chromatotronu® a jeho zařazení do laboratorní úlohy z organické chemie pro obor: Zdravotnická bioanalýtika, kombinovaná forma studia

Sekce 6 - Chemie životního prostředí

Přednášky

- 6L-01 *M. Veselý, P. Dzik, M. Veselá, J. Chomoucká, J. Chovancová* Antimikrobiální a samočisticí vlastnosti fotokatalytických superhydrofilních vrstev
- 6L-02 *J. Kalina, O. Urban, R. Bukovská* Rubisco - jeden z mnoha enzymů
- 6L-03 *J. Tomáš, L. Lahučký, J. Musilová, J. Bystrická, P. Obtulovič* Cudzorodé látky v půdách Podunajskej nížiny
- 6L-04 *T. Tóth, A. Vollmannová, J. Musilová, J. Bystrická, A. Hegedüsová, K. Jomová* Rizikové prvky antropogénneho pôvodu v pôdach Stredného Spiša
- 6L-05 *M. Matucha, M. Gryndler, H. Uhlířová, S.T. Forczek, K. Fuksová, P. Schröder, J. Rohlenová* Chlor v lesním ekosystému - přirozená chlorace půdní organické hmoty
- 6L-06 *J. Kizlink, K. Fančovič* Možnosti zužitkování použitých nízkotuhnoucích chladicích směsí na bázi glykolů
- 6L-07 *L. Kohl, M. Suchánek, Z. Plzák* Vývoj screeningové metody pro speciální analýzu organokovových látek v rybách pomocí komerčně dostupné instrumentace
- 6L-08 *P. Janoš, S. Grötschelová, L. Madronová, J. Kozler* Acidobazické, sorpční a iontově-výměnné vlastnosti materiálů na bázi huminových látek
- 6L-09 *L. Madronová, J. Novák, J. Kozler, B. Antošová* Příprava huminových kyselin vyšší čistoty

6L-10	<u>B. Antošová</u> , J. Kozler, J. Novák, J. Kubíček, L. Madronová	Hodnocení stimulačního účinku huminových látek na vyšší rostliny
6L-11	<u>A. Fargašová</u> , M. Molnárová	Reciprocal interactions between Se, Cd, Zn, Cu and Pb evaluated by inhibition of physiological processes and metals accumulation in seedlings of <i>Sinapsis alba</i> L.
6L-12	<u>J. Pastierová</u> , A. Fargašová, I. Ondrejkočivá	Comparison of inhibitory effects of Se(4+) and Se(6+) compounds on freshwater algae
6L-13	<u>M. Molnárová</u> , A. Fargašová	Assessment of inhibitory effect and metals accumulation (Cd, Zn, Cu, Pb, Se) in mustard <i>Sinapsis alba</i> L.
6L-14	H. Mäsiar, <u>N. Kaloforov</u>	Veľmi malé množstvá polyetylénoxidu s molekulovou hmotnosťou 600 000 modifikátorom niektorých základných technologických vlastností jadrových zmesí zlievárenských na báze alkalických fenolových živíc
6L-15	<u>P. Kotianová</u> , A. Caseiro, B. Rollinger, H. Puxbaum	Determination of organic wood smoke makers in aerosol samples
6L-16	<u>P. Kotianová</u> , H. Puxbaum	Evaluation of Vienna air pollution by determination of selected organic markers in aerosols samples

Vývěsková sdělení

6P-01	<u>K. Ambróová</u> , A. Fargašová	Monitoring of eutrophication waters near Bratislava
6P-02	<u>J. Baloun</u> , J. Prášek, M. Adámek, J. Hubálek, L. Trnková, P. Hanuštiak, V. Adam, D. Potěšil, R. Kizek	Detekce těžkých kovů za použití elektrochemických senzorů
6P-03	<u>J. Baloun</u> , J. Petřek, J. Víteček, V. Adam, D. Potěšil, K. Stejskal, L. Havel, M. Beklová, R. Kizek	Optimalizace stanovení oxidovaného glutathionu, jeho redukované formy a s-nitrosoglutathionu pomocí Brdičkovy reakce
6P-04	<u>J. Baloun</u> , J. Petrlová, J. Petřek, L. Havel, K. Stejskal, H. Vlašínová, J. Zehnálek, V. Adam, L. Trnková, J. Hubálek, R. Kizek	Studium rostlinných detoxikačních peptidů pomocí elektrochemických technik
6P-05	<u>S. Grötschelová</u> , H. Buchtová	Příprava a využití netradičních sorbentů v oblasti životního prostředí
6P-06	<u>T. Hubka</u> , M. Kandlová, K. Komárek, M. Šafaříková, I. Šafařík	Extrakce 4-nonylfenol monoethoxylátů z vody magnetickou tuhou fází
6P-07	E. Jurová, <u>K. Ciahotný</u>	Technologie odstraňování oxidu uhličitého z plynů využitelné v průmyslovém měřítku
6P-08	<u>M. Kandlová</u> , K. Komárek, M. Šafaříková, I. Šafařík	Využití extrakce magnetickou tuhou fází jako prekoncentrační metody při stanovení alifatických uhlovodíků, leteckého petroleje a nafty ve vodě
6P-09	<u>P. Kotianová</u> , H. Puxbaum, H. Bauer, G. Čík	Three cities intercomparison of n-alkanes and polyaromatic hydrocarbons in the atmospheric aerosols
6P-10	<u>J. Kučerík</u> , M. Pekař, J. Kislinger	Stabilita a degradace huminových kyselin
6P-11	<u>P. Mokrejš</u> , D. Janáčová, M. Mládek, K. Kolomazník, F. Langmaier	Modifikace enzymové hydrolýsy proteinových odpadů s cílem optimalizace filtračního procesu
6P-12	<u>M. Molnárová</u> , A. Fargašová	Selenium effects on living organisms
6P-13	<u>P. Možišková</u> , L. Kučeříková, M. Veselý	Využití lignitu jako sorbentu při fotokatalytickém odstraňování měďnatých iontů
6P-14	<u>I. Pasková</u> , V. Koza, S. Skoblja, P. Chalupa, B. Kremanová	Sorbenty pro vysokoteplotní odsiřování energoplynu z biomasy pro napájení palivového článku
6P-15	<u>J. Pastierová</u> , A. Fargašová, I. Ondrejkočivá	Porovnanie ekotoxikologického účinku Se(VI) a Cd(II) komplexov s heterocyklickým N-donorovým biologicky aktívnym ligandom nikotínamidom (nia) na riasu <i>Scenedesmus quadricauda</i>
6P-16	<u>P. Stopka</u> , E. Šebestová	EPR spektroskopie huminových kyselin a fulvokyselin

- 6P-17 M. Reháková, M. Kušnierová, L. Gaberová, L. Fortunová, S. Čuvanová Využitie prírodných zeolitov a biotechnologických postupov v environmentalnej oblasti
- 6P-18 J. Tomáš, T. Tóth, P. Lazor Využitie mletej odseparovanej magnezitovej horniny ako horečnatého hnojiva
- 6P-19 T. Tóth, J. Tomáš, P. Lazor, D. Bajčan, L. Lahučký Vplyv biokalov získaných kontinuálnou kofermentáciou živočíšnych odpadov na stav pôdnej hygieny a kvalitu dopestovaných plodín
- 6P-20 J. Víteček, S. Křížková, V. Šupálková, R. Mikelová, L. Trnková, V. Adam., M. Beklová, J. Pikula, M. Svoboda, R. Kizek Elektrochemické stanovení bromadiolonu
- 6P-21 J. Víteček, D. Šigutová, J. Petřek, J. Petřlová, L. Havel, J. Baloun, V. Adam, R. Kizek Stanovení thiolových sloučenin v dozrávajících somatických embryích smrku pichlavého (*Picea pungens*) ovlivněných kadmiiem
- 6P-22 A. Vollmannová, T. Tóth, L. Lahučký,
B. J. Musilová, K. Jomová Kumulácia medi a kadmia alternatívnymi plodínami
- 6P-23 P. Zachař, Č. Novotný Biodegradace některých organopolutantů pomocí ligninolytických hub
- 6P-24 P. Zachař, V. Král., V.A. Borek, L. Kodýmová Degradace biologicky a environmentálně významných sloučenin - modelování působení enzymu cytochrom P 450
- 6P-25 O. Zítka, V. Šupálková, H. Stavělková, S. Křížková, R. Mikelová, L. Trnková, A. Horná, L. Havel, R. Kizek Detekce kapsaicinu v paprice (*Capsicum annum*) pomocí kapalinové chromatografie s elektrochemickou detekcí

