



60. JUBILEJNÍ SJEZD ASOCIACÍ ČESKÝCH A SLOVENSKÝCH CHEMICKÝCH SPOLEČNOSTÍ

OLOMOUC

1. – 4. září 2008

Pořádající organizace

Asociace českých chemických společností

Asociácia slovenských chemických a farmaceutických spoločností

Univerzita Palackého

Statutární město Olomouc

a

Česká společnost chemická

ČESTNÉ PŘEDSEDNICTVO SJEZDU

Pavel Drašar	předseda Asociace českých chemických společností
Lubomír Dvořák	rektor Univerzity Palackého
Jozef Kollár	čestný předseda Asociácie slovenských chemických a farmaceutických spoločností
Jaromír Lederer	předseda České společnosti průmyslové chemie
Viktor Milata	předseda Slovenské chemické spoločnosti
Martin Novotný	primátor Statutárního města Olomouc
Miloš Revús	předseda Asociácie slovenských chemických a farmaceutických spoločností

Organizační výbor

Jitka Ulrichová (předsedkyně)
Taťána Bukvová
Boris Cvek
Zdeněk Dvořák
Marta Klečková
Pavel Kosina
Vladimír Kryštof
Karin Oklešťková
Aleš Panáček
Gabriela Pokorná
Helena Pokorná
Radmila Řápková
Petr Tarkowski
Jaroslav Vičar

Vědecký výbor

Vilím Šimánek (předseda)
Hana Čtrnáctová
Vladimír Filip
Jiří Hanika
Jan Hlaváč
Jaroslav Koča
Vladimír Křen
Juraj Ševčík
Eva Tesařová
Tomáš Wágner



MERCI s.r.o.
Váš partner pro laboratoř



SHIMADZU
Solutions for Science
since 1875



ThermoFisher
SCIENTIFIC

Karolina
Express sartorius



Waters
THE SCIENCE OF
WHAT'S POSSIBLE™

VITRUM®



HELAGO®

AB Applied Biosystems
an Applied Corporation Business

lach:ner

ACROS
ORGANICS



Vaše úklidová firma
HARYSERVIS®



ARTCOM GROUP s.r.o.

WWW
INFRA
SAUNA
.CZ



ČESKÁ
SPORITELNA



eppendorf
— Czech & Slovakia —





KRÁL ČESKÝCH PIV

Klasicky vařené pivo Litovel získalo zlatou, stříbrnou a bronzovou Českou pivní pečeť 2008. Opakovaná vítězství na různých celostátních anonymních degustačních soutěžích potvrzují jedinečnou chuť piva Litovel.

Kvalitní suroviny, vaření na danou stupňovitost a dlouhý proces zrání dělají totiž české pivo pravým českým pivem...

Vítěz zlaté pivní pečeti 2008

SEKCE SJEZDU A JEJICH GARANTI

1. Anorganická chemie

Tomáš Wágner

2. Organická chemie

Jan Hlaváč

3. Analytická chemie

Eva Tesařová

4. Přírodní látky

Vladimír Křen

5. Chemické vzdělávání, historie a popularizace chemie

Hana Čtrnáctová, Juraj Ševčík

6. Průmyslová chemie

Jiří Hanika

7. Teoretická a fyzikální chemie

Jaroslav Koča

8. Potravinářská chemie

Vladimír Filip

Vážení účastníci sjezdu Asociací chemických společností, vážení čtenáři!

Srpnové číslo je, podle tradice zahájené v roce 1992, dalším ze sjezdových čísel Chemických listů věnovaných abstraktům sjezdu chemiků českých a slovenských odborných společností. Konference, které se účastníte, je 60. jubilejním sjezdem Asociací českých a slovenských chemických společností. Jeho organizací byla Českou společností chemickou pověřena olomoucká pobočka a připravila jej ve spolupráci s Univerzitou Palackého a Statutárním městem Olomouc. Sborník obsahuje abstrakta 318 příspěvků, z nichž bude předneseno 125 a 193 bude vystaveno formou plakátového sdělení. Příspěvky jsou rozděleny do 8 odborných sekcí. Organizátoři sjezdu jmenovitě pozvali 30 českých a slovenských chemiků aby dokumentovali směry a výsledky chemického výzkumu v obou republikách. Letošní jubilejní sjezd chemiků bude zahájen přednáškou profesora Jean-Maria Lehna, nositele Nobelovy ceny za chemii za rok 1987. Pozvání profesora Lehna je nejen oceněním jeho příspěvku k oboru supramolekulární chemie, ale také poděkováním za jeho dlouholetý zájem o mladou generaci českých chemiků, ale rovněž i poděkováním za jejich podporu formou soutěží a stipendií poskytovaných vládou Francouzské republiky. Druhým významným hostem je Raphael Mechoulam, profesor Hebrejské univerzity v Jeruzalémě. Jeho vědecká práce je spojena s obsahovými látkami *Canabis sativa* a výzkumem jejich biologické aktivity. Profesor Mechoulam řadu let spolupracoval se Zdeňkem Krejčí a Františkem Šantavým, profesory Univerzity Palackého. Hosty sjezdu bude také šest mladých polských chemiků. Jejich účast je již více než 15 letou tradicí a nesporně přispívá ke vzájemnému poznávání obou blízkých komunit chemiků. Novinkou je, že nad každou sekci převzala patronát významná firma orientovaná na chemii a udělí finanční ocenění vždy jednomu příspěvku v sekci. Součástí programu sjezdu je soutěž o CENU SHIMADZU, která letos proběhne nejen před odbornou porotou, ale také před účastníky sjezdu. Vědecké konference jsou dnes součástí marketingu vědy a výzkumu. Konference národních chemických společností svou polytematičností částečně ztrácí svůj význam jako fórum pro prezentaci nejnovějších výsledků vědeckých týmů. Měly by se tedy spíše stát místem střetávání názorů na nové směry výzkumu, setkání různých generací chemiků, místem přátelských odborných diskusí. Olomouc jako univerzitní město se staletou kulturní historií může svým geniem loci tento cíl naplňovat. Česká společnost chemická pozvala k diskusi o smyslu spolkového života chemiků představitele sousedních národních chemických společností – Maďarské, Německé, Polské, Rakouské, Slovenské a Slovinské chemické společnosti. Tématy, již druhého olomouckého setkání, byla nejen spolková činnost, ale také diskuse jak nejlépe dělat chemii pozitivní reklamu mezi veřejností a jak zvýšit zájem o její studium na vysokých školách. Aktuálním problémem pro obě Asociace je také konání Evropských konferencí chemiků v roce 2010 v Norimberku a 2012 v Praze a jejich dopad na národní konference českých a slovenských chemiků.

Přejeme všem účastníkům, aby si z pobytu v Olomouci odnesli hezké vzpomínky, obnovili staré a vytvořili nové přátelské kontakty, tak nezbytné v prostředí, které je více a více virtuální. Věříme, že srpnové číslo 102. ročníku Chemických listů bude svým obsahem takové, že se k němu budou čtenáři vracet ještě dlouho po skončení konference.

Jitka Ulrichová
Vilím Šimánek

TCAutomation – flexibilní řešení automatizace Vaší laboratoře.



Thermo
SCIENTIFIC

BioVendor

CTPark, Evropská 873, 664 42 Modřice
tel.: +420 549 124 111, fax: +420 549 211 465
Česká republika

www.biovendor.cz



FARMAK, a.s., je chemicko–farmaceutická firma s dlouholetou tradicí a specializací na kvalifikovanou chemii organických látek. Výroba a prodej jsou zaměřeny hlavně na léčivé látky – aktivní farmaceutické ingredience (API) převážně s heterocyklickou strukturou.

FARMAK, a.s., poskytuje služby zahrnující výzkum a vývoj, analytický servis, poloprovozní a provozní výrobu a předepsanou dokumentaci (DMF, CEP).

FARMAK, a.s., uplatňuje systém řízení jakosti, který vyhovuje současným požadavkům cGMP. Výroba podléhá pravidelné inspekci SÚKLu, FDA a zákaznickým auditům.

FARMAK, a.s., investuje do výstavby nových moderních analytických a výzkumných laboratoří a rozsáhlé rekonstrukce provozních jednotek.

FARMAK, a.s. exportuje 90% produkce do EU, USA a dalších teritorií včetně Asie.

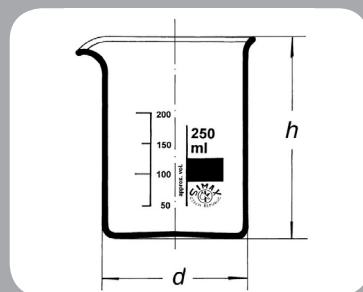
- API
- meziprodukty
- chemické speciality
- zakázková výroba
- dezinfekční prostředky pro zdravotnictví a komunální hygienu

FARMAK, a.s.
Na Vlčinci 16/3,
771 17 OLOMOUC
tel: 585 547 111
e-mail: ceo@farmak.cz
www.farmak.cz

Vybavení
pro Vaši
laboratoř...



- **Laboratorní nábytek**
 - **digestoře**
 - **energetické stoly**
- **Laboratorní přístroje**
- **Laboratorní sklo a pomůcky**



**HELAGO**[®] CZ

HELAGO-CZ, s.r.o.
Kladská 1082
500 03 Hradec Králové 3
Tel.: 495 220 229; 495 220 394
Fax: 495 220 154
GSM brána: 602 123 096
E-mail: info@helago.cz
<http://www.helago.cz>

Uznávaní světoví dodavatelé chemických specialit na našem trhu

ACROS ORGANICS, FISHER CHEMICALS,
MAYBRIDGE UK, FISHER BIOREAGENTS

ACRŌS
ORGANICS

Společnost Lach-Ner s.r.o. nabízí více jak 18 000 různých organických i anorganických sloučenin, buildingblocků a bioreagentů dodávaných společností Acros Organics, Belgie

Kompletní přehled sortimentu Acros Organics je uveden na
www.acros.com

Nejprodávanější materiály jsou skladem v Lach-Ner Neratovice!

lach:ner

INFO o stálém skladu v Neratovicích: **www.acros.cz**, tel: 315 618 224

Dodávky ze skladu v Neratovicích: do 72 hodin po objednávce
Dodávky ze skladu v Belgii: do 10-ti dnů po objednávce

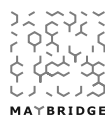
Renomované značky:



specialista
na organické syntézy



specialista
na analytickou chemii



specialista
na Buildingblocky



specialista
na Bioreagenty

Pro informace o naší nabídce a dodávkách nás neváhejte kontaktovat!

lach:ner

Lach-Ner, s.r.o., Tovární 157, 277 11 Neratovice, CZECH REPUBLIC
tel.: +420 315 618 224, e-mail: info@lach-ner.com, www.lach-ner.com

Společnost je držitelem certifikátu kvality ISO 9001 a osvědčení Responsible Care.

**ЩЕЩЕ
АР**

LABORATORNÍ A PRŮMYSLOVÁ FILTRACE

• VÁŽICÍ TECHNIKA

- předfiltrace
- sterilní filtrace
- ultrafiltrace
- crossflow filtrace
- měření integrity filtrů
- Biostat-laboratorní fermentory
- air samplery
- mikrobiologické sety
- membránové adsorbéry
- TC Bags pro manipulaci s roztoky ve pharma průmyslu

- laboratorní váhy •
- průmyslové váhy •
- váhy pro stanovení sušiny •
- váhy do prostředí Ex •
- komparátory •
- převodníky, indikátory •
- vážicí plošiny •
- procesní kontroléry •
- indikátory kovů •
- příslušenství vah •

- odstředivky, třepačky, pH metry, inkubátory

Vaníčkova 31
400 01 Ústí nad Labem

Tel.: 475 211 348
Tel./fax: 475 200 870

E-mail: info@sartorius.cz
<http://www.karolinaexpress.cz>

[HYPOTHESIS]

THE WORLD ISN'T FOCUSED
ON YOUR LABORATORY'S PROCESS.
BUT IT'S DESPERATELY WAITING
TO SEE YOUR RESULTS.

Disease. Hunger. Pollution. Rising healthcare costs. Those are just a few of the enormous challenges the world faces today and in the immediate future. While scientists work to create a better tomorrow, Waters is helping to speed scientific progress by delivering breakthrough technologies, powerful analytical software and unparalleled expertise. From pharmaceutical companies to environmental, food safety or government organizations, Waters believes every laboratory has the opportunity to give the world the results it's waiting to see. And to fulfill the infinite potential of science itself. To learn more, visit www.waters.com/b1.

©2007 Waters Corporation. Waters and The Science of What's Possible are trademarks of Waters Corporation.

Waters

THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.™

allen&gerritsen

Job #: WATR7829_A

Job Name: **WATR7829_A_Launch_Mech.qxd** Date: **04-30-07**
Live: **7"x10"** Sm Trim: **7.875"x10.5"** Lg Trim: **8.375"x10.875"** Bleed: **8.675"x11.375"** Page: **1** Rev: **1**
Stage: **MECH** Release: **04-30-07** DB AD: **BB** CW: **AS** PM: **JT** Scale: **100%**
Color: **4c** Gutter: — Other: — ST: **DB**

APPROVALS	<input type="checkbox"/> MECH	Initials / Date	Initials / Date	Initials / Date
	<input type="checkbox"/> PROOF	MK: _____	AD: _____	CW: _____
		PM: _____	CD: _____	
Client / Date: _____				

Please note this is a COMMON SIZE mechanical file, you will need to center file when placing ad in the publication page area. (common size = smallest live/smallest trim/largest bleed)

PUBS:

American Laboratory
American Drug Discovery
American Pharmaceutical Review
Bio Business
Bio IT World
BioTech World
Bio Pharam International
Chemical & Engineering News
Drug Discovery and Dev

Drug Discovery News
Food Quality
Food Safety Magazine
Genetic Engineering News (GEN)
Genome Technology
Genomics & Proteomics
Jour of The American Soc for
Mass Spectrometry
Lab Asia Media Guide
LCGC Asia
LCGC N. America
LCGC Europe

Molecular and Cellular
Proteomics
Pharmaceutical Technology
Pharmaceutical Drug & Discovery
Pharmaceutical Technology
EUROPE
Pharm Form and Quality
Proteomics Journal
Scientific Computing &
Instrumentation
Scientific Computing World



Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy rozhodlo o finanční podpoře projektu „Výzkum nových, moderních nástrojů a metod popularizace výsledků vědy, výzkumu a vývoje na vysokých školách v ČR ve spolupráci s vědeckou společností a způsoby jejich uplatňování v praxi“. Projekt byl schválen v rámci veřejné soutěže na řešení projektů programů výzkumu a vývoje, která je součástí Národního programu výzkumu II.

Řešitelem projektu je Univerzita Palackého v Olomouci – Projektový servis UP ve spolupráci s Českou společností chemickou.

Projekt je zaměřen na:

- analýzu stávající situace v oblasti popularizace výsledků vědy, výzkumu a vývoje na vysokých školách a vědecko-výzkumných institucích v České republice a ve vybraných státech Evropské unie (Velká Británie, Německo, Itálie, Francie, Belgie, Rakousko, Španělsko),
- komparaci výsledků,
- vytvoření metodiky popularizace výsledků vědy, výzkumu a vývoje na vysokých školách a vědecko-výzkumných institucích v České republice.

Analýza bude provedena formou dotazníkového šetření a akčního výzkumu a bude realizována na vysokých školách a vědecko-výzkumných institucích v České republice a ve vybraných státech Evropské unie. Výsledky budou vyhodnoceny a na jejich základě budou zpracovány analýzy současného stavu a studie možného vývoje metod a nástrojů popularizace výsledků V&V v České republice.

Metody popularizace výsledků vědy, výzkumu a vývoje budou rozděleny do oblastí:

- ZDRAVÍ
- PŘÍRODNÍ VĚDY
- SPOLEČENSKÉ VĚDY
- NOVÉ TECHNOLOGIE A MATERIÁLY

Toto rozdělení bude realizováno z důvodu odlišných nástrojů a metod popularizace v jednotlivých oborech.

Výstupy analýz a studií budou podkladem pro vytvoření hlavního výstupu projektu – recenzované publikace s názvem „Nové, moderní nástroje popularizace výsledků vědy, výzkumu a vývoje na vysokých školách v ČR“ obsahující zásady, metodiky a doporučení pro využívání nových, moderních nástrojů popularizace výsledků vědy, výzkumu a vývoje na vysokých školách a vědecko-výzkumných institucích v České republice a konkrétní příklady pro jejich uplatnění v praxi.

Více informací o projektu naleznete na www.metpopuli.cz.

Kontakt:

Projektový servis UP

Šlechtitelů 27

783 71 Olomouc

tel.: 585 631 421

fax: 585 631 401

mobil: 774 401 559

e-mail: info@metpopuli.cz

www.metpopuli.cz

**PL1
FROM SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY
TO CONSTITUTIONAL DYNAMIC CHEMISTRY**

JEAN-MARIE LEHN

*ISIS, Université Louis Pasteur, Strasbourg and College de France, Paris
lehn@isis.u-strasbg.fr*

Supramolecular chemistry is actively exploring the design of systems undergoing *self-organization*, i.e. systems capable of spontaneously generating well-defined functional supramolecular architectures by self-assembly from their components, on the basis of the *molecular information* stored in the covalent framework of the components and read out at the supramolecular level through specific interactional algorithms, thus behaving as *programmed chemical systems*. The implementation of such molecular information-controlled self-organizing processes for the generation of functional nanostructures provides a powerful approach to nanoscience and nanotechnology.

Supramolecular chemistry is intrinsically a *dynamic chemistry* in view of the lability of the interactions connecting the molecular components of a supramolecular entity and the resulting ability of supramolecular species to exchange their constituents. The same holds for molecular chemistry when the molecular entity contains covalent bonds that may form and break reversibly, so as to allow a continuous change in constitution by reorganization and exchange of building blocks. These features define a *Constitutional Dynamic Chemistry* (CDC) on both the molecular and supramolecular levels.

CDC introduces a paradigm shift with respect to constitutionally static chemistry. The latter relies on design for the generation of a target entity, while CDC takes advantage of dynamic diversity to allow variation and selection. The implementation of selection in chemistry introduces a fundamental change in outlook. Thus, *self-organization by design* strives to achieve full control over the output molecular or supramolecular entity by explicit programming, whereas *self-organization with selection* operates on dynamic constitutional diversity in response to either internal or external factors to achieve *adaptation*. Applications of this approach in biological systems as well as in materials science will be described.

The merging of the features: – information and programmability, – dynamics and reversibility, – constitution and structural diversity, points towards the emergence of *adaptive chemistry*.

**PL2
BIOSYNTÉZA HMYZÍCH FEROMONŮ**

IRENA VALTEROVÁ

*Ústav organické chemie a biochemie Akademie věd České republiky, Flemingovo náměstí 2, 166 10 Praha 6
irena@uochb.cas.cz*

Feromony slouží k výměně informací mezi organismy téhož biologického druhu. Tyto komunikační látky ovlivňují chování většiny živočichů v důležitých fázích jejich života. U hmyzu jsou chemické signály, vnímané čichovými nebo chuťovými receptory, podstatně důležitější než jiné vjemy, např. zrakové či sluchové.

Z hlediska chemické struktury jsou feromony pestrou paletou strukturních typů (alifatické či aromatické látky, terpeny, makrocycly, spiroacetyly, heterocykly apod.)^{1,2}. Mnoho feromonů jsou látky chirální, u nichž absolutní konfigurace hraje klíčovou úlohu v biologické aktivitě³. Proto jak výzkum struktur feromonů, tak i jejich syntéza je často výzvou pro organické chemiky. To, co příroda elegantně vyřeší několika enzymaticky katalyzovanými kroky, znamená často mnohastupňovou syntézu s využitím nejmodernějších reakčních i separačních postupů.

Pro biosyntézu feromonů jsou v zásadě tři možnosti: a) *de novo* syntéza ve feromonové žláze (dvou- a tříuhlíkatých jednotek, z kyseliny mevalonové nebo z aminokyselin), b) modifikace prekurzorů transportovaných z jiných částí těla (např. mastných kyselin ze zásobních lipidů) a c) sekvestrace látek z potravy (např. modifikace rostlinného alkaloidu na feromon). Přes rozsáhlou literaturu pojednávající o biosyntéze feromonů je tato soustředěna především na řád motýlů (Lepidoptera), brouků (Coleoptera) a dvoukřídlých (Diptera)^{4,5}, zatímco v ostatních hmyzích řádech jsou informace kusé. Příkladem dobře prozkoumaných modelových druhů hmyzu jsou lišaj tabákový, *Manduca sexta* (Lepidoptera) a octomilka, *Drosophila melanogaster* (Diptera). U octomilky se dnes výzkum provádí na molekulární úrovni díky přečtení jejího genetického kódu.

Experimentální metody výzkumu biosyntézy hmyzích feromonů jsou většinou založeny na aplikaci značených prekurzorů těchto látek. Pokusy mohou probíhat buď *in vivo* aplikací substrátů potravou, vystavením parám, injekcí či rozetřením po povrchu žlázy hmyzu, anebo *in vitro*, kdy se s roztokem substrátu inkubuje izolovaná tkáň nebo její extrakt. Značkou ve struktuře substrátu může být např. stabilní izotop (¹³C, ²H, ¹⁸O, ¹⁵N, ³¹P), nestabilní izotop (¹⁴C, ³H) nebo atom fluoru.

Pro výzkum *de novo* biosyntézy se používají následující prekurzory: a) značený acetát či malonát⁶ pro nevětvené mastné kyseliny, b) sukcinát, propionát a aminokyseliny, které jsou prekurzorem propionátu (valin, isoleucin, či methionin⁷) pro methylem substituované alifatické feromony, c) butyrát pro ethylem substituované alifatické struktury, d) mevalonát, mevalonolakton hydroxymethyl-glutarát, isopentenyl-difosfát, isopentenol či dimethylallyl-difosfát pro terpenické a steroidní látky a e) šikimát, aminokyseliny tyrosin, phenylalanin a tryptofan⁸ pro výzkum biosyntézy aromatických strukturních typů feromonů.

V přednášce budou ukázány příklady, jakým způsobem

byla prokázána biosyntéza feromonů u různých řádů hmyzu a jak podobné či rozdílné jsou biosyntetické cesty pro tvorbu feromonů.

Práce na biosyntéze feromonů je podporována grantem GA AV ČR IAA4055403.

LITERATURA

1. Francke W., Schulz S., v knize: *Comprehensive Natural Products 8* (Barton D., Nakanishi K., Meth-Cohn O., ed.), s. 191. Elsevier Science Ltd., Oxford 1999.
2. Luxová A., Valterová I.: *Chem. Listy 100*, 243 (2006).
3. Mori K.: *Eur. J. Org. Chem.* 1998, 1479.
4. Tillman J. A., Seybold S. J., Jurenka R. A., Blomquist G. J.: *Insect Biochem. Mol. Biol.* 29, 481 (1999).
5. Seybold S. J., Vanderwel D., v knize: *Insect Pheromone Biochemistry and Molecular Biology* (Blomquist G. J., Vogt R. G., ed.) s. 137. Elsevier Academic Press, Amsterdam 2003.
6. Bjostad L. B., Wolf W. A., Roelofs W. L., v knize: *Pheromone Biochemistry* (Blomquist G. J., Prestwich G. D., ed.) s. 77. Academic Press, Orlando 1987.
7. Blomquist G. K., Borgeson C. E., De Renoables M., v knize: *Insect Lipids, Chemistry, Biochemistry and Biology* (Stanley-Samuelson, Nelson D. R., ed.) s. 318. Univ. of Nebraska Press, Lincoln 1993.
8. Leal W. S., v knize: *Insect Pheromone Research* (Cardé R. T., Minks A. K., ed.) s. 505. New Directions, Chapman and Hall, New York 1997.

PL3

1,3-DIPOLAR CYCLOADDITIONS OF CHIRAL NITRONES AND THEIR UTILIZATION IN SYNTHESIS

LUBOR FIŠERA

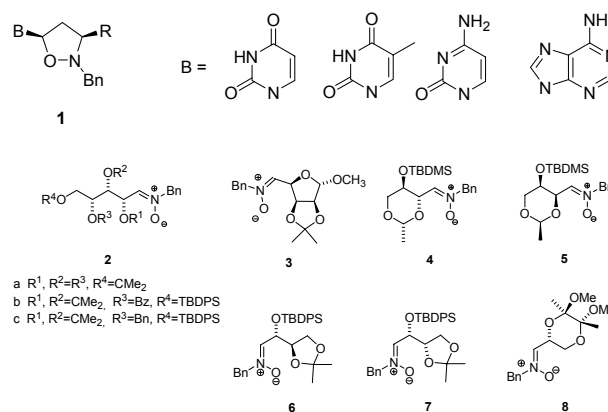
*Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic
lubor.fisera@stuba.sk*

Over the years, nitrones have become important building blocks in organic synthesis^{1–3}. During the last years we have learned know-how about the preparation of optically active nitronone templates for the asymmetric 1,3-dipolar cycloadditions^{4–7}.

Further we have found that the regio- and stereoselectivity of nitronone cycloaddition can be controlled by steric effects and by Lewis acids catalysis. Very unusual and seldom reversal of regioselectivity of cycloaddition of nitrones with acryloyloxazolidinone in the presence of Lewis acid will be discussed^{8–10}.

Next two strategies are reported for the diastereoselective synthesis of isoxazolidinyl nucleosides, as potential antiviral agents – a one-step approach based on 1,3-dipolar cycloaddition of sugar-derived nitrones with vinyl nucleobases derived from uracil and adenine, as well as a two-step methodology based on the Vorbrüggen nucleosidation of the 5-acetoxisoxazolidinones^{11–15}. The 1,3-dipolar cycloadditions

of sugar-derived nitrones with vinyl acetate proceeded with very good diastereoselectivity to give the diastereoisomeric isoxazolidines. The condensation of the major diastereomerically pure acetoxyisoxazolidines with silylated uracil, thymine, cytosine, *N*-acetylguanidine and purines could be performed with moderate to excellent stereoselectivity with the formation of the expected isoxazolidinyl nucleosides. The stereoselectivity of the addition of the silylated nucleobase is dependent on the structure of the substituent at C-3 originating from the starting chiral nitronone and on the attacking nucleobase.



An application of the samarium diiodide-promoted coupling between nitrones and methyl acrylate using nitrones derived from D-lyxose, D-xylose, D-erythrose and D-threose is described. The reaction course of coupling is dependant on the structure of the starting chiral nitronone. The results show that the method has potential use in the preparation γ -*N*-hydroxylamino esters, pyrrolidinones and pyrrolidines containing carbohydrate residues^{16,17}.

The authors are grateful to the Slovak Grant Agency (No. 13549/06) and APVV (No. 20/000305).

REFERENCES

1. Fišera L., Ondruš V., Kubáň J., Mičúch P., Blanáriková I., Jäger V.: *J. Heterocyclic Chem.* 37, 551 (2000).
2. Pellissier H.: *Tetrahedron* 63, 3235 (2007).
3. Fišera L., in: *Topics in Heterocyclic Chemistry. Heterocycles from Carbohydrate Precursors*, (El Ashry, E. S. H., ed.), p. 287. Springer, Berlin, Heidelberg 2007.
4. Kubáň J., Blanáriková I., Fišera L., Jarošková L., Fenger-veith M., Jäger V., Kožíšek J., Humpa O., Prónayová N., Langer V.: *Tetrahedron* 55, 9501 (1999).
5. Kubáň J., Kolarovič A., Fišera L., Jäger V., Humpa O., Prónayová N., Ertl P.: *Synlett* 2001, 1862.
6. Kubáň J., Kolarovič A., Fišera L., Jäger V., Humpa O., Prónayová N.: *Synlett* 2001, 1866.
7. Blanáriková-Hlobilová I., Kopaničáková Z., Fišera L., Cyraňski M. K., Salanski P., Jurczak J., Prónayová N.: *Tetrahedron* 59, 3333 (2003).
8. Dugovič B., Fišera L., Hametner C.: *Synlett* 2004, 1569.
9. Dugovič B., Wiesenganger T., Fišera L., Hametner C., Prónayová, N.: *Heterocycles* 65, 591 (2005).
10. Dugovič B., Fišera L., Cyraňski M. K., Hametner C.,

- Prónayová N., Obranec M.: *Helv. Chim. Acta* 88, 1432 (2005).
11. Fischer R., Drucková A., Fišera L., Rybár A., Hametner C., Cyraňski M. K.: *Synlett* 2002, 1113.
 12. Fischer R., Drucková A., Fišera L., Hametner C.: *Arki- voc* 2002, 80.
 13. Hýrošová E., Fišera L., Jame R. M.-A., Prónayová N., Medvecký M., Kooš M.: *Chem. Heterocycl. Comp.* 2007, 14.
 14. Hýrošová E., Medvecký M., Fišera L., Hametner C., Fröhlich J., Marchetti M., Allmaier G.: *Tetrahedron* 64, 3111 (2008).
 15. Hýrošová E., Fišera L., Kožíšek J., Fronc M.: *Synthesis* 2008, 1233.
 16. Reháč J., Fišera L., Kožíšek J., Perašínová L., Steiner B., Kooš M.: *Arki- voc* 2008, 18.
 17. Reháč J., Fišera L., Podolan G., Kožíšek J., Perašínová L.: *Synlett* 2008, 1260.

PL4**RYCHLÉ REVERZIBILNÍ ZMĚNY AMORFNÍ-KRYSTALICKÁ FÁZE A NOVÉ MATERIÁLY PRO OPTICKÉ A ELEKTRICKÉ PAMĚTI VYSOKÉ HUSTOTY****MILOSLAV FRUMAR**

Katedra obecné a anorganické chemie, Chemicko-techno- logická fakulta a Výzkumné centrum, Univerzita Pardubice; Společná laboratoř chemie pevných látek Univerzity Pardubi- ce a Ústavu makromolekulární chemie AV ČR Praha miloslav.frumar@upce.cz

Je podán přehled nových výsledků studia úzkopásmo- vých, degenerovaných a amorfních polovodičů, polokovů a kovů nanometrických rozměrů, využitelných jako aktivní materiály pro přípravu optických a elektrických pamětí vyso- ké hustoty a malých rozměrů. Je prezentován model rychlých fázových nerovnovážných změn a jejich ovlivnění složením, strukturou a rozměry materiálů. Jsou diskutovány stávající (DVD, „blue ray“ disk) i potenciální aplikace (elektrické pa- měti vysoké kapacity, víceúrovňový záznam informací, nová ne-Neumanovská filozofie pamětí). Hlavní akcent je kladen na vlastnosti možných materiálů (zatím vesměs anorganic- kých), na jejich strukturu a fyzikálně chemické vlastnosti.

PL5**HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE – OD ELEKTRICKÉHO VÝBOJE K ZOBRAZOVÁNÍ TKÁNÍ****KAREL LEMR**

Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzi- ty Palackého, Tr. Svobody 8, 771 46 Olomouc Karel.Lemr@upol.cz

Hmotnostní spektrometrie je účinným nástrojem pro získávání informací, které dovolují pochopit podstatu dějů

v přírodě, i nástrojem pro rutinní analýzy například v toxikologické praxi, při kontrole výroby, při analýze složek životního prostředí a v dalších oblastech, které se bezprostřed- ně dotýkají každodenního života lidí. Její uplatnění v analytické praxi vycházelo a vychází ze základního výzku- mu procesů, které jsou podstatou samotného hmotnostně spektrometrického měření.

Vývoj hmotnostní spektrometrie je provázen řadou vý- znamných objevů, včetně objevů oceněných Nobelovou ce- nou¹. Na počátku hmotnostní spektrometrie stál výzkum elek- trického výboje v plynech, při kterém vznikaly kladně nabitě částice, konstrukce přístrojů, které dovolily odlišit těchto částic podle poměru hmotnosti ku náboji. V prvních desetile- tích dvacátého století jsou konstruovány hmotnostní spektro- metry poskytující mimo jiné experimentální data vedoucí k objevu stabilních izotopů. V souvislosti s izotopy byla hmotnostní spektrometrie také významným nástrojem v projektu Manhattan (vývoj atomové bomby ve Spojených státech). Již ve třicátých letech 20. století byla schopnost roz- lišit izotopy využita v metabolických studiích, ale tím ještě nebyly možnosti analýzy izotopů vyčerpány, například řadu zajímavých aplikací lze nalézt v geologii (měření poměru izotopů slouží k datování či k odhadu teploty na Zemi v její minulosti). Geologie je i dnes významnou aplikační oblastí anorganické hmotnostní spektrometrie.

Rozvoj organické hmotnostní spektrometrie lze sledovat od druhé světové války, kdy se tato technika uplatnila při ana- lýze ropných frakcí. S pokroky v instrumentaci se zvětšují i molekuly dostupné měření. V padesátých letech minulého století byly analyzovány steroidy, ale jeho koncem již mole- kuly proteinů s relativní molekulovou hmotností v řádu stati- siců. Rozvoj aplikací byl podmíněn základním výzkumem procesů vzniku iontů i jejich separace. Mimo jiné byly vyvi- nuty iontové zdroje (elektrosprej a MALDI), bez nichž by byl stěžejí představitelný rozvoj proteomiky.

Výčet oblastí, ve kterých se uplatňuje hmotnostní spekt- rometrie, je značně rozsáhlý. Například se jedná o sledování životního prostředí, kontrolu dopingů, kriminalistické využití (vyšetřování požárů, identifikace výbušnin, analýza drog aj.) a dále diagnostiku metabolických poruch, vývoj léčiv, přiče- mž hmotnostní spektrometrie doslova provází látku, léčivo, od její syntézy přes metabolické studie a studie interakcí s organismem až po farmaceutickou výrobu. Hmotnostní spektrometry také patří k přístrojům vysílaným do vesmíru a jejich prostřednictvím jsou získávány významné informace ze vzdálených míst sluneční soustavy.

Hmotnostní spektrometrie poskytuje údaje o struktuře látek a o jejich množství ve vzorku. Stává se ale i zobrazovací technikou, přičemž lze získat představu o rozložení sledova- ných látek na měřeném povrchu. Analyzovanými povrchy mohou být tkáně a získaný obraz rozložení látek může být využit při sledování distribuce léčiv, v diagnostice atd.

Zajímavých výsledků bylo dosaženo i na Katedře analy- tické chemie PřF UP, např. při studiu ionizace a fragmentace látek^{2,3}, při využití spojení kapilární elektroforézy s hmotnostní spektrometrií⁴, při analýze metabolitů³ a prekurzorů bojových látek⁵, při zkoumání interakcí malých molekul s peptidy⁶, při rozlišení optických izomerů⁷ aj.

Je zřejmé, že s pokroky v instrumentaci a s poznáním základních dějů se hmotnostní spektrometrie stala vysoce výkonným nástrojem pro výzkum v nejrůznějších oblastech

nejen chemie, ale i oborech biologických, medicínských a jiných. Zároveň je metodou aplikovatelnou při řešení řady problémů běžné analytické praxe.

Výsledky dosažené na našem pracovišti vznikly za finanční podpory grantu MŠMT ČR MSM6198959216. Poděkování patří ale především spolupracovníkům, kteří jsou spoluautory citovaných publikací a bez kterých by nebylo možné dosáhnout zajímavých poznatků.

LITERATURA

1. Grayson M. A.: *Measuring Mass, from Positive Rays to Proteins*. ASMS, Santa Fe 2002.
2. Takats Z., Koblíha V., Ševčík K., Novák P., Kruppa G., Lemr K., Havlíček V.: *J. Mass Spectrom.* 43, 196 (2008).
3. Fryčák P., Hušková R., Adam T., Lemr K.: *J. Mass Spectrom.* 37, 1242 (2002).
4. Bednář P., Papoušková B., Müller L., Barták P., Stávek J., Pavloušek P., Lemr K.: *J. Sep. Sci.* 28, 1291 (2005).
5. Papoušková B., Bednář P., Fryšová I., Stýskala J., Hlaváč J., Barták P., Ulrichová J., Jirkovský J., Lemr K.: *J. Mass Spectrom.* 42, 1550 (2007).
6. Fryčák P., Zdráhal Z., Ulrichová J., Wiegrebe W., Lemr K.: *J. Mass Spectrom.* 40, 1309 (2005).
7. Lemr K., Ranc V., Fryčák P., Bednář P., Ševčík J.: *J. Mass Spectrom.* 41, 499 (2006).

1L-01 CHEMIE KARBENOVÝCH KOMPLEXŮ CHROMU A ŽELEZA

DALIMIL DVOŘÁK

Ústav organické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6
dalimil.dvorak@vscht.cz

Karbenové komplexy přechodných kovů, které nesou jako ligand dvojvazný atom uhlíku, jsou zajímavé jak strukturou (obsahují formálně dvojnou vazbu kov-uhlík) tak i svojí jedinečnou reaktivitou. O tom svědčí i udělení dvou Nobelových cen za chemii. První obdržel v roce 1973 E. O. Fischer za jejich objev. Druhá Nobelova cena byla udělena v roce 2005 Y. Chauvinovi, R. R. Schrockovi a R. H. Grubsovi za objevy v oblasti metathese alkenů, která je karbenovými komplexy přechodných kovů katalyzovaná.

V naší skupině jsme vypracovali novou syntézu aminokarbenových komplexů železa¹ a studovali jejich reaktivitu. Reakce těchto komplexů s elektronově deficitními alkeny vede k γ -ketoderivátům² (Schéma 1). Termolýza chelatovaných aminokarbenových komplexů nesoucích dvojnou vazbu v postranním řetězci poskytla, v závislosti na struktuře, deriváty tetrahydropyridinu³ nebo dihydropyrrolu⁴ (Schéma 2). Na rozdíl od obdobných komplexů chromu zde nedochází k intramolekulární cyklopropanaci.

Při studiu obecných vlastností aminokarbenových komplexů chromu jsme se zaměřili na vysvětlení bráněné rotace aromátu v aminokarbenových komplexech nesoucích benzenové jádro přímo vázané na karbenový atom uhlíku. Prokázali jsme, že tato bráněná rotace je důsledkem sterických interakcí *N*-substituentů s benzenovým jádrem⁵. V případě, kdy je benzenové jádro v *o*-poloze vůči aminokarbenovému zbytku substituované, je rotační bariéra tak vysoká, že bylo možno

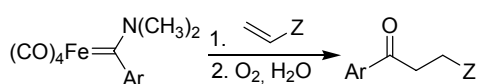


Schéma 1. Reakce aminokarbenových komplexů železa s elektronově deficitními alkeny

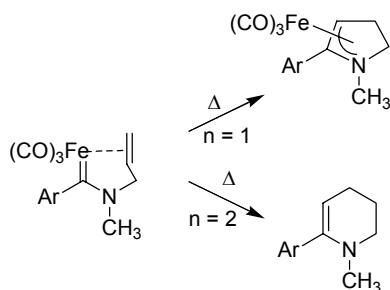


Schéma 2. Termolýza nenasyčených aminokarbenových komplexů železa

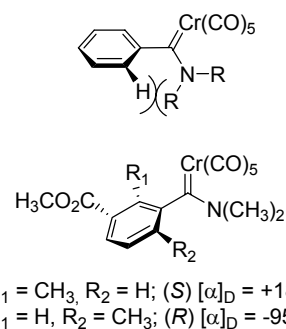


Schéma 3. Bráněná rotace a axiálně-chirální aminokarbenové komplexy chromu

izolovat enantiomery vzniklého axiálně-chirálního komplexu⁶ (Schéma 3).

Vodíkové atomy v α -poloze vůči karbenovému ligandu jsou kyselé. Ukázali jsme, že vzniklý anion je možno využít jako stabilizovaný nukleofil při palladiem katalyzované allylové substituci⁷. Anionty aminokarbenových komplexů reagují podle očekávání ve smyslu allylové substituce za vzniku nových, nenasyčených karbenových komplexů. Při reakci alkoxykarbenových komplexů však dochází k přenosu alkoxyvinylové skupiny a vznikají ketony. Allylovou substitucí je možno provést i enantioselektivně, ale enantiomerní přebytek jsou u těchto reakcí ve srovnání s běžnými *C*-nukleofily nižší. Studium elektronakceptorních vlastností chrompentakarbonylmethylenové skupiny ukázalo, že ke kyselosti vodíkových atomů v sousedství karbenového ligandu přispívá více mezo-erní stabilizace vzniklého aniontu než záporný induktivní efekt karbenového ligandu.

Tato práce vznikla za podpory grantů GA ČR (203/95/0160, 203/00/1240, 203/03/0035) a Centra základního výzkumu LC06070: Struktura a syntetické aplikace komplexů přechodných kovů MŠMT ČR.

LITERATURA

- Dvořák D.: *Organometallics* 14, 570 (1995).
- Rotrekl I., Vyklický L., Dvořák D.: *J. Organometal. Chem.* 617, 329 (2001).
- Vyklický L., Dvořáková H., Dvořák D.: *Organometallics* 20, 5419 (2001).
- Meca L., Cisařová I., Dvořák D.: *Organometallics* 22, 3703 (2003).
- Tobrman T., Meca L., Dvořáková H., Černý J., Dvořák D.: *Organometallics* 25, 5540 (2006).
- Meca L., Cisařová I., Drahoňovský D., Dvořák D.: *Organometallics* 27, 1850 (2008).
- Drahoňovský D., Borgo V., Dvořák D.: *Tetrahedron Lett.* 43, 7867 (2002).

1L-02 CO NABÍZÍ SOUČASNÁ RTG STRUKTURNÍ ANALÝZA?

BOHUMIL KRATOCHVÍL

*Ústav chemie pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
bohumi.kratochvil@vscht.cz*

Významný objev RTG difrakce v roce 1912 (cit.¹) vedl ke vzniku nové analytické techniky – RTG strukturní krystalografie. U nás se počátky RTG strukturní analýzy datují mnohem později. Okolo roku 1950 začal fyzik Allan Linek řešit strukturu ethylendiamonium-tartarátu, aby vysvětlil mechanismus jeho piezoelektrických vlastností. Řešení dosáhl až v roce 1957 a model vyřešené struktury byl vystaven na EX-PO1958 v Bruselu.