Sekce 7 - Chemie potravin a biotechnologie

Přednášky

- 7L-01 M. Šulc, M. Schilla Antioxidační aktivita vín v žrnosecké vinařské oblasti roku 2005. Srovnání metod
- 7L-02 P. Stopka, J. Křížová Antioxidanty a volné radikály v přírodních produktech
- 7L-03 L. Zahradníková, Š. Schmidt, S. Sekretár Test oxidačnej stability niektorých rastlinných tukov metódami zrýchlenej oxidácie
- 7L-04 S. Sekretár, Š. Schmidt, L. Zahradníková, L. Janáč Oxidation stability of edible fats exposed to microwave heating
- 7L-05 Š. Schmidt, J. Pokorný, S. Sekretár Natural antioxidant functionality during food processing
- 7L-06 M. Veselá, M. Veselý, J. Chomoucká Kinetika fotokatalytické dezinfekce vody
- 7L-07 P. Jeřábková, O. Zmeškal, M. Veselá Stanovení počtu buněk kvasinek pomocí fraktální analýzy
- 7L-08 J. Víteček, A. Wünschová, L. Obálová, R. Kizek, L. Havel Detekce oxidu dusnatého v rostlinných systémech
- 7L-09 R. Uvíra, F. Pudil Obrazová analýza potravin a virtuální realita
- 7L-10 E. Vítová, B. Loupancová, H. Štoudková, J. Zemanová, I. Macků Analýza mastných kyselín v čokoládě metodou plynové chromatografie
- 7L-11 V. Dohnal, R. Burdychová, H. Dvořáčková, T. Komprda Rychlá chromatografická metoda pro screening mikroorganismů produkujících toxické biogenní aminy v polotvrdém sýru
- 7L-12 M. Vespalcová, J. Zemanová, P. Řihák Využití separačních metod v analýze náhradních sladidel rostlinného původu
- 7L-13 H. Štoudková, J. Zemanová, I. Švarcová, M. Popelková, B. Loupancová Analýza obsahu γ -linolenové kyseliny v oleji pupalky dvouleté
- 7L-14 T. Zoufalý, P. Brynych České pivo každodenní fenomén
- 7L-15 P. Mokrejš, S. Sukop, D. Janáčová, M. Mládek, F. Langmaier, K. Kolomazník Zpracování ovčí vlny na keratinový hydrolyzát

- 7L-16 *P. Mokrejš, D. Janáčová, K. Kolomazník, M. Mládek, F. Langmaier* Možnosti ztekucení bílkovin amarantové mouky
- 7L-17 *O. Hegedüs, A. Hegedüsová, K. Jomová, A. Vargová, S. Šimková* Problematika obsahu a zachování selénu při pěstování kulturních rostlin

Vývěsková sdělení

- 7P-01 *J. Bolyó, G. Kuncová* Teplotná závislost optického kyslíkového senzoru v biofilme
- 7P-02 *T. Zoufalý, P. Brynych* České pivo kvalitou a objemem tradičně dobývá svět
- 7P-03 *P. Gavlasová, G. Kuncová, J. Bolyó, M. Vošahlíková, J. Pazlarová, J. Karban* Imobilizace biodegradérů methyl terc-butyl etheru (MTBE)
- 7P-04 *L. Čechová, D. Kramářová, M. Janalíková, E. Kašpárková, M. Lukešová* Účinek organických kyselin na vybrané mikroorganismy
- 7P-05 *M. Janalíková, E. Lukášková, Z. Molatová, V. Šteklová, M. Marounek* Aplikace organických kyselin na povrch chlazené drůbeže a jejich vliv na mikroflóru
- 7P-06 *L. Čechová, M. Janalíková, L. Kulendová, M. Mikulcová, J. Krejčí* Vliv monoacylglycerolů na inhibici nežádoucí mikroflóry potravin
- 7P-07 *S. Škrovánková, D. Kramářová, K. Šimánková, I. Hoza* Determination of ascorbic acid by HPLC with electrochemical detection
- 7P-08 *D. Kramářová, S. Škrovánková, M. Hábová, I. Hoza* Determination of riboflavin using HPLC with detection in meat products
- 7P-09 *Z. Kohajdová, J. Karovičová, M. Greifová, G. Greif, J. Lehkoživová* Determination of extraneous compounds in the lactic acid fermented vegetable juices by capillary isotachopheresis
- 7P-10 *J. Lehkoživová, J. Karovičová, Z. Kohajdová* Physical - chemical parameters of some commercial tomato ketchups
- 7P-11 *B. Loupancová, E. Vítová, H. Štoudková, F. Buňka, J. Zemanová* Změny organoleptických vlastností sterilovaných tavených sýrů v závislosti na době a způsobu skladování
- 7P-12 *F. Pudil, R. Uvíra, V. Janda* Shiitake (*Lentinus edodes*) jako zdroj biologicky a senzorycky aktivních látek
- 7P-13 *S. Sukop, P. Mokrejš, K. Kolomazník* Příprava proteinových hydrolyzátů a stanovení jejich molekulové hmotnosti
- 7P-14 *S. Škrovánková, D. Kramářová* Sensory active compounds – improvement of herbal tea flavour
- 7P-15 *P. Štern, J. Pokorný, K. Míková, Z. Panovská* Vliv obsahu oleje na reologické a texturní vlastnosti majonéz
- 7P-16 *R. Uvíra, F. Pudil* Multimediální obrazové databáze
- 7P-17 *F. Pudil, R. Uvíra, V. Janda* Těkavé látky hadovky smrduté (*Phallus impudicus*)

Sekce 8 - Průmyslová chemie - CHEMPROGRESS

Přednášky

- 8L-01 *A. Pálffy* Vodík jako alternativní zdroj energie
- 8L-02 *M. Šimíčková, V. Tukač, J. Hanika, V. Chyba, J. Lederer, J. Kolena* Analýza a modelování hydrogenace styrenu ve zkrápěném reaktoru
- 8L-03 *V. Fajt, L. Kurc, L. Červený* Vliv rozpouštědla na kinetiku hydrogenace substituovaných chinonů
- 8L-04 *J. Kolena, P. Morávek, O. Bortnovský, V. Tukač, J. Hanika* Selektivní krakování vyšších alkenů na propylen
- 8L-05 *R. Pjatkan, M. Prajer* Novinky ve vývoji polystyrenových plastů, polymerních směsí a nanokompozitních materiálů
- 8L-06 *V. Macho, B. Cibik, M. Olšovský, J. Michálek* Nové možnosti využití gumovej drvin v parciálnej substitúcii kaučukov v gumárskej zmesi

- 8L-07 *A. Murárová* Textile materials from the point of view of an evaluation of their physiology and comfort
- 8L-08 *J. Sýkorová, M. Jambrich, L. Hajduchová, I. Kopal, A. Murárová, M. Šiarnik* Špeciálne typy vláknitých materiálov pre bytové textílie
- 8L-09 *A. Rusnák, A. Murárová, V. Ďurman* Modification of the surfaces of textile materials and its effect on the transport properties
- 8L-10 *P. Mokrejš, M. Mládek, D. Janáčová, K. Kolomazník, F. Langmaier* Aplikace činicích chromitých břechek v technologickém koželužském procesu při výrobě vepřovicových usní
- 8L-11 *J. Horák* Vztah veřejnosti k chemickému průmyslu, jeho vliv na podmínky podnikání v Evropě a možnosti jeho ovlivnění
- 8L-12 *O. Míka, I. Mašek* Současné a budoucí analýzy rizika nebezpečných chemických látek a přípravků
- 8L-13 *V. Macho, M. Kavala, M. Olšovský, M. Králík* Výskumné a priemyselné využitie karbonylačnej redukcie a reduktívnej karbonylácie organických nitro- a nitrózozlúčenín
- 8L-14 *P. Koutník, P. Roubíček, J. Drottnerová, J. Maláč, J. Krivánek* Zhodnocení tuzemských kaolinů na produkty s vysokou přidanou hodnotou
- 8L-15 *L. Knechtl, P. Karásek, S. Machovský* Výroba syntetických pryskyřic ve Spolchemii – současnost a perspektivy
- 8L-16 *Š. Florián, I. Novák, V. Pollák, M. Šivová* Investigation of properties of pressure-sensitive adhesives containing metallized particles
- 8L-17 *L. Novák, E. Borsig, L. Hřčková, A. Fiedlerová, V. Pollák, A. Kleinová* Investigation of adhesive and surface properties of isotactic polypropylene grafted by maleic anhydride in quasi-solid state
- 8L-18 *H. Mäsiar, N. Kaloforov, J. Kasala* Účinek velmi malých množství polyethylénoxidu na vybraných druhoch formovacích zmesí z výroby
- 8L-19 *H. Mäsiar, N. Kaloforov* Veľmi malé množstvá polyethylénoxidu modifikátorom technologických vlastností zlievarenských formovacích zmesí aktivovaného bentoninu

Vývěsková sdělení

- 8P-01 *S. Miníková, I. Sroková, A. Ebringerová, V. Sasinková* The transesterification of hydroxyethylcellulose under microwave energy
- 8P-02 *P. Mokrejš, M. Mládek, D. Janáčová, K. Kolomazník, F. Langmaier* Zkoušky vepřovicových usní vyčiněných břechkami připravenými z chromitého koláče po hydrolýse postružin
- 8P-03 *A. Murárová, S. Podobeková, A. Rusnák* The adaptation of a method for the measurement of the thermal conductivity of fibres in a perpendicular direction
- 8P-04 *A. Murárová, S. Podobeková, Z. Jakubíková* Zmáčateľnosť povrchovo upravených textilných materiálov
- 8P-05 *L. Poláková, J. Svobodová, J. Šmidrkal, V. Filip* Charakteristika buildrových systémů
- 8P-06 *A. Rusnák, A. Murárová, K. Olejníková, P. Fedorko* Electrical conductivity of the PET and PP textile materials with modified surfaces
- 8P-07 *L. Semenyšinová, L. Svoboda* Samonosný pyrolytický rozklad hnojiv NPK
- 8P-08 *J. Vídenský, D. Gabriš, I. Sedlářová* Vlivy uplatňující se při reakci fosfátu s kyselinou trihydrogenfosforečnou

AUTORSKÝ REJSTŘÍK

- Adam V. 1L-23, 1L-24, 1P-47, 6P-02, 6P-03, 6P-04, 6P-20, 6P-21
Adamčíková L. 1P-25
Adámek M. 6P-02
Ambróová K. 6P-01
Ambrová M. 2P-01
Andicsová A. 3P-01
Antošová B. 6L-09, 6L-10
Aranyosiová M. 1L-20, 1P-28, 1P-38
- Bachan D. 2P-15
Bajčan D. 6P-19
Bakardjiev M. 2P-02, 2P-14
Bakardjieva S. 2L-02
Balaš M. 4L-06
Balkovic S. 2P-09
Baloun J. 6P-02, 6P-03, 6P-04, 6P-21
Baran W. 3P-02, 3P-03
Barek J. 1L-01, 1L-22, 1P-05, 1P-07, 1P-10, 1P-29, 1P-43, 5L-05, 1P-06
Barták P. 1P-27, 1P-40, 1-P45
Barth P. 1P-01, 1P-02
Bartošová I. 1P-26
Bauer H. 6P-09
Baymak M.S. 1L-03
Bdžoch J. 1P-48
Beklová M. 6P-03, 6P-20
Bělohav Z. 4L-12, 4L-14
Beneš L. 2P-48
Beňová V. 1P-47
Berek D. 4L-23
Bergmann H. 1L-05
Bezdička P. 2L-02
Bierská L. 1P-15
Bílek M. 5L-10, 5L-18
Billík P. 2P-10
Binková H. 1L-23, 1L-24
Bíro C. 1L-20
Blařková P. 1P-24
Blařtík O. 1L-23, 1L-24
Blařek J. 4L-05
Boháč A. 3P-16
Boková V. 1L-18, 1P-01, 1P-02
Bolhová E. 4L-19
Bolyó J. 7P-01, 7P-03
Borecká L. 2P-03
Borek V.A. 6P-24
Borsig E. 8L-17
Bortnovský O. 8L-04
Bouillon J.-P. 3L-11
Bouzek K. 1L-05, 1L-07, 1P-03, 1P-21, 2L-15, 2L-17
Božoň M. 5L-20
Brandštetr J. 2P-21
Breza J. 2L-04
Brožek V. 2P-04, 2P-05, 2P-08
- Bryných P. 7L-14, 7P-02
Bugár I. 1P-48
Buchtová H. 6P-05
Bukovská R. 6L-02
Buňka F. 7P-11
Burčák M. 2P-47
Burdychová R. 7L-11
Bystřická J. 6L-03, 6L-04
Bystroň T. 1L-07, 1P-03
- Cabildo P. 3P-12
Cano F.H. 3P-12
Carrion M.C. 3P-12
Caseiro A. 6L-15
Čiahotný K. 4L-09, 6P-07
Čibík B. 8L-06
Čisařová I. 2P-14, 2P-24
Claramunt R.M. 3P-12
Cornago P. 3P-12
Czogala J. 1P-11, 1P-12
- Čajan M. 2L-13, 2P-06
Čakyová M. 2L-19
Čáp L. 1P-27, 1P-40, 1-P45
Čechlovská H. 1P-04
Čechová L. 7P-04, 7P-06
Čechová R. 4L-21
Černák J. 2P-22
Černý J. 4L-04
Černý M. 4P-01
Červený L. 8L-03
Čík G. 6P-09
Čížek K. 1L-01, 1P-05
Čopíková J. 1L-16, 1P-24
Čtrnáctová H. 5L-04, 5L-12
Čtvrtníčková T. 1P-17
Čurillová Z. 3L-10
Čuvanová S. 2P-30, 6P-17
- Daňhel A. 1P-06
Danielik V. 2P-01, 2P-07, 2P-12
de Clerck K. 4L-19
de la Hoz A. 3P-12
Dejmková H. 1P-07
Demnerová K. 1L-17
Dian J. 4PL
Dibuszová E. 5P-03
Dočkalová V. 4L-20
Dohnal J. 3P-09
Dohnal V. 3L-15, 3P-14, 7L-11
Doležal M. 3L-15, 3P-14, 5L-27
Doležal R. 3P-04
Domlátil J. 2P-08
Doskočil J. 4L-12
Dostál R. 2L-01
Drábík M. 2P-09
Drábková J. 1-P45
- Drařar Ā. 2P-15, 2P-48
Drařar P. 3L-07, 3L-08, 3P-05, 5L-05, 5L-16
Drobková H. 5L-19
Drobný J. G. 4L-18
Drottnerová J. 8L-14
Durišin J. 1P-16, 1P-18
Đurman V. 8L-09
Dušek M. 2L-09, 2L-10
Dvořáčková H. 7L-11
Dvořák D. 3L-01
Dvořák J. 5L-27
Dzik P. 1P-15, 4L-22, 6L-01
- Ebringerová A. 8P-01
Ederová J. 1P-24
Elguero J. 3P-12
Erben M. 2L-09, 2L-10
Ersöz M. 1P-05, 1P-07
- Fajnor V. F. 2P-10
Fajnor V. S. 2L-19
Fajnor V. Š. 2P-16
Fajt V. 8L-03
Fančovič K. 6L-06
Fargašová A. 6L-11, 6L-12, 6L-13, 6P-01, 6P-12, 6P-15
Fasurová N. 1P-04, 1P-08, 5L-26
Fečková Z. 1P-09
Fedorko P. 8P-06
Fellner P. 2P-12
Férriz J.M. 5P-04
Fiedlerová A. 8L-17
Filip V. 5PL, 8P-05
Fischer J. 1L-01, 1P-10
Fischer O. 1L-12
Fischerová E. 1L-12
Fišerová A. 2P-11
Flórián K. 1L-18, 1P-01, 1P-02
Flórián Š. 8L-16
Forczek S.T. 6L-05
Fortunová L. 6P-17
Frumar M. 2L-05
Frumarová B. 2L-05
Fryčová M. 4L-21
Fryšová I. 3L-06, 3P-06, 3P-07
Fuksová K. 6L-05
Fulín P. 4L-13
- Gabčová J. 2P-07, 2P-12
Gaberová L. 6P-17
Gabriš D. 8P-08
Gáliková L. 2P-09
Galiová M. 1P-17
Galková S. 2P-13
Gařpár B. 3P-16
Gavlasová P. 7P-03