RTG strukturní analýza se postupně rozdělila na malé molekuly (zhruba do 1000 nevodíkových atomů) a velké molekuly (proteinová krystalografie, ale netýkající se pouze proteinů).

Současná rutinní RTG strukturní analýza je svojí rychlostí srovnatelná se spektrálními technikami. Chemikovi podává velmi užitečnou, ale na druhé straně statickou informaci. Krystalová struktura v ozařovaném objemu krystalu je prostoro-ově zprůměrována do jedné elementární buňky, resp. její asymetrické části, a časově do délky trvání difrakčního experimentu. Výzvou RTG strukturní analýzy je sledovat měnící se strukturu látky během chemické reakce *in situ*.

Dnes se rutinně studují struktury anorganické, mineralogické, farmaceutické, organické a organokovové, struktury pro ukládání jaderného odpadu, struktury typu hostitel-host, struktury aperiodické, struktury potravinářských ingrediencí, struktury zajímavých materiálů, struktury amorfních a semi-krystalických fází, struktury monitorované pro zachování a konzervaci kulturního dědictví a jiné. Vedle pevné fáze se ojedinele studují i strukturní jevy v kapalinách. Hledají se cesty, jak řídit krystalizaci a budovat struktury elektronové, krystalové, mikro- a nanostruktury s předem vytipovanými vlastnostmi. Zkoumají se krystalové stavební jednotky a jejich vztah k samospořádávajícím procesům vedoucím k supramolekulám. Velká pozornost je věnována strukturnímu studiu fázových přechodů a reakcím typu monokrystal → monokrystal a monokrystal → prášek. Zdokonaluje se RTG difrakční experiment za normálních a extrémních podmínek a jeho časově-rozlišené verze, vyvíjejí se RTG zdroje (laboratorní i synchrotronové) a detektory RTG záření a v neposlední řadě i matematické metody zpracování difrakčních dat.

V prezentaci bude podrobněji zmíněna revoluční metoda „charge flipping“² pro řešení krystalových struktur. Dále bude porovnána monokrystalová a prášková RTG strukturní analýza³, bude zmíněna aplikace RTG strukturní analýzy při výzkumu léčivých látek (kokrystaly), budou komentovány časově rozlišené RTG difrakční experimenty pro studium chemických reakcí *in situ*, na příkladech budou ilustrovány modulované struktury, stanovení nábojových a deformačních hustot a krystalografické studie za extrémních podmínek vysokého tlaku a teploty.

Závěrem bude diskutován současný stav a význam teore-

tické predikce krystalových struktur⁴.

Práce byla podpořena grantem GA ČR 203/07/0040 a výzkumným záměrem MŠMT ČR 6046137302.

LITERATURA

1. Friedrich W., Knipping P., Laue M.: Sitzungsber. Bayer. Akad. Wiss. 1912, 303.
2. Oszlányi G., Sütö A.: Acta Crystallogr. A 60, 134 (2004).
3. Hušák M., Rohlíček J., Čejka J., Kratochvíl B.: Chem. Listy 101, 697 (2007).
4. Day M. G.: 24th European Crystallographic Meeting ECM24, Marrakech 2007. Abstrakt MS1401.

1L-03

IMPROVED SYNTHESIS OF [closo-1-CB₉H₁₀]⁻ ANION AND NEW C-SUBSTITUTED DERIVATIVES

Dedicated to Professor Jaromír Plešek on the occasion of his 80th birthday in recognition of his major contributions to cluster borane chemistry

BRYAN RINGSTRAND^{a,b}, DEVON BATMAN^a, RICHARD K. SHOMAKER^c, and ZBYNĚK JANOUŠEK^{}**

*^a Institute of Inorganic Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, 250 68 Řež, The Czech Republic, ^b on leave from Dr. Piotr Kaszynski's Organic Materials Research Group, Department of Chemistry, Vanderbilt University, Nashville, Tennessee 37235, ^c Department of Chemistry and Biochemistry, University of Colorado at Boulder, Boulder, CO 80309-0215
bryan.ringstrand@Vanderbilt.edu*

Monocarbaborane anion CB₉H₁₀⁻ (*I*)¹ belongs to the group of anions of general formula CB_nH_{n+1}⁻, where the anionic charge is highly delocalized. These anions possess chemical, electrochemical and thermal stability; thus, they are useful in weakly coordinating and low coordinating anion chemistry². From this group, the [closo-1-CB₁₁H₁₂]⁻ anion is the most studied³ because of its ease of accessibility. However, new synthetic breakthroughs produced monocarbaboranes *via* Brellochs reactions^{4–6} of aldehydes with *nido*-B₁₀H₁₄ starting an accelerated expansion in sub-icosahedral monocarbaborane chemistry, revealing compounds with highly desirable characteristics. Suitably-substituted anions of this new, underdeveloped, class of compounds are among the most stable compounds even to the most aggressive reagents. They are also highly lipophilic and can be extremely difficult to oxidize. This combination of properties makes these anions useful in applications as diverse as counterions for reactive cationic organometallic catalysts, electrolytes for non-aqueous solvent and electrical batteries, and solubilizers of cations in organic solvents.

The work was supported by grant “Contact” (project ME857) and project LC523 of the Ministry of Education, Youth and Sport of the Czech Republic. Financial support from the Na-

tional Science Foundation (CHE-0446688) is also gratefully acknowledged.

REFERENCES

1. Knoth W. H.: *Inorg. Chem.* 10, 598 (1971).
2. Strauss S. H.: *Chem. Rev.* 93, 927 (1993).
3. Körbe S., Schreiber P. J., Michl J.: *Chem. Rev.* 106, 5208 (2006).
4. Brelloch B., in: *Contemporary Boron Chemistry*, (M. G. A. K. Davidson, Hughes K. Wade, ed.), p. 212–214. Royal Society of Chemistry, Cambridge 2000.
5. Franken A., Ormsby D. L., Kilner C. A., Clegg W., Thornton-Pett M., Kennedy J. D.: *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 14, 2807 (2002).
6. Franken A., Clegg W., Kilner C. A., Kennedy J. D.: *Chem. Comm.* 3, 328 (2004).

1L-04

VYUŽITIE SYMETRIE SPINOVÉHO HAMILTONIÁNU NA VÝPOČET MAGNETICKÝCH VLASTNOSTÍ POLYMÉRNÝCH KOORDINAČNÝCH ZLÚČENÍN

RADOVAN HERCHEL

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc
radovan.herchel@upol.cz

Výpočet magnetických vlastností – magnetizácie a susceptibility pre polymérne komplexné zlúčeniny je zväčša založený na využití spinového hamiltoniánu so zahrnutím izotropnej výmennej interakcie a Zeemanovho členu. Výsledné interakčné matice je následne potrebné diagonalizovať, aby sa získali hodnoty energetických hladín v magnetickom poli a z nich sa vypočítali magnetické vlastnosti pri rôznej teplote a magnetickom poli^{1,2}. S narastajúcim počtom paramagnetických centier sa výpočet značne komplikuje, pretože prudko narastá počet energetických hladín a tým aj rozmery matíc, ktoré je potrebné diagonalizovať – výsledná matica sa stáva exaktne „neriešiteľnou“ v reálnom čase a preto je potrebné využiť symetriu spinového hamiltoniánu a generovať novú bázu spinových funkcií, ktoré zodpovedajú ireducibilným reprezentáciám danej bodovej grupy symetrie, čo následne umožňuje rozložiť výslednú interakčnú maticu na submatice³.

Pre polymérne látky je významná možnosť zahrnúť dostatočný počet centier do výpočtu a tak imitovať ich polymérny charakter čo umožňuje interpretovať nielen teplotnú závislosť susceptibility, pre ktorú existujú aproximatívne vzťahy, ale aj polovú závislosť magnetizácie pri nízkych teplotách. Tento postup umožňuje vierohodnejšie stanoviť hodnoty parametrov a plne využiť meracie možnosti dnešných SQUID magnetometrov.

Pre paramagnetické centrá so spinom $S > 1$ je okrem izotropnej výmennej interakcie často potrebné zahrnúť i interakcie opisujúce magnetickú anizotropiu, ktorá významne vplýva na zmenu ich magnetických vlastností.

Prezentované budú výsledky pre 1D polyméry medi ($S = 1/2$), niklu ($S = 1$), železa ($S = 5/2$) a mangánu ($S = 5/2$).

Práca vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM619895218.

LITERATÚRA

1. Kahn O.: *Molecular Magnetism*. VCH, New York 1993.
2. Boča R.: *Theoretical Foundations of Molecular Magnetism*. Elsevier, Amsterdam 1999.
3. Waldmann O.: *Phys. Rev.*, B 61, 6138 (2000).

1L-05

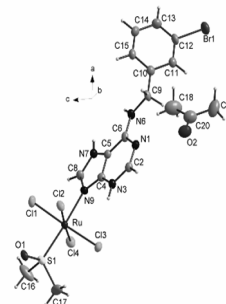
INTERAKCIA Ru(III) KOMPLEXOV OBSAHUJÚCICH DERIVÁT 6-BENZYLAMINOPURÍNU S DNA

MIROSLAVA MATÍKOVÁ-MAĽAROVÁ^a, VERONIKA PRAŽÁKOVÁ^b, JÁN VANČO^{a,c} a ZDENĚK TRÁVNÍČEK^a

^a *Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta UP, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc*, ^b *Ústav přírodních léčiv, Farmaceutická fakulta VFU, Palackého 1/3, 612 42 Brno*, ^c *Ústav chemických léčiv, Farmaceutická fakulta VFU, Palackého 1/3, 612 42 Brno*
miroslava.matikova@upol.cz

Mnohé komplexy ruténia s *N*-donorovými ligandami, ako sú amoniak, amíny, imíny ale predovšetkým aromatické heterocyklické zlúčeniny, sú v súčasnosti intenzívne študované najmä vďaka ich vysokej cytotoxickej aktivite voči ľudským nádorovým líniam^{1,2}. Mechanizmus ich účinku na molekulárnej úrovni nie je doposiaľ úplne objasnený a jednú z metód, významne prispievajúcich k objasneniu ich účinku, je výskum interakcie takýchto Ru-komplexov s DNA^{3,4}.

Účinnosť pôsobenia oktaedrických Ru(III) komplexov všeobecného zloženia [*trans*-Ru^{III}Cl₄(DMSO)(H⁺L)] \times sol (I–VI), kde L = derivát 6-benzylaminopurínu a sol = DMSO, EtOH, Me₂CO, ako chemických nukleáz bola študovaná metódou štiepenia plazmidovej dsDNA pôsobením H₂O₂ za prítomnosti/nepřítomnosti askorbátu ako redukčného činidla. Modelovým substrátom bol plazmid *E. coli* pRSET-B. Pripravené komplexy boli študované v troch rôznych molárných pomeroch, prepočítaných na jeden pár báz plazmidovej DNA (2,5:1; 1:1 a 0,5:1). V závislosti na molárnom pomere, intenzita fragmentácie stúpala od jednoreťazcových zlomov, až po úplnú hydrolyzu na malé nedefinovatelné fragmenty.



Obr. 1. Ukážka štruktúry študovaného komplexu (I)

Táto práca vznikla za podpory grantov MŠMT ČR MSM619895218 a GA ČR 203/08/P436.

LITERATÚRA

1. Ang W. H., Dyson P. J.: Eur. J. Inorg. Chem. 2006, 4003.
2. Clarke M. J.: Coord. Chem. Rev. 232, 69 (2002).
3. Reedijk J: Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 100, 3611 (2003).
4. Bešker N., Coletti C., Marrone A., Re N.: J. Phys. Chem. 111, 9955 (2007).

1L-06

**STUDIUM SYNTÉZY, STRUKTURY
A CYTOSTATICKÉ AKTIVITY VANADOCENOVÝCH
SLOUČENIN S BIOGENNÍMI AMINOKYSELINAMI**

**JAROMÍR VINKLÁREK, HANA PALÁČKOVÁ a JANA
HOLUBOVÁ**

*Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-
technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10
Pardubice
jaromír.vinklarek@upce.cz*

Bis(η^5 -cyklopentadienyl)dihalogenidové komplexy Cp_2MX_2 přechodných kovů 4., 5. a 6. skupiny jsou v současné době předmětem intenzivního zájmu především v souvislosti s jejich biologickou aktivitou¹. Ve většině biologických experimentů byl neaktivnějším metalocenovým komplexem titanocendichlorid (Cp_2TiCl_2) a vanadocendichlorid (Cp_2VCl_2). Tyto metaloceny byly preklinicky vyzkoušeny vůči rozsáhlému panelu lidských karcinomů (heterotrans-plantovaných na bezthymové myši). Na rozdíl od *cis*-Pt(NH₃)₂Cl₂ titanocendichlorid ani vanadocendichlorid toxikologický obraz (nefrototoxicita, myelotoxicita či teratogenita) nejeví. Mechanismus cytostatického účinku metalocenových sloučenin není doposud uspokojivě vyřešen. Dosavadní poznatky vyplývající z biologických, cytologických i chemických studií ukazují, že podstatou je zřejmě inhibice replikace DNA v rakovině buňce, která probíhá přímou interakcí s DNA nebo interakcí s enzymy, které se na replikaci podílejí.

V příspěvku bude diskutována možnost vazby antitumorově aktivního Cp_2VCl_2 s biogenními α -L-aminokyselinami. Na základě výsledků elementární analýzy, hmotnostní spektrometrie, vibračních spekter, EPR spektroskopie a RTG analýzy bylo potvrzeno, že všechny studované biogenní kyseliny jsou schopny vázat se vanadocenovému fragmentu $[Cp_2V]^{2+}$ za tvorby stabilních sloučenin. Většina kódovaných aminokyselin se váže k vanadocenovému fragmentu chelátovým typem vazby, který je uskutečněn přes dusík aminoskupiny a kyslík karboxylové skupiny jedné molekuly aminoskupiny $[Cp_2V(N,O-aa)Cl]$. Jiný typ chelátových komplexů byl nalezen pro L-cystein. Byly identifikovány komplexy $[Cp_2V(N,S-aa)Cl]$ $[Cp_2V(O,S-aa)Cl]$. Jedinou výjimkou, kde byla pozorována monodentátní vazba dvou molekul aminokyseliny k vanadocenovému fragmentu je L-prolin v popsáném komplexu $[Cp_2V(O-pro)_2Cl_2]$.

V neposlední řadě bylo rovněž dokázáno, že vanadocenové komplexy s biogenními aminokyselinami jsou zajímavé i z hlediska přímého použití jako antitumorové agens.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru MSM 0021627501.

LITERATURA

1. Köpf-Maier P., Köpf H.: Chem. Rev. 87, 1137 (1987).
2. Vinklárek J., Paláčková H., Honzíček J., Holubová J., Holčápek M., Císařová I.: Inorg. Chem. 45, 2156 (2006).

1L-07

**SYNTHESIS, SPECTRAL, MAGNETIC PROPERTIES
AND CRYSTAL STRUCTURES OF IRON
COMPLEXES WITH DERIVATIVES OF PYRIDINE**

**SILVIA ŠTEFÁNIKOVÁ^a, IVETA
ONDREJKOVIČOVÁ^a, MARIÁN KOMAN^a, JERZY
MROZIŃSKI^b, and TADEUSZ LIS^b**

*^a Faculty of Chemical and Food Technology, Radlinského 9,
812 37 Bratislava, Slovakia, ^b Faculty of Chemistry, F. Joliot-
Curie 14, 50-383 Wrocław, Poland
silvia.galkova@stuba.sk*

It is well known that iron cations play an active role in various biological processes. From our point of view it was challenging to study the interactions between iron cations and derivatives of pyridine that occur in living systems and are used as medicaments. Recently our attention has been focused on study of interactions between Fe(NCS)₃ and several derivatives of pyridine such as nicotinamide (nia), 2-pyridylmethanol (2-pm), methyl-3-pyridylcarbamate (mpc), *N,N'*-diethylnicotinamide (dena) and 3-pyridylmethanol (3-pm)¹.

Here we describe syntheses and spectral properties of $[Fe(NCS)_2(dena)_2]_n$ (**I**), $[3\text{-pmH}\times 3\text{-pm}][Fe(NCS)_4(3\text{-pm})_2]$ (**II**), $[Fe(NCS)_3(nia)_3]$ (**III**), $[Fe(NCS)_3(mpc)_3]$ (**IV**) and $[Fe(NCS)_2(2\text{-pm})_2]$ (**V**), and magnetic properties as well as the crystal structures of iron(II) complex (**I**) and iron(III) complex (**II**). Single crystal X-ray diffraction methods show that the complex (**I**) crystallizes in the triclinic P-1 and complex (**II**) crystallizes in the monoclinic P2(1)/c space group. The complex (**I**) is high-spin $S = 2$ ($^5T_{2g}$) and as a result effects due to zero-field splitting are anticipated at low temperatures. The complex (**II**) is high-spin $S = 5/2$ ($^5T_{2g}$).

In all complexes derivatives of pyridine are coordinated to iron atom through N atom of pyridine ring. However, in polymeric complex (**I**) dena acts as bidentate bridging ligand coordinated also by O atom of $-CO(NEt_2)$ group and in complex (**V**) 2-pm is bonded as chelating ligand by oxygen atom of $-CH_2OH$ group to Fe(II) atom, too.

This work was supported by the Science and Technology Assistance Agency under the contract VEGA No. 1/0353/08, VEGA No. 1/4454/07 and by the Ministry of Polish Ministry of Science and Higher Education Grant No. 1T09A12430.

REFERENCE

1. Galková S., Ondrejkoovičová I., in: *Achievements in Coordination, Bioinorganic and Applied Inorganic Chemistry*, p. 74–79. STU Press, Bratislava 2007.

1L-08

TEMPERATURE-DEPENDENT COMPLEXATION OF RONICOL TO COPPER(II) IN AQUEOUS MEDIA - STUDY BY TWO-DIMENSIONAL ESR SIMULATION

RASTISLAV ŠÍPOŠ^a, JOZEF ŠIMA^a, MILAN MELNÍK^a
TERÉZIA SZABÓ-PLÁNKA^b, NÓRA VERONIKA
NAGY^c, ANTAL ROCKENBAUER^c

^a Department of Inorganic Chemistry, Slovak Technical University, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia,

^b Department of Physical Chemistry, University of Szeged, Rerrich Béla tér 1, H-6720 Szeged, Hungary, ^c Chemical Research Center, Hungarian Academy of Sciences, P.O. Box 17, H-1525 Budapest, Hungary
rasto.sipos@gmail.com

The copper(II)–ronicol L (3-pyridylmethanol, acting as a non-steroidal anti-inflammatory drug in clinical practice) systems were investigated in aqueous solutions by the two-dimensional ESR evaluation method¹ at 298 K, and the computer simulation of the individual anisotropic spectra at 77 K. The data revealed that the paramagnetic copper(II) complexes $[\text{CuL}]^{2+}$, $[\text{CuL}_2]^{2+}$, $[\text{CuL}_3]^{2+}$, and $[\text{CuL}_4]^{2+}$ are formed up to $\text{pH} \approx 7$ at a moderate and high excess of ligand. When compared to chelating ligands², two differences were observed for the complexation of ronicol with copper(II): 1) in contrast to the well-resolved spectra in frozen solution, considerable line-broadening and distortion of spectral shapes occurred at 298 K which was interpreted with *cis-trans* isomeric equilibria and medium-rate interconversion of various complexes on the ESR time-scale. 2) At low temperature, dramatic changes in the concentration distribution occurred: the minor complexes with greater number of coordinating ligands ($[\text{CuL}_3]^{2+}$, and, in particular, $[\text{CuL}_4]^{2+}$) became highly favoured. An explanation for this fact was given by the discussion of the free-energy term.

The work was performed in the framework of Hungarian-Slovak Intergovernmental S&T Cooperation (Grant TÉT SK-25/2006). Furthermore, the financial support of the Hungarian Scientific Research Fund OTKA (Grant K-72781) and the Slovak Fund (VEGA 1/0353/08) is gratefully acknowledged.

REFERENCES

- Šípoš R., Szabó-Plánka T., Rockenbauer A., Nagy N. V., Šima J., Melník M.: J. Phys. Chem., submitted
- Szabó-Plánka T., Gyurcsik B., Nagy N. V., Rockenbauer A., Šípoš R., Šima J., Melník M.: J. Inorg. Biochem. 102, 101 (2008).

1L-09

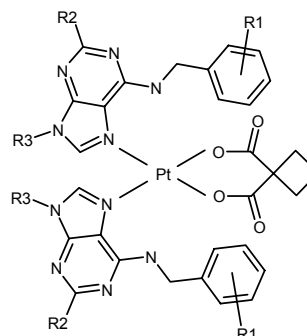
ČTVERCOVÉ Pt(II) KOMPLEXY ODVOZENÉ OD KARBOPLATINY S VYBRANÝMI DERIVÁTY 6-(BENZYLAMINO)PURINU

LUKÁŠ DVORŽÁK^a, IGOR POPA^{a,b} a ZDENĚK
TRÁVNÍČEK^{a,*}

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

^b Laboratoř růstových regulátorů, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého a Ústav experimentální botaniky AV ČR, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc
rybarlucas@seznam.cz

Karboplatina, diammin-(cyklobutan-1,1-dikarboxyláto)-platnatý komplex, je již řadu let využívána jako kancerostaticum tzv. druhé generace. Současným obecným trendem v oblasti vývoje protinádorových léčiv na bázi komplexů platiny je snaha o přípravu strukturně podobných sloučenin s cílem zvýšit cytotoxické účinky při současném snížení toxicity připravených sloučenin na lidský organismus (kancerostatika 3. generace). V rámci výše uvedených snah byla připravena série komplexů obecného vzorce $[\text{Pt}(\text{HL})_2(\text{CBDCA})]$ (obr. 1), kde HL je vhodný derivát 6-(benzylamino)purinu a CBDCA je dianion kyseliny cyklobutan-1,1-dikarboxylové.



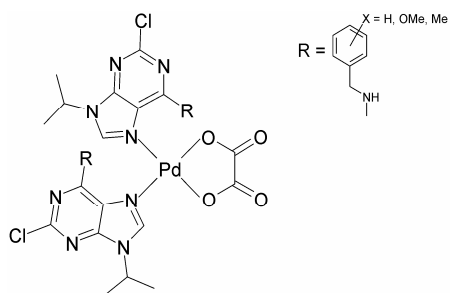
Obr. 1. Předpokládaná struktura připravených Pt(II) komplexů

Připravené komplexy byly charakterizovány dostupnými fyzikálně-chemickými technikami (chemická analýza prvků, FTIR, Ramanova a multinukleární NMR spektrometrie, termická analýza). Na základě výsledků plynoucích z výše zmíněných technik jde o čtvercové Pt(II) komplexy s chromoforem PtN_2O_2 , ve kterých je *N*-donorový ligand koordinován přes *N7* atom imidazolového kruhu. V současnosti probíhá optimalizace geometrie vybraného komplexu pomocí DFT výpočtů a probíhají snahy o přípravu monokystalů vhodných pro X-ray analýzu. Jedním z cílů práce je i studium *in vitro* cytotoxicity připravených komplexů.

Tato práce vznikla za podpory grantu MSM6198959218.

IL-10**Pd(II) OXALÁTOKOMPLEXY S 2,6,9-TRI-SUBSTITUOVANÝMI DERIVÁTY PURINU: SYNTÉZA, VLASTNOSTI****PAVEL ŠTARHA^a, IGOR POPA^{a,b} a ZDENĚK TRÁVNÍČEK^a**^a Katedra anorganické chemie, PŘF UP v Olomouci, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc, ^b Laboratoř růstových regulátorů, PŘF UP & ÚEB AV ČR, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc
pavel.starha@upol.cz

V této práci se zabýváme syntézou a studiem fyzikálně-chemických a biologických vlastností Pd(II) oxalátokomplexů s vybranými 2,6,9-trisubstituovanými deriváty purinu (L_n). Komplexy byly připraveny vícestupňovou syntézou vycházející z K_2PdCl_4 . Meziprodukty a finální produkty byly charakterizovány následujícími fyzikálně-chemickými metodami: chemická analýza prvků, UV-VIS, FT-IR, Ramanova a multinukleární NMR spektroskopie, vodivostní měření, hmotnostní spektrometrie, termická analýza (TG/DTA) a monokystalová rentgenová strukturní analýza.



Obr. 1. Schematické znázornění připravených Pd(II) komplexů

Na základě výsledků výše uvedených metod studia je zřejmé, že byly připraveny komplexy obecného složení $[Pd(L_n)(ox)]$, kde H_2Ox = kyselina šťavelová. Centrální Pd(II) ion je bidentátně koordinován oxalátovým dianionem a dvěma N-donorovými purinovými deriváty (L_n) – tyto jsou koordinovány přes atomy N7 imidazolových purinových cyklů a v rámci molekuly komplexu zaujímají „head-to-tail“ orientaci. Připravené Pd(II) komplexy mají mírně deformovanou čtvercovou geometrii.

In vitro studium cytotoxicity připravených komplexů vůči vybraným lidským nádorovým liniím je předmětem dalšího studia a bude diskutováno v rámci prezentace.

Tato práce je podporována grantem MŠMT ČR MSM6198959218.

IL-11**NANOMATERIÁLY A FOTOKATALYTICKÉ VLASTNOSTI TiO_2** **ANTONÍN MLČOCH**České technologické centrum pro anorganické pigmenty, Nábřeží Dr. E. Beneše 24, 751 62 Přešov
antonin.mlcoch@precheza.cz

Nanotechnologie a nanomateriály jsou považovány za perspektivní pro řešení rozhodujících problémů lidstva, jako jsou ochrana životního prostředí, energie a zdraví. Skutečnost, že velikost částic významně ovlivňuje řadu vlastností známých látek, jako jsou optické, elektrické, magnetické, chemické a mechanické, nabízí nové průmyslové aplikace. Jedním z perspektivních nanomateriálů je oxid titaničitý. Hlavní oblasti aplikace těchto TiO_2 specialit jsou katalyzátory, UV absorbery pro nátěrové hmoty, kosmetiku a plasty, mikroelektronika, textil, stavební materiály a zdravotnictví.

Vývoj v ČTC AP jak v laboratorním, tak poloprovozním měřítku je zaměřen na implementaci vědeckých poznatků do zavedení ekonomických a životnímu prostředí přátelských technologií do průmyslové výroby.

Cílem bylo připravit optimální strukturu TiO_2 s vysokou fotoaktivitou a dále nanostrukturu vhodnou pro přípravu UV absorberů. Při vývoji postupu z ilmenitu bylo zjištěno, že již v roztoku titanyl-sulfátu vzniklého rozkladem ilmenitu kyselinou sírovou je možno identifikovat určité „clustery“, které mohou hrát roli při následné termické hydrolyze díky vysoké reaktivitě titaničitého prekurzoru. Bylo zjištěno, že fotoaktivita závisí na morfologii, struktuře a chemickém složení, na charakteru povrchu, velikosti částic a velikosti pórů. Závislost na měrném povrchu není jednoznačná s ohledem na rozdílný charakter povrchu (např. na velikost pórů, adsorpci/desorpci organických polutantů).

Hledání příčinných souvislostí mezi materiálovými charakteristikami a fotoaktivitou nanokrystalického oxidu titaničitého a poznání technologických faktorů, které ji ovlivňují, jsou předmětem našich studií.

Zkušební vzorky nanostruktur TiO_2 připravených byly zkoumány pomocí XRD, BET, SEM, HRTEM, UV-VIS a EPR spektrometrie a dále byla zjišťována fotoaktivita a samoumyvatelnost nátěrů připravených z nanomateriálů^{1,2}.

Tato práce vznikla za finanční podpory z prostředků státního rozpočtu prostřednictvím MPO ČR FT- 04-025.

LITERATURA

1. Kovář P., Červenka P., Mlčoch A.: VZ TK 501493, ČTCAP prosinec 2007.
2. Kovář P., Mlčoch A.: TK 501494, ČTCAP prosinec 2007.

1L-12 FOTOFYZIKÁLNÍ VLASTNOSTI INTERKALOVANÝCH VRSTEVNATÝCH MATERIÁLŮ

KAMIL LANG

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

Hybridní materiály na bázi anorganický nosič–organická fotoaktivní molekula, např. porfyriny, se využívají v katalýze, fotosenzitizovaných reakcích, při imobilizaci biomolekul nebo v nelineární optice. V samouspořádaných filmech jsou molekuly porfyrinů ve vzájemné interakci a sdílejí absorbovanou excitační energii. Během přípravy fotofunkčních materiálů musejí být tyto interakce potlačeny, protože sdílení vede k disipaci energie a tím k výraznému snížení doby života excitovaných stavů a následně k ovlivnění všech fotoindukovaných reakcí. Metodou, jak tomuto zabránit, je imobilizace jednotlivých molekul v pevných materiálech majících uspořádanou strukturu jako např. zeolity, vrstevnaté křemičitany nebo podvojně vrstevnaté hydroxidy (layered double hydroxides, LDH).

Tématem přednášky je popis strukturních, spektrálních a fotofyzikálních vlastností LDH materiálů obsahujících interkalované porfyriny¹. Struktura LDH se skládá z uspořádaných kladně nabitých hydroxidových vrstev, jejichž náboj je kompenzován anionty nacházející se spolu s molekulami vody v prostoru mezi vrstvami. Chemické složení je popsáno obecným vzorcem $[M^{II}_{1-x}M^{III}_x(OH)_2]^{x+}[A^{n-}{}_{x/n} \times yH_2O]^{x-}$, kde M^{II} a M^{III} představuje kovové ionty, A^{n-} jsou kompenzující porfyrinové anionty a x leží převážně v rozmezí 0,20 a 0,35. Z kovových iontů studujeme Mg(II), Zn(II) a Al(III), a anionty jsou porfyriny – 5,10,15,20-tetrakis(4-sulfonatofenyl) porfyrin a Pd(II)-5,10,15,20-tetrakis(4-karboxyfenyl) porfyrin.

Pozornost je věnována metodám přípravy nanostrukturálních hybridních materiálů, jak ve formě prášků, tak orientovaných filmů, vlivu struktury LDH matrice na uspořádání interkalovaných molekul, popsání jejich fotofyzikálních vlastností (fluorescence, tripletové stavy, přenos energie, singletový kyslík), popisu mikroskopické struktury hybridů a možným aplikacím v oblasti materiálů s definovanými fotofyzikálními vlastnostmi. Porfyriny v pevných LDH nosičích si zachovávají vlastnosti jako jsou fluorescence a produkce tripletových stavů po excitaci. Tripletové stavy interagují hlavně s kyslíkem za vzniku excitované formy kyslíku, tj. singletového kyslíku $O_2(^1\Delta_g)$. Měřené doby života $O_2(^1\Delta_g)$ jsou 6–64 μ s. Hlavním cílem je kvantitativní popis reaktivity excitovaných stavů v pevných maticích, charakterizace struktury nosičů a příprava fotofunkčních materiálů.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 203/06/1244.

LITERATURA

- Lang K., Bezdička P., Bourdelande J. L., Hernando J., Jirka I., Káfuňková E., Kovanda F., Kubát P., Mosinger J., Wagnerová D. M.: Chem. Mater. 19, 3822 (2007).

1L-13 EXTRÉMNE RÝCHLE CHLADENIE ROZTAVENÝCH SOLÍ A INÉ POKROČILÉ METÓDY VÝSKUMU – APLIKÁCIA NA KRYOLITOVÉ TAVENINY

MIROSLAV BOČA^a, MARIÁN KUCHARÍK^a, MICHAL
KORENKO^a a DUŠAN JANÍČKOVIČ^b

^a Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, ^b Institute of Physics, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovakia
uachboca@savba.sk

Výskum kryolitových tavenín je dôležitý pre hliníkársky priemysel. Pod kryolitovou taveninou rozumieme kvapalnú fázu zliučiny Na_3AlF_6 , v ktorej sú rozpustené ďalšie zložky najmä Al_2O_3 . Spôsob interakcie týchto dvoch zložiek je predmetom výskumu od samého počiatku priemyselnej výroby hliníka. Rozvoj moderných techník umožňuje aplikovať postupy, ktoré boli donedávna neznáme. Jednou z nich je aj „Rapid Solidification Processing“ (RPS).

RPS je metóda chladenia, pri ktorej sa dosahuje rýchlosť chladenia 10^5 – 10^6 °C s⁻¹. Pri takejto rýchlosti chladenia sa dá v určitom priblížení uvažovať, že stav, ktorý existoval v kvapalnej fáze, bude zachovaný ako metastabilný stav v tuhej fáze. Takto pripravenú látku možno analyzovať ktoroukoľvek štandardnou technikou.

RPS metódou boli pripravené vzorky s počiatočným zložením $Na_3AlF_6 - x$ hm.% Al_2O_3 ($x = 10, 20$ a 30). Časť vzoriek bola žiňaná pri rôznych teplotách (750 °C a 950 °C) v rôznej atmosfére s cieľom relaxácie metastabilného stavu. Vzorky boli potom študované röntgenovou difrakčnou analýzou, infračervenou a Ramanovou spektroskopiou, pričom sa sledovala prítomnosť rôznych fáz oxohlitanov sodných.

Ďalšou aplikovanou metódou, ktorá posúva hranice výskumu tavenín je neuronová difrakčná analýza pri vysokých teplotách.

Práca vznikla za podpory grantu VEGA 2/7077/27.

1L-14 KRYŠTALIZÁCIA A TERMICKÁ STABILITA LÍTNOKREMIČITÝCH SKIEL S PRÍDAVKOM OXIDU TITANIČITÉHO A ZIRKONIČITÉHO

VILIAM PAVLÍK a EUGEN JÓNA

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

Základná informácia z hľadiska existencie a potenciálnej aplikácie skiel je ich stabilita voči kryštalizácii. Navrhnuté kritérium na zisťovanie stability skiel bola aktivačná kryštalizačná energia, E^{1-5} , ktorá v sebe zahŕňa proces nukleácie aj kryštalizácie. Boli pripravené sklá s prídavkom TiO_2 a ZrO_2 zloženia: $Li_2O \cdot 2 SiO_2 \cdot n TiO_2 \cdot n ZrO_2$ (pričom $n = 0; 0,015; 0,031$;

0,050; 0,075; 0,1; 0,15; 0,2). Tieto systémy boli porovnané so systémom $\text{Li}_2\text{O} \cdot 2 \text{SiO}_2 \cdot m \text{ZrO}_2$ (pričom $m = 0,030; 0,062; 0,100$) kde sa zistilo, že tieto sklá majú vyššiu termickú stabilitu ako pripravené s TiO_2 a ZrO_2 s rovnakým mólovým pomerom. Pri štúdiu termickej stability skiel sa použila diferenčná termická analýza (DTA) a pre zistenie formovania sa kryštalizačných nukleí bola použitá RTG analýza. Zo získaných údajov sa vypočítala aktivačná energia, E :

$$\ln(T_f^2/\beta) = E_{(Tf)} / RT_f + \ln E_{(Tf)} / R - \ln A \quad (1)$$

$$\ln(T_p^2/\beta) = E_{(Tp)} / RT_p + \ln E_{(Tp)} / R - \ln A \quad (2)$$

$$\ln \beta = E_{(\beta)} / RT_p \quad (3)$$

kde T_p je teplota maxima exotermického píku na DTA krivke, T_f je teplota inflexného bodu a β je rýchlosť ohrevu vzoriek.

Pri sústavách s prídavkom do 0,050 mólových množstiev oxidov hodnoty aktivačných energií klesajú oproti základnej sústave. Pri prídavku $n = 0,075$ oxidov hodnoty E prudko rastú a ďalej sa zvyšujú iba mierne. 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 kremičitaneovej siete tetraédrov. ZrO_2 pri vyšších koncentráciách pôsobí ako sieťotvorný oxid. Oxid titaničitý môže pôsobiť pri nižšom obsahu ako nukleátor. Tieto výsledky súhlasia aj s hodnotami teplôt T_p , ktoré sa so zvyšujúcim prídavkom ZrO_2 zvyšujú. Kryštalická fáza bola dokázaná pomocou RTG analýzy.

Zistilo sa, že so zvyšujúcim sa prídavkom oxidov TiO_2 a ZrO_2 hodnoty aktivačných energií stúpajú od mólového množstva 0,075, tj. stúpa aj termická stabilita lítokremičitých skiel voči kryštalizácii.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/3161/06 a CUGA.

LITERATÚRA

1. Sakka S., Tashiro M.: J. Ceram. Soc. Japan. 69, 67 (1961).
2. Stookey S. D.: Glastechn. Ber. 32 k, V/1 (1959).
3. Moriya T.: J. Ceram. Soc. Japan. 63, 1129 (1960).
4. Jóna E.: J. Therm. Anal. Cal. 76, 85 (2006).
5. Jóna E.: J. Therm. Anal. Cal. 84, 673 (2006).

1L-15

SANACE ORGANICKÝCH KONTAMINANTŮ A KOVŮ METODOU STABILIZACE/SOLIDIFIKACE IN SITU

ALENA RODOVÁ^a a ONDŘEJ URBAN^b

^a Výzkumný ústav anorganické chemie, a. s., Revoluční 1521/84, 400 01 Ústí nad Labem, ^b DEKONTA, a. s., Volutová 2523, 158 00 Praha 5
alena.rodova@vuanch.cz

Stabilizace/solidifikace je soubor fyzikálních a chemických procesů, kterými lze přeměnit kontaminanty na méně rozpustnou, imobilní nebo méně toxickou formu a fixovat je v sanovaném materiálu pomocí vhodných činidel. Sanační zásah *in situ* probíhá přímo v místě výskytu kontaminace.

Výzkumný ústav anorganické chemie ve spolupráci se společností DEKONTA realizoval laboratorní zkoušky, v rámci kterých bylo testováno přibližně 30 stabilizačních

receptur. Stabilizovány byly materiály kontaminované toxickými kovy (As, Sb, Ni, Tl) a organickými látkami (NEL, PAU). Jako stabilizační činidla byla použita řada látek, např. cement, pálené vápno, vápenný hydrát, energosádrovec, popílek, bentonit nebo vodní sklo v různých dávkách a kombinacích.

Připravené stabilizáty byly podrobeny standardním výluhovým testům dle vyhlášky 294/2005 Sb. a dle metody U. S. Environmental Protection Agency (Toxicity Characteristic Leaching Procedure 1311). Byly realizovány dynamické zkoušky se srážkovou vodou a zkoušky geomechanických vlastností. Na základě výsledků zkoušek je navrhována technologie sanace metodou stabilizace/solidifikace *in situ* v pilotním měřítku na vybraných lokalitách v České republice i zahraničí.

Autoři děkují za finanční podporu projektu Výzkum a ověření metody sanace kontaminovaných zemín progresivní technologií stabilizace a solidifikace in situ (FI-IM3/095) Ministerstvu průmyslu a obchodu České republiky.

LITERATURA

1. Spence R. D., Shi C.: *Hazardous, Radioactive and Mixed Wastes*. CRC Press, Boca Raton 2005.
2. Urban O., Rodová A.: *Výzkum a ověření metody sanace kontaminovaných zemín progresivní technologií stabilizace a solidifikace in situ II*. Zpráva o řešení projektu (2007).

1L-16

ANORGANICKÉ POLYMERY

MILAN ALBERTI

Ústav fyzikální elektroniky, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Kotlářská 2, 611 37 Brno
alberti@chemi.muni.cz

Termín anorganické polymery je zpravidla používán pro makromolekulární látky, jejichž hlavní řetězce jsou tvořeny atomovými uskupeními, např. Si - O, P - N, B - N, S - N, B - O, P - O, Al - N, C - N, jakož i dalšími vzájemnými kombinacemi uvedených prvků. Různými badateli jsou připouštěny širší definice anorganických polymerů a proto jsou běžně zahrnovány do této třídy látek alotropické modifikace prvků např. P, S, C, anorganická skla, DLC a DLN vrstvy, zeolity, celá plejáda binárních sloučenin, jakými jsou karbidy, oxidy a nitridy.

V posledních letech se čím dál častěji hovoří o organometallických polymerech, resp. anorganicko / organických polymerech, anorganicko / organických hybridních polymerech, organokovových polymerech anebo o polymerech obsahujících kov, přičemž jsou míněny polymery, v jejichž hlavních řetězcích se střídají atomy kovů s organickými skupinami. V této souvislosti je často používán termín nové hybridní materiály a anorganicko/organické hybridní materiály. Přednáška je především zaměřena na pokroky v chemii sloučenin křemíku – polysilanů, polysiloxanů, polysilazanů, polykarbosilanů, silseskvioxanů, dále fosforu – polyfosfazanů, bóru – polyborazanů a polyaminoborazanů a

jejich ekvivalentních nitridů. Prezentovány jsou způsoby přípravy prekurzorů, metody polymerizačních procesů vedoucí k tvorbě příslušných polymerů, jejich chemická reaktivita, struktura, fyzikální vlastnosti a rovněž současné a potenciální aplikace v technické praxi.

Tato práce vznikla za podpory grantu MSM 0021622411.

LITERATURA

1. Wisian-Neilson, P., Allcock H. R., Wynne K. J.: *Inorganic and Organometallic Polymers II*, ACS Symposium Series 572, s. 1–536. American Chemical Society, Washington DC 1994.
2. Allcock H. R.: *Chemistry and Applications of Polyphosphazenes*, s. 1–725. J. Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey 2003.
3. Gleria M., De Jaeger R.: *Phosphazenes a Worldwide Insight*, s. 1–1047. Nova Science Publishers, Inc. Hauppauge, New York 2004.
4. De Jaeger R., Gleria M.: *Inorganic Polymers*, s. 1–893. Nova Science Publishers, Inc. Hauppauge, New York 2007.