- Gažák R. 3PL
 Gelb M. H. PL2
 Goniewicz M.L. 1P-11, 1P-12
 Gracza T. 3L-02
 Gregor Ć. 2P-40
 Grégr J. 2P-19, 5L-17, 5P-02
 Greif G. 7P-09
 Greifová M. 7P-09
 Grötschelová S. 6L-08, 6P-05
 Grym J. 2P-39
 Gryndler M. 6L-05
 Guerrero A. 3P-12
 Guillard Ch. 1L-13
 Gyepesová D. 3L-18, 3P-16
 Gyoryová K. 2P-36
- Hábová M. 7P-08
 Hajduchová L. 8L-08
 Hájíček J. 3L-09
 Halamová D. 2P-47
 Halbych J. 5L-08
 Hálová J. 1L-17
 Halža E. 3P-18
 Hanika J. 8L-02, 8L-04
 Hanuštiak P. 6P-02
 Hassler J. 1L-18, 1P-01, 1P-02
 Havel L. 1P-47, 6P-03, 6P-04, 6P-21, 6P-25, 7L-08
 Hegedüs O. 7L-17
 Hegedüsová A. 6L-04, 7L-17
 Herink T. 4L-12, 4L-13
 Heyrovský M. 1L-02
 Heželová M. 1P-13
 Hnyk D. 2L-01, 2P-14
 Holá M. 1P-17
 Holčapek M. 3L-12
 Holub J. 2P-02, 2P-14
 Holubová R. 5L-06
 Holý P. 5L-03
 Horák J. 8L-11
 Horáková H. 1L-09
 Horáková J. 1P-20
 Horáková Z. 1L-23, 1L-24
 Horná A. 6P-25
 Hoskocová I. 5L-20
 Hovorková A. 2P-15
 Hoza I. 7P-07, 7P-08
 Hrabal R. 1P-26
 Hraňová K. 3L-02
 Hrachová J. 2P-10
 Hřčková L. 4P-02, 8L-17
 Hrdlička A. 1P-17
 Hrdlička J. 5L-11
 Hrnčariková K. 3P-19
 Hubálek J. 6P-02, 6P-04
 Hubka T. 6P-06
 Hudcová D. 2P-31, 2P-36
 Huspeka J. 5L-11
 Huttel L. 2P-26
 Hybelbauerová S. 5L-08
 Hynek D. 1P-14
- Chalupa P. 6P-14
 Chmela Š. 4P-02
 Chmielewska E. 1P-28
 Chodák I. 4P-04, 4P-05, 4P-06, 4P-07, 4P-08
 Chomič J. 2P-36
 Chomoucká J. 1P-15, 6L-01, 7L-06
 Chorvát D. 1L-20, 1P-28, 1P-38, 1P-48
 Chorvátová A. 1L-20
 Chovancová J. 1L-13, 6L-01
 Chrastina D. 1P-27
 Chuchvalec P. 1L-14
 Chyba V. 8L-02
- Imramovský A. 3P-08, 3P-09, 5P-04
 Imrichová I. 1L-16
 Infantes L. 3P-12
 Ivánová D. 1P-16, 1P-18
 Izakovič M. 2L-14
- Jakubec P. 3P-17
 Jakubíková Z. 8P-04
 Jakubovský J. 1L-20
 Jalón F.A. 3P-12
 Jambrich M. 8L-08
 Jampilek J. 3P-08, 3P-09
 Janáč L. 7L-04
 Janáčková D. 3P-13, 6P-11, 7L-15, 7L-16, 8L-10, 8P-02
 Janalíková M. 7P-04, 7P-05, 7P-06
 Janda V. 7P-12, 7P-17
 Janek M. 1P-48
 Janoš P. 6L-08
 Janoušek Z. 2L-01
 Jantová S. 1P-22
 Jeřábková P. 7L-07
 Jesenák K. 2L-04, 2L-06, 2P-16, 2P-41
 Ježková V. 3P-10
 Jiráček J. 2P-17
 Jiráček J. 5L-20, 5P-03
 Jodas B. 5L-17
 Jodas B. 5P-02
 Jomová K. 6L-04, 6P-22, 7L-17
 Jóna E. 2P-34, 2P-41
 Jun D. 3L-15, 3P-14
 Jurišová J. 2P-01
 Jurová E. 6P-07
 Jůzová Z. 1P-42
- Kadlečíková M. 2L-04
 Kafka S. 5L-22
 Kainzová V. 5L-06
 Kalčík J. 1P-26
 Kalina J. 6L-02
 Kaloforov N. 4L-17, 6L-14, 8L-18, 8L-19
 Kalužný J. 2P-46
 Kandelová M. 6P-06, 6P-08
 Kanický V. 1P-17
 Karásek P. 8L-15
- Karban J. 7P-03
 Karovičová J. 7P-09, 7P-10
 Kasala J. 8L-18
 Kašpárková E. 7P-04
 Katrlík J. 1P-39
 Kaustová J. 3L-16, 3P-04
 Kavala M. 8L-13
 Kavuličová J. 1P-16, 1P-18
 Kejík Z. 4PL
 Khandl V. 2P-07, 2P-12
 Khlifá M. 3L-10
 Kislinger J. 6P-10
 Kizek R. 1L-23, 1L-24, 1P-47, 6P-02, 6P-03, 6P-04, 6P-20, 6P-21, 6P-25, 7L-08
 Kizlink J. 5L-21, 6L-06
 Klán P. 3L-13
 Klanicová A. 2L-11
 Klásek A. 3L-12
 Klečková M. 5L-06, 5L-13
 Kleinová A. 8L-17
 Klementová M. 2L-02
 Klímková P. 3L-08
 Klučáková M. 1P-19, 5P-01
 Kmeťová J. 5L-19
 Knechtl L. 8L-15
 Knob R. 1P-20
 Kodým R. 1L-05, 1P-21
 Kodýmová L. 6P-24
 Kohajdová Z. 7P-09, 7P-10
 Kohl L. 6L-07
 Kohlíková E. 1L-02
 Kohoutová D. 5L-20
 Kolář F. 2P-27, 4P-03
 Kolář M. 2P-33, 2P-23
 Kolena J. 4L-16, 8L-02, 8L-04
 Kolomazník K. 3P-13, 6P-11, 7L-15, 7L-16, 7P-13, 8L-10, 8P-02
 Koloros P. 5L-09
 Kolská Z. 1L-15, 5L-24
 Koman M. 2P-31
 Komárek K. 6P-06, 6P-08
 Kompertová H. 4L-21
 Komprda T. 7L-11
 Kooš M. 3L-18
 Kopal I. 8L-08
 Kopáni M. 1L-20
 Kopecká M. 2P-39
 Kopecký K. 5L-25
 Kopecký L. 2P-27
 Koszowski B. 1P-11, 1P-12
 Košata B. 5L-20, 5P-03
 Kotál V. 2P-42
 Kotianová P. 6L-15, 6L-16, 6P-09
 Kotková K. 2P-18
 Kotorá M. 3L-03
 Koudelka L. 2L-03, 2P-17, 2P-38
 Koukol O. 1P-26
 Koutník I. 1P-30
 Koutník P. 8L-14
 Kovačič V. 2P-19

- Kovář M. 5L-22
 Kovářová J. 2P-36
 Koza V. 6P-14
 Kozler J. 6L-08, 6L-09, 6L-10
 Kozlová A. 5L-20
 Kozlovská B. 2L-06
 Kožíšek J. 3P-19
 Král V. 4PL, 6P-24
 Králik M. 8L-13
 Králová I. 2P-20
 Kramářová D. 2P-21, 7P-04, 7P-07, 7P-08, 7P-14
 Krčma F. 1P-19
 Krčmová M. 1L-10
 Krejčí J. 7P-06
 Kremanová B. 6P-14
 Kronek J. 3L-18
 Kroufek J. 4L-01
 Krupčík J. 1P-40
 Krystl V. 4L-16
 Kryštof V. 2L-12
 Křen V. 3PL
 Křivánek J. 8L-14
 Křížková S. 6P-20, 6P-25
 Křížová J. 7L-02
 Kubicová L. 1L-17, 3P-04
 Kubiček J. 6L-10
 Kubička D. 4L-15
 Kubizna P. 3P-11
 Kuča K. 3L-15, 3P-14
 Kučerík J. 1P-04, 6P-10
 Kučeříková L. 6P-13
 Kuchár J. 2P-22
 Kuchta L. 2L-06, 2P-16, 2P-41
 Kulendová L. 7P-06
 Kulhánek P. 5L-22
 Kuncová G. 1L-17, 7P-01, 7P-03
 Kurc L. 8L-03
 Kuruc Š. 4P-04, 4P-07, 4P-08
 Kuřitka I. 3P-10
 Kúš P. 2L-06
 Kušnierová M. 6P-17
 Kutschy P. 3L-10, 3P-18
 Kvítek L. 1P-36, 1P-37, 1P-41, 2P-33, 2P-23

 Labuda J. 1L-11, 1L-22, 1P-22
 Lahučký L. 6L-03, 6P-19, 6P-22
 Lamač M. 2P-24
 Langauf A. 1L-09, 1P-49
 Langer V. 3L-18, 3P-16
 Langmaier F. 3P-13, 6P-11, 7L-15, 7L-16, 8L-10, 8P-02
 Lapique F. 1L-07
 Lazor P. 6P-18, 6P-19
 Lederer J. 4L-12, 4L-13, 4L-15, 4L-16, 8L-02
 Lehkoživová J. 7P-09, 7P-10
 Ležal D. 2P-46
 Li Y. 2PL
 Liptáková M. 2P-43

 Lisý M. 4L-06
 Liška M. 2P-04
 Lošťák P. 2P-15, 2P-48
 Loupancová B. 7L-10, 7P-11, 7L-13
 Ludvík J. 1L-08
 Lukáč J. 2L-02
 Lukášková E. 7P-05
 Lukešová M. 7P-04
 Luptáková V. 2L-04
 Lustoň J. 3L-18
 Luxová J. 2P-25
 Lyčka A. 3L-12, 3P-07
 Lyutakov O. 2P-26

 Macků I. 7L-10
 Mácová Z. 2L-15, 2L-17
 Madronová L. 6L-08, 6L-09, 6L-10
 Mach P. 3P-16
 Macháček J. 2L-01
 Macho V. 8L-06, 8L-13
 Machovič V. 2P-03, 2P-27
 Machovský S. 8L-15
 Maier V. 1P-20
 Maláč J. 8L-14
 Malárová M. 2L-08
 Malo J. 2P-28
 Man S. 3L-11
 Mancini G. 3P-05
 Manzano B.R. 3P-12
 Marcinčín A. 4L-19
 Marounek M. 7P-05
 Maršálek R. 1L-19, 1P-23
 Maryška M. 1L-16
 Mäsiar H. 4L-17, 6L-14, 8L-18, 8L-19
 Massa W. 2P-22
 Mašek I. 8L-12
 Matějčík J. 2P-05
 Matějka P. 5L-20
 Matherny M. 1P-01, 1P-34, 1P-35
 Matoušek M. 2P-04
 Matucha M. 6L-05
 Matuchová M. 2P-29
 Matyk J. 3L-16
 Melník M. 2P-28, 2P-31
 Merna J. 2L-09
 Mičková K. 1P-24
 Michálek J. 8L-06
 Michalík D. 4PL
 Michalka M. 1L-20
 Mika O. 8L-12
 Mikelová R. 1P-47, 6P-20, 6P-25
 Mikloš D. 2P-28
 Míková K. 7P-15
 Mikulcová M. 7P-06
 Mikulík J. 2L-12
 Milata V. 3P-12, 3P-17
 Militký J. 2P-19
 Miníková S. 8P-01
 Mišičák D. 1P-25
 Mládek M. 3P-13, 6P-11, 7L-15, 7L-16, 8L-10, 8P-02

 Mojžiš J. 3L-10, 3P-18
 Mokrejš P. 3P-13, 6P-11, 7L-15, 7L-16, 7P-13, 8L-10, 8P-02
 Molatová Z. 7P-05
 Molnárová M. 6L-11, 6L-13, 6P-12
 Monde K. 3L-10
 Monti D. 3P-05
 Moravcová J. 6PL
 Morávek P. 8L-04
 Mošková D. 4P-05
 Mošner P. 2L-03, 2P-17, 2P-38
 Možíšková P. 6P-13
 Možná V. 1P-17
 Mrkvička V. 5L-22
 Mudroňová D. 2P-36
 Murárová A. 8L-07, 8L-08, 8L-09, 8P-03, 8P-04, 8P-06
 Musil Z. 5L-25
 Musílek K. 3L-15, 3P-14
 Musilová J. 6L-03, 6L-04, 6P-22
 Mydlová J. 1P-40

 Nádherná M. 2L-16
 Nagyová S. 2P-30
 Näther Ch. 1PL
 Navrátil M. 5L-23
 Navrátil T. 1L-02, 1L-06, 1P-10
 Navrátilová Z. 1L-04, 2L-18
 Nečas D. 3L-03
 Nečas M. 3L-11
 Nemčeková K. 2P-34
 Neufuss K. 2P-05
 Nguyen Thi Thu Huong 3L-08
 Nič M. 5L-20, 5P-03
 Nógellová Z. 4P-06
 Novák F. 1P-26
 Novák I. 4P-04, 4P-07, 4P-08, 8L-16, 8L-17, 6L-09
 Novák J. 6L-10
 Novák J. P. 1L-14
 Novotná I. 1P-08
 Novotný Č. 6P-23
 Novotný K. 1P-17
 Novotný R. P-23

 Obálová L. 7L-08
 Obtulovič P. 6L-03
 Olejníková K. 8P-06
 Olejníková P. 2P-31
 Olšovský M. 8L-06, 8L-13
 Ondrejčovičová I. 2P-13, 6L-12, 6P-15
 Ondrušová Z. 2P-31
 Opatrný P. 5L-10
 Opluštil S. 1P-27
 Oslanská J. 1P-28
 Otruba V. 1P-17
 Otyepka M. 2P-40
 Otyepková E. 2P-40
 Ovádek R. 1L-11, 1P-22

 Padevět J. 3L-01

- Palarčík J. 2P-32
 Palek L. 5L-27
 Pálffy A. 8L-01
 Pálszegi T. 1P-48
 Panáček A. 1P-36, 2P-33, 2P-23
 Panovská Z. 7P-15
 Parchanski V. 2L-05
 Pařík P. 1L-17
 Pasková I. 6P-14
 Pastierová J. 6L-12, 6P-15
 Pataridis S. 4PL
 Pavlík V. 2P-34
 Pavlíková N. 3L-13
 Pazlarová J. 7P-03
 Pecková K. 1L-01, 1P-29
 Peclová D. 1L-02
 Pedlíková J. 2P-46
 Pekárek L. 2P-35
 Pekař M. 1P-04, 1P-30, 6P-10
 Perný J. 5L-17
 Petr J. 1P-20
 Petr M. 1L-02
 Petrik P. 3P-15
 Petřlová J. 1P-47, 6P-04
 Petřlová J. 6P-21
 Petřek J. 6P-03, 6P-04, 6P-21
 Pikna L. 1P-31
 Piknová L. 2P-36
 Pikula J. 6P-20
 Pilarčík T. 3L-09
 Pilátová M. 3L-10
 Pisková D. 5L-07, 5L-08
 Pištěková M. 1P-17
 Pjatkan R. 8L-05
 Pleceník A. 2L-06
 Plesch G. 2L-06
 Plevová E. 2L-18, 2P-37, 4P-09
 Plzák Z. 1L-21, 6L-07
 Podobeková S. 8P-03, 8P-04
 Pohořelý M. 4L-06
 Pokorný J. 7L-05, 7P-15
 Poláková L. 8P-05
 Pollák V. 8L-16, 8L-17
 Popa I. 2L-08, 2L-11, 2L-12
 Popelková M. 7L-13
 Portella Ch. 3L-11
 Pospíšil J. 2L-03, 2P-38
 Pospíšil M. 4L-02, 4L-03
 Potáček M. 3L-11
 Potěšil D. 1L-24, 6P-02, 6P-03
 Pour M. 3L-04
 Prajer M. 8L-05
 Prášek J. 6P-02
 Procházka 5L-01
 Procházková O. 2P-39, 2P-44
 Prokeš O. 4L-06, 4L-07, 4L-08, 4L-09, 4L-10, 4L-11
 Prónayová N. 3L-02
 Prucek R. 2P-40, 2P-23
 Přihonská J. 5L-17
 Příkryl J. 4P-01
 Přistoupil T. I. 1L-02
 Přistoupilová K. 1L-02
 Pudil F. 7L-09, 7P-12, 7P-16, 7P-17
 Puxbaum H. 6L-15, 6L-16, 6P-09
 Puženat E. 1L-13
 Pytela J. 3L-05
 Pytela O. 5L-15
 Rábara L. 1P-32
 Reháková M. 2P-30, 6P-17
 Reiter J. 2L-16
 Rejnek J. 5L-24
 Remeteiová D. 1P-33, 1P-35
 Remko M. 3L-14
 Repovská M. 3P-18
 Ripp S. 1L-17
 Rodriguez A. 3P-12
 Rohlenová J. 6L-05
 Rollinger B. 6L-15
 Roubíček P. 8L-14
 Rulík M. 1P-27
 Rusín K. 2P-21
 Rusnák A. 8L-09, 8P-03, 8P-06
 Rusnák R. 1P-33
 Růžička V. 1L-15
 Ružičková S. 1L-18, 1P-34, 1P-35
 Řihák P. 7L-12
 Římanová D. 4L-08
 Salayová A. 3L-10
 Sališová M. 3P-16
 Salzman R. 1L-23, 1L-24
 Santa Maria M. D. 3P-12
 Sapietová M. 2P-41
 Sasinková V. 8P-01
 Sayler G. S. 1L-17
 Scott C. R. 2PL
 Sedlářová I. 8P-08
 Segla P. 2P-28
 Sekretár S. 7L-03, 7L-04, 7L-05
 Semenyšinová L. 8P-07
 Schejbalová H. 5P-02
 Schilla M. 7L-01
 Schmidt Š. 7L-03, 7L-04, 7L-05
 Scholtzová E. 3L-18, 3P-16
 Schröder P. 6L-05
 Siegel J. 2P-42
 Silný P. 5L-14
 Skačáni I. 1P-40
 Skoblia S. 4L-06, 6P-14
 Slavík M. 5L-17, 5P-02
 Slepíčka P. 2P-42
 Slouka J. 3L-06, 3L-17, 3P-06, 3P-07
 Slovák V. 1L-19, 2P-43
 Sminčáková E. 1P-33
 Sobczak A. 1P-46
 Sochacka J. 3P-03
 Solčán T. 3P-17, 3P-19
 Solich M. 4L-10
 Soukup J. 3P-15
 Soukupová J. 1P-36, 2P-23
 Sroková I. 8P-01
 Staňková A. 1P-17
 Stankovský Š. 1P-22
 Stará D. 5L-22
 Starkbaumová L. 4L-14
 Stavěliková H. 6P-25
 Stejskal K. 6P-03, 6P-04
 Stejskal M. 4L-01
 Stopka P. 6P-16, 7L-02
 Strnadová H. 1P-37
 Stupavská M. 1P-38
 Stýskála J. 3L-17
 Suchánek M. 6L-07
 Suchý V. 4L-01
 Sukop S. 7L-15, 7P-13
 Svítilová J. 2P-27, 4P-03
 Svoboda J. 5L-20, 2P-32, 8P-07
 Svoboda M. 1L-23, 1L-24, 6P-20
 Svobodová J. 8P-05
 Sýkora A. 3P-18
 Sýkorová J. 8L-08
 Synytsya A. 1L-16, 1P-24
 Sysel P. 4L-21
 Szabó P. 2L-04
 Szatmáry L. 2L-02
 Szöcs V. 1P-48
 Szolcsányi P. 3L-02, 3P-11
 Szoltysek-Boldys I. 1P-46
 Šafařík I. 6P-06, 6P-08
 Šafaříková M. 6P-06, 6P-08
 Šauliová J. 3L-08
 Šebek J. 4PL
 Šebestová E. 6P-16
 Šebor G. 4L-01, 4L-02, 4L-03
 Šenholdová Z. 1L-02
 Ševčík J. 1P-20
 Ševčík P. 1P-25
 Šiarník M. 8L-08
 Šigutová D. 6P-21
 Šima J. 2L-14
 Šimánek V. 3PL
 Šimánková K. 7P-07
 Šimek J. 4L-16, 4L-20
 Šimičková M. 8L-02
 Šimková S. 7L-17
 Šimon P. 1P-14
 Šindelár Z. 2L-13, 2L-11
 Šípoš R. 2L-14
 Šivová M. 8L-16
 Škrha J. 1P-42
 Škrovánková S. 7P-07, 7P-08, 7P-14
 Šmejkal P. 5L-12
 Šmídová L. 5P-03
 Šmidrkal J. 5PL, 8P-05
 Šnita D. 1P-21
 Špírková K. 1P-22
 Šrobár F. 2P-44
 Štajgerová L. 2P-06
 Štefko M. 3P-01