1L-17

STUDIUM SYNTÉZY A VLASTNOSTÍ PYROCHLOROVÝCH PIGMENTŮ TYPU Sr-Tb-Sn

ŽANETA DOHNALOVÁ, PETRA ŠULCOVÁ
a **MIROSLAV TROJAN**

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice
zaneta.dohnalova@upce.cz

Struktura perovskitových sloučenin je odvozena od tmavě hnědého až černého přírodního minerálu perovskitu CaTiO_3 . V perovskitu jsou atomy kyslíku a vápníku seskupeny v nejtěsnějším kubickém uspořádání a atom titanu je vnesen do oktaedrické dutiny. V případě sloučenin SrSnO_3 a CaSnO_3 dochází vlivem většího atomu cínu k rozšíření oktaedrických dutin, kubická perovskitová struktura je deformována a přechází na strukturu orthorombickou. Vestavění jinovalentních iontů lanthanoidů do hostitelské perovskitové mřížky cínicitanů vede ke vzniku bodových poruch. Snadnější nestechiometrická substituce části strontnatých iontů trojmocnými ionty lanthanoidů vytváří kladný náboj, který je kompenzován buď vznikem negativně nabitých kationtových vakancí (V''_{Sr}) nebo vznikem elektronů ($2e^-$). Je však možné dosáhnout také nestechiometrické substituce na straně iontů Sn^{4+} , která je kompenzována vznikem vakancí v aniontové podmřížce¹.

Klasickou keramickou metodou syntézy byly připravovány dvě řady perovskitových sloučenin obsahující Sr-Tb-Sn. Východí sloučeniny Tb_4O_7 , SnO_2 a SrCO_3 byly homogenizovány v achátové misce a poté byly v korundových vypalovacích nádobkách podrobeny dvoustupňové kalcinaci. První kalcinace byla provedena při teplotě 1000 °C po dobu 2 hodin. Po vychladnutí a vyjmutí z pece byly výpalky opět zhomogenizovány rozdrcením v třecí misce a podrobeny dru-

hé kalcinaci při vyšších teplotách (1300–1550 °C) po dobu 3 hodin. Takto připravené pigmenty byly podrobeny studiu základních pigmentově-aplikačních vlastností, tzn. měření distribuce velikosti částic a barevných vlastností a dále byly studovány jejich strukturální vlastnosti.

Bílý SrSnO_3 se při syntéze reakcí v pevné fázi za teploty 1500 °C vyznačuje orthorombickou strukturou. Teoreticky jednodušší syntéza pigmentů typu $\text{Sr}_{1-x}\text{Tb}_x\text{SnO}_3$ se ukázala jako náročnější a za daných reakčních podmínek se nepodařilo syntetizovat jednofázovou sloučeninu. Pigmenty druhé řady $\text{SrSn}_{1-x}\text{Tb}_x\text{O}_3$ se jeví jako barevně zajímavé potenciální anorganické pigmenty žluté barvy. Rentgenová difrakční analýza prokázala úplné proreagování reakčních směsí již při nižších teplotách, avšak z hlediska barevnosti se jako nevhodnější teplota jeví 1500 °C.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru č. MSM 0021627501 a projektu grantové agentury ČR č. 104/08/0289.

LITERATURA

1. Lei B., Li B., Zhang H., Li W.: *Opt. Mater.* 29, 1491 (2007).

1L-18

STUDIUM POLYETHYLENU PO INTERAKCI S PLAZMATEM

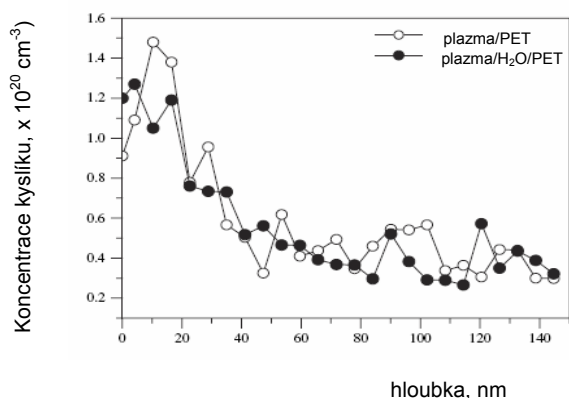
JAKUB SIEGEL^a, PETR SLEPIČKA^a, ANNA MACKOVÁ^b a VÁCLAV ŠVORČÍK^a

^a Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha, ^b Ústav jaderné fyziky AV ČR, 250 68 Řež u Prahy
jakub.siegel@vscht.cz

Možnosti aplikace polymerů v různých odvětvích průmyslu stoupají se schopností lidstva nalézat nové techniky zpracování, výroby či úpravy těchto materiálů. Počátkem minulého století byl nárůst spotřeby spojen především s nově objevenými polymerními materiály a jejich masovou produkcí. Na začátku 21. století je situace odlišná. Hnací silou pro nové aplikace polymerů v oblastech s dynamickým rozvojem (optika, fotonika, elektrotechnika) je zejména úprava vlastností stávajících polymerů pro specifické aplikace. Vhodnou metodou, jak modifikovat povrchové vlastnosti polymerů při zachování charakteristických vlastností objemových, je expozice povrchu plazmatem^{1,2}.

Tato práce se zabývá modifikací polyethylenu Ar plazmatem. Sledovány byly změny chemického složení v povrchové vrstvě FTIR, XPS a RBS metodami. Povrchová morfologie a drsnost byla studována AFM. Gravimetrickými měřeními byla stanovena tloušťka ablatované vrstvy a studována rozpustnost modifikované povrchové vrstvy polymeru.

Modifikace iniciovaná plazmatem způsobuje ablaci PE a nárůst koncentrace funkčních skupin obsahujících kyslík v povrchové vrstvě polymeru (několik desítek nm). Koncentrace kyslíku závisí na stárnutí vzorku po expozici. Důsledkem modifikace je i rozpustnost tenké povrchové vrstvy ve vodě.



Obr. 1. Koncentrační profil kyslíku v PE po modifikaci plazmatem a leptání ve vodě

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR č. 102/06/1106, MŠMT MSM č. 6046137302 a LC 06041, GA AV ČR č. KAN400480701 a 200100801.

LITERATURA

1. Siegel J., Řezničková A., Chaloupka A., Slepíčka P., Švorčík V.: Radiat. Eff. Def. Sol., v tisku.
2. Švorčík V., Kotál V., Siegel J., Sajdl P., Macková A., Hnatowicz V.: Polym. Degrad. Stabil. 92, 1645 (2008).

1L-19

“MACRO-DEFECT-FREE” MATERIÁLY – VÝZVA PRE CHÉMIU A TECHNOLOGIU?

MILAN DRÁBIK a SVETOZÁR BALKOVIC

Ústav anorganickej chémie SAV, 845 36 Bratislava, SR
uachmdra@savba.sk

Výskum cementu poskytuje pozoruhodné cesty na dosiahnutie požadovaných vlastností. Hoci Portlandský cement ako materiál pre stavebné účely na celom svete dominuje, existuje niekoľko významných technológií pre spracovanie cementov, zaznamenávame takto aj nové materiály a nové techniky zhutňovania (napr. mechanické lisovanie, extrúzia, použitie doplnkových materiálov – selektívnych promótorov interakcií, tuhnutia a tvrdnutia). Výsledkom je zvýšené zosieťovanie hydratovaných fragmentov v prototypoch takých materiálov, akými sú pevné cementy (DSP, Ductal), alebo MDF materiály na báze polymérnych hybridných systémov (uhlíkaté polyméry, epoxidové živice, alebo polyfosforečnany prímiešané do cementu). MDF materiály zatiaľ trpia na neželaný vplyv vlhkosti. Príspevok je venovaný potenciálu anorganickej chémie a materiálovej chémie pre túto technologicky novú a uživateľsky perspektívnu oblasť.

Spracovania surovinovej zmesi pri syntéze MDF materiálov je sprevádzané mechano-chemickými interakciami – sieťovaním atómov z cementu s atómami z polyméru. Mechanické efekty v priebehu strižného miešania spôsobujú štiepe-

nie polymérnych reťazcov a vznikajúce radikály vstupujú do hydratačných reakcií cementových fáz. Princiipiálne sa jedná o mechanochemický mechanizmus; tak mechanické efekty ako aj chemické reakcie sú synergicky zodpovedné za vznik hutnej zosieťovanej viskoelastickej lokálnej štruktúry a mikroštruktúry v produkte a ovplyvňujú jeho technologicky relevantné vlastnosti. Preukázané interakcie funkčných skupín atómov so zrnami cementu a v jeho hydratačných produktoch poukazujú na význam nano-, resp. atomárnych rozhraní v MDF materiáloch. Siete Al(Fe)-O-C(P) stabilné termodynamicky, ale predovšetkým v podmienkach potenciálneho použitia, znižujú afinitu nedoreagovanej suroviny k nežiadúcim sekundárnym reakciám so vzdušnou vlhkosťou a síranmi.

Výsledky prezentované v tejto práci boli získané v rámci projektu VEGA 0055 a projektu vedecko-technickej spolupráce ÚACH SAV a PC Ladce, a. s.

1L-20

SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND CATALYTIC PROPERTIES OF NANOSTRUCTURED CERIAS DOPED COPPER

MAŁGORZATA M. ZAITZ, MARCIN MOLENDNA, MAREK DROZDEK, BARBARA DUDEK, LUCJAN CHMIELARZ, and ROMAN DZIEMBAJ

Department of Chemical Technology, Faculty of Chemistry, Jagiellonian University, ul. R. Ingardena 3, 30-060 Kraków, Poland
malgorzata@zaitz.eu

The polymer electrolyte fuel cell (PEMFC) can generate electricity without polluting the environment. In those systems hydrogen is used as a fuel. The anode in PEMFC is made of platinum and as a consequence is very sensitive to the poisoning by CO. Therefore, CO removal in a hydrogen rich fuel is a critical issue, even small amounts of CO must be removed (<10 ppm) before entering the fuel cell. Preferential oxidation was proposed for removing CO from hydrogen-rich gas streams. This reaction can be conducted at relative low temperature and atmospheric pressure which is a great advantage. Nevertheless, size and morphology of catalyst grains are essential and need to be controlled. Closely interacting copper oxide and ceria are one of the most interesting catalysts for CO preferential oxidation in a H₂-rich stream (CO-PROX) as well as in volatile organic compounds (VOC) total combustion. In the present work the synthesis procedure, physico-chemical characterisation and catalytic activity of Cu-doped ceria catalysts were investigated.

Precursors of nanostructured Ce_{1-x}Cu_xO₂ (0 ≤ x ≤ 0.2) catalysts were prepared in reverse microemulsion¹. The obtained precursors were calcined at 500 °C in air stream to produce ceria doped copper. Thermal decomposition of ceria precursors was controlled by thermal analysis methods (EGA-TGA/DTG/SDTA)². The structure of the obtained nanostructured powders was estimated from XRD measurements and average crystallites size was calculated from Debye-Scherrer formula. Surface morphology, specific surface area and pores distribution were evaluated on the basis of the BET method.

Catalytic properties of the copper doped cerias were examined with respect to their performance in CO-PROX process and in VOC total combustion^{2,3}.

REFERENCES

1. Martínez-Arias A., Hungría A. B., Fernández-García M., Conesa J. C., Munuerab G.: *J. Power Sources* 151, 32 (2005).
2. Avgouropoulos G., Papavasiliou J., Tabakova T., Idakiev V., Ioannides T.: *Chem. Engin. J.* 124, 41 (2006).
3. Martínez-Arias A., Gamarra D., Fernández-García M., Wang X. Q., Hanson J. C., Rodriguez J. A.: *J. Catalysis* 240, 1 (2006).

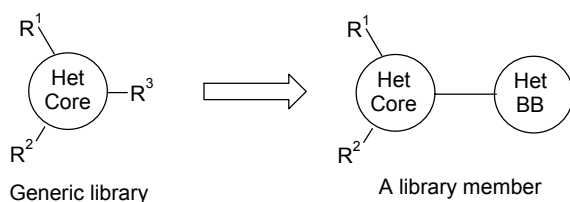
2L-01 SKELETAL DIVERSITY FOR SIZABLE COMBINATORIAL LIBRARIES OF DRUG-LIKE HETEROCYCLIC COMPOUNDS

VIKTOR KRCHNAK

*Department of Chemistry and Biochemistry, University of Notre Dame, Notre Dame, IN 46556
vkrchnak@nd.edu*

The exclusive role of heterocyclic compounds for drug discovery is best documented by the occurrence of a heterocyclic moiety in current drugs; the majority of drugs are heterocyclic compounds. Consequently, a substantial effort has been dedicated to the development of chemistries, both solid- and solution-phase, for combinatorial syntheses of heterocyclic libraries^{1–4}.

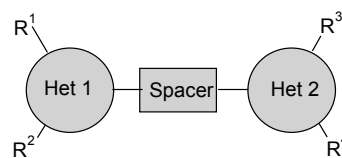
Traditionally, generic combinatorial libraries contained one heterocyclic scaffold and the library diversity was created through derivatization of the common heterocyclic core by diverse R groups, portrayed below for a three combinatorial step library (R¹, R² and R³ in the structure below). Albeit building blocks for a generic library were selected among the most diverse ones, the library diversity was limited by the presence of one identical core structure (Het Core). Not surprisingly, building blocks (BB) for introduction of R groups were also selected among heterocyclic compounds (Het BB) and compounds containing two heterocyclic moieties connected by a spacer were synthesized.



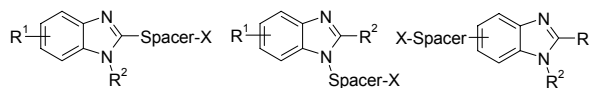
There is a strong evidence of drug-likeability of bis-heterocyclic compounds. Numerous hit and lead compounds are bis-heterocycles^{3,4}. Among notable drugs, the structure of Imatinib (Gleevec/Glivec™), a potent and selective inhibitor of BCR-ABL and c-kit oncogenic tyrosine kinases, contains three heterocyclic rings. The structure of Viagra can also be described as a bis-heterocycle.

We designed and synthesized combinatorial libraries of bis-heterocyclic compounds that deviate from the traditional approach. Libraries of bis-heterocyclic compounds are characterized by the presence of two heterocyclic cores connected by a spacer of variable length/structure. Both heterocyclic rings were assembled on resin in combinatorial fashion and provided structurally heterogeneous libraries with skeletal diversity. Due to skeletal diversity and up to five combinatorial steps (two for each heterocycle and one for the spacer) this strategy allows synthesis of sizable diverse libraries to match screening throughput of the state of the art screening facilities.

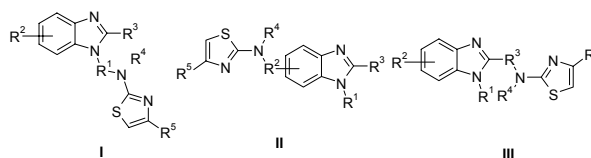
For the synthesis of initial bis-heterocyclic libraries we adapted our traceless synthesis of benzimidazoles with three



diversity positions⁵. Three combinatorial steps synthesis enabled to introduce the spacer for assembly of the second heterocyclic ring to three positions, creating three sub-libraries.



The spacer contained a functional group X that facilitated assembly of the second heterocycle. We have chosen amino group and built thiazole ring as the second heterocycle yielding three sub-libraries **I**, **II**, and **III**.



Logistics of library synthesis becomes a relevant issue, particularly for the synthesis of sizable libraries. We synthesized bis-heterocyclic combinatorial libraries using the directed split-and-pool approach, the most efficient method for the synthesis of combinatorial libraries on solid phase. Selection of formulation of solid phase compatible with this technology was driven by the library size and quantity of individual library members. We used SynPhase Lanterns (Mimotopes) for the synthesis of sizable libraries (>1,000 compounds, 1–2 mg each) and resin capsules for larger sample quantity of smaller libraries (~100 compounds, 10–20 mg each). A resin capsule, developed in the author's laboratory, is a permeable container for resin beads designed for multiple/combinatorial solid-phase organic synthesis.

This research was supported by the Department of Chemistry and Biochemistry, University of Notre Dame and the NIH (GM079576).

REFERENCES

1. Nefzi A., Ostresh J. M., Houghten R. A.: *Chem. Rev.* 97, 449 (1997).
2. Krchnak V., Holladay M. W.: *Chem. Rev.* 102, 61 (2002).
3. Blaney P., Grigg R., Sridharan V.: *Chem. Rev.* 102, 2607 (2002).
4. Horton D. A., Bourne G. T., Smythe M. L.: *Chem. Rev.* 103, 893 (2003).
5. Smith J., Krchnak V.: *Tetrahedron Lett.* 40, 7633 (1999).

2L-02 SOLID PHASE SYNTHESIS OF HIGHLY DIVERSE BISHETEROCYCLIC LIBRARIES

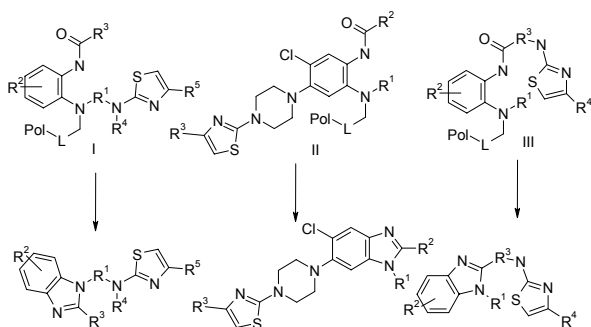
MIROSLAV SOURAL^a and VIKTOR KRCHŇÁK^b

^a Department of Organic Chemistry, University of Palacky,
Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc, Czech Republic,

^b Department of Chemistry and Biochemistry, University of
Notre Dame, Notre Dame, IN 46556
souralm@seznam.cz, vkrchnak@nd.edu

Benzimidazoles as well as thiazoles are well known heterocycles included in both natural and synthetic substances. However, bisheterocyclic derivatives including both benzimidazole and thiazole skeletons in one molecule have not been systematically studied. So far, only few papers dealing with mentioned bisheterocycles have been published and antiviral¹, fungicidal² and antitumor³ activity has been described.

We decided to take advantage of combinatorial chemistry and developed efficient solid phase synthesis of target bisheterocycles. Three types of *o*-phenyldiamines derivatives **I**, **II**, and **III** were synthesized, cleaved from the resin and the benzimidazole ring closure was performed in solution by heating under acidic conditions.



All the compounds prepared were subjected to NIH for high throughput screening which is in progress now.

This research was supported by the Department of Chemistry and Biochemistry, University of Notre Dame and the NIH (GM079576).

REFERENCES

1. Tiwari M. M., Saxena V. K., Bajpal S. K., Srivastava A. J., Joshi M. N.: *Indian Drugs* 327, 30, (1993).
2. Hayakawa I, Kanno Y, Azuma T, Furukawa H., Kurakata S.: *PCT Intl. Patent Appl. Publ. JP 313176* (2003).
3. Madkour H. M. F., Farag, A. A., Ramses S. Sh., Ibrahim N. A. A.: *Phosphorus Sulfur* 255, 181 (2006).

2L-03 POLOACETALY A JEJICH KOMPLEXY S IONTY KOVŮ V DYNAMICKÉ KOMBINATORIÁLNÍ CHEMII

DUŠAN DRAHOŇOVSKÝ a JEAN-MARIE LEHN

Laboratoire de Chimie Supramoléculaire, ISIS, Université
Louis Pasteur, 8 allée Gaspard Monge, 67083 Strasbourg,
France

d.drahonovsky@isis.u-strasb.fr

Systémy dynamické kombinatoriální chemie (DCC) jsou založeny na různých typech vratných rovnovážných reakcí a interakcí^{1,2}. Dle našich informací, tvorba poloacetalů nebyla dosud testována, jako vhodná reakce pro DCC. V současné době je popsáno v tomto směru pouze několik experimentů s acetal^{3,4}. Krom toho, že chemie poloacetalů nebyla dosud využita pro cílenou generaci dynamických systémů, chybí zde i celkově souhrnné informace k chemii poloacetalů s výjimkou chemie sacharidů. Proto jsme se rozhodli prostudovat vybrané aldehydy pyridinového typu a zjistit možnosti a podmínky pro generaci a stabilizaci jejich poloacetalů. Experimenty byly prováděny za laboratorní teploty v organických rozpouštědlech, jako jsou chloroform a acetonitril a monitorovány prostřednictvím NMR spektroskopie. Nejprve byly testovány jednoduché monofunkční alkoholy, jako *n*-butanol, methoxyethanol, fenol, 2-pyridylmethanol, 2-propanol a *t*-butanol. Relativně nepříznivý poměr poloacetalů k výchozím aldehydům bylo možno efektivně zvýšit a kontrolovat přidávkou iontů kovů (např. Zn²⁺, Pb²⁺). Tato aktivace pak poskytuje poloacetal⁵, jako komplexy příslušných kovů. Jejich strukturu se nám dosud nepodařilo potvrdit rentgenovou difrakcí, ale zde i NMR experimenty poskytují mnoho informací o jejich pravděpodobné struktuře. Experimenty se směsí alkoholů pak potvrdili vynikající dynamický charakter systémů, kdy jsou nové rovnováhy ustaveny v řádu maximálně několika minut. Jako velice slibné se ukázaly Zn(II) komplexy poloacetalů terpenických alkoholů, které by mohly být využity coby systémy kontrolovaného uvolňování těkavých vonných látek. Kromě monofunkčních alkoholů byly testovány rovněž vybrané dioly, které podle podmínek mohou tvořit buďto poly/oligomerní částice nebo makrocykly

Tato práce vznikla za podpory EU Network MRTN-CT-2005-019561 DYNAMIC.

LITERATURA

1. Lehn J. M.: *Chem. Eur. J.* 5, 2455 (1999).
2. Corbett P. T., Leclair J., Vial L., West K. R., Wietor J.-L., Sanders J. K. M., Otto S.: *J. Chem.* 106, 3652 (2006).
3. Cacciapaglia R., Di Stefano S., Mandolini L.: *J. Am. Chem. Soc.* 127, 13666 (2005).
4. Berkovich-Berger D., Lemcoff N. G., *Chem. Commun.* 2008, 1686.

2L-04
SOPHISTIC APPROACH AS A METHOD
OF THE CHEMISTRY FOR THE SUSTAINABLE
DEVELOPMENT – TWO DIFFERENT PURE
PRODUCTS FROM THE VERY SAME SET
OF REAGENTS

PAVEL PAZDERA, JAN ŠIMBERA, and JINDŘICH
BĚLUŠA

*Centre for Syntheses at Sustainable Conditions and Their Management, Chemistry Department, Masaryk University, Kotlářská 2, 611 37 Brno
 pazdera@chemi.muni.cz*

Contemporary technological development bears benefits for the development of increasing population and at the same time poses threats to the mankind and Earth if it will not be combined with already formulated coincident strategy of sustainable development on global scale which has no alternative. Entering the Third Millennium, scientists and engineers are given crucial role in its implementation which should be reflected in their approaches to solutions of problems.

These approaches are defined for synthetic chemists and production engineers as the principles of so-called “Green Chemistry” and “Cleaner Production”, respectively, collectively as the Chemistry for Sustainable Development. These principles may be characterized generally as environmentally friendly and discrete to resources of raw materials and energy, i. e. an application of alternative synthetic pathways and reaction conditions, formations and application of minimal toxic and hazardous intermediates and products, and maximum utilization of raw materials and energy inputs.

Catalysis (e. g. by transition metal complexes, micellar, PTC, solid support), sonochemistry, microwave assisted syntheses, non-classical solvent application, and also sophistic approach to reaction planning and process design are the often used methods of “Green Chemistry” and “Cleaner Production”.

This contribution will demonstrate a sophistic approach to preparation of two different pure products from the very same set of reagents on two examples reactions. First is reaction of cyanide anion with 2,4-dichloro-benzyl chloride (according to reaction conditions 2,4-dichlorobenzyl cyanide and/or 2,3-bis(2,4-dichloro-phenyl)propanenitrile are formed). The second example demonstrates the reaction of cyanide anion with benzoyl chloride (according to reaction conditions benzoyl cyanide and/or dicyano(phenyl)methyl benzoate are formed). All synthesized products were prepared under different reaction conditions in very high yields (more than 90 %) and purities.

The presented work was supported by Ministry of Industry and Trade Czech Republic (No. 2A-ITP1/090).

2L-05
POVRCHOVÉ VLASTNOSTI POLYETYLÉNOVÝCH
PÓROVITÝCH FILMOV

IGOR NOVÁK^a, GALINA ELYASHEVICH^b, IVAN
CHODÁK^a, MARIAN ŠTEVIAR^a, MILENA
ŠPÍRKOVÁ^b a ANGELA KLEINOVÁ^a

*^a Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovensko, ^b Inst Macromol Compounds, RAV, 199004 St. Petersburg, Rusko, ^c Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 16206 Praha, Česká republika
 upolnovi@savba.sk*

Polyetylénové (PE) pórovité filmy boli modifikované dielektrickým povrchovým bariérovým výbojom pri atmosférickom tlaku v kyslíku, dusíku a vzduchu alebo rádiovýbojným výbojom pri zníženom tlaku 46 Pa vo vzduchu. Povrchová energia modifikovaných filmov PE bola určená meraním uhlov zmáčania s použitím SEE systému so sadou testovacích kvapalín s rôznou polaritou. Pevnosť adhézných spojov v odlupovaní v systéme modifikovaný PE film-polyakrylát bola zisťovaná na dynamometri Instron s uhlom odlupovania 90°. Bol pozorovaný výrazný rast povrchovej energie a jej polárnej zložky po modifikácii PE pórovitých filmov bariérovou a rádiovýbojnou plazmou. Vyššie hodnoty pevnosti adhézných spojov povrchovej energie boli dosiahnuté po modifikácii PE filmov bariérovou plazmou v porovnaní s rádiovýbojnou plazmou. AFM merania povrchovej topografie PE pórovitých filmov modifikovaných bariérovým výbojom ukázali pokles pórovitosti filmov po modifikácii plazmou bariérového výboja, pričom výraznejší pokles pórovitosti bol pozorovaný v prípade použitia kyslíkovej plazmy v porovnaní s dusíkovou plazmou. Zmeny v pórovitosti PE filmov boli spôsobené ablačným pôsobením bariérovej plazmy na polymér v priebehu modifikácie.

Práca bola podporená Slovenskou vedeckou agentúrou VEGA, projekt č. 2/7103/27, Grantovou agentúrou AV ČR, projekt č. A 400 500 505) a Ruskou agentúrou pre podporu základného výskumu, projekt č. 07-03-00177.

LITERATÚRA

1. Novák I., Pollák V., Chodák I.: Plasma Proces. Polym. 3, 355 (2006).
2. Štefečka M., Ráhel J., Černák M., Hudec I., Mikula M., Mazúr M.: J. Mater. Sci. Lett. 18, 1999 (2007).
3. Elyashevich G. K., Karpov E. A., Rozova E. Yu.: Polym. Sci. 40A, 567 (1998).
4. Foldes E., Toth A., Kalman E., Fekete E., Tomasovszky-Bobak A.: J. Appl. Polym. Sci. 76, 1529 (2000).

2L-06

SYNTEZA DERIVÁTŮ 3,5-DIAMINOPYRAZOLŮ S POTENCIÁLNÍ BIOLOGICKOU AKTIVITOU NA CDK9

PETR CANKAŘ^a a VLADIMÍR KRYŠTOF^b

^a Katedra organické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc, ^b Laboratoř růstových regulátorů, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci & Ústav experimentální botaniky AV ČR, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc cankar@orgchem.upol.cz

V posledních letech bylo zjištěno^{1,2}, že 3,5-diamino-4-arylazopyrazoly vykazují biologickou aktivitu na cyklin-dependentní kinasy s vysokou selektivitou k CDK9. U dosud nejúčinnějšího derivátu CAN508 byly provedena měření potvrzující kompetitivní inhibici a pomocí rentgeno-strukturální analýzy bylo nalezeno konformační uspořádání inhibitoru ve vazebném místě.

Na základě zjištěné biochemické aktivity byl derivát CAN508 vybrán jako výchozí látka pro další obměňování struktury s ohledem na zvyšování inhibičního účinku a selektivity na CDK9. Z tohoto důvodu byly u sloučeniny CAN508 provedeny předběžné modelové studie acylačních reakcí, které ukázaly, že se acylová skupina neváže na jednu z amino skupin v poloze 3 nebo 5, nýbrž na dusíkový atom pyrazolového skeletu. Aby bylo možné připravit acyl deriváty substituované na jedné z těchto amino skupin, bylo nutné použití chránicí skupiny, která zamezí substituci na pyrazolovém dusíku.

Dalším směrem, který je intenzivně studován, je záměna azo skupiny spojující benzenový a pyrazolový cyklus. Jednou z mnoha možností je např. reakce aminomalondinitrilu s acylhalogenidy za vzniku prekurzorů derivátů pyrazolu, kdy azo skupina je zaměněna amidickou skupinou. Jinou možností je příprava derivátů, kde linker tvoří pouze methylenová skupina. Zde se vychází z kondenzační reakce patričných derivátů aromatických aldehydů a malondinitrilu, následnou redukcí dvojně vazby vzniklé kondenzací a finální cyklizací pomocí hydrazinu se připraví odpovídající deriváty s methylenovou skupinou.

Za účelem přípravy většího množství derivátů je také studována možnost paralelní syntézy na pevné fázi pomocí kombinatoriální chemie.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru MŠMT ČR MSM6198959216.

LITERATURA

- Kryštof V., Cankář P., Fryšová I., Slouka J., Kontopidis G., Džubák P., Hajdúch M., Srovnal J., de Azevedo W. F. Jr., Orság M., Paprskářová M., Rolčík J., Látr A., Fischer P. M., Strnad M.: *J. Med. Chem.* 49, 6500 (2006).
- Cankář P., Fryšová I., Kryštof V., Lenobel R., Slouka J., Strnad M., Fisher P. M.: *PCT Intl. Patent Appl. Publ.* 2006024858 A1, 1 October 2004.

2L-07

ZLÚČENINY OBSAHUJÚCE 2-OXAZOLINOVÚ A NENASÝTENÚ SKUPINU V MOLEKULE

JOZEF LUSTOŇ a JURAJ KRONEK

Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, SR upollust@savba.sk

Náš doterajší záujem bol orientovaný na funkčné deriváty 2-oxazolinu a ich polymerizáciu adičnými reakciami, ich využitím na modifikáciu polymérov reakciami s funkčnými skupinami na hlavnom reťazci, ale aj reakciami s koncovými skupinami. V prípade, keď sa zakomponuje do molekuly aj dvojitá väzba, získavame ďalšiu dimenziu do štruktúry makromolekuly, ktorá sa dá využiť na radikálové alebo fotochemické reakcie. Dvojitá väzba v molekule monoméru môže byť vo vonkajšej sfére, alebo môže byť vo vnútornej sfére. Okrem toho, dvojitú väzbu možno inštalovať do molekuly vo východných surovinách, alebo ju generovať priamo v procese syntézy.

Príkladom syntézy monoméru s dvojitou väzbou vo vonkajšej sfére sú napríklad alylétery 2-oxazolinu, ktoré boli pripravené z alkoholov v podmienkach PTC katalýzy¹, alebo kondenzačné produkty paraformaldehydu s 2-alkyl-2-oxazolinmi za vzniku 2-[1,1-bis(hydroxymetyl)alkyl]-2-oxazolinu, ktoré možno termicky dehydratovať na nenasýtené 2-oxazolíny^{2,3}.

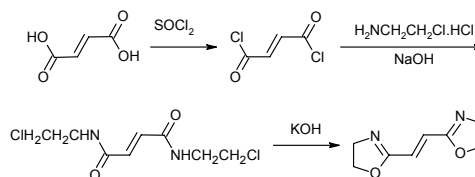


Schéma 1. Príprava derivátov kyseliny fumarovej

Príkladom syntézy s využitím vopred zabudovanej dvojitej väzby je príprava bis-(2-oxazolinu) z kyseliny fumarovej (Schéma 1) a generovanie dvojitej väzby v priebehu reakcie je demonštrované na kyslo katalyzovanej reakcii 2-(4-amino-fenyl)-2-oxazolinu s aldehydmi alebo dialdehydmi (Schéma 2).

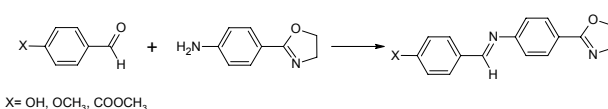


Schéma 2. Príprava azometínov s 2-oxazolinovou skupinou

Autori ďakujú za finančnú podporu Agentúry na podporu vývoja a výskumu (projekt č. APVV-003206) a grantovej agentúre VEGA (č. projektu 2/6117/28).

LITERATÚRA

1. Lustoň J., Boehme F., Komber H.: Des. Monomers Polym. 2, 325 (1999).
2. Wehrmeister H. L.: US3466309 (1969).

2L-08

DERIVÁTY KINETINU A KINETINRIBOZIDU – MONOKRYSTALOVÁ STRUKTURNÍ A MULTINUKLEÁRNÍ NMR STUDIE

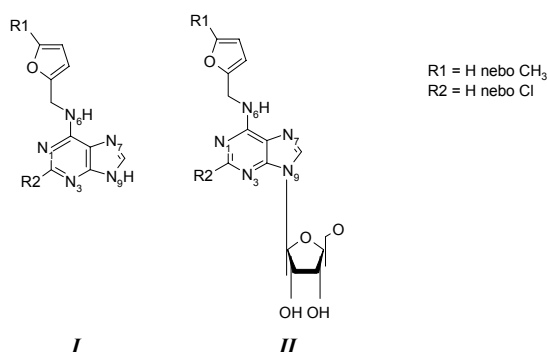
RADKA NOVOTNÁ^a, IGOR POPA^b a ZDENĚK TRÁVNÍČEK^a

^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

radka.novotna@upol.cz

Naše studie se zabývala syntézou a fyzikálně-chemickou charakterizací derivátů kinetinu (6-furfuryladeninu) a kinetinribozidu (6-furfuryladosinu) (viz obr. 1). Multinukleární NMR spektroskopie odhalila existenci dynamické tautomerie rovnováhy v roztoku dimethyl sulfoxidu pro zmíněné sloučeniny. Bylo zjištěno, že zatímco u samotného kinetinu (**I**, R1 = H nebo CH₃, R2 = H) jsou preferovány 9H-amino a 7H-amino tautomerie formy v poměru 10:1, u derivátu kinetinu s R2 = Cl jsou navíc přítomny tautomerie formy N6-H-amino a N1-H-imino. Výše zmíněné izomery jsou pak v poměru 10:1:5:2. V případě derivátů kinetinribozidu (**II**, R1 = H nebo CH₃, R2 = Cl) jsou pak jednotlivé tautomerie formy v poměru 8:2. Tato rozdílnost je pravděpodobně způsobena přítomností atomu chloru v poloze C2 na purinovém skeletu, který svou elektronegativitou přispívá k redistribuci elektronové hustoty na purinovém skeletu. Byla stanovena molekulová a krystalová struktura N6-(5-methylfurfuryl)adeninu a 2-chlor-N6-(5-methylfurfuryl)adenosinu, jejichž strukturní parametry budou diskutovány v rámci prezentace.



Obr. 1. Studované deriváty kinetinu (**I**) a kinetinribozidu (**II**)

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM6198959218.

2L-09

VYUŽITÍ α -HALOGENKETONŮ PRO SYNTÉZU HETEROCYKLICKÝCH SLOUČENIN

PAVEL HRADIL

Katedra organické chemie, Universita Palackého, Třída Svobody 8, 771 46 Olomouc
hradil@orgchem.upol.cz

Halogenketony jsou velice reaktivní látky všestranně využitelné v organické syntéze. Jejich syntéza i reakce jsou intenzivně studovány a byly zpracovány i v různých starších i novějších přehledech^{1,2}. Během přednášky budou diskutovány metody jejich přípravy jak klasickou přímou bromací bromem, selektivními bromačními činidly, tak budou probrány i další možnosti jejich přípravy. V další části přednášky bude diskutováno jejich použití v syntéze heterocyklických sloučenin.

Vedle zmiňovaného použití α -halogenderivátů jsou k této syntéze využívány rovněž jejich deriváty. Velmi často používané jsou např. azidoderiváty, diazo sloučeniny a deriváty α -amino a α -hydroxyketonů. V průběhu přednášky budou vybrány zajímavé reakce z literatury, ale hlavní pozornost bude věnována především derivátům α -amino a α -hydroxyketonů, které se využívají na katedře organické chemie UP Olomouc jako výchozí sloučeniny pro syntézu různých heterocyklických sloučenin, především derivát chinolonů (Schéma 1)³.

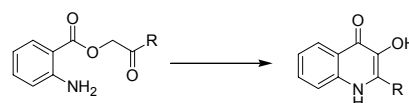


Schéma 1

Tyto sloučeniny vykazují celou řadu biologických aktivit, především aktivitu cytostatickou, antivirovou a antiprotozoální

V případě, že podmínky cyklizace byly modifikovány a reakce probíhala v kyselně octové za přítomnosti octanu amonného, docházelo v závislosti na substituci aminoskupiny v části anthrailové kyseliny ke vzniku celé řady různých heterocyklických látek (Schéma 2)^{4,5}.

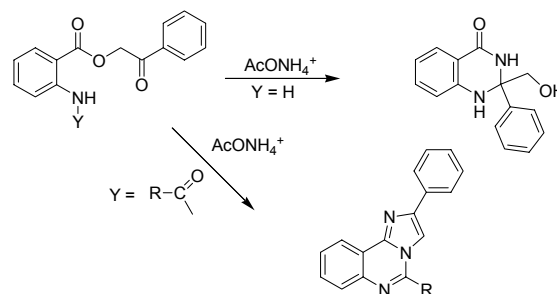


Schéma 2

Obdobně jako v případě cyklizace fenacylsterů kyseliny anthranilové i v případě fenacylanthranilamidu kyseliny anthranilové byl pozorován vznik 3-aminochinolonu. V tomto případě se ale podařilo získat širší spektrum sloučenin, včetně diazepinonu (Schéma 3)⁶.

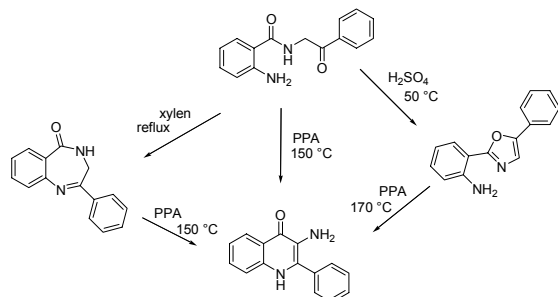
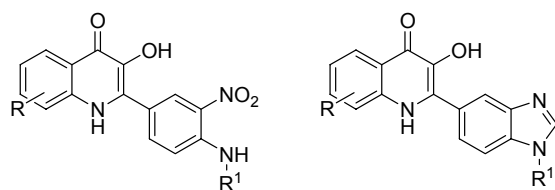


Schéma 3

Většina 3-hydroxychinolonů vykazuje nějakou biologickou aktivitu. Jedněmi z posledních publikovaných výsledkem biologického testování těchto látek jsou sloučeniny na obr. 1. Tyto látky vykazují vedle zmiňovaných biologických účinků i aktivitu protizánětlivou⁷.



Obr. 1.

V průběhu přednášky budou rovněž zmíněny syntézy další heterocyklické sloučeniny připravené na katedře zmiňovanými metodami.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM6198959216.

LITERATURA

- Hradil P., Hlaváč J.: *Modern Approaches to the Synthesis of O- and N-Heterocycles, Synthesis of nitrogen and oxygen-containing heteroaromatic compounds from a-substituted ketones*, Vol 2, s. 173, Research Signpost, Kerala 2007.
- Erian A. W., Sherif S. M., Gaber H. M.: *Molecules* 8, 793 (2003).
- Hradil P., Jirman J.: *Collect.Czech. Chem. Commun.* 60, 1357 (1995).
- Hradil P., Grepl M., Hlaváč J., Lyčka A.: *Heterocycles* 71, 269 (2007).
- Hradil P., Kvapil L., Hlaváč J., Weidlich T., Lyčka A.: *J. Heterocycl. Chem.* 37, 831 (2000).
- Hradil P., Grepl M., Hlavac J., Soural M., Malon M., Bertolasi V.: *J. Org. Chem.* 71, 819 (2006).

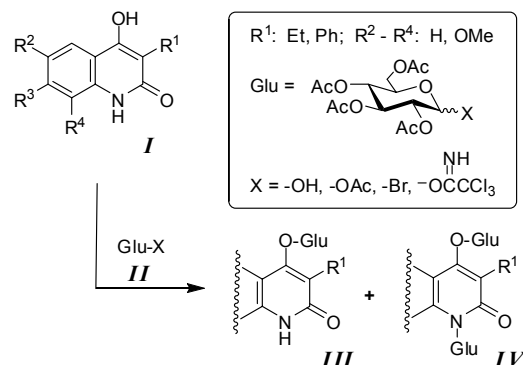
7. Krejčí P., Hradil P., Hlaváč J., Hajduch M.: PCT Int. Appl. WO2008028427.

2L-10 TOWARD SOME SACCHARIDE FUNCTIONALIZED QUINOLIN-2(1H)-ONES

ROMAN KIMMEL^a, JANEZ KOŠMRLJ^b,
and STANISLAV KAFKA^{a,*}

^a Faculty of Technology, Tomas Bata University in Zlin, 762 72 Zlin, Czech Republic, ^b Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, 1000 Ljubljana, Slovenia
kimmel@ft.utb.cz, kafka@ft.utb.cz

Despite the fact that saccharide functionalized quinoline derivatives gain considerable interest as they have been found in the nature and possesses interesting bioactivities including HIV-1 reverse transcriptase inhibition¹ and antimalarial activity², the syntheses of these compounds have not yet been fully explored. To our knowledge, no glycosylation of *N*-unsubstituted 4-hydroxyquinolin-2-(1*H*)-ones has so far been reported, for example.