- Šteklová V. 7P-05
 Štengl V. 2L-02
 Štěpánek P. 3P-05
 Štěpánková K. 2L-08
 Štěpnička P. 1L-08, 2L-07, 2P-24
 Štern P. 7P-15
 Števiar M. 4P-04, 4P-07, 4P-08
 Štíbr B. 2L-01, 2P-02, 2P-14
 Štoudková H. 7L -13, 7L-10, 7P-11
 Šubrt J. 2L-02
 Šugárková V. 2P-37, 4P-09
 Šulc M. 7L-01
 Šulcová P. 2P-25, 2P-45
 Šulcová R. 5L-07, 5L-08
 Šupálková V. 6P-20, 6P-25
 Švajgl O. 5L-02
 Švarcová I. 7L -13
 Švorčík V. 2P-26, 2P-42
- Taraba B. 1L-19
 Tenkrát D. 4L-06, 4L-11
 Thonstadt J. 1P-21
 Tichá H. 2P-18
 Tomáš J. 6L-03, 6P-18, 6P-19
 Tóth T. 6L-04, 6P-18, 6P-19, 6P-22
 Trávníček Z. 2L-08, 2L-11, 2L-12, 2L-13, 2P-06
 Traxmandlová M. 4L-21
 Trilčová A. 1L-16, 1P-24
 Trnka T. 3L-07, 3P-05
 Trnková L. 1P-31, 1P-47, 6P-02, 6P-04, 6P-20, 6P-25
 Trögl J. 1L-17
 Trojan M. 2P-25, 2P-45
 Tukač V. 8L-02, 8L-04
 Tůma M. 2P-45
 Tureček F. 2PL
 Turský M. 3L-03
- Uher C. 2P-48
 Uhlířová H. 6L-05
 Ujhelyiová A. 4L-19
 Ulrichová J. 3PL
- Ulrichová M. 5L-18
 Urban O. 6L-02
 Urbálková E. 5L-12
 Uvíra R. 7L-09, 7P-12, 7P-16, 7P-17
- Vaculíková L. 1L-04, 2L-18, 4P-09
 Vaculovič T. 1P-17
 Valach M. 1P-39
 Valentová Z. 5L-20
 Vančo J. 2L-11
 Vaňourková L. 1P-10
 Vargová A. 7L-17
 Vargová Z. 2P-36
 Večeřová R. 2P-33
 Věgh D. 3P-01, 3P-19
 Velič D. 1L-20, 1P-28, 1P-32, 1P-38, 1P-48
 Veselá M. 6L-01, 7L-06, 7L-07, 1L-13
 Veselý M. 1P-15, 2P-20, 4L-22, 6L-01, 6P-13, 7L-06
 Vespalcová M. 7L-12
 Vespalec R. 1L-09, 1L-10, 1P-49
 Vičar J. 3L-19
 Videnský J. 8P-08
 Vícha R. 3P-10, 5L-22
 Vinšová J. 3P-08, 3P-09, 5P-04
 Víteček J. 6P-03, 6P-20, 6P-21, 7L-08
 Vítková K. 1P-40, 1P-45
 Vítová E. 7L-10, 7P-11
 Vlašínová H. 6P-04
 Vlček M. 2P-11
 Vojáčková A. 2L-04
 Vojtěchovská J. 1P-41
 Volka K. 4PL
 Vollmannová A. 6L-04, 6P-22
 Vondrák J. 2L-16
 Vosecký M. 4L-06
 Vošahlíková M. 7P-03
 Vrajová J. 1P-19
 Vránková A. 1P-42
 Vrtílková V. 2P-03
 Vyskočil V. 1P-43
- Waisser K. 3L-16, 3P-04
 Walterová D. 3PL
 Wang D. 2PL
 Wardas W. 1P-46
 Weishauptová Z. 2P-03
 Widimský J. 1P-42
 Wolfová L. 1P-44, 5L-26
 Wünschová A. 7L-08
- Yosypchuk B. 1L-06, 1P-10
- Zábranský M. 1L-15
 Zahradníková L. 7L-03, 7L-04
 Zachař P. 6P-23, 6P-24
 Zámotný P. 4L-12, 4L-14
 Zaorálková L. 1P-17
 Zapadlo M. 1-P45
 Záruba K. 4PL
 Zavadil J. 2P-29, 2P-39, 2P-46
 Zbořil R. 2L-12, 2L-13, 2P-40
 Zdansky K. 2P-29
 Zedníčková P. 1P-30
 Zehnálek J. 6P-04
 Zeleňák V. 2P-36, 2P-47
 Zelenka K. 3L-07, 3P-05
 Zelinka T. 1P-42
 Zemanová J. 7L -13, 7L-10, 7L-12, 7P-11
 Zhou Z. 2P-48
 Zielinská-Danch W. 1P-46
 Zima J. 1P-05, 1P-07, 1P-29, 1P-43, Zimčík P. 3P-15
 Zimčík P. 5L-25
 Zítka O. 1P-47, 6P-25
 Zmeškal O. 7L-07
 Znamenáček J. 5P-03
 Zoufalý T. 7L-14, 7P-02
 Zuman P. 1L-03, 7PL
 Zymelka A. 1P-11, 1P-12
- Žabčík M. 2P-48
 Žáková M. 3P-18
 Žitňan M. 1P-48

OBSAH

Úvodník	564
Plenární přednášky	565
Sekce 1	571
Sekce 2	610
Sekce 3	646
Sekce 4	665
Sekce 5	684
Sekce 6	700
Sekce 7	723
Sekce 8	742
Seznam přednášek a posterů	757
Autorský rejstřík	771

CONTENTS

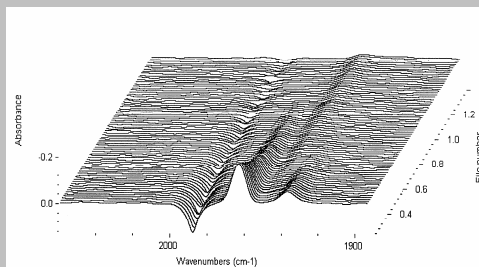
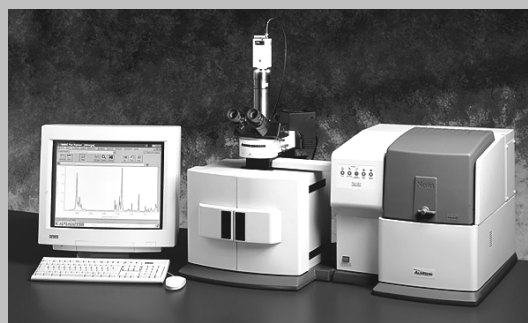
Editorial	564
Plenary Lectures	565
Section 1 - Lectures	571
Section 2 - Lectures	610
Section 3 - Lectures	646
Section 4 - Lectures	665
Section 5 - Lectures	684
Section 6 - Lectures	700
Section 7 - Lectures	723
Section 8 - Lectures	742
List of Lectures and Posters	757
Author's Index	771

CHEMICKÉ LISTY • ročník/volume 100 (2006), čís./no. 8 • LISTY CHEMICKÉ, roč./vol. 130, ČASOPIS PRO PRŮMYSL CHEMICKÝ, roč./vol. 116 • ISSN 0009-2770, ISSN 1213-7103 (e-verze) • evidenční číslo MK ČR E 321 • Vydává Česká společnost chemická jako časopis Asociace českých chemických společností ve spolupráci s VŠCHT v Praze, s ČSPCH a ÚOCHB AV ČR za finanční podpory NČLF a kolektivních členů ČSCH • IČO 444715 • Published by the Czech Chemical Society • VEDOUCÍ REDAKTOR/EDITOR-IN-CHIEF: B. Kratochvíl • REDAKTOŘI/EDITORS: J. Berek, Z. Bělohav, P. Drašar, J. Heflejš, P. Holý, J. Horák, P. Chuchvalec, J. Podešva, P. Rauch, J. Volke; WEBOVÉ STRÁNKY: R. Liboska, P. Zámotný • VÝKONNÁ REDAKTORKA/EDITORIAL ASSISTANT: R. Rápková • REDAKČNÍ RADA/ADVISORY BOARD: E. Borsig, M. Černá, L. Červený, E. Dibuszová, J. Hanika, Z. Havlas, I. Kadlecová, J. Káš, J. Koubek, T. Mišek, J. Pacák, V. Pačes, O. Paleta, V. Růžicka, I. Stibor, V. Šimánek, R. Zahradník • ADRESA PRO ZASÍLÁNÍ PŘÍSPĚVKŮ/MANUSCRIPTS IN CZECH, SLOVAK OR ENGLISH CAN BE SENT TO: Chemické listy, Novotného lávka 5, 116 68 Praha 1; tel./phone +420 221 082 370, fax +420 222 220 184, e-mail: chem.listy@csvts.cz • INFORMACE O PŘEDPLATNÉM, OBJEDNÁVKY, PRODEJ JEDNOTLIVÝCH ČÍSEL A INZERCE/INFORMATION ADS: Sekretariát ČSCH, Novotného lávka 5, 116 68 Praha 1; tel/fax +420 222 220 184, e-mail: chem.spol@csvts.cz, simanek@csvts.cz • PLNÁ VERZE NA INTERNETU/FULL VERSION ON URL: <http://chemicke-listy.vscht.cz> • Redakce č. 8: Sborník 58. sjezdu chemických společností (ISSUE EDITOR) J. Rejnek • SAZBA: ČSCH, Chemické listy • TISK: České Tiskárny, s.r.o., Ráby 14, 533 52 Staré Hradiště • Copyright © 2006 Chemické listy/Česká společnost chemická • DISTRIBUTION ABROAD: KUBON & SAGNER, POB 34 01 08, D-80328 Munich, FRG • This journal has been registered with the Copyright Clearance Center, 2322 Rosewood Drive, Danvers, MA 01923, USA, where the consent and conditions can be obtained for copying the articles for personal or internal use • Dáno do tisku 15.8.2006.

Poznámky:

Specialisté v oboru molekulové spektroskopie

FT-IR, FT-Raman, Raman, příslušenství, databáze spekter
Infračervená a Ramanská mikroskopie, mapování, imaging
Rutinní i vědecké systémy, vývoj metod a automatizace
Průmyslové analyzátoři



NICOLET CZ

Thermo
ELECTRON CORPORATION

Molecular Spectroscopy

Nicolet CZ s.r.o.,
Klapálkova 2242/9, 149 00 Praha 4
e-mail: nicoletcz@nicoletcz.cz
www.nicoletcz.cz

Tel/Fax: 272 760 432, 272 768 569, 272 773 356-7

Kvalita spektrometrů Nicolet ověřena více než 260 uživateli v ČR a SR.

- Laboratorní nábytek
 - Přístroje
 - Dávkovací zařízení
 - Laboratorní pomůcky
 - Filtrace
 - Laboratorní plast
 - Teploměry, hustoměry
 - Sklo a porcelán
 - Chemikálie
 - Školní pomůcky
- Projekty, výroba, dodávka a montáž laboratorního nábytku
 - Projekty a dodávky technologií pro chemii a farmacii
 - Dodávky a servis přístrojů a zařízení pro laboratoř



Brno
Ostrava
Plzeň
Praha
Ústí nad Labem
Bratislava

Hviezdoslavova 55b
627 00 Brno
tel.: 548 428 411
fax: 548 211 485
e-mail: merci@merci.cz
web: www.merci.cz



UNIVERZITA JANA EVANGELISTY PURKYNĚ V ÚSTÍ NAD LABEM

Univerzita je regionálním vědeckým, pedagogickým a kulturně vzdělávacím centrem Ústeckého kraje, jenž přispívá k rozvoji celého regionu nejen zvyšováním úrovně vzdělanosti, která je na severu Čech dlouhodobě nejnižší v rámci ČR, ale zároveň formou navazování kontaktů a přímou spoluprací s ostatními regionálními, státními i mezinárodními institucemi. Na univerzitu přicházejí každoročně studovat mladí lidé nejen ze severočeského regionu, ale i z nejrůznějších míst naší republiky.

Při svém vzniku v roce 1991 měla univerzita tři fakulty: pedagogickou, sociálně ekonomickou a životního prostředí a dva ústavy: Ústav slovansko-germánských studií a Ústav pro studium romské kultury, který se později stal součástí Pedagogické fakulty.

V současné době má univerzita 7 fakult a 2 ústavy:

- Fakulta sociálně ekonomická (1991)
- Fakulta užitého umění a designu (2000)
- Fakulta výrobních technologií a managementu (2006)
- Fakulta životního prostředí (1991)
- Filozofická fakulta (2006)
- Pedagogická fakulta (1991)
- Přírodovědecká fakulta (2005)
- Ústav slovansko-germánských studií (1991)
- Ústav zdravotnických studií (2003)

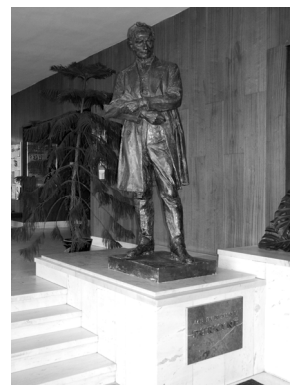
Na univerzitě studuje téměř 8 260 studentů a pracuje více než 400 akademických pracovníků a bezmála 300 nečitelských zaměstnanců.

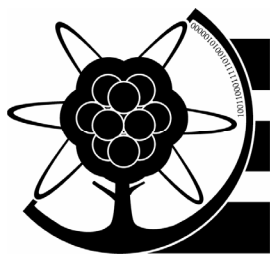
Univerzita vzdělává studenty v 97 studijních oborech a 45 programech celoživotního vzdělávání.

Pro nadcházející léta se univerzita zaměří na budování Kampusu UJEP v samotném středu města, což zásadně prohloubí sepětí univerzity s obyvateli Ústí nad Labem.