Herein, we report our study of glycosylation of 3-substituted-4-hydroxyquinoline-2(1*H*)-diones (**I**) with different glucosyl donors (**II**). Depending on the reaction conditions and glucosyl donor, monoglucoside **III**, diglucoside **IV**, or a mixture of both (**III** and **IV**) could be obtained. Structural integrity and the configuration at the anomeric carbon atom have been determined by 1D and 2D NMR spectroscopy.

This study was supported by the Czech Science Foundation (Grant No. 203/07/0320), by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Project MSM7088352101 and Joint Project Nr 9-06-3 of Programme KONTAKT), and the Slovenian Research Agency (Projects P1-0230-0103 and Joint Project BI-CZ/07-08-018).

REFERENCES

- Matta A. D., Santos C. V. B., Pereira H. S., Frugulhetti I. C. P., Oliveira M. R. P., Souza M. C. B. V., Moussatché N., Ferreira V. F.: *Heteroatom. Chem.* 10, 197 (1999).
- Suzuki H., Nagasawa H., Igarashi I., Igarashi M., Tanaka I., Suzuki N.: *Jpn. Kokai. Tokkyo Koho JP 2006056872*, 02 March 2006; *Chem. Abstr.* 144, 205733 (2006).

2L-11 SYNTEZA IMOBILIZOVANÝCH FOSFOROVÝCH LIGANDŮ

RICHARD ŠEVČÍK a PAVEL PAZDERA

*Centrum pro syntézy za udržitelných podmínek a jejich management, Ústav chemie, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno
sevcik@chemi.muni.cz, pazdera@chemi.muni.cz*

Fosfinové a fosfitové ligandy byly hojně využity jako prekurzory pro syntézu četných komplexních sloučenin^{1,2}, které našly významné využití jako katalyzátory nejrůznějších syntéz a průmyslových výrob. Bylo zjištěno, že fosfitové komplexy obsahující nikl v oxidačním stavu 0 vykazují katalytickou aktivitu při adičních reakcích, z nichž jednou z nejvýznamnějších je adice kyanovodíku na násobnou vazbu. Katalyzátorem takových reakcí jsou nejčastěji tetrakisfosfitové komplexy niklu obecného vzorce $Ni[P(OR)_3]_4$ ². Vlastnosti a katalytická aktivita komplexů je silně závislá na povaze substituentů na aryloxyfosforovém ligandu. Hydrokyanační reakce se využívají pro výrobu průmyslově významných sloučenin obsahujících nitrilovou skupinu, které jsou důležitými průmyslovými prekurzory. Mechanismus Ni^0 katalyzovaných hydrokyanačních reakcí byl v minulosti podrobně studován. Bylo prokázáno, že během reakce tetrakisfosfitové Ni^0 -komplexy podléhají disociaci, přičemž dochází k postupnému odštěpení až dvou fosfitových ligandů, na jejichž místo se pak váže adovaný kyanovodík a nenasycený uhlíkatý substrát (např. alken, alkadien, alkyn)^{3,4}. Z tohoto důvodu je nutné do reakční směsi dodávat určité množství volného ligandu, aby byla zachována stechiometrie nutná pro obnovu komplexu. Tímto dochází k postupné degradaci katalyzátoru, který se navíc musí po ukončení reakce z roztoku komplikovaně odstraňovat. Uvedené nevýhody by bylo možné odstranit použitím imobilizovaných Ni^0 -komplexů. Základním předpokladem pro přípravu takového katalyzátoru je imobilizace vybraných fosfitových ligandů na modifikovaném polymerním nosiči. Takto připravené Ni^0 -komplexy by následně mohly být s výhodou využity jako heterogenní katalyzátory nové generace pro kontinuální hydrokyanační reakce i v průmyslových maloprovozech.

V příspěvku bude ukázána možnost imobilizace fosfitových ligandů roubováním na vybrané kopolymerní nosiče.

Tato práce vznikla za podpory grantu Ministerstva průmyslu a obchodu ČR 2A-1TP1/090.

LITERATURA

1. Iyoda M., Tanaka S., Otani H., Nose M., Oda M.: *J. Am. Chem. Soc.* 110, 8494 (1988).
2. Vahrenkamp H., Dahl L. F.: *Angew. Chem. Int. Edn.* 8, 144 (1969).
3. Seidel W. C., Tolman C. A.: *Ann. N.Y. Acad. Sci.* 415, 201 (1983).
4. Tolman C. A., Seidel W. C., Druliner J. D., Domaille P. J.: *Organometallics* 3, 33 (1984).

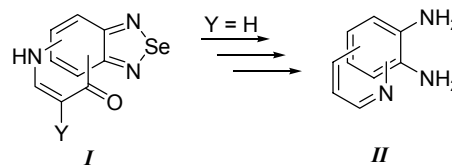
2L-12 PŘÍPRAVA A VYUŽITÍ ANGULÁRNE ANELOVANÝCH SELENADIAZOLOCHINOLÓNŮV

MAROŠ BELLA a VIKTOR MILATA

*Fakulta chemické a potravinářské technologie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika
maros.bella@centrum.sk, viktor.milata@stuba.sk*

V současné době se venuje značná pozornost selénovým heterocyklom, protože mnohé z nich vykazují zajímavou biologickou aktivitu¹ a optoelektronické vlastnosti². Selenaheterocykly, hlavně 2,1,3-benzoselenadiazoly, našli svoje využití aj v syntéze dusíkatých heterocyklů jako benzimidazoly, benzotriazoly, chinoxaliny a pod³.

Naším cílem bylo připravit angulárne anelované selenadiazolochinolóny **I**, a tak sa pokúš' skombinovať biologické účinky chinolónov s potenciálne biologicky účinným 1,2,5-selenadiazolovým jadrom. Kľúčové intermediáty v syntéze cieľových molekúl predstavujú amino-2,1,3-benzoselenadiazoly, ktoré boli zosyntetizované z dobre dostupných zlúčenín. Nukleofilná vinylová substitúcia alkoxyetylénových derivátov aminobenzoselenadiazolmi poskytla prekurzory selenadiazolochinolónov. Následná termická cyklizácia získaných prekurzorov v podmienkach Gouldovej-Jacobsovej reakcie viedla k cieľovým selena-diazolochinolónom. Nesubstituované selenadiazolochinolóny predstavujú východiskové zlúčeniny v syntéze *o*-diaminochinolínov **II**, dôležitých prekurzorov dusíkatých heterocyklů.



Y = H, CN, COCH₃, COOH, COOMe, COOEt

Táto práca bola finančne podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja č.g. APVV-0055-07 a Grantovou agentúrou VEGA č. g. 01/0225/08.

LITERATÚRA

1. Młochowski J., Kloc K., Lisiak R., Potaczek P., Wójtcwicz H.: *Arkivoc (iv)*, 14 (2007).
2. Velusamy M., Thomas K. R. J., Lin T. J., Hsu Y.-Ch.: *Org. Lett.* 7, 1899 (2005).
3. Grivas S.: *Current Org. Chem.* 4, 707 (2000).

2L-13 ORGANOKATYZÁTORY A IÓNOVÉ KVAPALINY – ÁNO, ČI NIE?

ŠTEFAN TOMA

Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská
dolina CH-2, 842 15 Bratislava, Slovensko
toma@fns.uniba.sk

V prednáške bude podaná stručná charakterizácia iónových kvapalín a naznačené ich využitie v organickej syntéze. Taktiež bude vysvetlené čo sú to organokatalyzátory a kde môžu nájsť použitie.

Na prácach z vlastného pracoviska bude dokumentované, či je výhodné použiť iónové kvapaliny aj pre organokatalyzované reakcie, alebo nie. Stručne sa uvedú aj príklady neobvyklého chovania sa iónových kvapalín a pokusom o vysvetlenie.

Tato práca vznikla v rámci grantu VEGA (grant No. 1/3569/06).

LITERATÚRA

- Kotrusz P., Kmentová I., Gotov B., Toma Š., Solčaniová E.: Chem. Commun. 2002, 2510.
- Kotrusz P., Toma Š., Schmalz H. G., Adler A.: Eur. J. Org. Chem. 2004, 1577.
- Kotrusz P., Alemayehu S., Toma Š., Schmalz H. G., Adler A.: Eur. J. Org. Chem. 2005, 4909.
- Mečiarová M., Toma Š., Kotrusz P.: Org. Biomol. Chem., 4, 1420 (2006).
- Mečiarová M., Toma Š.: Chem. Eur. J. 13, 1268 (2007).
- Mečiarová M., Toma Š., Berkessel A., Koch B.: Lett. Org. Chem. 3, 437 (2006).
- Mečiarová M., Hubinská K., Toma Š., Berkessel A., Koch B.: Monatsh. Chem. 138, 1198 (2007).

2L-14

SYNTHESIS OF 2'-DEOXY-URIDINE ANALOGUES BY THE ALKYNE-AZIDE „CLICK“ REACTION AND THEIR INFLUENCE ON THE DUPLEX STABILITY

LUCIE SPÁČILOVÁ^a and POUL NIELSEN^b

^a Department of Organic chemistry, Faculty of Sciences, Palacky University, Tr. Svobody 8, 772 00 Olomouc,

^b Department of Chemistry, University of Southern Denmark, Campusvej 55, DK-5230 Odense
spacilova@orgchem.upol.cz

The modified 2'-deoxy-uridine analogues with substituted *m* (or *p*) – phenyltriazole moiety in position 5 were successfully synthesized through the application of click chemistry. For these, phosphoramidites (Fig. 1) were synthesized and employed in solid-phase oligonucleotide synthesis. The T_m values demonstrated that single modifications lead to decreased duplex stability, while the stacking of four consecutive modifications leads to enhanced duplex stability, especially for DNA:RNA-duplex. These results as well as molecu-

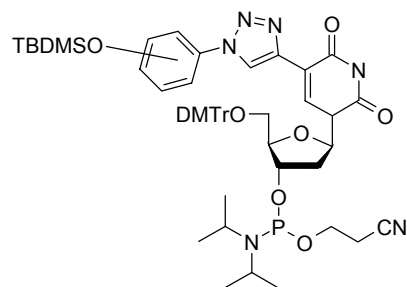


Fig. 1. Structure of phosphoramidites

lar modelling showed us resemblances to the unsubstituted phenyl derivative, which was reported earlier¹.

This work was supported by the Sixth Framework Program Marie Curie Host Fellowships for Early Stage Research Training under contract number MEST-CT-2004-504018 and by the Nucleic Acid Centre, which is funded by The Danish National Research Foundation for studies on nucleic acid chemical biology

REFERENCE

- Kočalka P., Andersen N. K., Jensen F., Nielsen P.: Chem. Bio. Chem. 8, 2106 (2007).

2L-15

NOVÉ POLYFUNKČNÉ INICIÁTORY NA PRÍPRAVU POLY(2-OXAZOLÍNŮV) S VETVENOU ŠTRUKTÚROU

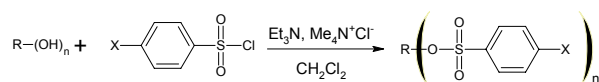
JURAJ KRONEK^a, JOZEF LUSTOŇ^a, AGNIESZKA
KOWALCZUK^b a ANDRZEJ DWORAK^b

^a Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovensko, ^b Centre of Polymer and Carbon Materials, Polish Academy of Sciences, M. Curie-Skłodowskiej 34, 41-819 Zabrze, Poland
upolkron@savba.sk

V súčasnosti je v centre záujmu príprava materiálov šitých na mieru. Jedným z parametrov ovplyvňujúcich vlastnosti polymérov je aj topológia molekúl. Polyméry s vetvenou štruktúrou predstavujú skupinu makromolekulových látok s osobitnými roztokovými vlastnosťami ako aj obsahom väčšieho množstva reaktívnych skupín na periférii makromolekuly¹. Uvedené vlastnosti môžu byť využité v rôznych aplikáciách, napríklad v nanotechnológiách, cieľnom transporte a uvoľňovaní liečiv a pod. Príkladom polymérov s vetvenou štruktúrou sú dendriméry, hypervetvené polyméry, hviezdicové a rebříčkové polyméry a pod.

Jednou z metód využívajúcich sa pri príprave polymérov s vetvenou štruktúrou je „grafting from“ využívajúca multifunkčný iniciátor, na ktorom sa následne polymerizujú ramená požadovaného polyméru². V našej práci boli uvedeným spôsobom pripravené hviezdicové polyméry s poly(2-etyl-2-oxazolínovými) ramenami. Ako multifunkčné iniciátory sa

zvolili arénsulfonáty polyfunkčných alkoholov, ako aj arénsulfonáty hypervetveného polyglycerolu. Iniciátory sa pripravili esterifikáciou polyalkoholov *p*-toluénsulfonylchloridom a *p*-nitrobenzénsulfonylchloridom v pyridíne alebo modifikovaným postupom v prítomnosti trietylamínu a tetrametylamínu-hydrochloridu.



X=CH₃, NO₂, n=3, 4, 6, 13

Schéma 1. Príprava multifunkčných iniciátorov

Prípravené iniciátory boli charakterizované NMR, UV a IČ spektroskopiou. Účinnosť naviazania iniciačnej skupiny sa určila z NMR spektier ako aj z GPC. Prípravené iniciátory sa použili na prípravu hviezdicových polymérov kationovou polymerizáciou 2-etyl-2-oxazolinu.

Práca vznikla v rámci projektu bilaterárnej spolupráce ústavov SAV a PAV. Autori tiež ďakujú za finančnú podporu Agentúry na podporu vývoja a výskumu (projekt č. APVV-003206).

LITERATÚRA

1. a) Nishiyama N., Kataoka K.: *Pharm. Therapeutic* 112, 630 (2006), b) Riess G.: *Prog. Polym. Sci.* 28, 1107 (2003).
2. Ishizu K., Kojima T., Ohta Y., Shibuya T.: *J. Colloid Interface Sci.* 272, 76 (2004).

2L-16

MONTMORILLONIT V KOMPOZITOCH NA BÁZE POLYKAPROLAKTÓNU

IVICA JANIGOVÁ^a, DANIELA MOŠKOVÁ^a,
KATARÍNA CSOMOROVÁ^a a FRANTIŠEK
LEDNICKÝ^b

^a Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovenská republika, ^b Ústav makromolekulárnej chemie AV ČR, Heyrovského nám. 2, 160 06 Praha, Česká republika
upoljani@savba.sk

Rastúci záujem verejnosti o životné prostredie viedol v posledných rokoch k štúdiu a príprave biodegradovateľných polymérnych materiálov. Jeden z biodegradovateľných polymérov, ktorý našiel využitie v biomedicíne a v obalovom priemysle je syntetický, semikryštalický, termoplastický polyester polykaprolaktón (PCL). Množstvo článkov v literatúre je venovaných zlepšeniu fyzikálnych a chemických vlastností PCL pomocou plnív. Veľkú skupinu tvoria anorganické plnivé, predovšetkým montmorillonity (MMT) ako plnivé s vrstevnatou štruktúrou. Vhodnou modifikáciou vrstevnatého MMT alebo matrice dochádza k interkalácii a/alebo exfoliácii vrstiev plniva za vzniku kompozitov a/alebo nanokompozitov so zlepšenými vlastnosťami (mechanické, termické

a bariérové) už pri malom množstve plniva (do 5 hm.%).

Predložená práca sa zaoberá štúdiom morfológie, mechanických a termických vlastností kompozitov PCL/MMT s možnosťou prípravy nanokompozitov konvenčným miešaním v tavenine. Porovnávali sa tri typy plniva – Nanofil 15, Cloisit 15 ako organicky modifikované MMT s rôznymi amóniovými kationmi a J10 ako nemodifikovaný MMT. Morfológia pripravených vzoriek sa sledovala metódami elektrónovej mikroskopie (SEM, TEM) a röntgenovou difrakciou, vlastnosti sa charakterizovali termogravimetriou a mechanickými testami.

Mikrografy SEM a TEM pripravených materiálov ukázali prítomnosť interkalovaných a exfoliovaných štruktúr pre vzorky s čiastočne interkalovanými plnivami bez prítomnosti pôvodných častíc (PCL/Nanofil 15 a PCL/Cloisit 15) v celom objeme. Výsledky získané z röntgenovej difrakcie sú v súlade s predchádzajúcimi pozorovaniami – posun hlavného difrakčného píku smerom k nižším hodnotám 2θ° pre vzorky s organicky modifikovaným plnivom, čo potvrdzuje zväčšenie medzivrstvového priestoru.

Prítomnosť modifikovaných plnív v matrici spôsobila zlepšenie termooxidačnej stability vzoriek (viac ako 90 °C), čo je pravdepodobne spôsobené zhoršenou difúziou kyslíka vzhľadom na prítomnosť interkalovaných a exfoliovaných vrstiev plniva. Na základe získaných výsledkov možno konštatovať, že konvenčným miešaním v tavenine v komôrke plastografu Brabender je možné pripraviť čiastočne exfoliované nanokompozity pri použití organicky modifikovaných montmorillonitov.

Autori ďakujú za finančnú podporu Agentúre na podporu výskumu a vývoja (Grant č. APVV-51-050505) a Slovenskej grantovej agentúre pre vedu (Grant č. VEGA 2/7103/27).

3L-01 OPTOSENZORY NA BÁZI PORÉZNÍHO KŘEMÍKU

IVAN JELÍNEK^a, JURAJ DIAN^b a JINDŘICH JINDŘICH^c

^a *Univerzita Karlova Praze, PřF, Katedra analytické chemie, Hlavova 8, 128 43 Praha 2,* ^b *Univerzita Karlova v Praze, MFF, Katedra chemické fyziky a optiky, Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2,* ^c *Univerzita Karlova Praze, PřF, Katedra organické a makromolekulární chemie, Hlavova 8, 128 43 Praha 2*
jelinek@natur.cuni.cz.

Křemík patří mezi strategické prvky, v elementární formě je využíván jako základní materiál současné elektroniky. Technika přípravy polykrystalického a především monokrystalického křemíku patří mezi nejpropracovanější technologické postupy anorganické chemie. Významným průlomem v zájmu o novou nanokrystalickou formu křemíku, tzv. porézní křemík, byl objev intenzivní viditelné fotoluminiscence za pokojové teploty při excitaci UV zářením¹. Od roku 1990 bylo o porézním křemíku publikováno přes 7000 původních článků zabývajících se jeho přípravou a vlastnostmi, se zvláštním zaměřením na možné využití v optoelektronice. Realizace elektroluminiscenčního zdroje světla na křemíkovém čipu představuje průlom v možnostech integrace mikroelektroniky a optoelektroniky na bázi jednoho materiálu. Vysoká sorpční kapacita povrchu porézního křemíku a závislost elektrických a optických vlastností na chemickém složení okolí je základním předpokladem jeho využití v oblasti chemických senzorů². Byly popsány senzory detegující chemické látky v plynné a kapalné fázi na základě změny elektrické vodivosti porézního křemíku, absorpce záření a reverzibilního zhášení fotoluminiscence. V příspěvku je prezentován ucelený přehled o možnostech analytického využití porézního křemíku při konstrukci optosenzorů, zvláštní pozornost je věnována technikám funkcionalizace nanostrukturálního povrchu, zvyšujících jeho chemickou stabilitu a selektivitu odezvy. Z těchto hledisek se jako velmi perspektivní jeví substituce vazeb Si-H vazbami Si-C a navázání funkčních skupin s deriváty cyklo-dextrinů.

Autoři děkují za finanční podporu projektu grantovým agenturám GA ČR (203/06/0786) a ministerstvu školství (MSM 0021 620 835 a MSM 0021 620 857).

LITERATURA

1. Canham L. T.: Appl. Phys. Lett. 57, 1046 (1990).
2. Lauerhaas J. M., Credo G. M., Heinrich J. L., Sailor M. J.: J. Am. Chem. Soc. 114, 1911 (1992).

3L-02 MOŽNOSTI A OMEZENÍ NOVÝCH ELEKTRODOVÝCH MATERIÁLŮ VE VOLTAMETRII A AMPEROMETRII

**JIŘÍ BAREK, KAROLINA PECKOVÁ, JAN FISCHER,
VLASTIMIL VYSKOČIL a ALEŠ DAŇHEL**

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

Rostoucí požadavky na moderní voltametrické a amperometrické metody iniciovaly rozsáhlý výzkum nových elektrodoových materiálů charakterizovaných širokým potenciálovým oknem, nízkým šumem, mechanickou robustností a odolností vůči pasivaci¹. V tomto příspěvku budou diskutovány možnosti a omezení různých typů tuhých a pastových stříbrných amalgamových elektrod, uhlíkových pastových elektrod, uhlíkových filmových elektrod a borem dopovaných diamantových filmových elektrod. Bude diskutováno jejich využití ke vsádkovému voltametrickému stanovení stopových množství biologicky aktivních organických sloučenin významných z hlediska ochrany lidského zdraví a životního prostředí. Pozornost bude věnována i jejich využití při elektrochemické detekci těchto látek ve spojení s vysokou účinnou kapalinovou chromatografií či průtokovou injekční analýzou. Bude diskutována možnost elektrochemické předúpravy těchto materiálů a možnostem jejich využití k eliminaci problémů souvisejících s pasivací používaných elektrod. Budou ukázány konkrétní případy zvýšení citlivosti a selektivity těchto metod jejich kombinací s předběžnou separací kapalinovou extrakcí či extrakcí tuhou fází.

Tento výzkum byl finančně podporován MŠMT ČR (projekty LC 06035 a MSM 0021620857), Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (projekt 6107/2007/B-Ch/PrF) a Grantovou agenturou České republiky (grant 203/07/P261).

LITERATURA

1. Barek J., Fischer J., Navrátil T., Pecková K., Yosypchuk B., Zima J.: Electroanalysis 19, 2003 (2007).

3L-03 POKROKY VE VYUŽITÍ UHLÍKOVÝCH PAST V ORGANICKÉ ANALÝZE

JIŘÍ ZIMA

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

Uhlíkové pastové elektrody (CPE) tvořené směsí uhlíkového prášku a vhodného pojiva byly uvedeny do chemické praxe přesně před 50 roky¹ a od té doby prošly mnoha etapami svého vývoje. A i v dnešní době stále poutají pozornost mnoha výzkumníků a jsou využívány ke stanovení jak orga-

nických, tak anorganických analytů. Je to především jejich snadná laboratorní příprava a modifikovatelnost různými chemickými či biologickými látkami, která je centrem pozornosti^{2,3}. Modifikace složení CPE mají za cíl buď zvýšit selektivitu stanovení studovaných látek a nebo zvýšit citlivost metody v důsledku specifických interakcí analytu a modifikátoru.

Elektrochemické metody využívající uhlíkové pastové elektrody ke stanovení organických sloučenin jsou obvykle velmi citlivé a v některých případech jsou autory uváděny i výrazně nižší než nanomolární limity detekce. Nižší selektivita elektrochemických metod využívajících uhlíkových past lze obejít jejich kombinací s HPLC. Detektory na bázi mikrokuliček skelného uhlíku jsou stále i v prostředí s vysokým obsahem organického modifikátoru a jsou tedy kompatibilní s běžně používanými mobilními fázemi v RP HPLC a mohou tak představovat levnou a přitom dostatečně citlivou alternativu ke spektrofotometrickým UV detektorům. V poslední době se objevují i práce využívající modifikace pasty iontovými kapalinami⁴. Specifické vlastnosti iontových kapalin mohou do oblasti CPE vnést nové impulsy, např. možnost akumulace i polárních sloučenin a tedy výrazné snížení jejich mezí detekce.

V příspěvku bude věnována pozornost poslednímu vývoji v oblasti organické analýzy využívající uhlíkových past, a to jak na příkladech z vlastního pracoviště, tak z jiných předních laboratoří.

Tato práce vznikla za podpory projektů MŠMT ČR MSM0021620857 a LC06035.

LITERATURA

1. Adams R. N.: Anal. Chem. 30, 1576 (1958).
2. Švancara I., Vytřas K., Zima, J. Berek J.: Crit. Rev. Anal. Chem. 31, 311 (2001).
3. Kalcher K., Švancara I., Metelka R., Vytřas K., Walcaris A.: Heterogeneous Carbon Electrochemical Sensors, in: Encyclopedia of Sensors, Vol. 4 (Grimes C. A., Dickey E. C., Pishko M. V., ed.), str. 283–429. ASP, Stevenson Ranch (CA, USA), 2006.
4. Kachoosangi R. T., Wildgoose G. G., Compton R.: Electroanalysis 19, 1483 (2007).

3L-04

RTUŤOVÉ FILMOVÉ ELEKTRODY NA KOVOVÝCH PODLOŽKÁCH PRO ELEKTROCHEMICKÁ MĚŘENÍ

BOGDAN YOSYPCHUK

*Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.,
Dolejškova 3, 182 23 Praha 8
josypcuk@jh-inst.cas.cz*

Rtuťové filmové elektrody se připravují na různých vodivých podložkách. Opravdový, ideálně rovný film lze získat na kovové podložce, která se smáčí rtuť (např. na uhlíkových materiálech se tvoří soubor mikrokapiček rtuť). Jako podložka pro filmové elektrody se nejčastěji používají Ag, Au, Pt, Ir, Cu aj. kovy. Pevné amalgámy různých kovů^{1–3} se velmi dobře smáčí rtuť, a proto taky jsou vhodným materiálem pro přípravu filmových elektrod. Jedním z cílů tohoto výzkumu bylo

vypracování jednoduchého, spolehlivého a k životnímu prostředí šetrného postupu přípravy stabilních a přesně definovaných rtuťových filmů.

Byl navržen elektrolyt a rozpustná anoda ze stříbrného pastového amalgámu⁴, které zajišťují dobrou reprodukovatelnost získávání filmů. Malé množství elektrolytu, který se může používat mnohokrát, a pastový amalgám, který nelze rozlít, podstatně snižují riziko znečištění životního prostředí. Rtuťový film na podložce ze stříbrného pevného amalgámu má zrcadlově lesklý povrch po dobu pracovního dne není-li jeho tloušťka menší než 2 μm. Proudová odezva ASV-píků Tl (I) vztažená na jednotku plochy elektrody je na filmových elektrodách nejvyšší. Šířka píku, která určuje rozlišení metody, je na filmových elektrodách nejmenší. Rozsah pracovních potenciálů na rtuťovém filmem pokryté stříbrné pevné amalgamové elektrodě v různých elektrolytech je srovnatelný se rtuťovými elektrodami. Ideálně rovný, přesně definovaný, stabilní v čase a lehce obnovitelný povrch pracovní elektrody byl využit pro vytvoření mono a více vrstevných filmů biologicky aktivních látek, přičemž zvolením vhodného složení amalgámu bylo možno ovlivňovat oblast pracovních potenciálů, rychlost a stupeň fixace zmíněných látek na elektrodě.

Tato práce byla podpořena Grantovou agenturou České republiky (grant č. 203/07/1195) a Grantovou agenturou Akademie věd České republiky (grant č. IAA400400806).

LITERATURA

1. Yosypchuk B., Novotný L.: Critic. Rev. Anal. Chem. 32, 141 (2002).
2. Yosypchuk B., Heyrovský M., Paleček E., Novotný L.: Electroanalysis 14, 1488 (2002).
3. Yosypchuk B., Šestáková I., Novotný L.: Talanta 59, 1253 (2003).
4. Yosypchuk B., Šestáková I.: Electroanalysis 20, 426 (2008).

3L-05

TWO-COLUMN, TWO-DIMENSIONAL AND COMPREHENSIVE TWO-DIMENSIONAL GAS CHROMATOGRAPHY

JÁN KRUPČÍK and JANKA MYDLOVÁ-MEMERSHEIMEROVÁ

*Institute of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, STU, Bratislava, Slovakia
jan.krupcik@stuba.sk*

Two columns of different polarities are often coupled in series to improve the gas chromatographic (GC) separation of complex mixtures. A schematic of two columns coupled in series placed in one oven is depicted in the scheme 1.

The following possibilities of two columns coupled in series exist in dependence on the interface nature^{1–4}:

1. Dual column chromatography
2. Two-dimensional chromatography
3. Comprehensive two-dimensional chromatography

A novel method for comprehensive two-dimensional capillary gas chromatography shall be demonstrated in this



Scheme 1. **Two columns coupled in series** (p_i and p_o is an inlet and outlet carrier gas pressure, respectively)

presentation. The method is based on the principle of two-dimensional thin layer chromatography, where all sample constituents are separated in the first as well as in the second dimension with no-modulation.

Retention locking principle is used for both columns in this method which is superior to any so far used comprehensive GCxGC as it allows using retention times for qualitative analysis. Quantitative analysis of complex samples using this method is much simpler than in any already published comprehensive GCxGC as no modulation is used. Performance of this non-modulated GCxGC shall be illustrated separating 209 PCB congeners and compared with flow and thermal modulated comprehensive GCxGC.

REFERENCES

1. Gorecki T., Harynuk J., Panic O.: *J. Sep. Sci.* 27, 359 (2004).
2. Marriott P. J., Morrison P. D., Shellie R. A., Dunn M. S., Sari E., Ryan D.: *LC-GC Europe* 16, 23 (2003).
3. Seeley J. V., Kramp F., Hicks C.J.: *Anal. Chem.* 72, 4346 (2000).
4. Mohler R. E., Prazen. B. J., Synovec R. E.: *Anal. Chim. Acta* 555, 68 (2006).

3L-06

TĚŽ NEZNAMENÁ TO_TĚŽ, TO NENÍ TO_TĚŽ!

Věnováno profesoru Vilimu Šimánkovi za to, že je.

EVA TESAŘOVÁ^a, ZUZANA BOSÁKOVÁ^b, KVĚTA KALÍKOVÁ^a, JANA LOKAJOVÁ^a, MARIE VADINSKÁ^b, LUCIE LOUKOTKOVÁ^b, JOANNA ZNALEZIONA^c, MAGDA MEGOVÁ^c, VÍTĚZSLAV MAIER^c, JAN PETR^c, RADIM KNOB^c, LUKÁŠ MULLER^c a JURAJ ŠEVČÍK^c

^a Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, PŘF UK v Praze, Hlavova 8, 128 43 Praha 2, ^b Katedra analytické chemie, PŘF UK v Praze, Hlavova 8, 128 43 Praha 2, ^c Katedra analytické chemie, PŘF UP v Olomouci, Třída Svobody 8, 771 46 Olomouc
tesarove@natur.cuni.cz, sevcik@prfnw.upol.cz

Co je „to“ a co je „totéž“? Jsou předmět a jeho zrcadlový obraz totožné? Odpovědi na tyto zdánlivě filozofické otázky si klademe i v chemii. Důvodem je skutečnost, že „vyhledávání“ stereoselektivních interakcí patří k základním

komunikačním vlastnostem chemických látek v přírodě. Enantiomery, zrcadlové obrazy sebe sama, se totiž (nebo tudíž) mohou (a nemusejí) zásadně lišit ve svých vlastnostech, pokud se vyskytují v chirálním prostředí, kterým příroda jednoznačně je. Pak je zde jasná odpověď: „To“ neznamená (není) v přírodě „totéž“.

Pro zkoumání odlišných vlastností, chování a často i rozdílného metabolismu enantiomerů, máme k dispozici řadu více či méně propracovaných separačních postupů, využívajících různé analytické techniky. Kapalinově chromatografické a kapilárně elektroforetické metody mají dnes výsostné postavení při řešení problematiky separace enantiomerů. Široká variabilita uspořádání enantioselektivních separačních systémů – volba různých chirálních stacionárních fází nebo chirálních aditiv do mobilních fází – umožňuje rozdělit kapalinovou chromatografií mnoho strukturně odlišných enantiomerů. Elektromigrační kapilární metody disponují celou řadou principiálně i technicky se lišících uspořádání. Jejich vhodnou kombinací lze docílit nejen úspěšné enantioselektivní separace, ale i významné on-line prekoncentrace analytu o několik řádů.

V přednášce bude ukázána a diskutována řada zajímavých HPLC a CE separačních systémů resp. aplikací, které byly vyvinuty a použity autory k chirálnímu dělení analytů z oblastí léčiv, návykových látek, pesticidů a složek potravin.

Tato práce vznikla za finanční podpory grantu Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky, projekt Kontakt ME 895 a výzkumných záměrů č. MSM0021620857 a MSM6198959216.

LITERATURA

1. Tesařová E.: *Analýza chirálních sloučenin*. PACI, VŠCHT Praha 2007.

3L-07

ANALÝZA MIKROORGANISMŮ A BUNĚK KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZOU

JAN PETR^a, OLGA RYPAROVÁ^a, VÁCLAV RANC^a, PETRA HINNEROVÁ^a, JOANNA ZNALEZIONA^a, MARTA KOWALSKA^b, RADIM KNOB^a, VÍTĚZSLAV MAIER^a, IVO FRÉBORT^b, KAREL LEMR^a a JURAJ ŠEVČÍK^a

^a Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Třída Svobody 8, 771 46 Olomouc, ^b Katedra biochemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc
petrjan1@gmail.com

Kapilární elektroforéza (CE) je dnes známá separační technika, kterou lze analyzovat malé ionty, ale i fragmenty nukleových kyselin. Přesto CE umožňuje separovat a blíže studovat částice, jejichž velikost se blíží rozměrům separační kapiláry, tj. buňky, mikroorganismy, viry. Právě tato oblast je spolu s miniaturizací a možností analýzy jedné buňky ve velkém zájmu předních světových výzkumných pracovišť.

Tento příspěvek si dovoluje shrnout současný stav vědeckého poznání v této oblasti, včetně možných problémů, na

keré při analýze buněk můžeme narazit. Bude diskutována problematika adsorpce a její řešení jak použitím dynamické, tak kovalentní modifikace kapiláry, problémy identifikace a její možné řešení pomocí PCR techniky nebo off-line spojení s DESI-MS a možnosti využití preconcentračních technik pro analýzu buněk.

Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy (Výzkumný záměr číslo MSM6198959216 a Program Kontakt ME 895) za finanční podporu práce.

3L-08

DEVELOPMENT OF COMPUTER APPLICATION FOR IDENTIFICATION AND COMPARISON OF CAR PAINT SAMPLES ANALYSED BY PYROLYSIS - GAS CHROMATOGRAPHY - MASS SPECTROMETRY (PY-GC/MS)

JAKUB M. MILCZAREK^{a,b}, JANINA ZIĘBA-PALUS^b, and MARCIN PIECHOWICZ^b

^a Jagiellonian University, Faculty of Chemistry, Department of Analytical Chemistry R. Ingardena 3, 30-060 Kraków, Poland, ^b Institute of Forensic Research, Westerplatte 9, 30-033 Kraków, Poland
jakub@milczarek.eu

Car paint as physical evidence is the type of sample that is probably most commonly examined in forensic laboratories. Chips of paint coat or paint smears are very often transferred to the clothing of a hit-and-run accident victim.

Typical new automotive refinishment consists of at least four layers: the primer, the primer surfacer, the basecoat and the clear-coat. Each layer of the coating is a mixture of different components: a polymer binder, inorganic and organic pigments, fillers and other substances. Identification of the polymer binder requires application of pyrolysis-GC/MS method. Using this method small paint samples are decomposed by heating to gaseous products later separated.

Py-GC/MS was applied in comparative analysis of polymer binder of over 100 automobile paint samples. It was found that binders of identical type and similar infrared spectra can be, in most cases, effectively differentiated, sometimes based only on the presence of peaks of very low intensity originating from minor paint components. The qualitative procedure of pyrograms comparison was developed¹.

For faster identification and automated differentiation of car paint samples a special computer application is being developed. Borland C++ Builder version 6.0 is used as the software development environment.

The most important functions of the application are:

- visualisation of chromatograms in total ion current (TIC) mode and in selected m/z value;
- assignment of identified peaks to known components;
- automated comparison of chromatograms based on retention time of major and selected minor peaks;
- database search based on car manufacturer, year of production, type of binder or minor components.

In presentation first modules and basic features will be presented and briefly described.

The research was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education, Poland, within the project No. O N204 003034.

REFERENCE

1. Zięba-Palus J., Zadora G., Milczarek J. M., Kościelniak P.: J. Chromatogr., A 1179, 41 (2008).

3L-09

DIFÚZNÍ ZNEČIŠTĚNÍ ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ ENDOKRINNÍMI DISRUPTORY

ZUZANA BOSÁKOVÁ, EVA TESAŘOVÁ a VĚRA PACÁKOVÁ

PřF UK, Hlavova 8, 128 43 Praha 2
bosakova@natur.cuni.cz

Česká republika, jako průmyslový stát s rozvinutou infrastrukturou produkuje velké množství polutantů. Vedle tradičních znečištění se objevují stále nové látky, o kterých je nyní známo, že i v minimálním množství jsou potenciálně škodlivé pro živé organismy a jejich reprodukci. Difúzní znečištění se chápe jako znečištění velké plochy (povrchu) nebo velkého objemu (vody) velmi nízkými koncentracemi různých polutantů z nejrůznějších zdrojů, které při dlouhodobém působení mají negativní vliv na zdraví lidí a další složky životního prostředí. Podílí se na něm velké množství sloučenin, které jsou mimo jiné dále transportovány vzduchem nebo vypouštěny ve vyčištěných odpadních vodách a rozptylovány v životním prostředí v důsledku různých antropogenních činností. Vedle již delší dobu sledovaných perzistentních organických polutantů (polycyklické aromatické uhlovodíky, organochlorové sloučeniny, herbicidy, fungicidy a pesticidy, polychlorované bifenylly aj.) se pozornost zaměřuje i na některá léčiva (včetně antibiotik) a na látky s endokrinní aktivitou (tzv. endokrinní disruptory). Výrazný negativní efekt prokazují estrogenní látky. Jejich zbytková koncentrace ve vypouštěných vyčištěných komunálních odpadních vodách má vliv na vodní živočichy v řekách, na feminizaci říčních ryb a deformaci u žab. Tyto látky se dostávají do organismu savců (včetně člověka) a mohou interferovat s činností endogenních hormonů. Tento negativní účinek má pravděpodobný dopad i na reprodukci lidské populace (časnější puberta, pokles počtu spermií u mužů a mírné defekty u novorozenců). Bylo prokázáno, že estrogenní steroidy (a nejen ony) mají negativní vliv na reprodukci a vývoj v koncentracích řádově ppt¹. Vývoj vhodných metod pro jejich detekci, kvantifikaci a dlouhodobé monitorování je prvním krokem k jejich lokalizaci a následné eliminaci ze životního prostředí.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR, projekt Centrum 1M06011 a výzkumného záměru MSM0021620857.

3L-10 BIODEGRADACE VYBRANÝCH ORGANO- POLUTANTŮ DŘEVOKAZNÝMI HOUBAMI

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

Hlavními znečišťovateli povrchových vod jsou tradičně průmyslové podniky, ale novodobě též podniky „průmyslového zemědělství“. Při současném stavu ochrany životního prostředí je nemyslitelné, aby průmyslový podnik vypouštěl odpadní vody bez dostatečného přečištění, ale v zemědělství je situace odlišná. Pesticidy se dostávají do půdy a splachem pak do vodních toků, které jsou často zdrojem pro přípravu pitné vody. Čištění kontaminované vody v řekách není možné a je třeba soustředit se na čištění v procesu přípravy vod pitných. Dalšími důležitými oblastmi je čištění průsakových vod ze starých skládek a dekontaminace znečištěných půd.

Způsob dekontaminace se liší, je-li dekontaminována voda (odpadní nebo pitná) nebo zemina, ale v podstatě vždy může probíhat dvojím způsobem. Buď je kontaminant převeden (zakoncentrován) do jiného materiálu nebo se provádí úplná nebo částečná likvidace kontaminantu, tedy jeho degradace. Mezi metody využívající zakoncentrování kontaminantu do jiného média patří v případě zemin např. fytoremediace, v případě čištění vod (zejména pitných) např. sorpce na granulovaném aktivním uhlí nebo koagulace – vyvložkování. Tyto metody však vyžadují další zpracování kontaminovaného materiálu. Naproti tomu v případě degračních metod je příslušný kontaminant (organopolutant) přímo likvidován. Mezi perspektivní metody degradace patří zejména tzv. pokročilé oxidační procesy, jejichž podstatou je oxidace i velmi stabilních molekul pomocí vysoce reaktivních částic (radikálů) buď přidávaných nebo přímo v daném prostředí (vodě) vznikajících, např. katalýzou homogenní (H₂O₂ a UV záření) nebo heterogenní (polovodičový katalyzátor TiO₂ a UV záření) či enzymatickým působením organismů. S tím úzce souvisí celá rozsáhlá skupina biodegradačních metod aplikovatelných jak na dekontaminaci půd a kalů, tak na čištění odpadních i povrchových a pitných vod. Vedle biodegradace působením mikroorganismů, která v řadě případů je již poměrně dobře propracována, se pozornost věnuje také působení dřevokazných hub, tj. hub schopných rozkládat dřevní hmotu (lignin), tzv. hub bílé hniloby.

Pozornost v tomto projektu byla věnována biodegradaci průmyslových barviv pro čištění odpadních vod z textilních továren a biodegradaci herbicidů (zejména triazinového typu) intenzivně aplikovaných v zemědělství. Protože při degradaci řady těchto látek může docházet k tvorbě meziproductů, které mohou být toxičtější než původní kontaminant, je úkolem analytického chemika nejen sledovat úbytek degradované látky, ale také identifikovat vznikající meziproducty.

Tato práce vznikla za podpory grantu AV ČR IAA6020411.