Kontaktní adresa
Hoření 13
400 96 Ústí nad Labem
Česká republika
Tel: +420 475 282 111
Fax: +420 472 772 982
E-mail: sikova@rek.ujep.cz
www.ujep.cz





PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA UNIVERZITY J. E. PURKYNĚ V ÚSTÍ NAD LABEM

Posláním Přírodovědecké fakulty je pěstování výuky a rozvoj poznání v přírodovědných oborech. Dále také výrazné posílení vědecko-výzkumné základny UJEP v oblasti přírodních věd, dosažení jejího výraznějšího zapojení do evropského výzkumného prostoru a sítě mezinárodní spolupráce a zajišťování vysokoškolského vzdělávání všech tří stupňů (Bc., Mgr., Ph.D.), jak pro odborníky v přírodovědných oborech, tak pro přípravu učitelů přírodovědných předmětů. Cílem fakulty je připravit absolventy tak, aby se dobře uplatnili na trhu práce nebo aby se mohli věnovat vědecké práci nebo vědecké přípravě v rámci doktorských studijních programů.

- **Katedra biologie**
 - **Katedra fyziky**
 - **Katedra geografie**
 - **Katedra chemie**
 - **Katedra informatiky**
 - **Katedra matematiky**

Hlavní pozornost vědy a výzkumu je zaměřena na fyziku plazmatu, plazmochemii, fyziku tenkých vrstev, počítačovou fyziku, počítačové metody, biotechnologie, mikrobiologii a biologii rostlin a živočichů, aplikovanou geografii, environmentální geografii syntetizující fyzickogeografické a sociogeografické aspekty krajiny, organickou chemii, modelování, výpočty v chemii, instrumentální metody analytické chemie, počítačovou simulaci a numerickou analýzu problémů stlačitelného proudění, radiobiologické procesy v živých buňkách a samoorganizující se zobrazení, prostory funkcí a zobrazení, neasociativní algebru a teorii binárních systémů.

Přírodovědecká fakulta

Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem

České mládeže 8

400 96 Ústí nad Labem

Telefon: +420 475 283 223

E-mail: info@sci.ujep.cz

Fax: +420 475 283 563

<http://sci.ujep.cz/>

Univerzita Jana Evangelisty Purkyně v Ústí nad Labem

Fakulta životního prostředí

Fakulta životního prostředí je zaměřena na výzkum a vzdělávání v široké oblasti ekologie a životního prostředí. Klade důraz na studium příčin narušení základních složek životního prostředí, na možnosti a způsoby jejich ozdravení a zejména na preventivní opatření v oblasti tvorby a ochrany životního prostředí. Ve studijním a výzkumném programu je uplatněna zásada multidisciplinarity a flexibility s vyváženým podílem přírodovědných, technických, ekonomických a informačních disciplín.

Vědeckovýzkumná a vzdělávací činnosti se soustřeďuje především na oblasti poznamenané intenzivní antropogenní činností a zahrnuje mimo jiné:

- Sledování kontaminace složek životního prostředí chemickými polutanty, studium chemických rovnováh a speciace chemických látek v životním prostředí.
- Vývoj vybraných technologií pro minimalizaci negativních vlivů průmyslové činnosti na životní prostředí.
- Studium ekosystémů v antropogenně postižených oblastech a návrhy revitalizace území.
- Socioekonomické a statistické aspekty ochrany životního prostředí.
- Využití GIS, dálkového průzkumu Země a starých map pro studium časoprostorových změn krajiny.

Studium na fakultě je tříleté v bakalářských studijních programech a dvouleté v navazujícím magisterském studijním programu. Absolventi nacházejí velmi dobré uplatnění v podnikové sféře, v orgánech státní správy a samosprávy, ve výzkumných a projektových ústavech, v kontrolních a inspekčních institucích či v orgánech ochrany přírody.

Fakulta životního prostředí

Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem
Králova Výšina 3132/7
400 96 Ústí nad Labem

tel.: +420 475 284 111, fax: +420 475 284 158
e-mail: dekan@fzp.ujep.cz, <http://fzp.ujep.cz/>

Slovenská chemická spoločnosť
FCHPT STU
Radlinského 9/1111
812 37 Bratislava
Slovensko

Miesto konania

Tatranské Matliare, 930 m.n.m.



Organizačný výbor

Dušan Velič – predseda
Monika Aranyosiová – výkonný tajomník
Viktor Milata – vedecký tajomník
Pavel Drašar – vedecký tajomník
Zuzana Hloušková – hospodár

Čestné predsedníctvo

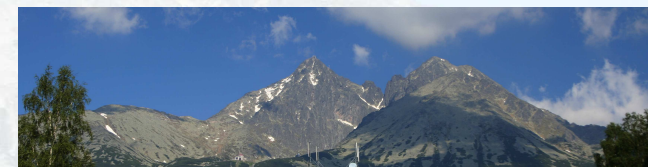
Vladimír Bálaš – predseda SSCHI
Jozef Čižmárik – predseda SFS
Jozef Kollár – predseda ASCHFS
Viktor Milata – predseda SCHS
Miloš Revús – predseda SSPCH
Ján Turňa – predseda SSBMB
Karel Ventura – predseda AČCHS

Kontakt

Slovenská chemická spoločnosť
Radlinského 9/1111
812 37 Bratislava
www.schems.sk
schs@chtf.stuba.sk



59. zjazd chemických spoločností



2. – 6. september 2007
Vysoké Tatry

pod záštitou primátora mesta Vysoké Tatry
Ing. Jána Mokoša



Vážení priatelia,

v mene organizačného výboru, garantov a sponzorov je nám potešením Vás pozvať na náš spoločný chemický zjazd a to opäť do Vysokých Tatier. Centrom zjazdu bude hotelový komplex Hutník situovaný v Tatranských Matliaroch s priamym prístupom k najvýznamnejším tatranským lokalitám i s možným rozšírením ubytovacích kapacít v hoteli Odborár. Určite ste si všimli, že postupne budujeme a testujeme tradíciu tatranských zjazdov s presunom do hotelového komplexu so zaslúženým komfortom pod jednou strechou, čo predstavuje ubytovanie, plnú penziu, občerstvenie, spoločenský večierok, opekačku a využitie plavárne a minigolfu.

Náklady na osobu na celú konferenciu „all inclusive“ sú odhadované na 185 Euro.

Základom tradície je hotelový komplex poskytujúci prehĺbenie spoločensko-odborného charakteru zjazdu v tatranskom prostredí, v spojení s plejádou pozvaných prednášajúcich.

Na plenárnu prednášku by sme radi pozvali prof. Ertla z Fritz Haber inštitútu, významného kandidáta na Nobelovu cenu za chémiu.

Tešíme sa na Vašu účasť. Organizačný výbor.



Predbežný program s príspevkami vo všetkých oblastiach chémie

Hod.	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
Hod.	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
Ne 2/sep	Dovoz autobusmi z Popradu, registrácia a ubytovanie Recepcia komplexu Hutník												Welcome Party Komplex Hutník			
Po 3/sep	Otvorenie zjazdu Tatranská Lomnica		Plenárna prednáška	Vainé zhromaždenie SCHS	Obed Komplex Hutník	Obed Komplex Hutník	Prednášky Komplex Hutník	Večera Komplex Hutník	Večera Komplex Hutník	Postery a Vinny večer Komplex Hutník	Postery a Vinny večer Komplex Hutník					
Ut 4/sep	Prednášky Komplex Hutník		Obed Komplex Hutník	Obed Komplex Hutník	Výlety	Večera Komplex Hutník	Večera Komplex Hutník	Postery a Pivný večer Komplex Hutník								
St 5/sep	Prednášky Komplex Hutník		Obed Komplex Hutník	Obed Komplex Hutník	Prednášky Komplex Hutník	Večera Komplex Hutník	Večera Komplex Hutník	Postery a Pivný večer Komplex Hutník								
Št 6/sep	Prednášky/ Panelová diskusia Ukončenie zjazdu Komplex Hutník		Obed Komplex Hutník	Obed Komplex Hutník	Odvoz autobusmi do Popradu	Večera Komplex Hutník	Večera Komplex Hutník	Postery a Pivný večer Komplex Hutník								

Predbežná prihláška

Priezvisko :

Meno:

Titul(y):

Pracovisko :

Adresa :

Mám záujem o :

2. cirkulár, voľte len jednu možnosť

email:

fax:

adresa (prosíme, len vo
výnimočných prípadoch)

aktívnu účasť

účasť ako zástupca firmy

počet sprevádzajúcich osôb : _____

iné:

Vrátiť obratom osobne, alebo najneskôr do Troch
Kráľov, 6. januára 2007 a to poštou alebo cez
<http://www.schems.sk>.