3L-11 MAGNETICKÉ MIKROČÁSTICE VE SPOJENÍ S ELEKTROCHEMICKOU ANALÝZOU JAKO MNOHOSTRANNĚ VYUŽITELNÉ NÁSTROJE PRO ANALÝZU BIOMOLEKULÁRNÍCH INTERAKCÍ

**MIROSLAV FOJTA, PETRA HORÁKOVÁ,
KATEŘINA CAHOVÁ, MILOSLAVA FOJTOVÁ,
STANISLAV HASOŇ, LUDĚK HAVRAN, PAVEL
KOSTEČKA, KATEŘINA NĚMCOVÁ, HANA
PIVOŇKOVÁ a MARIE BRÁZDOVÁ**

Biofyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Královopolská 135, 612 65 Brno
fojta@ibp.cz

Paramagnetické částice nesoucí na svém povrchu různé biorekogniční prvky (např. oligonukleotidy, streptavidin, protilátky aj.) se osvědčily jako vynikající, mnohostranně využitelné nástroje pro izolaci a analýzu specifických biologických molekul (DNA, RNA nebo proteinů) i celých buněk. Magnetoseparační technologie v kombinaci s elektrochemickou analýzou byly v poslední době úspěšně aplikovány v nových mikroanalytických metodách zaměřených na detekci hybridizace DNA, interakcí DNA s proteiny, v imunoanalýze apod¹. Tyto tzv. „dvoupovrchové“ elektrochemické techniky využívají různé detekční principy, založené buď na vlastní elektrochemické aktivitě nukleových kyselin a proteinů, nebo na elektrochemicky aktivních značkách zavedených do těchto biomolekul. V případě detekce hybridizace DNA se osvědčila metoda založená na kyselé hydrolyze DNA separované pomocí magnetických částic a stanovení uvolněných purinových bazí pomocí rozpouštěcí voltametrie v přítomnosti iontů mědi^{2,3}. Jiné přístupy využívají značení hybridizačních sond pomocí kovových komplexů^{4,5}, nanočástic⁶, organických elektroaktivních skupin⁷ nebo enzymů⁸, které katalyzují přeměnu neaktivních substrátů na elektroaktivní produkty (indikátory). Pro vysoce citlivé stanovení proteinů se ukázalo (vedle detekce oxidačních signálů tyrozinu a tryptofanu na uhlíkových elektrodách⁹) jako mimořádně vhodné měření katalytického píku H na rtuťových elektrodách¹⁰. V řadě prací bylo ukázáno, že dvoupovrchové elektrochemické metody jsou využitelné v analýze přirozených (genomových) nukleotidových sekvencí amplifikovaných pomocí PCR, pro detekci mutací (sekvenčních polymorfismů), monitorování exprese genů a sledování vazby proteinů na specifická místa v DNA.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT LC06035 a GA ČR 203/07/1195 a AV ČR IQS500040581.

LITERATURA

1. Palecek E., Fojta M.: *Talanta* 74, 276 (2007).
2. Hason S., Pivonkova H., Vetterl V., Fojta M.: *Anal. Chem.* 80, 2391 (2008).
3. Jelen F., Yosypchuk B., Kourilova A., Novotny L., Palecek E.: *Anal. Chem.* 74, 4788 (2002).
4. Fojta M., Kostecka P., Trefulka M., Havran L., Palecek E.: *Anal. Chem.* 79, 1022 (2007).
5. Horakova-Brazdilova P., Fojtova M., Vytras K., Fojta M.: *Sensors* 8, 193 (2008).
6. Wang J., Liu G., Merkoci A.: *J. Am. Chem. Soc.* 125,

- 3214 (2003).
- Cahova H., Havran L., Brazdilova P., Pivonkova H., Pohl R., Fojta M., Hocek M.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 47, 2059 (2008).
 - Fojta M., Havran L., Vojtišková M., Palecek E.: *J. Am. Chem. Soc.* 126, 6532 (2004).
 - Masarik M., Cahova K., Kizek R., Palecek E., Fojta M.: *Anal. Bioanal. Chem.* 388, 259 (2007).
 - Palecek E., Masarik M., R. K., Kuhlmeier D., Hassmann J., Schüle J.: *Anal. Chem.* 76, 5930 (2004).

3L-12**VÝVOJ DNA SENZORA PRE PRIETOKOVÝ SYSTÉM**

DARINA ŠIMKOVÁ*, **STANISLAVA HLÚBIKOVÁ**,
JÚLIA GALANDOVÁ, **ERNEST BEINROHR** a **JÁN**
LABUDA

*Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, SR
simkovad@gmail.com*

Problemátike štúdia deoxyribonukleovej kyseliny (DNA) sa venuje v súčasnosti veľa pozornosti a jej výskum sa stáva záležitosťou spolupráce odborníkov z viacerých oblastí hlavne medicíny, biológie, biochémie a biofyziky. Pre štúdium DNA sa v súčasnosti využívajú okrem iných moderné elektrochemické techniky. Boli navrhnuté pracovné elektródy modifikované jednovláknovou alebo dvojitovláknovou DNA. Tieto tzv. biosenzory na báze DNA sú vysoko špecifické v prípade detekcie hybridizácie DNA, ale málo špecifické voči interakciám DNA s látkami malej molekulovej hmotnosti. Umožňujú však rýchle, jednoduché a lacné *in vitro* vyšetrenie a stanovenie látky interagujúcej s DNA. Biosensor všeobecne predstavuje účinný nástroj pre chemické, biologické, medicínske a environmentálne oblasti analýzy pre jeho vlastnosti ako malá veľkosť, reálny čas analýzy, jednoduchá predúprava a použitie.

V našej práci sme sa zaoberali vývojom DNA biosenzora pre analýzu v prietokovom systéme. Optimalizovali sme podmienky pre detekciu DNA pomocou cyklickej voltamperometrie s komplexom $K_3[Fe(CN)_6]$ ako redoxným indikátorom. Testovali sa tri druhy elektród: súbor uhlíkových mikroelektrod (tubulárna elektroda), makroporézne uhlíkové elektródy (sklovitý uhlík) a screen-printed uhlíkové elektródy DropSens 110. Ako základné elektrolyty sa použili octanový tlmivý roztok pH 5.0 s prídavkom chloridu sodného a fosforečnanový tlmivý roztok. pH 7.0. Sledovala sa odozva elektródy na použitý indikátor, stabilita DNA vrstvy na elektróde a možnosti sledovania štruktúrneho poškodenia DNA.

Práca sa riešila za finančnej podpory projektu Aplikovaného výskumu MŠ SR AV/4/0103/06.

3L-13**ANIMAL GLUES AS BINDERS IN XIX AND XX CENTURY OIL PAINTINGS - MALDI-TOF ANALYSIS**

MONIKA A. KOPERSKA

*University of Sciences and Technologies, Lille 1, Lille, France and Jagiellonian University, Faculty of Chemistry, Kraków, Poland
mkoperska@gmail.com*

Since few years scientists' attention has been drawn to the field of art. They become aware that no efficient conservation of cultural heritage is possible without a thorough scientific analysis of the piece before. In search for a good method many techniques have been tested. Although some non-destructive have been found. Mass Spectrometry is still called for due to its informative aspects.

Knowing the exact composition of an oil painting is a hard task. Many different layers like size, prime, gesso, paint or varnish are all present in a sample, each of which is a mixture of different organic or mineral compounds. These vary depending on the period in which the piece was made. As it would be difficult to analyse all of them at once, different procedures of extraction had been implemented¹.

Animal glues, chemically speaking, are proteins, but for artists they are important compounds of their paintings, as they are used to bind gesso or paints together. Few types of animal glues have been tested, first by extracting them from prepared earlier model paintings and then by MALDI-TOF analysis.

All the results will be shown during the presentation.

REFERENCES

- Tokarski C.: *Developpements methodologiques en analyse proteomique: application a des echantillons biologique natif ou transformes* thesis USTL, Lille.
- Kuckova S., Hynek R.: *Anal. Bioanal. Chem.* 388, 201 (2007).
- Andreotti A., Bonaduce I.: *Anal. Chem.* 78, 4490 (2006).

3L-14**DISTRIBÚCIA STRONCIA V TKANIVÁCH A KOSTIACH POTKANOV PO APLIKÁCIÍ RANELÁTU STRONCIA**

MONIKA ARANYOSIOVÁ^{a,b}, **MÁRIA STANČÍKOVÁ^c**
a DUŠAN VELIČ^{a,b}

*^a Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava, Slovenská republika, ^b Prirodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovenská republika, ^c Národný ústav reumatologických chorôb, I. Krasku 4, 921 01 Piešťany, Slovenská republika
aranyosiova@ilc.sk*

Distribúcia a akumulácia stroncia v tkanivách a kostiach potkanov testovaných na ranelát stroncia ($C_{12}H_6N_2SO_8Sr_2$) sa stanovovali hmotnostnou spektrometriou sekundárnych iónov. Ranelát stroncia je hlavnou zložkou nového lieku, ktorý pod-

poruje obnovu kostí a efektívne sa používa v liečbe osteoporózy. Cieľom práce je štúdium novej akumulácie stroncia nielen v kostiach, kde má pozitívny kvalitatívny aj kvantitatívny účinok, ale aj v tkanivách pečene, mozgu a srdca.

Skúmané potkany boli rozdelené do troch skupín v závislosti od spôsobu podávania lieku, pričom jedna skupina bola kontrolná. V ďalších dvoch skupinách sa liek podával po dobu 5 týždňov v dennej dávke 400 mg kg^{-1} , pričom v jednej skupine nasledovala fáza bez podávania lieku ďalších 5 týždňov. Vzorky kostí a tkanív sa vo forme tenkých rezov na kremíkovej podložke analyzovali na prístroji TOF-SIMS IV (ION-TOF, Muenster, Germany). Ako primárne ióny sa použili Bi_n^+ s energiou 25 keV. Hmotnostné spektrá sa merali na ploche $100 \times 100 \mu\text{m}^2$ v statickom limite $5 \cdot 10^{12}$ iónov cm^{-2} . Dvojrozmerné distribúcie Sr sa merali s laterálnym rozlíšením 300 nm v pozitívnej polarite. Identifikovali sa aj molekulové ióny typické pre biologické systémy ako fosfolipidy, cholesterol a mastné kyseliny. Porovnaním distribúcie stroncia v kostiach a tkanivách v troch rôznych skupinách sa získajú informácie o akumulácii a zadržaní stroncia aj po 5 týždňovej fáze vysadenia lieku počas novej liečby stronciom ranelátom.

Z metód, ktoré sa používajú na určenie chemického zloženia biologických vzoriek, má hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov jednoznačné výhody. Chemická charakterizácia biologických vzoriek v pôvodnej forme bez chemickej úpravy môže byť užitočná v medicínskom výskume.

Táto práca vznikla vďaka podpore grantov VEGA 1/3577/06, APVT-20-0298-0 a APVV-0491-07.

LITERATÚRA

1. Marie P. J.: *Curr. Opin. Rheumatol.* 18, 11 (2006).
2. Ammann P.: *Bone* 38, 15 (2006).

3L-15

ELECTRON PARAMAGNETIC RESONANCE SPECTROSCOPY (EPR) AS POTENT TOOL OF IDENTIFICATION AND DESIGNATION MELANINES IN BIOLOGICAL SAMPLES

ALEKSANDER SALWIŃSKI

*Jagiellonian University, Faculty of Chemistry, Ingardena Street 3, 30-060 Krakow, Jagiellonian University, Faculty of Biochemistry, Biophysics and Biotechnology, Department of Biophysics, Gronostajowa Street 7, Krakow, Poland
salwinski@gmail.com*

Melanins belong to the most widespread classes of pigments, both in case of world of plants and animals. As far as mammals are concerned, melanin is responsible for color of skin, hair and iris and poses protection against UV radiation. From the chemical point of view, melanins are polymers of diverse composition and may be divided into three characteristic classes: eumelanin, feomelanin and neuromelanin. One of the unique features of melanins is fact, that these polymers exhibit stable free-radical properties. Because of presence of free-radicals, electron paramagnetic resonance spectroscopy

(EPR) can be applied to conduct (relative) quantitative designation of melanins' concentration within confines of examined set of biological samples. Moreover, EPR spectroscopy allows conducting unequivocal identification of melanin's class on the basis of differences in hyperfine structure of EPR spectra¹.

Melanins are synthesized from tyrosine by specialized cells called melanocytes, which are incapable of division. Therefore, after fulfilling their function, melanocytes undergo apoptosis, programmed cell death. Constant number of specialized melanocytes is maintained by stem cells of melanocytes that reside in hair follicles. Rate of synthesis of melanin is thus directly correlated with hair cycle's phase. Mentioned cycle may be interfered by numerous external factors (e.g. by some groups of drugs, especially antineoplastic, for instance cyclophosphamide)^{2,3}. Scientific projects connected with determination of the influence of various factors on hair cycle's phase may contribute to development of new drugs inhibiting unpleasant side effects of chemotherapy. EPR spectroscopy is perfect tool to quantitative and qualitative monitoring of hair cycle.

REFERENCES

1. Sarna T., Swartz H. M., in: *The Pigmentary System. Physiology and Pathophysiology*. Oxford University Press, New York 1998.
2. Płonka P. M., Handjiski B., Michalczyk D., Popik M., Paus R.: *Br. J. Dermatol.* 155, 39 (2006).
3. Nishimura E. K., Jordan S. A., Oshima H., Yoshida H., Osawa M., Moriyama M., Jackson I. J., Barradin Y., Miyachi Y., Nishikawa S. I.: *Nature* 416, 854 (2002).

3L-16

ANALÝZA POTRAVIN ATÓMOVOU ABSORPČNOU SPEKTROMETRIOU S PRIAMYM DÁVKOVANÍM TUHÝCH VZORIEK

DANIEL BAJČAN^a, MÁRIA ŽEMBERYOVÁ^b a INGRID HAGAROVÁ^c

^a *Katedra chémie, FBP SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra,* ^b *Katedra analytickej chémie, PriF UK v Bratislave,* ^c *Geologický Ústav, PriF UK v Bratislave, Mlynská dolina 1, 842 15 Bratislava, SR
bajcan@gmail.com*

Jedným z trendov, ktorým sa analytická chémia ubera už niekoľko desaťročí, je analýza stopových a ultrastopových koncentrácií prvkov v širokom spektre rôznych látok. Ďalším trendom je analýza tuhých vzoriek bez potreby ich mineralizácie, ktorá analýzu značne predlžuje, komplikuje a zároveň ju predražuje. Obidva tieto smery sa spojili pri metóde, ktorou je atómová absorpčná spektrometria s priamym dávkovaním tuhých vzoriek (v anglickej literatúre označovaná ako Solid sampling AAS).

Medzi jej hlavné výhody patrí: skrátenie času úpravy vzoriek; nízke riziko straty analytu, príp. kontaminácie vzoriek, ku ktorým môže dôjsť počas mineralizácie; výrazné zvýšenie citlivosti a možnosti mikroanalýzy^{1,2}.

V predloženej práci sa zaoberáme stanovením kremíka

touto metódou v potravinách. Metóda Solid sampling AAS sa ukázala ako výhodná, rýchla a výkonná metóda na priame stanovenie kremíka v potravinách alebo biologických vzorkách. Porovnaním s klasickou „roztokovou“ metódou ET AAS zahŕňajúcou mineralizáciu vzorky sú hlavné výhody tejto metódy minimálna kontaminácia vzoriek vplyvom prostredia alebo použitia laboratórnych pomôcok či chemikálií, značné skrátenie času analýzy a veľmi nízky detekčný limit stanovenia na ultrastopovej úrovni 18 ng g^{-1} , ktorý zatiaľ nebol dosiahnutý inou metódou. Možnosť použitia kvapalných štandardov značne zjednodušuje stanovenie kremíka v tuhých vzorkách, pričom pri samotnom stanovení stačí použiť metódu kalibračnej krivky. Stanovenie kremíka v potravinách metódou AAS s priamym dávkovaním tuhých vzoriek vyžaduje použitie zmesného modifikátora $10 \mu\text{g Mg}(\text{NO}_3)_2 + 10 \mu\text{g Pd}$, ktorý sa nanáša na spopolnenú vzorku po prerušení kroku pyrolýzy pri teplote $600 \text{ }^\circ\text{C}$. Analýzou kriviek rozkladu a atomizácie sme zistili, že optimálna teplota pyrolýzy je $1400 \text{ }^\circ\text{C}$ a teplota atomizácie $2600 \text{ }^\circ\text{C}$ pri použití spomenutého zmesného modifikátora. Správnosť výsledkov, dosiahnutých použitou metódou, bola overená analýzou dvoch certifikovaných referenčných materiálov.

LITERATÚRA

1. Bendicho C., de Loos-Vollebregt M. T. C.: J. Anal. At. Spectrom. 6, 353 (1991).
2. Jackson K. W.: *Electrothermal Atomization for Analytical Atomic Spectrometry*. John Wiley, Chichester 1999.

Přednášky v soutěži o cenu Shimadzu

3L-17

IMPLEMENTATION OF THE *IN VITRO* METHOD FOR SKIN PENETRATION OF CHEMICALS FROM EVERYDAY LIFE

MARTINA BOREKOVÁ*, **LENKA ORSÁGOVÁ**,
and **JARMILA HOJEROVÁ**

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic
martina.borekova@stuba.sk

It is confirming that some of potentially harmful chemicals come in organism through the skin or mucous membrane. Because of potential risks to human health, evaluation of their skin penetration value is important for safety assessment. OECD recommended 428 methods, which is in the EU necessary to establish until 2009. It includes *in vivo* and *in vitro* tests, but preference should be given to *in vitro* testing methods as *in vivo* raise ethical concern. The aim of study was an implementation of this new technique *in vitro* skin penetration, because nowadays is neither verified in Slovakia. As a model of chemicals were testing four food and cosmetic colors: Patent Blue (E131, CI 42051), Brilliant Blue (E133, CI 42090), Tartrazine (E102, CI 19140) and Azorubine

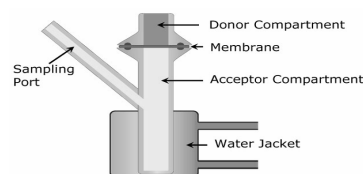


Fig. 1. Franz cell with pig skin membrane

(E122, CI 14720). All of these colors are used e.o. for whose products which are in relatively long term contact with mucous membrane (lollipops, sweets, chewing gums...) or skin (skin care, hair care and color cosmetics). Penetration of colors was measured through standardised *ex vivo* 0.4 mm thick „Split thickness“ pig skin in 15 parallel static Franz diffusion cells (Fig. 1) at $32 \text{ }^\circ\text{C}$. Excised pig skin is suitable for the *in vitro* estimation of the chemicals' penetration by human skin because of its physiological similarities and availability. The quantity each of color in dependency on varying the time and applied amount was detected by Spectrophotometer UV-1601 Shimadzu, Japan. Absorbance data $A(\lambda)$ were transformed to concentration. The penetration of 1 % colors (as 1 hour infinite dose in water) after 24 hours varied from 177.2 (Brilliant Blue) to $8.1 \mu\text{g cm}^{-2}$ (Azorubine). In the worst case scenario to $18\,000 \text{ cm}^2$ (skin area of adult) 3.19–0.14 g of the color will be absorbed to organism. Depending upon the toxic profile color, some of these may be of concern. Studies, similar to those presented here, should be extended to skin penetration of many chemicals from everyday life products, so as household chemistry, textile, toys, cosmetics and some of the foods.

The research was realized with a support of the grant agency of Slovak Republic under the project VEGA: 1/0438/08, 1/0746/08 and APVV-51-017905.

3L-18

UTILIZATION OF SILVER SOLID AMALGAM ELECTRODE FOR AMPEROMETRIC DETERMINATION OF PLANT GROWTH REGULATOR BY HPLC-ED

ALES DANHEL^a, **KWOK KEUNG SHIU^b**, **BOGDAN YOSYPCHUK^c**, **VLASTIMIL VYSKOCIL^a**, **KAROLINA PECKOVA^a**, and **JIRI BAREK^{a*}**

^a Charles University in Prague, Faculty of Science, UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Albertov 6, 128 43 Praha 2, Czech Republic, ^b Department of Chemistry, Faculty of Science, Hong Kong Baptist University, Waterloo Road, Kowloon, ^c J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry of AS CR, v.v.i., Dolejskova 3, 182 23 Prague 8, Czech Republic
ales.danhel@seznam.cz

Voltammetric behaviour of many nitrophenols at the hanging mercury drop electrode, at the silver solid amalgam electrode (AgSAE), as well as the use of AgSAE in wall-jet configuration in flow systems (FIA, HPLC) were already

described^{1–3}. In this work, the working AgSAE was designed, constructed and employed for a Thin-Layer LC-EC flow cell applied as detector for HPLC. This HPLC-ED system was used for determination of 2-nitrophenol, 4-nitrophenol, 2,4-nitrophenol, 2-methoxy-5-nitrophenol (or more precisely their sodium salts) contained in mixture in the world-wide plant growth regulators (for example Atonic, Chaperone, *N*-fenol MIX). The optimal conditions of the separation by RP-HPLC at a column Nova-Pack C18 (150 × 3.9 mm) and of the detection by LC-EC flow cell based on AgSAE working electrode were found (mobile phase: 0.05M phosphate buffer pH 6.0 in mixture with methanol 7:3 (v/v), flow rate 1.3 mL min⁻¹ and working electrode potential -1.0 V vs. Ag/AgCl). Under these conditions, the above given nitrophenols can be separated in 10 min and determined in concentration range 5–2500 μmol L⁻¹ (evaluation of the peaks area). Wide negative potential range, simple preparation and easy electrochemical pretreatment are main advantages of AgSAE. Relatively low limits of detection of reducible organic compounds as well as its low price are to be mentioned as well.

Financial support from MSMT CR (LC 06035 and MSM 0021620857), GACR (203/07/1195 and 203/07/P261) and GAUK (6107/2007/B-Ch/PrF) is gratefully acknowledged. A.D. thanks the Croucher Foundation and the Faculty of Science, HKBU, for financial support of the postgraduate exchange program.

REFERENCES

1. Barek J., Ebertova H., Mejstrik V., Zima J.: Collect. Czech. Chem. Commun. 59, 1761 (1994).
2. Fischer J., Vanourkova L., Danhel A., Vyskocil V., Cizek K., Barek J., Peckova K., Yosypchuk B., Navratil T.: Int. J. Electrochem. Sci. 2, 226 (2007).
3. Barek J., Fischer J., Navratil T., Peckova K., Yosypchuk B., Zima J.: Electroanalysis 19, 2003 (2007).

3L-19

METABOLICKÉ PŘEMĚNY SILYBINU

PETRA JANČOVÁ, EVA ANZENBACHEROVÁ, ZDENĚK DVORÁK, PAVEL KOSINA a VILÍM ŠIMÁNEK

*Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc
jancovapetra@seznam.cz*

Silymarin je směs nejméně 7 flavonolignanů a flavonoidu taxifolinu získaná z extraktu semen ostropestřce mariánského (*Silybum marianum* [L.] Gaertn, Asteraceae). Silymarin má chemopreventivní účinky a je aktivní složkou řady fytopřípravků a doplňků stravy¹. Farmakologicky nejvíce studovaným flavonolignanem silymarinu je silybin (v silymarinu do 60 %), který je směsí dvou stereoisomerů, A a B v poměru 1:1. V předkládané práci byly sledovány metabolické přeměny silybinu v podmínkách *in vitro* a *in vivo*.

Publikovali jsme, že silybin je *O*-demetylovan enzymem I fáze metabolismu cizorodých látek, cytochromem P450 2C8 (CYP2C8) v přítomnosti mikrosomální frakce lid-

ského jaterního homogenátu i za účasti rekombinantního CYP2C8 (cit.²). Tento metabolit však nebyl nalezen po inkubaci silybinu s primární kulturou lidských hepatocytů ani v moči dobrovolníka.

V této studii bylo nalezeno, že nejvýznamnější metabolity při biotransformaci silybinu jsou glukuronidy. HPLC analýzou s UV detekcí bylo prokázáno, že UDP-glukuronosyltransferasy (UGT) přítomné v mikrosomální frakci lidského jaterního homogenátu metabolizovaly silybin za vzniku 7-*O*-β-D-glukuronidů a 20-*O*-β-D-glukuronidů. Stejně glukuronidy byly identifikovány také po inkubaci silybinu s primární kulturou lidských hepatocytů a za účasti rekombinantní UDP-glukuronosyltransferasy 1A1 (UGT1A1). Další experiment ukázal, že UGT přednostně reagují s jedním ze dvou diastereoisomerů silybinu.

Na rozdíl od lidské plazmy³, kde byl nalezen především 20-*O*-β-D-glukuronid, jsme ve vzorcích lidské moči identifikovali 7-*O*-β-D-glukuronid silybinu. Největší množství 7-*O*-β-D-glukuronidů bylo v moči nalezeno již do 4 hodin po požití 2 tablet doplňku stravy Silymarin forte (2 × 190 mg silymarinu).

Znalost metabolických přeměn silybinu významně přispívá k jeho použití jako chemoprotektiva snižujícího riziko vzniku některých nádorových onemocnění.

Tato práce vznikla za podpory Vnitřního grantu Univerzity Palackého 91110181 a grantu MŠM 6198959216.

LITERATURA

1. Gažák R., Walterová D., Křen V.: Curr. Medicinal Chem. 14, 315 (2007).
2. Jančová P., Anzenbacherová E., Papoušková B., Lemr K., Lužná P., Veinlichová A., Anzenbacher P., Šimánek V.: DMD 35, 2035 (2007).
3. Křen V., Ulrichová J., Kosina P., Stevenson D., Sedmera P., Příkrylová V., Halada P., Šimánek V.: DMD 28, 1513 (2000).

3L-20

HPLC/MS CHARACTERIZATION OF TRIACYLGLYCEROL SAMPLES IMPORTANT IN HUMAN HEALTH AND NUTRITION RESEARCH

MIROSLAV LÍSA

*Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, Czech Republic
miroslav.lisa@upce.cz*

Triacylglycerols in complex natural mixtures important in nutrition and human health have been analyzed in this work. Properly optimized non-aqueous reversed-phase (NARP) HPLC method together with atmospheric pressure chemical ionization (APCI-MS) mass spectrometry detection enables the separation and identification of the highest number of triacylglycerols reported so far. The retention and fragmentation behavior of triacylglycerols in both common and unusual plant oils have been described. The identification of triacylglycerols double bond positional isomers based on

retention shifts and different fragmentation behavior have been suggested. Based on the comparison of three widely used detection techniques for analysis of triacylglycerols (APCI-MS, evaporative-light scattering detector and UV at 205 nm), the APCI-MS detection has been selected for the quantitative analysis of triacylglycerols in natural mixtures. Precise quantitation of triacylglycerols using NARP-HPLC/APCI-MS is based on the response factors calculated from calibration curves of single-acyl triacylglycerol standards. Developed quantitative approach is applied for the analysis of a wide range of plant oils important in nutrition and many branches of industry. Based on precise concentrations of triacylglycerols, the average composition of fatty acids in individual plant oils and sums of fatty acids with different saturation degree are calculated to describe the nutritional value of analyzed plant oils. HPLC/MS quantitative results have been compared with charge aerosol detection. The response uniformity of triacylglycerols in common plant oils, good reproducibility and excellent sensitivity of charge aerosol detector with gradient compensation method has been demonstrated.

This work was supported by the grant project No. MSM0021627502 sponsored by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic and projects No. 203/06/0219 and 203/08/1536 sponsored by the Czech Science Foundation.

3L-21

CYKLODEXTRINOVÉ A CELULOSOVÉ CHIRÁLNÍ STACIONÁRNÍ FÁZE PRO ENANTIOSEPARACI SUBSTITUOVANÝCH BINAFTYLŮ

LUCIE LOUKOTKOVÁ, ZUZANA BOSÁKOVÁ a EVA TESÁŘOVÁ

*PřF UK, Hlavova 8, 128 43 Praha 2
loukotko@natur.cuni.cz*

Asymetrická syntéza s použitím vhodných katalyzátorů umožňuje přípravu čistých enantiomerů. Jako katalyzátory se dobře uplatňují mimořádné vlastnosti substituovaných binaftylů – jsou rigidní, chirální a mají vhodné prostorové uspořádání. Vysokou účinnou kapalinová chromatografie (HPLC) s chirálními stacionárními fázemi (CSPs) umožňuje rychlé a efektivní stanovení optické čistoty syntetizovaných látek.

V této práci bylo studováno enantioseparační chování deseti vybraných binaftylových derivátů – osm 2,2'-disubstituovaných 1,1'-binaftylů a dvou 8,3'-disubst. 1,2'-binaftylů – na CSPs na bázi nativního- (β -CD) a hydroxypropyl- β -cyklodextrinu (HP- β -CD) a tris(3,5-dimethylfenylylkarbamátu) celulosy. Sledován byl vliv složení mobilní fáze (MF) na enantioseparační chování analytů.

Studie byly prováděny jak v normálním, tak v reverzním separačním módu. V normálním módu s MF tvořenou *n*-hexanem/propan-2-olem v různých objemových poměrech se na celulosové CSP rozdělily čtyři z deseti analytů. CD-kolony se neosvědčily.

Reverzní mód byl v případě CD CSPs tvořen MF methanol/voda nebo 0,5% triethylaminooctanový pufr, pH 3,0 nebo 6,0. Tři z deseti látek se podařilo rozdělit na obou CD kolo-

nách, avšak lepší chromatografické parametry poskytla HP- β -CD CSP. V případě tris(3,5-dimethylfenylylkarbamátu) celulosy byly MF složeny z acetonitrilu/vody nebo 20 mM fosfátového pufru, pH 3,0 nebo 6,0. 1,2'-binaftylů vykazovaly vysoké hodnoty *R* ve všech studovaných systémech. Pro enantioselektivní rozlišení některých 1,1'-binaftylů bylo výhodnější prostředí bez pufru, zatímco deriváty schopné tvorby H-vazeb vyžadovaly prostředí o nízké hodnotě pH. Strukturně symetrické analyty nebyly v žádném testovaném separačním systému rozlišeny.

Z výsledků jednoznačně vyplývá, že pro enantioseparaci binaftylů je v obou separačních módech výhodnější použití polysacharidové CSP. Vysoké hodnoty rozlišení 1,2'-binaftylů umožňující i aplikaci semi-preparativního módu zřejmě souvisí s jejich stericky vhodným fitem do chirální dutiny helikální struktury celulosy. Toto sterické uspořádání je zjevně výhodné i pro jejich inkluzi do kavity CD, o čemž svědčí jejich úspěšná enantioseparace na obou CD kolonách.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR, projekt Kontakt ME 89,5 a výzkumného záměru MSM0021620857.

3L-22

RAPID AND FACILE DETERMINATION OF ENANTIOMERIC COMPOSITION OF CHIRAL TETRAHYDROISOQUINOLINES BASED ON DERIVATIZATION WITH MENTHYL CHLOROFORMATE AND GC RESOLUTION OF CORRESPONDING CARBAMATES

VÁCLAV MATOUŠEK^a, PETR KAČER^a, MAREK KUZMA^b, and LIBOR ČERVENÝ^a

^a *Department of Organic Technology, Institute of Chemical Technology, Prague, Technická 5, 166 28 Prague 6,*

^b *Laboratory of Molecular Structure Characterization, Institute of Microbiology Academy of Sciences of the Czech Republic, Vídeňská 1083, 142 20 Prague 4
vaclav.matousek@vscht.cz*

The quest for highly efficient routes to enantiopure chemicals for use in the pharmaceutical, fine chemical and agro-chemical sectors have been greatly accelerated in the last decade due to legislative and environmental pressures. One reason for this situation is the fact that the two enantiomers of a chiral active compound can interact in different ways with living organisms. The significance of chiral amines especially in the above mentioned branches of chemical industry demands not only the development of an efficient route to optically pure compounds but also a reliable, facile, rapid and cost-effective analytical technique for determination of their enantiomeric purity.

During our research on asymmetric transfer hydrogenation of prochiral substituted 3,4-dihydroisoquinolines with Noyori catalyst [Ru(Ts-DPEN)(*p*-cymene)Cl], we were searching for a quick and precise method for determination of enantiomeric excess of product tetrahydroisoquinolines other than HPLC-UV and chiral GC because of high labor-cost expenses and limited thermal stability of chiral GC-columns. We wish to report our successful attempt in determining the

enantiomeric excess of chiral tetrahydroisoquinolines.

The method is based on pre-column derivatization of chiral tetrahydroisoquinolines by reaction with (+)-menthylchloroformate. Nucleophilic secondary amine moiety in tetrahydroisoquinoline skeleton displaces chlorine in menthylchloroformate in the sense of nucleophilic acyl substitution to yield the corresponding diastereomeric carbamates. These diastereomers can be perfectly resolved on ordinary achiral non-polar poly(dimethylsiloxane) GC-column. No preferential derivatization of one enantiomer or the other occurs as was proven by derivatization of racemate. Varying the amount of derivatization reagent did not result in any change of observed peak ratio between the two formed diastereomers indicating good usability of this method.

3L-23

AMPEROMETRICKÉ STANOVENÍ ACIFLUORFENU, NITROFENU A OXYFLUORFENU S POUŽITÍM STŘÍBRNÝCH TUHÝCH AMALGAMOVÝCH ELEKTROD

VÍT NOVOTNÝ a JIŘÍ BAREK

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 43 Praha 2
novotny1@natur.cuni.cz

Acifluorfen, nitrofen a oxyfluorfen patří do skupiny herbicidů odvozených od difenyletheru. Jedná se o látky silně toxické pro studenokrevné vodní živočichy¹ a zároveň genotoxické. Jako látky obsahující nitroskupinu jsou také elektrochemicky aktivní, což bylo využito k jejich voltametričkému stanovení na stříbrných tuhých amalgamových elektrodách². V reálných vzorcích jsou zpravidla doprovázeny celou řadou interferujících látek. Proto je zapotřebí zvolit vhodný separační krok, v tomto případě HPLC. V práci budou prezentovány 4 různé typy elektrochemických detektorů na bázi netoxických tuhých amalgamů² a bude prokázána jejich použitelnost k amperometrické detekci mikromolárních koncentrací studovaných látek po jejich separaci pomocí RP-HPLC. Budou porovnány výhody a nevýhody různých konstrukčních uspořádání a provedeno porovnání elektrochemické detekce s běžnější detekcí spektrofotometrickou.

Tento výzkum byl finančně podporován Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (projekt 332/2005/B-CH/PřF a projekt 6107/2007/B-CH/PřF) a Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy ČR (projekt LC06035 a MSM 021620857).

LITERATURA

1. *The Pesticide Manual*. 11. vyd. British Crop Protection Council, Farnham 1997.
2. Novotný V.: *Bakalářská práce*, Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Praha 2006.
3. Yosypchuk B.: *PhD Disertační práce*. FCHT, Univerzita Pardubice, Pardubice 2003.

3L-24

PLYNOVÁ CHROMATOGRRAFIE JAKO NÁSTROJ KE STANOVENÍ TERMODYNAMICKÝCH VELIČIN PRO POPIS FÁZOVÝCH ROVNOVÁH

DANIEL ONDO

Ústav fyzikální chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
pingusun@hotmail.com

Informace o fázových rovnováhách jsou nedílnou součástí každodenní chemicko-inženýrské praxe a bezesporu patří mezi nejdůležitější termodynamická data vůbec. Z environmentální oblasti k tomu přistupuje ještě požadavek na údaje o chování zředěných vodných roztoků a distribuci organických látek mezi modelové „fáze“ životního prostředí. K termodynamickému popisu těchto směsí jsou používány různé veličiny (Henryho konstanta, limitní relativní tlakovost, rozdělovací koeficienty), ale základní veličinu představuje limitní aktivitní koeficient (LAK) minoritní složky¹.

Praxe ukázala, že plynová chromatografie je vhodnou analytickou technikou pro stanovení LAK, neboť LAK je vždy v přímém vztahu s jedním ze dvou hlavních chromatografických parametrů: retenčním časem nebo plochou píku sledované složky.

Plynový chromatograf jako experimentální nástroj byl využit při stanovení limitních aktivitních koeficientů organických látek v iontových kapalinách^{2,3} a ve vodě⁴. V těchto aplikacích je měřena retence sledované látky na chromatografické koloně, jejíž zakotvenou fází tvoří zkoumané rozpouštědlo.

Při stanovení limitních aktivitních koeficientů etherů ve vodě⁵ byla plynová chromatografie využita pro 4 různé experimentální techniky (relativní head-space analysis, saturační metoda, Rayleighova destilační metoda a metoda rovnovážného přístroje) jako analytický nástroj k určení složení rovnovážných fází, resp. pro kvantifikaci parciálního tlaku sledované složky nad jejím zředěným roztokem.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR 604 613 7307.

LITERATURA

1. Dohnal V., v knize: *Measurement of the Thermodynamic Properties of Multiple Phases* (Weir R. D., de Loos Th. W., ed.), kap. 14. Elsevier, Amsterdam 2005.
2. Heintz A., Verevkin S. P., Ondo D.: *J. Chem. Eng. Data* 51, 434 (2006).
3. Heintz A., Verevkin S. P., Lehmann J. K., Vasiltsova T. V., Ondo D.: *J. Chem. Thermodynamics* 39, 268 (2007).
4. Dohnal V., Ondo D.: *J. Chromatogr., A* 1097, 157 (2005).
5. Ondo D., Dohnal V.: *Fluid Phase Equilib.* 262, 121 (2007).

3L-25

STANOVENÍ ZELENĚ FLUORESKUJÍCÍHO PROTEINU POMOCÍ KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZY S LASEREM INDUKOVANOU FLUORESCENČNÍ DETEKCÍ**MARKÉTA RYVOLOVÁ^a, ONŘEJ PEŠA^a, RADKA FOHLEROVÁ^b, JAN HEJÁTKO^b a JAN PREILER^a**^a Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, 637 11 Brno, ^b Ústav experimentální biologie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, 637 11 Brno
marketa.ryvolova@yahoo.com

Zeleně fluoreskující protein (GFP) je používán jako fluorescenční marker proteinové exprese. Základem použití je modifikace sledovaného proteinu pomocí GFP na úrovni DNA, což umožňuje pozorování daného proteinu v nativních podmínkách. Hlavní výhodou GFP je možnost jeho použití v živých organismech ať rostlinných nebo živočišných^{1,2}.

Mezi nejdůležitější spektrální vlastnosti GFP patří dvě excitační maxima (395 nm a 475 nm) a emisní maximum 510 nm. Běžně se pro fluorescenční analýzu GFP využívá fluorescenční mikroskopie s excitací 450–500 nm případně CE-LIF s využitím excitační vlnové délky 488 nm^{3,4}.

V této práci bylo pro analýzu GFP použito přístroje kapilární elektroforézy sestaveného na Ústavu chemie, PřF, MU, který jako excitační zdroj využívá laserovou diodu s vlnovou délkou 405 nm. Excitace touto vlnovou délkou předpokládá dosažení vyšších výtěžků fluorescence, což je přínosné především pro vzorky o velmi nízké koncentraci. Analyzovány byly vzorky proteinového extraktu získané z *Arabidopsis thaliana*, kde byla exprimována volná forma GFP. Tato metoda může být v budoucnu využita jako velmi citlivá detekční technika pro analýzu fúzních proteinů značených GFP. A to zejména v případech, kdy nelze použít běžně využívaných metod jako například gelové elektroforézy v polyakrilamidovém gelu (PAGE). Jednou z možných aplikací je sledování průběhu fosforylace histidinu v proteinech AHP, které se účastní cytokininové signální dráhy zajišťující například dělení buněk nebo tvorbu chloroplastů. Nestabilita fosforylovaného histidinu a velmi nízký obsah těchto proteinů v buňce neumožňují aplikaci klasických detekčních technik.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR LC06035 a MSM0021622415.

LITERATURA

1. Zhang L., Yang J., Niu Q., Zhao X., Ye F., Liang L., Zhang K. Q.: Appl. Microbiol. Biotechnol. 78, 983 (2008).
2. Asencio C., Rodri'guez-Aguilera J.C., Va'zquez R, Baylis H., Cabello J., Schnabel R., Gavila'n A., Navas P.: Gene Expression Patterns 6, 433 (2006).
3. Turner E. H., Lauterbach K., Pugsley H. R., Palmer V. R., Dovichi N. J. : Anal. Chem. 79, 778 (2007).
4. Zhang J. F., Ma L., Liu X., Lu Y. T.: J. Chromatogr., B 804, 413 (2004).

3L-26

PHOTOCATALYTIC REACTIONS IN A MICROWAVE FIELD USING AN ELECTRODELESS DISCHARGE LAMP**HANA ŽABOVÁ and VLADIMÍR CÍRKVA**Institute of Chemical Process Fundamentals AS CR, v.v.i., Rozvojová 135, 165 02 Prague 6
zabova@icpf.cas.cz

Microwaves are well known for their heating effects on polar substances and are widely used domestically and industrially. Recently, microwaves have been used to assist photochemical and photocatalytic reactions for degradation of organic pollutants¹. As a source of light an electrodeless discharge lamp (EDL) which generates ultraviolet radiation after placed into the microwave field is used². Titanium dioxide in anatase form is a well-known photocatalyst. The aim of the research is to prepare titanium dioxide thin films onto the surface of EDL using the sol-gel method based on hydrolysis of titanium alkoxides. The crystal phase of TiO₂ prepared was analyzed by X-ray diffraction and the observed structure phases revealed anatase as the predominant crystalline phase. From Atomic Force Microscope images, the film of TiO₂ was homogeneous with approximately uniform crystallite size. The absorption edge of TiO₂ was detected by UV-Vis spectrophotometer. Specific surface area was determined from adsorption and desorption isotherms of nitrogen at 77 K. The photocatalytic activity of samples prepared was evaluated by degradation of mono-chloroacetic acid using Hg-EDL. Spectral measurements of prepared lamps were carried out on the spectrometer with an optical fiber probe.

Time behaviour of the reaction was analyzed by a chloride ion-selective electrode. This study revealed that the reaction efficiency depends on the intensity of light and initial pH value of the solution. Moreover, the degradation of mono-chloroacetic acid was enhanced in an alkaline solution and in the presence of H₂O₂, and significantly enhanced by increasing the intensity of light. Furthermore, this study also discloses that reaction is not influenced by the number of TiO₂ thin films or by air bubbling.

Authors wish to thank to the Grant Agency of the Czech Republic (Grant No. 104/06/0992) for funding this research. HŽ also thanks the Grant Agency of the Czech Republic for funding partly her PhD studentship (Doctoral Grant No. 203/08/H032).

REFERENCES

1. Klán P., Hájek M., Církva V.: J. Photochem. Photobiol., A 140, 185 (2001).
2. Klán P., Církva V., chapter in book: *Microwaves in Organic Synthesis, Microwaves in Photochemistry*, ch. 19, p. 861. John Wiley, New York 2006.

4L-01**THE ENDOCANNABINOID SYSTEM – A PERSONAL OVERVIEW****RAPHAEL MECHOULAM**

*Faculty of Medicine, Hebrew University, Jerusalem, Israel
mechou@cc.huji.ac.il*

The mammalian body has a highly developed immune system, whose main role is to guard against protein attack and reduce the damage caused. It is unconceivable that through evolution an analogous biological protective system has not been developed against non-protein attacks. Are there mechanisms through which our body lowers the damage caused by various types of trauma and neuronal impairment? Assuming that the answer is positive, we undertook an investigation of the neuroprotective role of the endocannabinoid system. It was found that 2-AG levels in mice brain are enhanced on trauma, which is a biochemical, neuroprotective response by the brain, as 2-AG on administration after trauma reduces the trauma damage, inhibits NFκB release and pro-inflammatory cytokine formation. The blood brain barrier damage incurred after trauma is lowered by 2-AG. CB1 cannabinoid receptor knock-out mice are not protected by 2-AG, indicating that 2-AG acts through this receptor. Thus the endocannabinoid system is indeed a apparently a general neuroprotective pathway in mammalian species^{1,2}.

The endocannabinoid system is also involved in a large number of additional processes both in the central nervous system and the periphery. I shall give examples from normal processes, such as sleep, suckling, bone formation, vasodilation and conditioning, as well as its action in pathological conditions – inflammation, diabetes and heart ischemia³.

REFERENCES

1. Panikashvili D., Simeonidou C., Ben-Shabat S., Hanus L., Breuer A., Mechoulam R., Shohami E.: *Nature* 413, 527 (2001).
2. Mechoulam R., Shohami E.: *Mol. Neurobiol.* 36, 68 (2007).
3. Mechoulam R., Peters M., Murillo-Rodriguez E., Hanus L. O.: *Chem. Biodivers.* 4, 1678 (2007).

4L-02**PŘÍRODNÍ LÁTKY VE VÝROBNÍM PROGRAMU TEVY OPAVA****LADISLAV CVAK**

*IVAX Pharmaceuticals, 747 70 Opava
ladislav_cvak@ivax-cz.com*

Galena Opava byla tradičním výrobcem léčiv založených na látkách izolovaných z přírodního materiálu a toto své zaměření firma neztratila ani po tom, co se stala v roce 1994 součástí firmy IVAX a nedávno, v roce 2006, součástí firmy TEVA. Ostatně už slovo *teva*, znamenající v hebrejštině příroda, k přírodním látkám směřuje.

Galena v minulosti vyráběla celou řadu extraktů léčivých rostlin, ale světově známou se stala výrobou aktivních substancí, zejména pak námelových alkaloidů. V současné době jsme největší světový výrobce námelových alkaloidů a to jak přírodních, tak semisyntetických. Vedle námelových alkaloidů vyrábíme cyclosporin, kyselinu mykofenolovou, paclitaxel a připravujeme výrobu tacrolimu. A o všech těchto přírodních látkách, jejich chemii, technologii jejich výroby a také trochu o jejich uplatnění na trhu bude moje přednáška.

4L-03**SOUČASNÁ ROLE A BUDOUCNOST ALKALOIDŮ V MEDICÍNĚ****EVA TÁBORSKÁ**

*Biochemický ústav Lékařské fakulty MU, Kamenice 5, 625 00 Brno
taborska@med.muni.cz*

Přes neustálý rozvoj syntetické chemie jsou přírodní látky významným zdrojem bioaktivních molekul pro farmaceutický průmysl. Podle současných údajů tvoří čistě přírodní látky kolem 6 % léků v moderní terapii, přičtou-li se však léky, které jsou buď syntetizovány na základě přírodního modelu nebo získány semisyntézou z přírodního zdroje, podíl se zvýší na 40 %. Např. mezi látkami nově zavedenými v letech 1981–2002 v oblasti protinádorové terapie patří 60 % mezi látky pocházející z přírodních zdrojů, v oblasti antimikrobiální terapie je to až 75 % (cit.^{1,2}). Mezi přírodními látkami hrají významnou roli rostlinné alkaloidy, které mezi již poznanými látkami s farmakologickou nebo biologickou účinností tvoří téměř 50 % (cit.³).

K alkaloidům se vedle tradičně terapeuticky užívaných látek jako morfin, papaverin, kodein, chinin, atropin ad., řadí také v nedávné době zavedené protinádorové léky vinblastin, vinkristin, kamptotecin, paclitaxel, etoposid a několik dalších léků odvozených z jejich struktur. V posledních pěti letech byl zaveden do terapeutické praxe alkaloid galanthamin, selektivní inhibitor acetylcholinesterasy, který se používá při terapii Alzheimerovy choroby. Další alkaloid huperzin A, který je rovněž inhibitorem acetylcholinesterasy, je ve fázi II klinického zkoušení. Ibogain, alkaloid rostlinného původu, v současné době není dosud oficiálně užívaným lékem, je však považován za perspektivní látku využitelnou v léčbě drogových závislostí. Lék s názvem tiotropium je strukturální modifikací alkaloidu atropinu a byl zaveden nedávno do klinické praxe při léčbě chronické obstrukční plicní nemoci. Ve fázi III klinického zkoušení jsou další látky, jejichž struktura byla odvozena od alkaloidů již užívaných v klinické praxi morfin-6-glukuronid, vinflunin, exatecan a cephalotoxinový alkaloid homoharingtonin. Do klinické praxe je od roku 2004 zaveden apomorfín hydrochlorid, který je derivátem morfinu^{4,5}.

Alkaloidy neslouží pouze jako léky nebo templáty pro jejich syntézu, avšak v mnoha případech vedou k odhalení a lepšímu porozumění biochemických pochodů při nemoci. Příkladem je použití alkaloidu makarpinu jako fluorescenční sondy při průtokové cytometrii, které ve spolupráci s našim pracovištěm nedávno popsala Slaninová⁶. Je potenciálně vyu-

žitelné diagnosticky např. při multiparametrické analýze periferní krve nebo kostní dřevě, kdy na základě značení buněk makarpinem lze odlišit jaderné buňky od bezjaderných. Tuto vlastnost lze využít pro rozlišení erytrocytů, retikulocytů a leukocytů a to bez detekce exprese povrchových znaků ve vzorku nesrážlivé krve. Širší možnost tohoto využití je však zatím limitována malou dostupností alkaloidu.

V roce 1950 bylo známo 1000 přírodních alkaloidů, v roce 1973 již 3300 a v roce 2000 bylo dle databáze Napralert popsáno pouze z rostlinných zdrojů již 21 120 alkaloidů. Biologické účinky však byly testovány pouze u nepatrného počtu z nich – 2291 bylo testováno jednoduchými testy, 167 bylo testováno ve více než 20 bioesejích. Z testovaných alkaloidů 30 % vykázalo farmakologickou účinnost³. Další výzkum alkaloidů je tedy potenciálem pro získání nových farmakologicky významných struktur. Alkaloidy se často nachází v rostlinách jako minoritní složky, k jejich strukturní charakterizaci pomocí moderních analytických metod stačí desítky miligramů. Pro kompletní testování biologických účinků jsou však potřebná značná množství látek. Tradiční izolační postupy jsou zdlouhavé a vzhledem k nejistým výsledkům a malé publikační hodnotě nepatří k atraktivní oblasti výzkumu. Rovněž biologické eseje jsou velmi nákladné. Dochází tedy ke značnému zpoždění mezi objevením alkaloidu a komplexním popisem biologických účinků. Typicky galantamin a kamtotecin byly izolovány před mnoha lety, rozpoznání jejich biologických účinků a vývoj do fáze léčiva byl dlouhý proces. Přesto je však zřejmé, že alkaloidy jsou v současnosti i do budoucna podstatným materiálem pro farmaceutický průmysl jako individuální látky, jako zdroje pro semisyntetické deriváty i jako farmakofory v řadě syntetických léčiv.

LITERATURA

1. Newman D. J., Cragg G. M., Snader K. M.: *J. Nat. Prod.* 63, 215 (2000).
2. Newman D. J., Cragg G. M.: *J. Nat. Prod.* 70, 461 (2007).
3. Cordell G. A., Quinn Beattie M. L., Farnsworth N. R.: *Phytother-Res.* 15, 183 (2001).
4. Butler M. S.: *J. Nat. Prod.* 67, 2141 (2004).
5. Balunas M. J., Kinghorn A. D.: *Life Science* 78, 431 (2005).
6. Slaninová I., Slanina J., Táborská E.: *Cytometry, Part A* 71A, 707 (2007).

4L-04

FYTOESTROGENY: TYPY STRUKTUR A JEJICH TAXONOMICKÝ VÝSKYT

OLDŘICH LAPČÍK

Ústav chemie přírodních látek, Fakulta potravinářské a biochemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
Oldrich.Lapcik@vscht.cz

O možnosti výskytu estrogenně aktivních látek v rostlinách uvažovali poprvé v roce 1946 australští veterináři v souvislosti s tzv. jetelovou nemocí, komplexem poruch plodnosti postihujících ovce pasené na jeteli podzemním

(*Trifolium subterraneum*). V následujících letech bylo identifikováno několik takových látek a jejich přítomnost byla potvrzena v desítkách rostlinných druhů. Termín fytoestrogen (phyto-oestrogen), původně pracovní označení hypotetické aktivní substance, se ujal a udržel do současnosti.

Problematika fytoestrogenů byla zpočátku studována veterinární medicínou, zejména v souvislosti s poruchami fertility u domácích zvířat a jejich ekonomickými dopady. Humánní medicína se fytoestrogeny soustavně zabývá od osmdesátých let dvacátého století a spojuje s nimi naopak převážně kladná očekávání. Ta byla vyvolána výsledky studií ukazujících nižší výskyt některých chorob, jejichž etiologie souvisí s estrogény, v populacích konzumujících relativně vysoká množství isoflavonů. Epidemiologická data byla v průběhu let doplněna řadou laboratorních i klinických studií, které ovšem ne vždy docházejí ke zcela souhlasným závěrům.

Fytoestrogeny jsou různorodá skupina látek jak z pohledu struktury, tak z hlediska taxonomického výskytu. Společnými charakteristikami jsou přítomnost benzenového jádra (většinou dvou), relativní tuhost a plochost molekuly, dvě nebo tři hydroxylové skupiny, jejichž vzdálenost je blízká vzdálenosti mezi C3 a C17 hydroxyly v 17- β -estradiolu. U slabých fytoestrogenů může být místo jednoho hydroxyly přítomna jiná skupina s parciálním nábojem. Praktický význam včetně komerčního mají zejména isoflavony, které se hojně nacházejí v bobovitých rostlinách (čeleď *Fabaceae*). Dále jsou to prenylované flavanony z chmele (*Humulus lupulus*, čeleď *Cannabaceae*), některé lignany a stilbeny. Dosud nebyla uspokojivě identifikována aktivní substance severoamerické léčivky *Cimicifuga racemosa* (syn. *Actaea racemosa*, čeleď *Ranunculaceae*), která se dočkala zvýšené pozornosti v první dekádě jedenadvacátého století.

Estrogenní aktivita založená na různých typech fenolických látek byla pozorována u řady dalších taxonů. Jako příklady lze uvést ethoxymethylfenol z pomerančovky *Maclura pomifera* (*Moraceae*), estery kyseliny 4-hydroxybenzoové s terpenoidními alkoholy z rostlin rodu *Ferula* (*Umbelliferae*), antrachinony z křídlatky kopinaté (*Polygonum cuspidatum*, *Polygonaceae*), alkaloidy rostlin rodu *Tabernaemontana* (*Apocynaceae*) či ellagitanniny z granátového jablka (*Punica granatum*, *Punicaceae*).

Tato práce vznikla za podpory grantů MŠM 6046137305 a GA ČR 303/08/0958.

4L-05

NOVÉ BIOLOGICKÉ AKTIVITY SILYMARINU A JEHO OBSAHOVÝCH SLOŽEK

JITKA VOSTÁLOVÁ

Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc
j.pstova@email.cz

Silymarin (SM) je extrakt ze semen ostropestřce mariánského (*Silybum marianum* (L.) Gaertn.). Jeho polyfenolová frakce obsahuje flavonolignany silybin A, silybin B, isosilybin A, isosilybin B, dehydrosilybin, silydianin, silychristin,

isosilychristin a flavonoid taxifolin. Vedle těchto látek je v SM stále chemicky neidentifikovaná polymerní frakce. Silymarin je v humánním lékařství znám jako rostlinné hepatoprotektivum, má výrazný antioxidační a protizánětlivý účinek¹. Z flavonolignanů SM je silybin používán jako léčivo u intoxikací muchomůrkou zelenou.

V současné době narůstá počet a snižuje se věk nemocných rakovinou kůže. Jedním z vysvětlení tohoto nežádoucího vývoje je zvýšená expozice na slunci. Ultrafialová složka slunečního záření způsobuje v kůži oxidační stres, poškození makromolekul, indukce zánětlivé procesy, imunosupresi, předčasné stárnutí či rakovinu kůže. Používání kosmetických přípravků, které obsahují různé látky schopné pohlcovat záření, odrážet paprsky, či odstraňovat vzniklé radikály je způsob, jak zmírnit nežádoucí vliv jeho ultrafialové složky. Jednou z možností ochrany jsou přípravky, které obsahují rostlinné antioxidanty. U silymarinu byla popsána jeho schopnost chránit kůži proti následkům UVB záření. My jsme studovali účinnost SM chránit kůži před UVA složkou. K tomu účelu byl použit model lidských keratinocytů. SM, silybin a dehydrosilybin prokázaly, že snižují toxický efekt UVA, čehož může být využito v účinné ochraně kůže proti oběma složkám UV záření (UVA a UVB) (cit.^{2,3}). Tento náleze je nutné ověřit *in vivo*.

SM jako součást kombinovaného doplňku stravy obsahujícího 100 mg silymarinu a 40 mg oleje ze semen *Ribes nigrum* v jedné tabletě (Dr. Theiss Silymarin forte) byl použit v dávce 420 mg SM/1,73 m²/den po dobu 6 měsíců v dvojité slepé placebem kontrolované pilotní studii u dětí trpících nespecifickými střevními záněty (Crohnovou chorobou, ulcerózní kolitidou, indeterminovanou kolitidou). Děti s touto chorobou mají kvůli zánětlivým procesům ve střevě sníženou resorpci živin a ubývají na tělesné váze. U pacientů, kteří mají toto onemocnění, byly stanoveny zvýšené hladiny ukazatelů oxidačního stresu. Podávaný doplněk stravy byl tolerován všemi účastníky po celou dobu studie. Po půlroční aplikaci přípravku nebyl prokázán žádný nežádoucí účinek na celkový zdravotní stav pacientů a neměl vliv na parametry oxidačního stresu. U skupiny, které byla podávána účinná látka, došlo ke statisticky významnému zvýšení antropometrických parametrů, tělesné hmotnosti a BMI, v porovnání s kontrolní skupinou.

V roce 2008 byla publikována antiandrogenní aktivita isosilybinu B na línii lidských nádorových buněk prostaty⁴ a chemoprotektivní účinky dehydrosilybinu⁵. V lednu 2008 jsme zahájili dvojité slepou placebem kontrolovanou pilotní studii u pacientů, kteří podstoupili radikální prostatektomii. Účastníkům studie je podáván k jejich standardní léčbě doplněk stravy obsahující 100 mg silymarinu, 25 µg selenomethioninu a 10 mg fytosterolů (Dr. Theiss Silymarin selen) v dávce 300 mg SM/den po dobu 6 měsíců. V průběhu studie je sledován zdravotní stav, parametry klinické biochemie a hematologie, oxidační kapacita a plasmatická hladina specifického antigenu prostaty (PSA). Výsledky studie jsou rovněž předmětem této přednášky.

Studium SM a jednotlivých flavonolignanů zůstává i v 3. tisíciletí výzvou pro hledání nových biologických aktivit a jejich aplikací v prevenci některých chronických onemocnění.

Tato práce vznikla za podpory grantů MSM 6198959216 a GA ČR 303/07/P314.

LITERATURA

1. Gazak R., Walterova D., Kren V.: *Curr. Med. Chem.* 14, 315 (2007).
2. Svobodova A., Zdarilova A., Maliskova J., Mikulkova H., Walterova D., Vostalova J.: *J. Dermatol. Sci.* 46, 21 (2007).
3. Svobodova A., Zdarilova A., Walterova D., Vostalova J.: *J. Dermatol. Sci.* 48, 213 (2007).
4. Deep G., Oberlies N. H., Kroll D. J., Agarwal R.: *Oncogene*, v tisku.
5. Huber A., Thongphasuk P., Erben G., Lehmann, W.-D., Tuma S., Stremmel W., Chamulitrat W.: *BBA* 1780, 837 (2008).

4L-06

METABOLICKÉ PŘEMĚNY SILYBINU

PETRA JANČOVÁ, EVA ANZENBACHEROVÁ, ZDENĚK DVORÁK, PAVEL KOSINA a VILÍM ŠIMÁNEK

*Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc
jancovapetra@seznam.cz*

Silymarin je směs nejméně 7 flavonolignanů a flavonoidu taxifolinu získaná z extraktu semen ostropestřce mariánského (*Silybum marianum* [L.] Gaertn, Asteraceae). Silymarin má chemopreventivní účinky a je aktivní složkou řady fytopřípravků a doplňků stravy¹. Farmakologicky nejvíce studovaným flavonoliganem silymarinu je silybin (v silymarinu do 60 %), který je směsí dvou stereoisomerů, A a B v poměru 1:1. V předkládané práci byly sledovány metabolické přeměny silybinu v podmínkách *in vitro* a *in vivo*.

Publikovali jsme, že silybin je *O*-demetylován enzymem I. fáze metabolismu cizorodých látek, cytochromem P450 2C8 (CYP2C8) v přítomnosti mikrosomální frakce lidského jaterního homogenátu i za účasti rekombinantního CYP2C8 (cit.²). Tento metabolit však nebyl nalezen po inkubaci silybinu s primární kulturou lidských hepatocytů ani v moči dobrovolníka.

V této studii bylo nalezeno, že nejvýznamnější metabolity při biotransformaci silybinu jsou glukuronidy. HPLC analýzou s UV detekcí bylo prokázáno, že UDP-glukuronosyltransferasy (UGT) přítomné v mikrosomální frakci lidského jaterního homogenátu metabolizovaly silybin za vzniku 7-*O*-β-D-glukuronidů a 20-*O*-β-D-glukuronidů. Stejně glukuronidy byly identifikovány také po inkubaci silybinu s primární kulturou lidských hepatocytů a za účasti rekombinantní UDP-glukuronosyltransferasy 1A1 (UGT1A1). Další experiment ukázal, že UGT přednostně reagují s jedním ze dvou diastereoizomerů silybinu.

Na rozdíl od lidské plazmy³, kde byl nalezen především 20-*O*-β-D-glukuronid, jsme ve vzorcích lidské moči identifikovali 7-*O*-β-D-glukuronid silybinu. Největší množství 7-*O*-β-D-glukuronidů bylo v moči nalezeno již do 4 hodin po požití 2 tablet doplňku stravy Silymarin forte (2 × 190 mg silymarinu).

Znalost metabolických přeměn silybinu významně přispívá k jeho použití jako chemoprotektiva snižujícího riziko

vzniku některých nádorových onemocnění.

Tato práce vznikla za podpory Vnitřního grantu Univerzity Palackého 91110181 a grantu MŠM 6198959216.

LITERATURA

1. Gažák R., Walterová D., Křen V.: *Curr. Med. Chem.* 14, 315 (2007).
2. Jančová P., Anzenbacherová E., Papoušková B., Lemr K., Lužná P., Veinlichová A., Anzenbacher P., Šimánek V.: *DMD* 35, 2035 (2007).
3. Křen V., Ulrichová J., Kosina P., Stevenson D., Sedmera P., Příkrylová V., Halada P., Šimánek V.: *DMD* 28, 1513 (2000).

4L-07

ANTIRADIKÁLOVÁ AKTIVITA FLAVONOLIGNANŮ SILYBINU A 2,3-DEHYDROSILYBINU – STUDIUM MECHANISMU A SYNTÉZA NOVÝCH DERIVÁTŮ

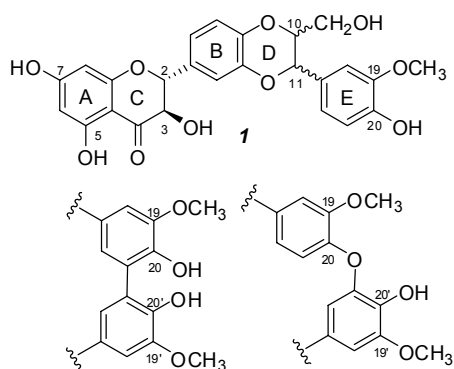
RADEK GAŽÁK, PETR SEDMERA a VLADIMÍR KŘEN

*Mikrobiologický ústav, AV ČR, Vídeňská 1083,
142 20 Praha 4
gazak@biomed.cas.cz*

Flavonolignany silybin (**1**) a 2,3-dehydrosilybin (**2**), izolované z ostropestřce mariánského (*Silybum marianum*), představují biologicky aktivní přírodní látky působící na mnoha buněčných úrovních¹. Řada těchto efektů je spojena s jejich antiradikálovou aktivitou, nicméně molekulární mechanismus antiradikálové aktivity jejich skupiny zodpovědné za tuto aktivitu nejsou dosud příliš dobře známy.

Mechanismus antiradikálové aktivity těchto látek může být odvozen ze struktur dimerních produktů, získaných pomocí radikálových reakcí selektivně methylovaných derivátů **1** a **2**. Radikálová oxidace **1** methylovaného v poloze 7-OH a **2** methylovaného na 3-OH a 7-OH poskytuje C-C a C-O dimery, jež umožňují objasnit molekulární mechanismus antiradikálové aktivity jejich kruhu E a ukazují tak důležitost polohy 20-OH.

Byla také potvrzena klíčová úloha polohy 3-OH v antiradikálové aktivitě **2** pomocí tvorby dalšího typu dimeru z jeho selektivně methylovaného derivátu.



Znalost aktivních míst obou molekul umožňuje vyvinout selektivní syntézy esterů **1** a **2** např. s kyselinou gallovou (jež je sama poměrně účinný antioxidant), aniž by došlo k zablokování aktivních pozic **1** a/nebo **2**, což představuje cestu k novým derivátům se zvýšenými antioxidačními aktivitami.

Tato práce vznikla za podpory GA AV ČR (grant č. KJB400200701) a výzkumného záměru MBÚ AV ČR, v.v.i., č. AV0Z50200510.

LITERATURA

1. Gažák R., Walterová D., Křen V.: *Curr. Med. Chem.* 14, 315 (2007).

4L-08

A QUANTUM CHEMICAL STUDY OF THE ANTIOXIDANT PROPERTIES OF NATURAL POLYPHENOLS

PATRICK TROUILLAS^a, DAVID KOSLOWSKI^a, PHILIPPE MARSAL^b, CLAUDE CALLISTE^a, RADEK GAŽÁK^c, PAVLÍNA KOŠINOVÁ^a, ALENA SVOBODOVÁ^d, JITKA VOSTÁLOVÁ^d, JAN HRBÁČE^e, PETR SEDMERA^c, DANIELA WALTEROVÁ^d, VLADIMÍR KŘEN^c, ROBERTO LAZZARONI^f, and JEAN-LUC DUROUX^a

^a *Lab. Biophysique, Université de Limoges, 2 rue du Docteur Marcland, 87025 Limoges, France,* ^b *Université de Mons-Hainaut, Mons, Belgium,* ^c *Institute of Microbiology, Academy of Sciences, Prague, Czech Republic,* ^d *Institute of Medical Chemistry and Biochemistry and,* ^e *Centre for Nanomaterial Research, Palacký University, Olomouc, Czech Republic*

Over the past decade, the chemical behavior of polyphenols (ArOH) as antioxidants has become the subject of intense experimental research. We use quantum-chemical calculations to shed light on their reactivity in solution. We particularly focus on their capacity to scavenge free radicals (R[•]) following one of those three mechanisms:

- (i) H Atom Transfer (HAT): $\text{ArOH} + \text{R}^{\bullet} \rightarrow \text{ArO}^{\bullet} + \text{RH}$
- (ii) Electron Transfer (ET): $\text{ArOH} + \text{R}^{\bullet} \rightarrow \text{ArOH}^{\bullet+} + \text{R}^{-}$
- (iii) Adduct Formation: $\text{ArOH} + \text{R}^{\bullet} \rightarrow [\text{ArOH-R}]^{\bullet}$

Our study draws up conclusions on the importance of those three mechanisms on the basis of joint experimental (i.e., scavenging of DPPH and other free radicals, and lipid peroxidation inhibition) and theoretical results obtained for a series of 21 flavonoids (i.e., flavonols, dihydroflavonols, flavones, flavanones and chalcones), 11 flavonolignans (i.e., silybin and dehydrosilybin derivatives), and other compounds including lignans and phenolic acids.

The theoretical redox properties are obtained by using DFT (Density Functional Theory) approaches and PCM (Polarizable Continuum Model) or hybrid models to show the influence of the solvent. From the theoretical (i) ionization potentials, (ii) O-H bond dissociation enthalpies (BDEs) of each OH group, (iii) electron distribution, (iv) reaction thermodynamics and (v) reaction kinetics (i.e., transition states and energy barriers), we clearly establish and confirm the

importance of the OH groups as H donors (HAT mechanism, governed by BDE). The structure-activity relationships for polyphenols is thus discussed and revisited on the basis of our theoretical highlights.

We also discuss on the secondary mechanisms (i.e., electron transfer (ET) mechanism, adduct formation with radicals) that could become more important (or predominant) as the active sites for the HAT mechanism are much less effective (high BDEs). Prooxidant effects (i.e., reactivity of ArO^\bullet and dimer formation) are also presented.

5L-01

JAK (NE)POPULARIZOVAT PŘÍRODNÍ VĚDY?

LIBOR KVÍTEK^a, LUDMILA ZAJONCOVÁ^a, JOSEF MOLNÁR^a, LUKÁŠ RICHTER^a, VÍTĚZSLAV MAIER^a, JAROSLAV ŠVRČEK^a, BOHUMIL NOVÁK^b, RENATA HOLUBOVÁ^a, MARTÍN KUBALA^a, MICHAL OTYEPKA^a, TAŤJANA NEVĚČNÁ^a, LUKÁŠ MÜLLER^a a MIROSLAV DOPITA^b

^a*Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Tř. Svobody 26, 771 48 Olomouc,* ^b*Pedagogická fakulta, Univerzita Palackého, Žižkovo nám. 5, 771 40 Olomouc*
libor.kvitek@upol.cz

Problém nezájmu mladé generace o studium přírodních věd pociťuje v posledních desetiletích celý vyspělý svět. Přitom přírodovědné obory patří mezi nejmladší generaci žáků mezi nejoblíbenější obory díky jejich přirozenému zájmu o přírodu a vysvětlení jejich „záhad“, se kterými se setkávají v každodenním životě. Ovšem s rostoucím školním věkem a narůstající specializací jednotlivých přírodovědných předmětů dochází k odklonu zájmu mladé generace o přírodní vědy. Důvodem může být převážně teoreticky vedená výuka, složitost výkladu i záplava těžko pochopitelných a samozřejmě i zapamatovatelných informací. Ze škol mizí praxe, soutěživost, hravost při výuce. Osnovy či doporučené znalosti žáků na daném stupni vzdělání stále narůstají na objemu stejně jako počty hodin strávené žáky ve školních lavicích. Na hraní si třeba na vědu, na rozvoj přirozené soutěživosti mládeže pak skutečně není čas. Výsledkem je pak již uvedený úpadek zájmu o obory představující pro žáka a později studenta pouze kvanta nezvládnutelných informací, protože nebyl čas se naučit s nimi pracovat.

Problém, jak zvrátit tento nepříznivý trend, řeší pedagogové a sociologové na celém světě stejně tak jako na Univerzitě Palackého v Olomouci. Z řady dlouholetých činností v oblasti popularizace přírodních věd mezi mládeží všech věkových kategorií vyplývají poměrně jednoznačné závěry o tom, jaké činnosti zájem o přírodní vědy podporují a naopak, jaké se z hlediska širšího dopadu míjejí svým účinkem. Typickou metodu pro zvyšování zájmu mladých lidí o jakýkoliv obor představují soutěže. Při takové činnosti mládež může uspokojit svou přirozenou touhu vyniknout a současně i získat nové vědomosti a dovednosti a s nimi i najít důležitý kladný pocit z dobře vykonané práce. Problém ovšem představuje to, jaká soutěžní forma je nejvhodnější pro zvýšení zájmu mládeže o přírodní vědy. Tady se ukazuje, že obdobně jako ve sportu, tíhne většina mladých ke kolektivní formě soutěžení. Odborné individuální soutěže typu Chemická či Fyzikální olympiáda jsou určeny pro poměrně úzkou skupinku nejlepších žáků a studentů a postrádají díky své vysoké náročnosti na odborné znalosti širší motivační charakter. Naopak kolektivní soutěžní činnosti založené na spolupráci v týmu dokáží i nevyhraněné členy kolektivu motivovat díky příkladu i vzájemné podpoře k hlubšímu zájmu i třeba o přírodní vědy. Hlavní problém takových typů soutěžních činností představuje skutečnost její vyšší náročnosti na kreativitu a čas učitele, bez jehož pomoci takový soutěžní kolektiv mladých lidí nedokáže efektivně pracovat. Bohužel spousta nevyukových činností administrativního charakteru učitele

skutečně vyčerpává a tak není vždy jednoduché na školách takovou aktivitu realizovat, zejména pokud neexistuje alespoň základní rámec činnosti pro práci soutěžního kolektivu. Důležité je zejména vhodné téma, rozpracované alespoň v části do konkrétních činností, umožňujících proniknutí do tématu a jeho následný rozvoj při vlastní kreativní činnosti žáků za součinnosti učitele. Následně pak chybí vyšší motivace pro takovou činnost – tedy možnost prezentovat výsledky práce soutěžního kolektivu v širším fóru ať již krajském či celostátním a získat tolik ceněnou publicitu na veřejnosti. O základní úrovni motivace – té ekonomické je prakticky zbytečné diskutovat, protože se nedostávají ani ty nejnětější finanční prostředky na poměrně finančně nenáročném individuální odborné soutěže.

Zkušenosti získané v oblasti propagace přírodních věd v rámci aktivit realizovaných na Univerzitě Palackého v rámci projektu STM-Morava ukazují, že zájem o soutěže a další aktivní formy zájmové činnosti mládeže v oblasti přírodních věd mezi mládeží, zejména nižšího školního věku, existuje. Ovšem bez dostatečné nabídky pestrých forem činností (a to zejména kolektivních) a bez dostatečného ekonomického a personálního zázemí pro podporu takových činností nelze rozvíjet dlouhodobě přirozený zájem té nejmladší generace o přírodní vědy a zvrátit tak nepříznivý trend nedostatku kvalitních vědeckých a vývojových pracovníků v oblasti přírodních a potažmo i technických věd.

Autoři děkují za finanční podporu projektu MŠMT NPV II č. 2E06029.

5L-02

UNIVERZITA DĚTSKÉHO VĚKU

JURAJ ŠEVČÍK, MICHAL SMOLKA a PAVEL VYSLOUŽIL

Přírodovědecká Fakulta UP v Olomouci, tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc
smolka@projektmedved.eu

Od července roku 2006 je na půdě Přírodovědecké fakulty UP v Olomouci realizován projekt MŠMT Mediální zdůraznění potřeb vědy a perspektiv studia exaktních oborů (MedVěd), jehož cílem je popularizovat a medializovat rozličné aspekty přírodních věd a vědeckého výzkumu. Jako východzí metodologický postup byl zvolen rámec skládající se ze dvou částí. První částí je vytváření prostředí, ve kterém jsou prezentovány aktivity související s přírodními vědami, které jsou atraktivní pro účastníky a přitahují pozornost různých typů medií. Druhou část tvoří vlastní pozitivní medializace aktivit, jejich účastníků a organizátorů spolupracujícími médii.

Pro školní rok 2007/08 řešitelský tým projektu MedVěd zorganizoval Univerzitu dětského věku. Tato aktivita se inspirovala Dětskou Univerzitou, kterou již několik let úspěšně pořádá Univerzita Komenského v Bratislavě. Základní myšlenkou je uvést děti do světa poznání a představit jim vzdělávací proces jako získávání informací z různých oborů a poukázat, jak se tyto formy poznání vzájemně doplňují. Cílem celé aktivity nebylo suplovat úlohu školy a děti vzdělá-

vat, ale přiblížit jim zábavnou formou různé podoby přírodních a humanitních věd jako běžnou důležitou součást každodenního života.

„Zimní semestr“ Univerzity dětského věku se konal od října do prosince v Městském divadle Olomouc. Účastníky byly děti z olomouckých základních škol ve věku 9–14 let, zaměstnanci divadla a Přírodovědecké fakulty UP. Jednotlivé přednášky, kterých bylo celkem devět, byly jednou týdně, trvaly hodinu a půl a skládaly se ze dvou částí. První část byla věnována divadlu, a to jak v návaznosti na jeho roli v životě města a regionu, tak na jeho vlastní činnost. Druhá část přednášek se týkala interaktivní prezentaci jednotlivých oborů fakulty. Většina přednášek byla koncipována jako poznávací hra, která děti vtahovala do děje a nechávala jim prostor k vlastní praktické realizaci v daném tématu. Celý koncept přírodovědných přednášek byl navíc umocněn kontrastem praktických prezentací postupů a důstojným prostředím divadla. Semestr byl zahájen imatrikulací a ukončen inaugurací a předáním diplomů. Univerzita dětského věku pokračovala „letním semestrem“, kdy děti prostřednictvím internetového rozhovoru (chatu) mohly klást přednášejícím otázky, které se týkaly témat přednášek. Z hlediska medializace byla celá aktivita velice úspěšná, neboť vytvořené popularizační prostředí bylo pro media nadměrně atraktivní. Různé fáze zimního semestru tak byly zdokumentovány všemi typy medií, tedy televizí, rozhlasem, tištěnými i elektronickými medií.

Tato aktivita byla realizována za podpory projektu MŠMT 2E06028 Mediální zdůraznění potřeb vědy a perspektiv studia exaktních oborů (MedVěd).

5L-03

KDE JE ZAKOPÁN POPULARIZAČNÍ PES

PAVEL VYSLOUŽIL, MICHAL SMOLKA a JURAJ ŠEVČÍK

*Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, třída Svobody 26, 771 46 Olomouc
vyslouzil@projektmedved.eu*

Před dvěma roky se na Přírodovědecké fakultě Univerzity Palackého v Olomouci rozběhl projekt Medvěd (zkrácený název pro projekt Mediální zdůraznění potřeb vědy a studia exaktních oborů). V době, kdy ve společnosti klesá zájem o studium exaktních oborů, projekt hledá odpovědi na otázky, proč jsou obory vědy, ve školních lavicích ztělesněné zejména fyzikou, matematikou a chemií, pro (mladé) lidi tak odtažitě, jak ovlivňují daný stav rodinné prostředí, školy, internet či média. Na několika vybraných typech popularizačních aktivit pro děti a mládež se snaží ověřit cesty, které by mohly vést ke změně stávajících trendů negace či nepochopení vědy. Autoři také zjišťují, jaký mají exaktní vědy obraz v médiích, jak a která média s problematikou vědy pracují a jaké formy prezentace vědy jsou pro ně nejpřitažlivější. Projekt se také snaží poukázat na to, jak se dívají média na vědu a jak vědci na média. Jedním z cílů projektového týmu je hledat cesty, jak časté bariéry mezi nimi odstranit či aspoň částečně rozbourat. Z dvouleté práce na tomto poli vyplývá, že popularizační pes není zakopán jen jeden a na jednom místě, ale že je jich hned

několik, a to jak přímo v chalupě, tak za humny, v sousední vesnici i v hlavním městě. Otázkou je, jakou živou vodou či jinou chemikálií je pokropit, aby se probrali životu. Na tuto otázku by měly přijít odpovědi od státního aparátu, z vysokých škol i z médií samotných.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR 2E06028.

5L-04

POSTOJE ŽÁKŮ ZÁKLADNÍCH A STŘEDNÍCH ŠKOL K PŘÍRODNÍM VĚDÁM

DANIEL TOPINKA, MICHAL SMOLKA a PAVEL VYSLOUŽIL

*Přírodovědecká Fakulta UP v Olomouci, tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc
d.topinka@volny.cz*

Příspěvek přibližuje postoje žáků základních a středních škol k přírodním vědám a zaměřuje se na identifikaci proměnných, které tyto postoje a rozumění ovlivňují. Vychází z integrovaného sociologického výzkumu, který proběhl v rámci Olomouckého kraje. Jeho první část se zaměřila na zjištění postojů žáků škol k přírodním vědám, druhá na porozumění sociální realitě žáků gymnázií, kteří se rozhodují o volbě studijního oboru na vysoké škole.

Zjišťovali jsme, co ovlivňuje postoje žáků a také rozhodovací proces, jehož výsledkem je volba studijního oboru na vysoké škole. Propojili jsme dvě výzkumné strategie: statisticko-quantitativní metodu s navazující metodou kvalitativní (ohniskové skupiny). Zjistili jsme, že žáci považují přírodní vědy za zajímavé, ale velmi náročné na zvládnutí. Jsou si vědomi vedlejších důsledků přírodních věd, převážně je však hodnotí kladně. Také zájem o studium přírodních věd není malý. Přesto všechno je povolání vědce málo atraktivní. Interpretace sociálních aktérů vědy, stereotypizace a popularizace, rozlišení tří typů věd – to vše působí v rámci rozhodovacích procesů, jejichž výsledkem je volba studijního oboru na vysoké škole. Na rozhodování ohledně volby přírodovědeckého typu studia se významnou měrou podílí podoba tzv. školní vědy.

Popularizace přírodních věd by měla směřovat k překonání propastného rozdílu mezi realitou vědce a realitou každodenního života. Škola je místem, kde má popularizace přírodovědných předmětů začínat. Školní věda by měla představovat nejenom výsledky vědy, ale i vědce v souvislostech každodenního života. Na přístupu učitele záleží, jak dokáže vědu představit a využít její zajímavosti. Popularizace vyžaduje systémovější ráz a včlenění do výuky a přípravy učitelů v rámci jejich univerzitního vzdělávání. Žáci také potřebují získat přehled o možnostech uplatnění v praxi, nejlépe prostřednictvím individuálního poradenství.

Tento výzkum byl realizován za podpory projektu MŠMT 2E06028 Mediální zdůraznění potřeb vědy a perspektiv studia exaktních oborů (MedVěd).

LITERATURA

1. Fensham P. J. *Student interest in science: The problem,*

- possible solutions, and constraints.* Boosting Science Learning – what will it take? Research Conference, 2006.
2. Research Findings on Young People's Perceptions of Technology and Science Education. Helsinki: Technology Industries of Finland, 2005.
 3. Sjøberg S.: *Science and Scientists: The SAS-study.* University of Oslo, Oslo 2000.

5L-05**MOTIVACE MLÁDEŽE KE STUDIU PŘÍRODNÍCH VĚD FORMOU SOUTĚŽÍ ŠKOLNÍCH KOLEKTIVŮ**

LUDMILA ZAJONCOVÁ^a, LIBOR KVÍTEK^b, JANA SOUKUPOVÁ^b, PETR TARKOWSKI^a, VLADIMÍR VINTER^c a VERONIKA FADRNÁ^b

^a Katedra biochemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc-Holice, ^b Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzita Palackého, tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc, ^c Katedra botaniky, Přírodovědecká fakulta, Univerzity Palackého, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc-Holice
ludmila.zajoncova@upol.cz

V posledních dvaceti letech zaznamenala většina vyspělých zemí výrazný pokles zájmu mladé generace o studium přírodních a technických věd a s tím související nezáměr o kariéru výzkumného pracovníka. Tento trend se nevyhnul ani České republice a zejména pak vysokým školám mimo hlavní město.

V našem výzkumu jsme hledali nové cesty, jak zájem mládeže o přírodní vědy zvýšit. Vytipovali jsme několik důležitých elementů, které mohou mít vliv na motivaci žáků a studentů ke studiu přírodních věd. Naš výzkum se soustředí na práci s celými školními kolektivy, protože i věda je založena na týmové práci. Důležitým prvkem při sestavování soutěže tohoto typu je volba vhodného tématu. Téma musí být voleno vzhledem k věkové kategorii a zároveň tak, aby mladá generace sama chtěla co nejvíce z této oblasti poznat. S tématem souvisí výběr vhodných experimentů, které by měly být levné a bezpečné, ale zároveň názorné a přesvědčivé. V rámci řešeného projektu byly vytvořeny takové postupy, které ukazují proces vědeckého bádání od začátku do konce. Na začátku každého výzkumu je seznamování se stavem problematiky, tedy rešerše, následuje provádění experimentů, zaznamenávání výsledků těchto pozorování a na konci jejich prezentování na veřejnosti. Žáci a studenti pracovali v přírodovědných kroužcích po většinu školního roku, v květnu pak proběhla studentská konference. Vedle oficiální části konference, kde jsou vědecky prezentovány výsledky celoroční činnosti školních kolektivů, má konference také část společenskou, která umožnila žákům a studentům vzájemnou výměnu zkušeností a také zaslouženou zábavu.

Na závěr tohoto výzkumu byly všichni zúčastnění žáci a studenti, ale také jejich spolužáci, učitelé a rodiče podrobeni anketám, které mají zjistit, zda naše činnost měla pozitivní vliv při motivování žáků a studentů pro přírodní vědy.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT č. 2E06029 NPV II.

5L-06**KOMPETITIVNÍ WORKSHOPY – NETRADIČNÍ FORMA VÝUKY CHEMIE**

JANA SKOPALOVÁ, LUKÁŠ MÜLLER, JITKA SOUČKOVÁ a PAVLÍNA BAIZOVÁ

Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc
jana.skopalova@post.cz

Na Přírodovědecké fakultě Univerzity Palackého v Olomouci byl v rámci projektu MŠMT „Výzkum nových metod soutěží tvořivosti mládeže zaměřených na motivaci pro vědeckou výzkumnou činnost v oblasti přírodních věd, obzvláště v oborech matematických, fyzikálních a chemických“ vytvořen soubor dvaceti netradičních chemických kompetitivních workshopů. Jednotlivé tvůrčí dílny nesou názvy: Malujeme jako mistři, Chemopoly, Harry Potter a chemie, Jak dělat chemickou reportáž, Kde je ztracená známka, Cykloelektrogravimetrie, Co skrývá minerálka, Barvení je hra, Vytváříme vlastní parfém, Jak fungují baterie, Akumulátor 2, Boj o stříbrný důl, Tvorba přírodovědného časopisu PřČa, Vyrábíme funkční pH-metr, Vyrábíme funkční fotometr, Materiálová chemie I a II, Model čistírny odpadních vod, Hrátky s drátky a Soutěž studentů VŠ o nejlepší workshop s environmentální problematikou.

Workshopy jsou zaměřeny na nenásilnou hravou formu výuky chemie motivovanou vlastním citovým prožitkem žáka. K naplnění výukových cílů je v nich využita přirozená zvědavost a kreativita jednotlivých žáků a také soutěžení malých skupin. Téměř všechny dílny postihují mezioborové vztahy nejen u přírodovědných oborů (chemie, fyzika, biologie a ekologie), ale také s dalšími předměty a obory (tělesná výchova, výtvarná výchova, dramatická výchova, literatura a publicistika, apod.).

Jednotlivé tvůrčí dílny byly realizovány s náhodně vybranými skupinami žáků z různých základních a středních škol z celé Moravy, a některé i s přírodovědně orientovanými středoškolskými studenty na Letní škole mladých přírodovědců v Jevíčku v letech 2006 a 2007. Z evaluace jednotlivých workshopů provedené na základě anonymních dotazníků vyplývá, že zvolené strategie výuky průkazně pozitivně ovlivňují naladění studentů k chemii i k dalším vědním oborům.

Podrobné návody k jednotlivým tvůrčím dílnám budou volně k dispozici všem zájemcům v elektronické formě na internetových stránkách analytika.upol.cz/workshop a podle zájmu mohou být distribuovány učitelům v tištěné podobě.

Tato práce vznikla za finanční podpory projektu MŠMT NPV II č. 2E06029 (STM-Morava).

5L-07

ROZVOJ KREATIVITY BUDOUCÍCH UČITELŮ CHEMIE**JAN GRÉGR, MARTIN SLAVÍK a BOŘIVOJ JODAS***Katedra chemie FP TU v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec
jan.gregr@tul.cz*

Současné požadavky na absolventy pedagogických fakult se zvyšují vzhledem k požadavku na jejich samostatnou tvořivou práci při přípravě a využití moderních informačních technologií ve vyučovacím procesu. Zavedení školních vzdělávacích programů předpokládá větší prohloubení interdisciplinárních vazeb v celém rozsahu vzdělávání. Do popředí vystupuje požadavek zvýšit zájem žáků a studentů o technické a přírodovědné předměty a aplikaci poznatků pro praxi. Na odborných konferencích se v této souvislosti hovoří o kreativitě (budoucích) pedagogů a diskutuje se, jak tyto schopnosti prohloubit. Základní a střední školy jsou v současné době vybaveny moderní didaktickou technikou včetně interaktivních tabulí, tím více je třeba klást důraz na pregraduální přípravu budoucích učitelů a jejich praktickou přípravu tyto technologie tvůrčím způsobem používat. Cesty k rozvoji tvořivosti budoucích učitelů mohou spočívat v jejich zapojování do projektové výuky i mimo základní předmětovou didaktiku, v uplatňování her a soutěží v rámci výuky, vhodném využití zajímavých laboratorních experimentů a měření veličin, v integraci poznatků z různých přírodovědných oborů do výuky chemie, v současném více-úrovňovém pojetí vysvětlování přírodovědných jevů, ve využití posterů při výuce chemie, vhodném využití počítačových prezentací, zapojení interaktivních tabulí do výuky chemie, včetně dalších moderních prvků a postupů.

Přednáška ukáže ilustrace uvedených aktivit v několika předmětech výuky budoucích učitelů chemie. Ve volitelných předmětech jsme se snažili zakončit předmět projektem, v němž studenti představili vlastní power-pointové prezentace na téma z vybraného okruhu. Na těchto minikonferencích studenti nejen získají motivaci vzájemným porovnáváním zpracovaných témat, ale jsou vybízeni k hodnocení kvality, nápaditosti a přínosu prezentací. Tímto způsobem byly zpracovány projekty např. na téma Historie očima mladých chemiků, Objevitelé prvků, Historie objevů a poznání prvků, Člověk a kámen, Vlastnosti minerálů, Mineralogický systém, Voda okolo nás, Voda a energie a Člověk a chemie. Nejlepší z prezentací jsou převedeny do pdf formátu a zveřejněny na stránkách katedry pro inspiraci a motivaci dalších studentů.

Tato práce vznikla za podpory grantu IGS FP TUL 2008.

5L-08

EVROPSKÝ PROJEKT CITIES – MODUL VÝCHOVY A VZDĚLÁVÁNÍ**HANA ČTRNÁCTOVÁ^a, HANS J. BADER^b, PAVEL DRAŠAR^c, LEO GROS^d, IWONA MACIEJOWSKA^e, RAYMOND G. WALLACE^f, EVA STRATILOVÁ^a a JIŘÍ ZAJÍČEK^g**^a Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Albertov 6, 128 43 Praha 2, ^b Fachbereich Biochemie, Chemie und Pharmazie, J. W. Goethe-Universität, Frankfurt am Main, ^c VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, ^d Europa Fachhochschule Fresenius, ^e Widzial Chemii, Uniwersytet Jagielloński, Krakow, ^f School of Biomedical & Natural Sciences, Nottingham Trent University, Nottingham, ^g MSSCh, Křemencova 12, 116 28 Praha 1
ctr@natur.cuni.cz

V současné době chápe velká část studentů středních škol nejen u nás, ale i v dalších evropských zemích, chemii jako obtížný, teoreticky náročný a málo praktický obor. To se mimo jiné projevuje menším zájmem o studium chemie na vysokých školách. V ČR si chemii volí jako maturitní předmět pouze 6 % studentů a ve studiu chemie na VŠ pokračuje pouze 3 % středoškoláků. Proto se skupina chemiků sdružená v ECTN rozhodla připravit evropský projekt v rámci programu Comenius, který by právě středoškolákům a jejich učitelům ukázal chemii jako zajímavou a živou disciplínu.

Evropský projekt CITIES – Chemistry and Industry for Teachers in European Schools (Chemie a průmysl pro učitele v evropských školách) byl zahájen na podzim r. 2006. Cílem tohoto tříletého projektu je především připravit a ověřit moduly, které by měly přispět ke zvýšení zajímavosti a atraktivnosti výuky chemie na evropských středních školách. Důraz by měl být kladen na vysvětlení moderních chemických poznatků, jejich praktických aplikací a zajímavé způsoby výuky chemie. Na projektu v současné době participuje celkem 10 institucí ze 6 evropských zemí.

Cíle a obsah projektu jsou shrnuty v pěti modulech.

Modul 1: **Rámec Evropy** se zaměřuje na obecné a základní informace o deklaracích EU v oblasti vzdělávání s důrazem na oblast chemie a chemického průmyslu.

Modul 2: **Chemie vše mění** si klade za cíl ukázat rozsah, význam a dopad chemického průmyslu v Evropě, jeho zaměstnanců a výrobků na evropskou ekonomiku, na každodenní život obyvatel, na životní prostředí a na trh práce.

Modul 3: **Obchod a inovace – naše budoucnost** ukazuje současné a budoucí vývojové trendy na poli komerčního využití chemických inovací se zvláštním zaměřením na Evropu.

Modul 4: **Chemie – jak ji oživit** je především zaměřena na výchovu a vzdělání v chemii, na moderní a prakticky orientované učivo i metody výuky chemie, které širokému spektru žáků s různými schopnostmi a zájmy ukážou chemii jako poutavou disciplínu.

Modul 5: **Evropa – odborné vzdělávací aréna** se zaměřuje na různé přístupy k odbornému a terciárnímu vzdělávání v chemii v Evropě se speciálním důrazem na praxi studentů a studentskou mobilitu, které zohledňují otázku uplatnění absolventů v globální ekonomice.

V rámci chemického vzdělávání je hlavní pozornost zaměřena na modul 4, který gestorigují kolegové z Univerzity ve Frankfurtu n. Mohanem a na jehož řešení se autoři podílejí.

Hlavní aktivity tohoto modulu se soustřeďují na zajímavé a prakticky orientované učivo chemie a moderní metody výuky. Jako základní oblasti byly stanoveny potravinová chemie, forenzní chemie a chemie každodenního života.

Každá oblast je nejprve nahlížena pohledem běžného občana, zjišťujeme, kde se s ní může setkat. Pak se hledá vhodný objekt a následně experimenty k tomuto objektu.

V každej oblasti jsou jednotlivé experimenty propojeny s teorií tak, aby byl vytvořen smysluplný celek. Pak nastává ověřování v praxi. U nás probíhalo ověřování modelových experimentů oblasti chemie každodenního života, které reflektovaly aktuální otázky spojené s chemií (např. recyklace odpadů, znečištění životního prostředí, alternativní pohonné hmoty) nebo s experimenty, které seznamují studenty se vznikem běžných produktů, jejichž spojitost s chemií si sami často neuvědomují (např. syntetické pryskyřice, umělá vlákna, různé druhy obalů).

Ověřování se účastnilo 30 vyučujících chemie ze středních škol, jejich věkový průměr byl 42 let, délka praxe od 1 roku do 30 let. Účast v kurzu byla nejčastěji motivována snahou získat nové podněty pro vlastní výuku. Všechny výstupy a výpovědi učitelů o realizaci experimentů a celého kurzu je hodnotily jako nadprůměrné. Za nejhodnotnější bylo považováno získání cenných podnětů pro výuku, dostatečný počet a kvalitní práce lektorů, výborné vybavení laboratoře a příjemná pracovní atmosféra v průběhu celého kurzu.

Z komunikace s učiteli a následného dotazníkového šetření bylo zřejmé, že zúčastnění učitelé si uvědomují velkou motivační funkci experimentů spojených s běžně používanými produkty a že nabídnuté náměty budou využívat ve své další výukové praxi. Rozvoj těchto kompetencí učitelů tak přispívá v nadnárodním a mezinárodním měřítku k rozvoji zájmu studentů o chemii a ke zvýšení jejich chemické vzdělanosti.

LITERATURA

1. Bader H. J., Lühken A.: NiU-Chemie 10, 50, 33 (83) (1999).
2. Baur V., Melle I., Bader H. J.: CHEMKON, Weinheim 2000.
3. Böhmová H.: Nové přístupy k aplikované chemii ve vzdělávání. *Alternativní metody výuky*. Praha 2007.
4. Čtrnáctová H., Čížková V.: Experimental Teaching in Preparation of Science Subject Teachers. *XIth IOSTE World Symposium Proceedings*. M. Curie-Skłodowska University Press, Lublin 2006.
5. Čtrnáctová H., Čížková V.: Activation Methods in Education of Chemistry Students at Tertiary Level. *Proceedings of the 2nd European Variety in Chemistry Education*. Charles University, Prague 2007.
6. Landsgesell B., Bader H. J.: MNU 57/5, 285–289 (2004).
7. Šulcová R., Böhmová H.: *Netradiční experimenty z organické a praktické chemie*. PČF UK, Praha 2007.
8. Wallace R., Drašar P.: Chem. Listy 101, 341 (2007).

5L-09

CHÉMIA BEŽNÉHO ŽIVOTA A JEJ ÚLOHA V PRÍPRAVE BUDÚCICH ABSOLVENTOV ŠTUDIJNÉHO PROGRAMU CHÉMIA V ŠPECIALIZÁCI CHÉMIA ŽIVOTNÉHO PROSTREDIA

MELÁNIA FESZTEROVÁ

*Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita Konštantína Filozofa, Tr.A.Hlinku 1, 949 74 Nitra, Slovensko
mfeszterova@ukf.sk*

Jednotlivé prírodovedné predmety, medzi ktoré patrí aj chémia, sú orientované na racionálne zdôvodnenie príslušnej odbornej teórie a praxe v zmysle profesijného zamerania. Obsah učiva je zároveň dynamizujúcim činiteľom vo vzťahu učiteľa k žiakovi¹. Túto funkciu v samotnom edukačnom procese chémie zvyrazňuje ešte aj tá skutočnosť, že jej učebný obsah priamo determinuje voľbu adekvátnych vyučovacích foriem, metód a použitie učebných prostriedkov.

Chémia bežného života oboznamuje študentov so zložitými technologickými, biochemickými, chemickými a chemickotechnologickými postupmi a procesmi, bez ktorých si nevieme predstaviť dnešný život. Poukazuje aj na stav prírodného prostredia, v ktorom sa tieto zmeny negatívne odrážajú². Vyzbrojuje ich systematickými vedomosťami, spája teoretické tézy s praktickými ukázkami zmenených vlastností jednotlivých zložiek životného prostredia.

V príspevku poukazujeme na didakticky účelné využívanie vhodných učebných prostriedkov, ktoré sú nositeľmi základných informácií pre komplexné uplatňovanie medzipredmetových vzťahov v Chémii bežného života.

Príspevok vznikol s podporou grantov CGA VI/2/2007 a CGA V/5/2007.

LITERATÚRA

1. Kašiarová S.: *Environmentálna chémia*. s. 174. FSEV, Trenčín 2007.
2. Prousek J.: *Rizikové vlastnosti látok*, s. 74. Vydavateľstvo STU, Bratislava 2001.

5L-10

IMPLEMENTÁCIA ENVIRONMENTÁLNEHO ZDRAVIA PROSTREDNÍCTVOM VYUČOVACIEHO PREDMETU CHÉMIA

SLAVOMÍRA KAŠIAROVÁ

*FSEV, Univerzita Alexandra Dubčeka, Študentská 2, 911 50
Trenčín, SR
kasiarovas@azet.sk*

Na neobľúbenosti chémie u žiakov základných a stredných škôl sa podieľajú informácie o chemických látkach v prostredí, obsah učiva a nízka vzdelanosť¹. Na základe realizácie projektu II. etapy Akčného plánu MŠ SR bolo potrebné analyzovať problematiku environmentálneho zdravia (EZ)² v SR, stav poznatkov o EZ, možnosti včlenenia do edukačného procesu, s ťažiskom na projektové vyučovanie doporučené MŠ SR, posúdiť možnosti využitia všeobecno-vzdelávacieho predmetu – chémia v riešenej problematike. Z uvedených výsledkov vyplývajú veľké možnosti spolupráce učiteľa chémie s učiteľmi a žiakmi, zvýšenie motivácie žiakov a významná zmena postojov. Pre vyučovací predmet chémia za-traktívnenie tohto predmetu a možnosť implementácie EZ. Takmer na každej vyučovacej hodine, v rámci každej kapitoly je možné včleniť nové poznatky (čiastkové) z EZ. Je potrebné rozšíriť a upevniť poznatky o chemických látkach v ovzduší, vo vode, pôde, z dopravy, v potravinovej chémii.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/3276/06.

LITERATÚRA

1. Feszterová M., Baráth O.: Postavenie aplikovanej chémie prostredia v príprave učiteľov environmentálnej ekológie In: Environmentálna výchova a vzdelávanie na školách v SRO: zborník referátov a posterov zo 4. národnej konferencie FPV UKF. s. 113–114. Prírodovedec č. 166, Nitra 2005.
2. Yassi A., Kjellström T., de Kok T., Guidotti T.: *Basic Environmental Health*. p. 429, University of Manitoba 1997.

5L-11

HISTORICKÉ A SÚČASNÉ PERSPEKTÍVY VPLYVU RIZIKOVÝCH FAKTOROV NA ENVIRONMENTÁLNE ZDRAVIE

Abstrakt prednášky k Akčnému plánu SR

SLAVOMÍRA KAŠIAROVÁ

FSEV, Univerzita Alexandra Dubčeka, Študentská 2, 911 50 Trenčín, Slovensko
kasiarovas@azet.sk

Ľudské zdravie závisí od sociálnych schopností zorganizovať vzájomné pôsobenie medzi ľudskou činnosťou a fyzikálnymi, chemickými a biologickými zložkami životného prostredia¹.

Faktory podmieňujúce chorobnosť populácie sa vyvíjali od doby ľadovej po súčasnosť, čomu zodpovedajú aj ochorenia. Vplyv chemických látok na zdravie sa prejavil v každom historickom období inak, avšak najväčší vplyv (pozitívny aj negatívny) sa začína od 18. storočia. Táto skutočnosť súvisí s rozvojom vedy, techniky, so životným štýlom, vzdelaním, bezpečným miestom na bývanie, s dostatkom nezávadnej vody a potravy, kultúrou, rôznymi skupinami obyvateľstva². Prienik chemických látok do organizmu sa líši v čase, priestore, čo sa prejaví aj v odlišnom ochorení v meste a na vidieku³. V rámci TUR a na základe odporúčaní WHO je potrebné vzdelávanie širokej verejnosti za účelom zníženia rizika ochorenia, čo predstavuje prvotnú prevenciu.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/3276/06.

LITERATÚRA

1. Feszterová M., Baráth O.: Interdisciplinárne aspekty aplikovanej chémie. In: *XXIV mezinárodní kolokvium o řízení osvojovacího procesu. UO FEM, Brno, 2006*, CD
2. Yassi A., Kjellström T., de Kok T., Guidotti T.: *Basic Environmental Health*, s. 429. University of Manitoba, 1997.
3. Vilinová K.: Zdravotný stav obyvateľstva Slovenska na príklade chorôb dýchacej sústavy. 2007. In: *Geografické informácie 11: problémy geografického výskumu Česka a Slovenska*, s. 231–238. UKF, Nitra 2007.

5L-12

IDENTIFIKÁCIA CHEMICKÝCH FAKTOROV V ENVIRONMENTÁLNO M ZDRAVÍ OBYVATEĽOV MIKROREGIÓNU

HUBERT HILBERT

FSEV, Univerzita Alexandra Dubčeka, Študentská 2, 911 50 Trenčín, SR
hilbert@slovanet.sk

Zdravie je inštinktívny spôsob života, ku ktorému sa musíme priblížiť v rámci TUR. K tomu sú potrebné určité prvky v požadovanej kvalite – voda, vzduch, potrava – doplnené odpočinkom, čistotou, prostredím, vzťahmi, pohodou a vzdelaním, ktoré usmerňuje vedomosti, výchovu, postoje^{1,2}. Konkrétne rizikové faktory, ktoré negatívne vplyvajú na zdravie obyvateľov v jednotlivých mikroregiónoch nie je možné nájsť v literatúre (len čiastkové výsledky). Bola vytvorená metóda identifikácie rizikových faktorov prírodného, pracovného, obytného prostredia, životného štýlu, sociálno-ekonomických podmienok a následná korelácia rizikových faktorov – pravdepodobnosť ochorenia.

Vytvorený model bol overený v niekoľkých obciach mikroregiónu a výsledky boli použité vo výchovno-vzdelávacom procese v chémii³.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/3276/06.

LITERATÚRA

1. Feszterová M.: Vybrané znečisťujúce látky v ovzduší Nitry a Šale. In: *Ochrana ovzdušia 2007, Kongres management, s.r.o., Bratislava, 2007*, s. 125–128.
2. Kramáreková H., Dubcová A., Czaková G., Vilinová K.: Perception of regional development by population of the town Nitra. In: *Zborník abstraktov zo XIV. konferencie – Geografické aspekty stredoeurópskeho priestoru. Nitra 2006*, s. 36. FPV UKF, Nitra 2006.
3. Kašiarová S.: *Aspekt environmentálneho zdravia v základných školách*, s. 101. FPV UMB, Banská Bystrica 2006.

5L-13

POČÍTAČ A MULTIMÉDIÁ VO VÝUČBE CHÉMIE – SÚČASNOSŤ A PERSPEKTÍVY

MÁRIA GANAJOVÁ^a a MARCELA VLADIMÍROVÁ^b

^a Oddelenie didaktiky chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovensko, ^b Gymnázium Exnárova 10, 040 22 Košice, Slovensko
maria.ganajova@upjs.sk

Už vyše 20 rokov sa diskutuje o zaradení počítača do výučby chémie. Od tohto nového média sa očakávalo veľmi veľa. Nie všetky z týchto očakávaní sa však splnili. Neustále prichádzajú nové technické vylepšenia, ktoré poskytujú nové možnosti pre zaradenie počítača do výučby. Najdôležitejšou z nich bolo v poslednom období zavedenie Internetu.

Príspevok je prehľadom o vývoji učenia a vzdelávania

z aspektu zaradenia počítača a multimédií do vyučovania chémie. Zahŕňa stránku nielen klasickej školskej výučby, ale aj ďalšieho vzdelávania. Snahou je spoznať zmysel zaradenia počítača do výučby chémie a tým predpokladať budúci vývoj zaradenia týchto zaujímavých technológií do učenia sa chémie.

Medzi prvé oblasti, do ktorých sa počítač etabloval, bolo meranie hodnôt. K tomu sa pridružili simulácie a chemické výučbové programy. Empirické výskumy však poukazujú na to, že software, ktorý nie je špecificky štruktúrovaný pre školské učenie, môže byť len veľmi ťažko zaradený do vyučovania. Taktiež, že učenie sa s animovanou obrázkovou informáciou sa stáva najefektívnejším, keď sa textové informácie sprístupňujú paralelne s priebehom animácie. Najúčinnjšia je pri sprostredkovaní informácií najprv ukážka animácie v závere s hovorenou informáciou, ku ktorej je vizuálne pripojený text. Uvedeným požiadavkám však u nás vyhovuje málo chemických výučbových programov.

Nezastupiteľné miesto vo výučbe chémie majú editory štruktúr chemických zlúčenín či programy na kreslenie chemických aparátov apod. ako sú *ChemWindow*, *GlassyChemistry*, *ChemSketch*, *Isis-Draw*, *C-Design*, *ChemOffice*.

Snáď najširšiu oblasť využitia vo výučbe chémie nachádza Internet, ktorý poskytuje veľmi dobrú platformu pre multimediálne zobrazenie obsahu výučby chémie. Umožňuje pripraviť individuálne učebné časti pre rôzne študijné skupiny. S nástupom Internetu sa u nás i v zahraničí vytvárali tzv. vzdelávacie servery pre výučbu chémie. Ako sa však konštatuje v zahraničných literárnych zdrojoch, veľmi málo sprístupnených informácií je štruktúrovaných s ohľadom na aktuálne kurikulum. Autori sprístupnených učebných materiálov na stránkach www by sa mali pri ich vytváraní viac pridŕžať výchovno-vzdelávacích cieľov. Medzi najnovšie aplikácie využitia Internetu vo výučbe chémie patrí e-learning, dištančné vzdelávanie, tvorba virtuálnych laboratórií, využitie IKT v projektovom vyučovaní, teleprojekty apod.

Pri otázke počítačovo podporovaného experimentovania prebieha diskusia aj o úlohe virtuálnych experimentov vo vyučovaní prírodovedných predmetov. Tu sa ukázalo, že učitelia sa lepšie porozumejú jednotlivým chemickým dejom a problémom s nimi súvisiacim, keď pred reálnym experimentom vidia jeho virtuálnu simuláciu.

Skúsenosti s realizáciou dištančného vzdelávania „Ďalšie vzdelávanie učiteľov chémie s využitím dištančnej vzdelávacej technológie“ poukazujú na to, že táto forma vzdelávania má hlavne pre ďalšie vzdelávanie učiteľov chémie veľkú budúcnosť. Ťažisko však spočíva vo virtuálnych prednáškach a seminároch, pretože laboratórne cvičenia sú touto formou nerealizovateľné. Uvedené skúsenosti aplikujeme v novom projekte KEGA 3/6301/08 Vzdelávanie učiteľov chémie a prírodovedných predmetov k vybraným témam trvalo udržateľného rozvoja formou blended learning.

Táto práca vznikla za podpory grantu KEGA č. 3/6301/08 MŠ SR.

LITERATÚRA

1. Brestenská B., Nagy T., Ganajová M.: *Vyučovanie a učenie sa chémie v modernej škole s podporou informačných a komunikačných technológií*. UIPŠ, Bratislava 2002.

2. Slivková M., Ganajová M.: *Informatika v škole* 23, 18 (2002).

5L-14 ON-LINE MOLEKULÁRNÍ VIZUALIZACE VE VÝUCE CHEMIE

MARTIN SLAVÍK a JAN GRÉGR

*Katedra chemie, Technická univerzita v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec
martin.slavik@tul.cz*

Vizualizace představuje: použití počítačem podporované, interaktivní obrazové reprezentace dat rozvíjející poznání¹, analogicky se molekulární vizualizace zabývá reprezentací chemických struktur. Chemické struktury je možné znázornit² pomocí: papíru; fyzických modelů a počítačové vizualizace.

Nevýhody² počítačové vizualizace minimalizuje použití Java appletů³ ve spojení s: WWW stránkami nebo lépe e-learningovým systémem. Vhodná je kombinace volně dostupného vizualizačního appletu „Jmol“⁴ a e-learningového systému „Moodle“⁵.

„Jmol“ je vizualizační nástroj, umožňující: interaktivní manipulaci se strukturou pomocí: 1) ovládacích prvků na webové stránce, 2) myši; 3) menu; 4) příkazů vložených do konzole. Další výhodami jsou: rozhraní v češtině; podpora velkého množství vstupních formátů, včetně „Chemistry Markup Language – CML“; podpora měření; vlastní programovací jazyk; zobrazovací modely; barevná schémata; znázornění vodíkových i disulfidických můstků, molekulových povrchů s projekcí; vibračních módů molekul, dipólových momentů, orbitalů, krystalových mřížek, výběr části struktury pomocí žolíkového zápisu; popisky; tvorba interaktivních animací s doprovodným textem a minimální velikostí; podpora 3D zobrazení s použitím barevných brýlí⁴.

„Moodle“ podporuje použití „Jmolu“ ve formě: studijního materiálu (snadno modifikovatelné zobrazení jedné struktury) a filtru (automatické zobrazení souboru s chemickou strukturou vloženého do jakékoli aktivity – test, přednáška, slovník, křížovka...). Tato rozšíření lze stáhnout z webu Moodle⁵ jako „Jmol filter“ a „Jmol resource type“.

Ale nejen to, „JME molecule design question“⁵ dovoluje testovat správnost struktury vytvořené studentem. Ve spojení s applety pro zpracování experimentálních dat, manipulaci se spektry a simulaci je tak možné získat komplexní prostředí pro on-line výuku chemie.

LITERATURA

1. Card S., Mackinlay J., Shneiderman B. (ed.): *Readings in Information Visualization – Using Vision to Think*, Morgan Kaufmann, Elsevier. (2005) ISBN 1558605339.
2. Valle M.: *Advanced Visualization for Chemistry Course* [on-line]. <http://www.cscs.ch/~mvalle/ChemViz/course/>, staženo 15.04.2008.
3. Bohne-Lang A., Lang E.: *Java Applets for Displaying 3D Molecule Structures*. [on-line]. <http://www.bohne-lang.de/spec/bohne/javamol/>, staženo 15.04.2008.
4. *Jmol 11.4*. [Java applet pro vizualizaci chemických struktur]. Dostupné na Internetu: <http://jmol.sf.net/>.

5. Moodle. [e-learningový systém]. Dostupné na Internetu: <http://moodle.org>.

5L-15 VYUŽITÍ PROGRAMOVANÉHO UČENÍ VE VÝUCE ELEKTROCHEMIE

JITKA SOUČKOVÁ^a, LUKÁŠ MÜLLER^a, JANA SKOPALOVÁ^a, PETR BARTÁK^a, MICHAELA PRÁŠILOVÁ^b a OTTO OBST^b

^a Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého, tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc, ^b Pedagogická fakulta Univerzity Palackého, Žižkovo nám. 5, 771 40 Olomouc
jitka.souckova@centrum.cz

Z důvodu modernizace a inovace výuky na Přírodovědecké fakultě UP v Olomouci byla vytvořena webová aplikace, která by měla pomoci pedagogům na základních, středních i vysokých školách. Vyučujícím se dostává do rukou nástroj, pomocí něhož mohou tvořit a zadávat studentům po internetu domácí úkoly, zkoušky, různé typy soutěží a evaluačních šetření a zároveň kontrolovat a usměrňovat průběh jejich studia. Funkčnost tohoto nově vytvořeného programu byla prověřena na pilotní verzi vědomostní soutěže s názvem "12×12" určené pro studenty UP oboru chemie¹, která probíhala od září do prosince roku 2007 a následně Soutěží o Cenu firmy TEVA uskutečněné v březnu roku 2008.

Příspěvek se věnuje využití popsaného webového programu k přípravě programovaných učebnic využitelných ve výuce elektrochemie na katedře analytické chemie. Tato kurikulární podpora využívá všech zásad programovaného učení², které vedou k aktivizaci studentů, k zintenzivnění jejich práce a zefektivnění vyučovacího procesu. Učebnice s učebními texty zaměřenými na teoretické základy vybraných elektroanalytických metod (např. chronopotenciometrie, voltametrie) je vhodným vyučovacím prostředkem při samostudiu, ale také při přípravě na laboratorní cvičení v rámci elektrochemie. Studentům by měla sloužit k ověření jejich dosavadních znalostí a k okamžitému doplnění případných neznalostí v dané oblasti.

V připravené prezentaci budou prezentovány ukázky z vybraných elektrochemických metod vytvořené učebnice, podrobněji prodiskutovány výhody a nevýhody použité kurikulární podpory a její přínos k rozvoji výuky na Přírodovědecké fakultě UP.

Autoři děkují grantu MŠMT NVP II č. 2E08021 a č. 2E06029 za finanční podporu. Poděkování patří také P. Hasilovi a M. Fešarovi za vytvoření prostředí výukového programu a M. Vrbasovi za tvorbu grafiky k tomuto programu.

LITERATURA

- Müller L., Maier V., Fryšová I., Skopalová J., Soukupová J., Součková J., Barták P., Prášilová M.: *II. ročník mezinárodní konference Nové metody propagace přírodních věd mezi mládeží aneb věda je zábava, Olomouc, 15. – 16. listopadu 2007*, Sborník příspěvků (bez editora), str. 112 (Poster č. 19).
- Nováková M.: *Programované učení z hlediska didaktiky*. SPN, Praha 1969.

5L-16 VYUŽITÍ UNIVERZÁLNÍHO SIMULAČNÍHO PROGRAMU COMSOL MULTIPHYSICS VE VÝUCE NAVRHOVÁNÍ CHEMICKÝCH APARÁTŮ A TECHNOLOGIÍ

ROMAN KODÝM a KAREL BOUZEK

*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze (VŠCHT Praha), Ústav anorganické technologie (ÚAT), Technická 5, 166 28, Praha 6
roman.kodym@vscht.cz*

S rozvojem možností výpočetní techniky se zvyšuje i význam a využití matematického modelování při návrhu a optimalizaci průmyslových zařízení. Využití matematického modelování přináší významné úspory nákladů a rovněž umožňuje sledovat lokální jevy, které jsou jen stěží postihnutele experimentálně. Lze jej s výhodou využít rovněž ve výuce jako názornou pomůcku při studiu chemických procesů a jednotlivých fyzikálně-chemických dějů na základě změn parametrů systému. Nezbytná znalost základních metod numerické matematiky a časová náročnost konstrukce matematických modelů běžnými programovacími prostředky (MATLAB, FORTRAN) jsou příčinou toho, že se výuka matematického modelování doposud omezovala pouze na úzce zaměřené předměty. V současné době však již existují specializované simulační programy založené na moderních víceúčelových metodách numerické matematiky. Tyto programy nabízejí uživatelsky příjemné prostředí a proceduru navrhování modelu zjednodušují pouze na nezbytné operace. Značně se tak redukuje rutinní časově náročné psaní základního kódu a studenti se mohou soustředit na podstatu studovaného problému. Práce v tomto prostředí však rovněž vyžaduje detailní pochopení modelového systému a jeho matematického popisu.

Za přispění Fondu rozvoje vysokých škol MŠMT ČR byl zakoupen na ÚAT VŠCHT Praha simulační program COMSOL MultiphysicsTM (CM)^{1,2} a výuka práce s tímto programem byla implementována do osnov předmětů magisterských studijních oborů "Elektrochemické inženýrství" a "Membránové procesy". Přednost CM oproti jiným komerčně dostupným programům spočívá v jeho univerzálnosti umožňující simulaci procesů širokého spektra technických oborů. CM byl vybrán rovněž z důvodu výhodné licenční politiky dodavatele činící tento software cenově dostupným. V rámci tohoto příspěvku autoři nastíní způsob implementace CM do výuky zmíněných předmětů a první zkušenosti získané v průběhu prvního roku výuky.

Tato práce vznikla za podpory MŠMT ČR v rámci Fondu rozvoje vysokých škol, grant č.: 1282.

LITERATURA

- COMSOL Multiphysics, www.comsol.com.
- William B. J. Zimmermann: *Process Modelling and Simulation with Finite Element Methods*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. (2004).

5L-17**MĚŘENÍ FYZIKÁLNÍCH VELIČIN VE ŠKOLNÍ CHEMICKÉ LABORATOŘI****PETR KOLOROS***Gymnázium Pierra de Coubertina, 390 01 Tábor
koloros@gymta.cz*

Chemická instrumentace ve školní chemické laboratoři na úrovni základních a středních škol byla do nedávné doby jen zbožným přáním mnoha vyučujících. Jediným funkčním přístrojem byly dvouramenné laboratorní váhy. I když se okolo devadesátých let nechaly získat i relativně dobré mechanické předvážky nebo i poloautomatické analytické váhy, acidimetry, případně spektrofotometr Spekol, byly to většinou pro školu špatně využitelné přístroje. Důvodem byla náročná příprava, obsluha i téměř neexistující servis. Většinou nebyly k dispozici ani návody na použití a údržbu. Další překážkou byly rozměry přístrojů a jejich hmotnost. Byl to tedy pro školu “Danajský dar“, a to i když byly různými organizacemi nabízeny zdarma.

V posledních několika letech se zlevněním elektroniky situace rychle změnila. Různé typy elektronických předvážek vhodných pro školu s váživostí 200–300 g a citlivostí 0,1 g lze koupit asi za dva tisíce korun. Za trojnásobek ceny je možné pořídit druhé desetinné místo, tedy citlivost 0,01 g. Podobným vývojem prošly nyní už digitální teploměry, které se cenově pohybují okolo 500 Kč. Kvůli ceně pohybující se v relaci desetitisíců Kč však stále ještě nejsou přístupné fotometry, které, z hlediska nenáročných metod, by byly pro školy obzvláště vhodné.

Výsledek: pro školní využití má být přístroj malý, kompaktní, přenosný s robustním ovládním s menšími nároky na přesnost a v cenové relaci okolo tisíce Kč, aby bylo možno koupit více kusů.

Příkladem je využití kapesního pHmetru HANNA HI 8424 a tužkových konduktometrů DIST 5 a DIST 6 při hodnocení vod např. povrchových vod. Je to měření pH, vodivosti [mS cm^{-1}] a [$\mu\text{S cm}^{-1}$] a množství rozpuštěných látek [ppt] a [ppm]. Další využití je jako milivoltmetr při elektrochemických experimentech.

Jako standard slouží dostupné údaje o kvalitě zkoumané vody z ověřených zdrojů.

LITERATURA

1. Katalog laboratorní techniky, Fisher Scientific 2007-2008.

6L-01 ALTERNATIVNÍ SUROVINY PRO CHEMICKÝ PRŮMYSL A VÝROBU PALIV

JAROMÍR LEADERER^a a GUSTAV ŠEBOR^b

^a Výzkumný ústav anorganické chemie, a. s., Revoluční 1521/84, 400 01 Ústí nad Labem, ^b Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, jaromir.lederer@vuanch.cz, gustav.sebor@vscht.cz

V současné době se po celém světě diskutuje o stavu zásob surovin pro výrobu pohonných hmot a elektrické energie a tvorbě skleníkových plynů vznikajících při jejich výrobě, resp. použití. Poněkud stranou zůstává problematika dostupnosti a skladby surovin pro výrobu základních petrochemikálií. Dosavadní základní zdroj, ropa, má obdivuhodnou roli – prozatím totiž zabezpečuje fungující rovnováhu mezi výrobou a spotřebou tří základních materiálních potřeb lidstva, energií, pohonných hmot a výrobků organické technologie. Pokud tedy mluvíme o výhledovém nedostatku ropy, musíme nutně hledat jiné zdroje, které ropu nahradí. V této souvislosti je všeobecně přijímán názor, že novým univerzálním surovinovým zdrojem, který bude postupně nahrazovat ubývající zásoby ropy a krýt rostoucí spotřebu uvedených komodit, bude syntézní plyn a z něj vyráběná syntetická ropa a petrochemikálie. Samotný syntézní plyn - směs vodíku a oxidu uhelnatého - je důležitou surovinou již více než jedno století. Reformování zemního plynu parou a kyslíkem je dnes základní výrobou syntézního plynu. Pro tuto základní technologii byla vyvinuta celá řada variant. Ty zahrnují parní reforming methanu (SMR), autotermální reforming (ATR), kombinovaný reforming (CR), tepelný reforming atd. Obdobně jsou k dispozici moderní procesy zplyňování pevných uhlíkatých surovin, především uhlí. Obě cesty jsou důležité, neboť ve světě jsou oblasti s velkými zásobami zemního plynu a/ nebo uhlí.

Dalším aspektem je celosvětový požadavek na výrobu čistých energií a syntetických paliv, jejichž používání povede ke snížení nežádoucích emisí. Pracuje se na koncepci XTP. Tato koncepce rozvíjí a rozšiřuje známé technologie GTL (Gas to Liquids), resp. CTL (Coal to Liquids), ke kterým se nově řadí i technologie BTL (Biomass to Liquids), jejímuž vývoji je ve světě věnována významná pozornost. Budoucnost se tak pojí s historickou technologií Fischer-Tropschovy (FT) syntézy. Tato technologie má zásadní potenciál při výrobě motorových paliv a petrochemikálií, a to jak z fosilních uhlíkatých surovin, tak z obnovitelné biomasy.

V případě chemického průmyslu se předpokládá, že jeho základem bude nadále současná sortimentní skladba produktů založená na olefinové chemii, tedy transformaci ethylenu a propylenu a základních aromátů.

Mezi perspektivní zdroje uhlíkové chemie patří vedle zemního plynu a uhlí i tzv. bitumenové písky a v delší perspektivě i kerogenní horniny. Vzhledem k velkým zásobám bitumenových písků a kerogenu¹, je jednou z cest výroba syntetické ropy z těchto surovin. Logikou tohoto postupu je postupná náhrada klasické ropy těmito zdroji. Způsob zpracování na paliva a petrochemikálie předpokládá využití současných rafinérských technologií.

Z technologií výroby syntézního plynu se uplatňuje pře-

devším parní reformování, u kterého byla ovšem realizována různá zdokonalení týkající se lepší výměny tepla v reformovacím reaktoru s využitím tepla vyráběného syntézního plynu. Tyto systémy nejen zlepšují ekonomiku výroby syntézního plynu, ale současně také významně snižují exhalace oxidů dusíku do atmosféry².

Transformace synplynu na vyšší uhlovodíky se děje především Fischerovou Tropschovou syntézou (FTS) nebo přes methanol. Tradiční FTS využívá syntézní plyn získaný z uhlí. Výroba synplynu se ovšem ve světě realizuje klasicky přes parní reforming nebo parciální oxidaci, a to především ze zemního plynu resp. z ropných frakcí, především pak ropných zbytků. V případě biomasy, analogicky k uhlí, musí být syntézní plyn dosti složitě zbavován nečistot a jeho složení upravováno. Následný krok - FT syntéza - může v principu probíhat na dvou teplotních hladinách: vysokoteplotní (300-350 °C), probíhající v systému plyn-pevná látka a vedoucí zejména k tvorbě alkenů a nízkoteplotní (200-250 °C)³. Následné zpracování primárních FT produktů není nutné, pokud se použijí jako nástřik do klasické pyrolýzy. Jen vysokovroucí podíly se pak musí upravit, a to běžnými postupy. Palivářské aplikace vyžadují procesy pod tlakem vodíku (krakování a izomerizace).

Speciální otázkou je výroba synplynu z biomasy. Této problematice se věnuje celosvětově mimořádná pozornost. Biomasa lze konvertovat na chemikálie buď fermentačními či termochemickými postupy nebo zplyňováním. Zatímco fermentační postupy jsou zjevně pro makrotechnologie málo intenzivní, zplyňování biomasy, jakkoli je dnes zatím ještě technologicky i ekonomicky problematické, je zřejmě surovinovým zdrojem budoucnosti. Jednou z mnohých variant je koncepce propojení nízkoteplotní pyrolýzy biomasy a následného zplyňování získané tzv. „biosuspenze“ (bioslurry gasification)⁴ na syntézní plyn resp. vodík.

LITERATURA

1. Blažek J., Rábl V.: *Základy zpracování a využití ropy, Skripta VŠCHT, VŠCHT, Praha 2006.*
2. Vosloo A.: *Fuel Process. Technol. 71, 149 (2001).*
3. Steynberg A. P., Dry M. E.: *Fischer-Tropsch Technology*, Elsevier B. V., The Netherlands 2004.
4. Dinjus E., Dahmen N., Henrich E.: *DGMK/SCI-Conference „Synthesis Gas Chemistry“, October 4-6, Dresden 2006. Germany 2006.*

6L-02 VÝROBA A UŽITÍ POLYMERNÍCH MATERIÁLŮ

VRATISLAV DUCHÁČEK

Ústav polymerů Vysoké školy chemicko-technologické v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
Vratislav.Duchacek@vscht.cz

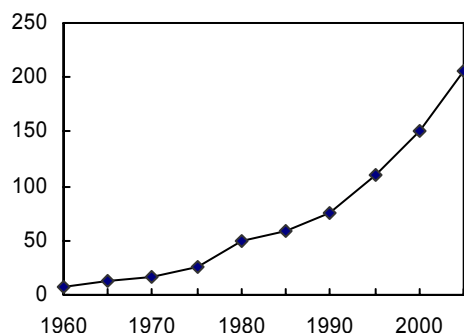
Ve druhé polovině 20. století se polymerní materiály staly hlavním prostředkem usnadňujícím technický pokrok. Co si pod tímto termínem představit? Materiály skládající se z polymerů a přísad.

Polymery můžeme klasifikovat podle jejich původu na přírodní a syntetické, podle jejich vlastností a použití na elas-

tomery, termoplasty a reaktoplasty a také podle jejich chemického složení především na polyolefiny (homopolymery a kopolymery ethenu, propenu a butenu), polyhalogenolefiny (zejména homopolymery a kopolymery vinylchloridu, fluoroplasty a fluoroelastomery), polydiény (homopolymery a kopolymery isoprenu, butadienu a chloroprenu), styrenové plasty, polymery kyselin akrylové, methakrylové a jejich derivátů, polyesterů, polyamidů, polyurethanů, polyetherů, polyacetalů, polyimidů, polyimidazolů, polysulfidů, polysulfonů, fenoplastů, aminoplastů, polyepoxidů (epoxidové pryskyřice) a polysiloxany (silikonové oleje, tmely, kaučuky a pryskyřice).

K přísadám patří zpracovatelské (plastikační, dispergační, homogenizační a vazebná činidla, maziva, pomocné zpracovatelské prostředky a tepelné stabilizátory), antidegradanty (světelné stabilizátory, antioxidanty a antiozonanty), síťovací prostředky (síťovací činidla, aktivátory a urychlovače síťování), přísady významně ovlivňující fyzikální vlastnosti výrobků (plniva, vyztužovačla, změkčovačla, nadouvačla a opticky zjasňující činidla) a přísady zvláštní (prostředky antistatické, adhezní, snižující hořlavost a brusné, svým způsobem dokonce i výbušnin a paliva).

Pojednat proto o výrobě a použití polymerních materiálů, jak znělo pozvání k této přednášce, není vůbec jednoduché. Napsat výstižný abstrakt v omezeném rozsahu téměř nemožné.



Obr. 1. Světová roční spotřeba polymerů (Mt) v letech 1960 až 2006

Sledujeme-li rozvoj polymerů ve 21. století, můžeme pozorovat kontinuální vývoj v oblasti dobré použitelnosti výrobků a změny způsobené globalizací reprezentovanou specializací a dělbou práce, výstavbou moderních výrobních podniků světového měřítká, které dosahují vynikající struktury nákladů a nahrazují starší kapacity, a restrukturalizaci spojenou se zaměřením na standardní (komoditní, základní) polymerní materiály, jejichž spotřeba vzrůstá nadprůměrně, a ponechává tak jen malý prostor pro drahé, speciální polymery. Obr. 1 ukazuje časový vývoj světové spotřeby polymerů v letech 1960 až 2006, tab. I jejich skladbu¹⁻⁵.

Z ní je zřejmé, že téměř 70 % spotřeby polymerů připadá na pouhé 3 z nich - polyetylen, polypropylen a polyvinylchlorid, i když v prvních dvou případech bychom měli

Tabulka I

Relativní světová spotřeba polymerů (z absolutní spotřeby 205 Mt v roce 2006)

Polymer	Spotřeba [%]
Polyetylen	32
Polypropylen	20
Polyvinylchlorid	16,5
Styrenové plasty	12,0
Polyurethany	5,5
Polyethylentereftalát	5,0
Butadien-styrenový kaučuk	3,6
Přírodní kaučuk	3,1
Polykarbonáty	1,25
Polyamidy	1,25

mluvit spíše o polyethylenech a polypropylenech, neboť pod těmito termíny se v praxi skrývají nejenom různě vyráběné homopolymery, ale dokonce i kopolymery olefinů. Z různorodosti jejich výroby a zpracování se odvíjejí jejich různé vlastnosti a nejrůznější oblasti aplikací. Od spotřebního zboží přes konstrukční prvky až po speciální použití, např. ve zdravotnictví. Proto je jejich spotřeba nejen největší, ale dokonce neustále roste. Proto také jim bude v přednášce věnována hlavní pozornost.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru MŠMT ČR MSM 62808.

LITERATURA

1. Ramlow G.: *Plastics in the Next Century*. Proceedings of the Round-table Discussion of the ad hoc Group of Experts on the Chemical Industry, pp. 37-62. United Nations, New York and Geneva 1999.
2. Orth P.: *Account at the K 2004 Press Conference, Prague 2004*.
3. Reifenhäuser U.: *Plastics and rubber have changed the world*. Trade Fair News 18/10/2007.
4. <http://www.ibiblio.org/lunarbin/worldpop>, staženo 12.11.2007.
5. <http://www.infoplease.com/ipa/A0762181.html>, staženo 12.11.2007.

6L-03

NOVŠIE A ZJEDNODUŠENÉ PROCESY PRE CHEMICKÝ PRIEMYSEL

VENDELÍN MACHO^a, MILAN OLŠOVSKÝ^a
a LADISLAV KOMORA^b

^a *Fakulta priemyselných technológií TnUAD, Ivana Krasku 491/30, 020 01 Púchov*, ^b *VÚP, a. s., Nábrežná 4, 971 04 Prievidza, SR*
macho@fpt.tnuni.sk

Cenné sú procesy oxidácie aromatických i heterocyklických metylderivátov na odpovedajúce karboxylové

kyseliny, ako dimetylbenzénov molekuloým kyslíkom na dikarboxylové aromatické kyseliny alebo metylpyridínov na pyridínkarboxylové kyseliny za miernych podmienok, za katalytického účinku *N*-hydroxyftalimidu s kobaltnatými soľami, ale aj nitrácie alkánov a cykloalkánov na odpovedajúce nitrózozlúčeniny. Potom vinylácie alkanolov na vinylalylétery acetylénom za katalytického účinku superbáz (napr. ROK/DMSO). Potom vysokoselektívne kabonylové redukcie nitro- a nitrózoaromátov oxidom uhoľnatým a vodou na odpovedajúce aminoszlúčeniny, ako aj ich reduktívne karbonylácie na *N*-alkylarylkarbamáty, *N*-alkylaryltiokarbamáty, Schiffove bázy, vrátane cenných antiozonantov a to nielen na klasických katalyzátoroch na báze vzácnych kovov, ale aj síry, resp. karbonylsulfidu a zlúčenin vanádu.

Príprava kopolymérov vinylchloridu s alkénmi iniciovaná súčasne radikálovým iniciátorom a koordinačnými zlúčeninami, umožňujúca pripraviť kopolyméry s viac než 20 hm.% zakopolymerizovaných alkénov. Potom využitie magnezitu, dolomitu, dolomitického vápenca na vysokoselektívnu prípravu a technologicky jednoduchú prípravu čistého MgO, CaO, CaCO₃ a to aj s využitím odpadového Ca(OH)₂ z výroby acetylénu z karbidu vápenatého a ďalších nízkozhodnocovaných surovín až odpadov.

LITERATÚRA

1. Macho V., Cingelová J., Brescher R., Štubňa M., Olšovský M.: CHEMagazín 17, 6 (2007).
2. Macho V., Kavala M., Jureček E., Štubňa M., Olšovský M.: CHEMagazín 18, 6 (2008).
3. Jan J. B., Nefedov B. S.: *Sintezy na osnove oksidov ugleroda*. Chimija, Moskva 1987 a tam citované práce.
4. Macho V., Králik M.: Ropa, uhlie, plyn a petrochémiá 41, 25 (2001).
5. Macho V., Kavala M., Olšovský M.: *Možnosti využitia oxidu uhoľnatého technickej kvality pre karbonylačné redukcie a reduktívne karbonylácie organických nitro- a nitrózozlúčenín*. APROCHEM 2007. Milovy, 16.–18. 4. 2007.
6. Macho V., Grolmus P., Olšovský M.: *Potenciálne využiteľné procesy a materiály pre chemický priemysel*. APROCHEM 2008. Milovy, 14.–16. 4. 2008.
7. Macho V., Kavala M., Olšovský M.: *Nové procesy a materiály pre chemický priemysel*. 59. Zjazd českých a slovenských chemických spoločností. Tatranské Matliare, 2.–6. 9. 2007.

6L-04

ODSTRAŇOVÁNÍ OXIDŮ DUSÍKU ABSORPČNÍMI METODAMI

LUKÁŠ HORA^a a VLASTIMIL FÍLA^b

^a Výzkumný ústav anorganické chemie, a. s., Revoluční 84, 400 01 Ústí nad Labem, ^b Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha lukas.hora@vuanch.cz

Oxidy dusíku (NO_x) jsou jednou ze složek, které se významně podílí na znečišťování životního prostředí. Hlavním zdrojem NO_x jsou především spalovací procesy, které tvoří

cca 90 % celkových emisí. Největší podíl připadá na dopravu, zbytek tvoří spalování paliv pro výrobu elektrické energie a tepla. Chemické výroby jsou zastoupeny v celkové emisí NO_x velmi malou měrou, avšak často se jedná o zdroje s proměnlivou a především o několik řádů vyšší koncentrací NO_x než u zdrojů ostatních.

Jedním z cílů námi řešeného projektu je snižování zbytkových emisí NO_x vznikajících při výrobě dusitanu amonného ve Spolaně a. s. Neratovice, v dílně výrobně provozu Kaprolaktam.

Prvním testovaným způsobem odstraňování NO_x je absorpce do roztoků siřičitanu a hydrogensířičitanu amonného. Produkty absorpce jsou dusík a síran amonný. Absorpce probíhá ve válcové výplňové koloně. Důležitým faktorem ovlivňujícím absorpci je především poměr NO₂/NO_x, který je závislý mimo jiné na obsahu kyslíku v plynu. Čím více NO₂ plyn obsahuje, tím se zvyšuje účinnost absorpce. Vyšší obsah kyslíku pozitivně ovlivňuje obsah NO₂ oxidací NO, na druhé straně způsobuje rychlejší úbytek absorpčního činidla oxidací siřičitanu.

Druhou možností snížení emisí NO_x je optimalizace vlastní výroby dusitanu amonného. Zde se jedná především o modifikaci procesu dooxidace nitróznych plynů a vhodnou úpravu poměru NO₂/NO_x na vstupech do jednotlivých absorpčních kolon. Nežádoucí reakcí je v tomto případě koprodukcce dusičnanu amonného, snižující výtěžek dusitanu amonného. Optimalizace výroby dusitanu je řešena pomocí matematického modelování s následným ověřováním výsledků na laboratorní modelové aparatuře.

V rámci projektu byla navržena a postavena laboratorní modelová aparatura pro testování absorpce NO_x v širokém rozsahu parametrů. Aparatura umožňuje připravovat plyn o různé koncentraci NO_x, kyslíku i poměru NO₂/NO_x. Poměr NO/NO₂ je nastavován dobou zdržení směsi NO se vzduchem v oxidátorech. Libovolně lze nastavovat intenzitu zkrápení výplně kolony absorpčním roztokem a díky termostatu s chlazením testovat absorpci NO_x i při (pro absorpci vhodnějších) nižších teplotách.

Tento projekt je řešen s finanční podporou Ministerstva průmyslu a obchodu České republiky, evidenční číslo projektu je FT-TA3/075. Autoři za finanční podporu děkují.

6L-05

VLIV PŘÍSADY DIMETHYLKARBONÁTU NA KVALITU MOTOROVÝCH PALIV

JURAJ KIZLINK

Fakulta chemická VUT, Purkyňova 118., 612 00 Brno kizlink@fch.vutbr.cz

Dimethylkarbonát (DMC) je důležitou látkou používanou pro různé účely. DMC /616-38-6/ lze připravit reakcí oxidu uhličitého s methanolem¹, ale průmyslově se zatím vyrábí oxidační karbonylací methanolu^{2,3}. DMC má t.t. –3 °C, t.v. 90 °C a s methanolem tvoří azeotrop (70 % DMC a 30 % MeOH). DMC je málo toxický, LD₅₀ (oral) min. 9.000 mg kg⁻¹ (potkan), (dermal) min. 6.000 mg kg⁻¹ (králik) a přepravuje se podle ADR/RID pod UN kódem 1161 ve třídě 3. V posled-

ní době je DMC využíván také jako přísada do motorových paliv⁴⁻⁷ pro zlepšení hoření a tím i lepší kvalitu spalin hlavně pro vznětové (diesel) motory^{7,8}, ale také proti „klepání“ zážehových (otto) motorů^{9,10} včetně zlepšení jejich kvality zvýšením hodnoty OČ, potlačuje cyklizaci uhlovodíků vedoucí ke tvorbě polycyklických struktur¹¹ a také se zlepšuje lepší a rovnoměrnější hoření směsi¹². Problematika výroby DMC z CO₂ a methanolu je nyní ve stadiu řešení¹³⁻²⁰.

LITERATURA

1. Yamazaki N., Nakahama S.: Ing. Eng. Chem. Res. Dev. 18, 249 (1979).
2. Romano U., Tesi R., Mauri M. M., Rebori P.: Ing. Eng. Chem. Res. Dev. 19, 396 (1980).
3. Pacheco M. A., Marshall C. L.: Energy Fuels 11, 2 (1997).
4. Akagawa H., Miyamoto T., Harada A.: Soc. Automot. Eng. SP 1999, 1444.
5. Perera S. D., Shaw B. L., Thornton-Pett M.: J. Chem. Soc., Dalton Trans. 1992, 1469.
6. Ogawa H., Nabi M. N., Minami M., Miyamoto N.: Soc. Automot. Eng. SP 2000, 1549.
7. Miyamoto N., Ogawa H., Obata K., Cao G. H.: JSAE Review 19, 154 (1998).
8. Yoshimura M., Yoshi T., Shimizu K.: JP (12) 336, 379 (2000), CA 134, 19 226 (2001).
9. Fang Y., Xiao W., Lu W.: Xiandai Huagong 18, 20 (1998), CA 129, 318 417 (1998).
10. Komiya K.: JP (13) 19,979 (2001), CA 134, 118 215 (2001).
11. Kitagawa H., Murayama T., Tosaka S.: Soc. Automot. Eng. SP 2001, 1632.
12. Zhang G., Huang Z.: Ranshao Kexue Yu Jishu 8, 385 (2002), CA 138, 371 362 (2003).
13. Huang Z., Jiang D.: Ranshao Kexue Yu Jishu 9, 453 (2003), CA 141, 91 515 (2004).
14. Cheung C.S.: 4-th Asia-Pacific Conf., 289, Nanjing (RC) 2003, CA 142, 300 536 (2005).
15. Zhao X., Ren M., Liu Z.: Fuel 84, 2380 (2005), CA 144, 194 869 (2006).
16. Song C., Guo Z.: Ranshao Kexue Yu Jishu 10, 295 (2004), CA 142, 282 479 (2005).
17. Dong S., Song C.: Ranshao Kexue Yu Jishu 11, 350 (2005), CA 144, 375 269 (2005-6).
18. Song C., Dong S.: Ranshao Kexue Yu Jishu 11, 303 (2005), CA 144, 375 267 (2005-6).
19. Lugo L., Comunas M. J. P., Lopez E. R., Garcia J.: Can. J. Chem. 81, 840 (2003).
20. Kizlink J.: CHEMagazín 18, v tisku.

6L-06

NOVÁ METODA CHEMICKÉ RECYKLACE PET LAHVÍ

VÁCLAV VESELÝ^a, JIŘÍ HANIKA^a a BOHUMÍR ČECH^b

^a Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Rozvojová 135, 165 02 Praha 6, ^b Katedra energetiky, VŠB-TU, 17. listopadu 15, Ostrava-Poruba
vesely@icpf.cas.cz

PET láhve se třídí a následně se drtí na flakes. Tato drť obsahuje kromě PET i PE, PVC, papír, lepidla, zbytky nápojů a minerální nečistoty. Samotný PET bývá polymerem glykolu s kyselinou tereftalovou a isoftalovou.

Navrhovaná metoda spočívá v krystalizaci PET flejků při teplotě 255 °C. Přitom se volatelní látky odpaří a PVC se rozloží. Vzniklý krystalický PET se drtí na malé částice a pak se podrobí basické hydrolyze při atmosférickém tlaku. Do hydrolyzy se přidává vedle roztoku louhu i glykol. Varem se odstraní voda a vznikne suspenze sodné soli kyseliny tereftalové a glykolu. Suspenze se dělí odstředěním a filtrovaný glykol se vakuově destiluje. Destilační produkt je čistý glykol.

Krystaly se rozpustí ve vodě a roztok se filtruje. Tím se zbaví PE a pených nečistot. Z roztoku se elektrodialýzou oddělí čistá sůl kyseliny tereftalové. Roztok glykolu se vrací do hydrolyzy. Kyseliny tereftalové se sráží minerální kyselinou. Následně se promývá a suší. Filtrát se elektrodialýzou dělí na louh a kyselinu. Louh se vrací do hydrolyzy a kyselina se používá k srážení.

Produktem je kyselina tereftalová a glykol v kvalitě „polymer grade“. Odpadem jsou část promývacích vod, destilační zbytek po regeneraci glykolu a filtrační koláč po filtraci roztoku tereftalátu.

6L-07

ECO-POLYMER MATERIALS FROM PP, POLY(LACTIC ACID) AND BAMBOO FIBRES

ELEONÓRA BENČÍKOVÁ^a, MARTIN JAMBRICH^a, JARMILA BALOGOVÁ^b, RUDOLF RAVAS^c, and JANKA VNENČÁKOVÁ^d

^a Faculty of Industrial Technologies, University of Alexander Dubček in Trenčín, T. Vansovej 1054/45, 020 01 Púchov,

^b Chemosvit-Fibrochem, a.s., Štúrová 101, 059 21 Svit,

^c Faculty of Electrical Engineering and Information Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Ilkovičová 3, 812 19 Bratislava, ^d Research Institute of Chemical Fibres, a.s., Štúrová 2, 059 21 Svit, Slovak Republic
bencikova@fpt.tnuni.sk

Eco-polymer materials represents an important product in the application of fibres destined for clothing, indoor and technical textiles production. Different kinds of clothing are used in direct or indirect contact with human skin. These types of textiles require appropriate utility properties, mainly suitable heat and moisture physiological properties. The blending of synthetic and natural fibres occurs with aim to prefer properties of specific fibres in the blend and at the same time to take advantage of more effective synergetic impact of fibres in the blend.

The contribution deals with the preparation, structure and properties of fibrous materials based on special types of chemical and natural fibres, especially polypropylene, bamboo and cotton fibres. Clothing and habitation are one of the basic social and personal human needs as they offer protection against the caprices of nature (weather) and serve also as a manifestation of personal preferences in terms of type and style of clothes. Clothes, which represent a physiological-like system, should provide good thermal physiological and skin-

sensorial comfort while worn.

REFERENCES

1. Jambrich M., Budzák D., Kochan J., v: *Prednáška na 59. ZCH, ChemZi 1/3 2007 V. Tatry*, s. 256. Bratislava 2007.
2. Balogová J., Vnenčáková J., Jambrich M., Hajduchova E., Pavlíková E., v: *Prednáška na 59. ZCH, ChemZi 1/3 2007 V. Tatry*, s. 256. Bratislava 2007.
3. Murárová A., Jambrich M., Balogová J.: *Vlákna a textil 11*, 3 (2004).
4. Lunt J., Shafer A.: *J. Ind. Textiles* 29, 191 (2000).
5. Ray A., Mondal S., Das S., Ramachandrarao P.: *J. Mater. Sci.* 40, 5249 (2005).

6L-08

VULKANIZAČNÉ ČINIDLO NA BÁZE KOPOLYMÉRNEJ SÍRY PRE NENASÝTENÉ KAUČUKY

MILAN OLŠOVSKÝ^a, ĽUDOVÍT JUREČEK^b, PETER GÁSEK^c a VENDELÍN MACHO^a

^a *Fakulta priemyselných technológií TnUAD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov*, ^b *VÚP, a. s. Nabrežná 4, 971 04 Prievidza*, ^c *Continental Matador Rubber, s. r. o., T. Vansovej 1054/45, 020 32 Púchov, SR*
 olsovsky@fpt.tnuni.sk

V nadväznosti na prezentované výsledky¹⁻⁶ autori informujú o možnostiach prípravy kopolymérnej až multikomponentnej kopolymérnej síry, pripravenej adíciou až polyadíciou cyklooktamérnej síry na nízkomolekulový polybutadién (Krasol LB) so zmesou prevažne nenasýtených karboxylových kyselín z repkového oleja, tiež oligomérov styrénu ako aj organických kyselín (stearovej, olejovej) a tiež pri substitúcii polybutadiénu zmesou dimérov pyrolýznej C₅ frakcie. Najvhodnejší obsah organického podielu v kopolymérnej síre je 10 až 30 hm.% a teplota kopolymerizácie 125 až 150 °C, najvhodnejšia okolo 130 °C. Porovnávajú sa vulkanizačné a spracovateľské charakteristiky gumárenských zmesí (v bočnicových a pätkových zmesiach) a fyzikálno-mechanické vlastnosti vulkanizátov, pripravených s uvedenými kopolymérmí síry, ako aj s komerčnou polymérom sírou (Síra N). Pri porovnateľnom obsahu síry vulkanizát dosahuje rovnako dobré a v niektorých parametroch (pevnosť, pevnosť po starnutí a modul 300) ešte lepšie fyzikálno-mechanické parametre, ako s uvedenou polymérom sírou.

Táto práca vznikla za podpory grantu AV 4/2012/2008.

LITERATÚRA

1. Macho V., Olšovský M., Špirk E., Michálek J., Karvaš A., Klabník M., Cibik B., Komora L.: *Vulkanizačné činidlo gumárenských zmesí*. UV SK 4589 (16. 8. 2006).
2. Olšovský M., Štubňa M., Macho V.: *Polymérna, resp. kopolymérna síra*. 56. *Sjezd chemických spoločností*. Ostrava, 6.-9. 9. 2004.
3. Olšovský M., Štubňa M., Macho V.: *Nové vulkanizačné činidlo na báze multikomponentnej kopolymérnej síry*. 14. *medzinárodná konferencia APROCHEM 2005*. Milo-

vy, 24.–26. 10. 2005.

4. Krajčík J., Olšovský M., Vajdová J.: *Možnosti náhrady polymérnej síry vo vulkanizačných systémoch*. 55. *Zjazd českých a slovenských chemických spoločností*. Košice, 8.–12. 9. 2003.
5. Olšovský M., Štubňa M., Gaňa D., Macho V.: *Copolymeric sulfur as vulcanizing agent*. *International Conference Polymeric Materials in Automotive*. Bratislava, 10.–12. 5. 2005.
6. Olšovský M., Michálek J., Macho V.: *New vulcanizing agent for rubber*. *The 5th Youth symposium on experimental solid mechanics*. Púchov, 10.–13. 5. 2006.

6L-09

NETRADIČNÉ APLIKÁCIE TLAKOVO-CITLIVÝCH ADHEZÍV

ŠTĚPÁN FLORIÁN, IGOR NOVÁK, ONDREJ ŽIGO a MÁRIA ŠIVOVÁ

Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovensko
 upolflor@savba.sk

S tlakovo-citlivými adhezívami sa stretávame v bežnom živote takmer na každom kroku. Tieto adhezíva sú aktívnou súčasťou „samolepivých“ etikiet, známok, pásov a obalov. Nachádzajú však uplatnenie aj v iných oblastiach – pri technologických procesoch, v elektrotechnike, doprave, čalunníctve, pri ekologickej ochrane úžitkových a okrasných rastlín alebo pri monitorovaní výskytu určitého druhu hmyzu. Uplatnenie nachádzajú aj v humánnej a veterinárnej medicíne. Pri týchto aplikáciách musia tlakovo-citlivé adhezíva spĺňať určité špecifické požiadavky, ktoré sú „šité“ na mieru¹⁻³. V prípade tlakovo-citlivých adhezív sa vytvára adhézný spoj výhradne v dôsledku fyzikálnej interakcie adhezíva s adherendom. Určujúci vplyv na vlastnosti tlakovo-citlivých adhezív má použitý kaučuk, nízkomolekulové tackifierové živice, resp. lepidlo prírodné, ktoré zásadne ovplyvňujú viskozitu vlastnosti adhezív a ich schopnosť zmäčať povrch adherenda. Pre tlakovo-citlivé adhezíva sú najpoužívanejšími polymérmí blokované kopolyméry elastoméru so styrénom, prírodný kaučuk, štatistický butadién-styrénový kaučuk, butylkaučuk alebo polyakrylát, tackifiery, resp. lepidlo prírodné, zmäčkovadlá a stabilizátory. Na prípravu tlakovo-citlivých adhezív sa používajú dve základné skupiny tackifierových živíc-deriváty kolofónie a aromatické alebo alifatické uhľovodíkové živice.

Podakovanie Slovenskej Grantovej Agentúre VEGA, grant č. 2/7103/27.

LITERATÚRA

1. Florián Š., Novák I.: *J. Mater. Sci. Lett.* 39, 649 (2004).
2. Satas D.: *Handbook of Pressure-Sensitive Adhesive Technology*, D. Satas (ed.). VNR, New York 2006.
3. Novák I., Florián Š., Pollák V.: *Intern. J. Polym. Mater.* 56, 841 (2007).

6L-10
SPECTRAL AND THERMAL STUDY OF Cu(II)
CARBOXYLATES AND THEIR PYRIDINE ADDUCTS

MARIANA PAJTÁŠOVÁ*, **SLÁVKA ĽALÍKOVÁ**,
DARINA ONDRUŠOVÁ, **TATIANA BAZYLÁKOVÁ**,
EUGEN JÓNA, and **VERONIKA PETRÁŠOVÁ**

Faculty of Industrial Technologies, TnU AD, I. Krasku
491/30, 020 01 Púchov, Slovakia
pajtasova@fpt.tnuni.sk

Divalent-metal salts of the higher fatty acids exhibit very interesting thermochemical properties. It was found that all compounds with even number of carbon atoms (n) in the 12–24 range transform to a thermotropic columnar mesophase at about 110–120 °C (ref.^{1–3}). The results of DSC calorimetry, thermogravimetry and vibrational spectroscopy have been used to study the influence of the length of aliphatic chains in the carboxylates studied on the:

- occurrence of a crystalline to liquid-crystalline phase transition;
- transition temperatures and enthalpic changes for this transition and the melting process;
- release of pyridine from the studied $\text{Cu}_2(\text{RCO}_2)_4\text{py}_2$ complexes [$\text{R}=\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{n-2}$, $n=14, 16, 18$].

The compounds $\text{Cu}_2(\text{RCO}_2)_4$ and $\text{Cu}_2(\text{RCO}_2)_4\text{py}_2$ [$\text{R}=\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{n-2}$, $n=14, 16, 18$; $\text{py}=\text{pyridine}$] were prepared, analysed and characterized by means of DSC calorimetry, thermogravimetry and infrared spectroscopy. Transition from a crystalline to a liquid crystalline phase after heating was observed for all $\text{Cu}_2(\text{RCO}_2)_4$ compounds but only for pyridine complex of Cu(II) tetradecanoate. However, the melting process was observed for all Cu(II) carboxylate complexes with pyridine.

$\text{Cu}_2(\text{RCO}_2)_4\text{py}_2$ [$\text{R}=\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{n-2}$, $n=14, 16, 18$] complexes undergo a crystal to liquid crystalline phase transition and melting at much lower temperatures than their $\text{Cu}_2(\text{RCO}_2)_4$ analogs. The lower thermal stability of $\text{Cu}_2(\text{RCO}_2)_4\text{py}_2$ than $\text{Cu}_2(\text{RCO}_2)_4$ could be explained by structural features. The weaker inter-dimer interactions are probably the main reason for significant lowering of thermal characteristics of pyridine compounds. An emission of pyridine after heating begins simultaneously with melting and enthalpic changes for these processes increase in the sequence (according to the number of carbon atoms): $14 < 16 < 18$.

The authors wish to thank the Slovak Grant Agency VEGA No.1/3161/06 and AV grant No. 4/2014/08 for financial support.

REFERENCES

- Burrows H. D., Ellis H. A.: *Thermochim. Acta* 52, 121 (1982).
- Abied H., Guillon D., Skoulios A., Weber P., Giroud-Godquin A. M., Marchon J. C.: *Liq. Crystals* 2, 269 (1987).
- Ibn-Elhaj M., Guillon D., Skoulios A., Giroud-Godquin A. M., Maldivi P.: *Liq. Crystals* 11, 731 (1992).

6L-11
ZÁKLADNÍ LABORATORNÍ METODY
PRO STUDIUM HETEROGENNÍCH
NEKATALYZOVANÝCH REAKCÍ MEZI
KAPALNOU A PEVNOU FÁZÍ

JAN VÍDENSKÝ a **IVONA SEDLÁŘOVÁ**

Ústav anorganické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5,
166 28 Praha 6
Jan.Vidensky@vscht.cz

Heterogenní nekatalyzované reakce mezi kapalnou a pevnou fází se v chemickém průmyslu vyskytují velice často. Realizaci případně optimalizaci příslušné technologie vždy předchází studium kinetiky probíhající reakce. Volba vhodné metodiky je pro získání požadovaných dat velmi důležitá. Příspěvek se týká studia reakcí, kde dochází k rozpouštění přírodních surovin minerálními kyselinami, které nachází uplatnění v oblasti výroby průmyslových fosforečných hnojiv a chemických specialit.

K získání potřebných závislostí stupně konverze výchozí pevné látky na čase je možno využít několika rozdílných experimentálních uspořádání. Ve všech případech se pracovalo za izotermních podmínek se souborem monodisperzních zrn zkoumané suroviny. Společným aspektem studovaných reakčních systémů byl vznik pouze kapalných, plynných a/nebo rozpustných produktů. Při reakci tedy docházelo k postupnému zmenšování až úplnému vymizení částic pevné fáze. Nižší zmíněné metodiky lze většinou využít i ke sledování průběhu reakcí, kde vznikají i pevné produkty.

Nejjednodušším využitelným experimentálním zařízením je vsádkový izotermní míchaný reaktor laboratorních rozměrů. Ten může pracovat s různým poměrem pevné fáze ku kapalné. Ke sledování průběhu stupně konverze pevné fáze na čase lze využít metod založených na kontinuálním sledování změny vhodné veličiny např. specifické vodivosti, pH atd. nebo využít metod založených na odběru vzorků a přerušení reakce např. gravimetrií. Všechny tyto metody mají své výhody a nevýhody. Kontinuální jsou vhodné pro sledování rychlých reakcí, ostatních je možno využít pro reakce pomalé. Například u gravimetrické metody bylo ověřeno, že pro statisticky významný soubor částic je tato metoda dostatečně přesná. Lze ji s výhodou využít, kdy koncentrace kapalně fáze je použita ve velkém přebytku, takže se tato koncentrace v průběhu reakce téměř nemění. Její nevýhodou je časová náročnost. Tento problém lze řešit u soustav, kde jsou reakční složky v takovém poměru, že v průběhu reakce dochází k měřitelné změně např. specifické vodivosti, pH atd. Kontinuálním sledováním těchto veličin lze tak získat celou reakční izotermu. Pro studium rychlých reakcí lze použít izotermní míchaný polovsádkový reaktor s průběžně snímaným pH nebo specifickou vodivostí roztoku s automatickým doplňováním zreagovaného podílu rozkladné kyseliny. Pro sledování vlivu přenosových jevů na celkovou reakční rychlost lze využít průtočný reaktor s pevným ložem rozpouštěných částí s nastavitelným průtokem kapalně fáze.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru MSM 223100001 a MSM 6046137301.

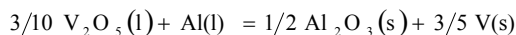
6L-12
VANÁD AKO NEČISTOTA V ELEKTROLYZÉRI
NA VÝROBU HLINÍKA HALL-HÉROULTOVÝM
PROCESOM

MARIÁN KUCHARÍK a FRANTIŠEK ŠIMKO

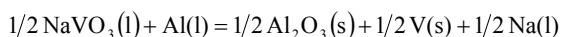
*Ústav Anorganickej Chémie SAV, Dúbravská cesta 9, 845 36
 Bratislava, SR
 uachkuch@savba.sk*

Nečistoty sa do procesu elektrolýzy dostávajú z rôznych zdrojov. Hlavným zdrojom sú základné suroviny (základné zložky elektrolytu: Na_3AlF_6 , AlF_3 , Al_2O_3) a grafitové anódy. Ďalším zdrojom nečistôt sú konštrukčné materiály elektrolyzéra ako sú vodiče elektrického prúdu, tkz. niple, (hlavne železo) a obloženie elektrolýznej vane (hlavne kremík)¹. Výstupmi z elektrolýznej cely sú vyrábaný roztavený hliník a plyny. Z elektrolyzéra odchádzajúce plyny obsahujú hlavne oxid uhľičitý, oxid uhoľnatý a fluoridové zlúčeniny. Súčasťou odchádzajúceho plynu sú aj tuhé častice hlavne uhlíka, oxidu hlinitého kryolitu, fluoridu hlinitého atď. V odchádzajúcom plyne sa nachádzajú aj zlúčeniny nečistôt².

Vanád patrí medzi nečistoty znižujúce prúdovú účinnosť procesu výroby hliníka. Z tohto dôvodu je zaujímavé študovať vplyv respektíve správanie sa vanádových zlúčenín v procese výroby hliníka. Rovnice (1) a (2) jasne naznačujú, že z termodynamického hľadiska bude roztavený hliník na dne elektrolyzéra veľmi ochotne chemicky reagovať s vanádovými zlúčeninami za vzniku vanádu. Z rovníc (1) a (2) tiež vyplýva, že obsah vanádových zlúčenín v elektrolyte sa bude znižovať v dôsledku ich reakcie z roztaveným hliníkom.



$$\Delta_r G_{1300\text{K},1}^{\text{O}} = -326,0 \text{kJ mol}^{-1}$$



$$\Delta_r G_{1300\text{K},2}^{\text{O}} = -2425 \text{kJ mol}^{-1}$$

Táto práca vznikla za podpory agentúry VEGA, č. projektu 2/7077/27.

LITERATÚRA

1. Thonstad J., Fellner P., Haarberg G. M., Hiveš J., Kvan-
de H., Sterten A., v knihe: *Aluminium Electrolysis, Fun-
damentals of the Hall-Héroult Process*, 3. vyd. Alumi-
nium-Verlag, Düsseldorf 2001.
2. Grjotheim K., Krohn C., Malinovský M., Matiašovský
K., Thonstad, J., v knihe: *Aluminium Electrolysis, Fun-
damentals of the Hall-Héroult Process*, 2. vyd. Alumi-
nium-Verlag, Düsseldorf 1982.

7L-01 FLUORESCENCE MICROSCOPY OF BIOMOLECULES ON A SINGLE MOLECULE LEVEL

MARTIN HOF

*J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry v.v.i., Academy of Sciences of the Czech Republic, Dolejškova 3, 182 23 Prague
hof@jh-inst.cas.cz*

Fluorescence microscopy (FM) is nowadays certainly one of the main tools in biological sciences. There are several reasons for the success of this technique: *a)* FM can be applied on a minimum-invasive way with high sensitivity even on living cells. *b)* FM has a good temporal and spatial resolution. *c)* FM is the basis and/or can be combined for a growing variety of single molecule approaches. One of the most popular single molecule techniques is Fluorescence Correlation Spectroscopy (FCS). This method is based on the fact that when illuminating a *femtoliter* volume element containing *nanomolar* concentrations of fluorescently labeled molecules, the fluorescence of only a few molecules or even a single molecule is detected. Usually diffusion of those molecules in and out of the *femtoliter* detection volume leads to large fluctuation in the fluorescence signal. These fluctuations are monitored, correlated, and analyzed and give, in the simplest case, information on the diffusion coefficient and concentration of diffusing and fluorescing species. While the technique was originally suggested in the 70's, its first reasonable experimental realization appeared in the 90's. Though the method certainly went through a boom in the 90's, it became soon very clear that the original single-spot FCS method is heavily limited. Thus several groups started to develop new variants of that technique aiming for higher precision.

The fluorescence group located at the J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the Academy of Sciences of the Czech Republic (<http://www.jh-inst.cas.cz/~fluorescence/>) was certainly significantly contributing to those developments. Specifically, in 2003 the group presented the first artifact-free measurements of diffusion coefficients by FCS¹. The so-called „z-scan“ FCS does -in opposite to earlier approaches- not need external calibration. This method was then applied for answering fundamental questions in lipid bilayer research as well as for characterizing lipid „rafts“ smaller than the resolution of an optical microscope (< 200 nm). A further methodological achievement was the first experimental realization of a confocal microscope allowing to perform Fluorescence Lifetime Correlation Spectroscopy (FLCS)². This method is using the fluorescence lifetime information to distinguish the diffusion of different species. Most recently we have applied this method in for the elucidation of the DNA compaction mechanism.

That compaction of DNA plays a role in the nuclei of several types of cells and becomes important in the non-viral gene therapy. Using standard single molecule fluorescence microscopy it was shown in a series of contributions by the group of K. Yoshikawa from Kyoto, Japan (http://www.chem.scphys.kyoto-u.ac.jp/index_e.html), that spermine-induced compaction of large DNA molecules (30–170 kbp) occurs in a discrete "all-or-non" regime, where the coexistence of free and folded DNA molecules was observed. In the

case of intermediate-sized DNA molecules (~10 kbp), so far, it was stated that the mechanism of folding is continuous. We show that FLCS can for the first time decide what kind of mechanism is undertaken in the compaction process of those intermediate sized DNA. The method takes advantage of a subtle lifetime change of an intercalating dye PicoGreen® during the titration with the condensing agent and based on that, it reveals the mechanism of the process and gives information on the equilibrium state transition dynamics of the compaction process³. The method is used to compare the condensation process induced by different condensers.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR LC 06063.

REFERENCES

1. Benda A., Beneš M., Mareček V., Lhotský A., Hermens W., Hof M.: *Langmuir* 19, 4120 (2003).
2. Benda A., Hof M., Wahl M., Patting M., Erdmann R., Kapusta P.: *Rev. Sci. Instruments* 76, 033106 (2005).
3. Humpolíčková J., Benda A., Sykora J., Machán R., Kral T., Gasinska B., Enderlein J., Hof M.: *Biophys. J.* 94, L17 (2008).
4. Further contributions on this field see <http://www.jh-inst.cas.cz/~fluorescence/>

7L-02 DYNAMIKA RELAXÁCIE FLUORESCENCIE KUMARÍNU C522 V CONFINED ŠTRUKTÚRACH

MICHAL ŽITŇAN^a, EDUARD JÁNÉ^a, VOJTECH SZOCS^a, TIBOR PÁLSZEGI^c, OEGA GRANČIČOVÁ^a, IGNÁC BUGÁR^b, DUŠAN CHORVÁT^b a DUŠAN VELIČ^{a,b}

^a *Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská Dolina, 842 15 Bratislava,* ^b *Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava,* ^c *Slovenská Technická Univerzita, Radlinského 9, 842 37 Bratislava, SR*
zitnan@fns.uniba.sk

Sledovali sme dynamiku fluorescencie kumarínu C522 v confined štruktúrach, teda v prostrediach obmedzujúcich voľný pohyb molekúl použitím femtosekundovej časovo-rozlišenej spektroskopie. Molekula kumarínu slúži ako fluorescenčná sonda. Rýchlosť deexcitácie sondy najviac ovplyvňuje prítomnosť voľnej vody¹. Vyšetřovali sme dva typy confined štruktúr: v prvom prípade bol prístup vody k molekule kumarínu obmedzený adsorpciou kumarínu na povrch montmorillonitu, skúmala sa interakcia s disperziou montmorillonitu vo vode. Montmorillonity patria medzi vrstevnaté hliníto-kremičitany so záporným nábojom vrstiev. Záporný náboj je možné znižovať fixáciou lítiovými kationmi². Veľkosť náboja ovplyvňuje adsorpciu kumarínu na povrch, čím sa znižuje možnosť kontaktu molekuly kumarínu s vodou. Prítomnosť záporne nabitého povrchu môže spomaliť solvatačnú odpoveď 3 až 5 krát v porovnaní s voľnou vodou³. Iným spôsobom obmedzenia prístupu voľnej vody k sonde je enkapsulácia sondy do cyklodextrínovej kavity⁴, prípadne uzavretie do reverznej micely rôznej veľkosti. Analýza deexcitačných

kriviek ukazuje až 1000 násobné spomalenie relaxačných časov v prostrediach obmedzujúcich prístup molekúl rozpúšťadla k molekule kumarínu v porovnaní s čistým rozpúšťadlom⁵.

Táto práca vznikla za podpory grantov APVT-20-029804 a APVV-0491-07.

LITERATÚRA

1. Jimenez R., Fleming G. R., Kumar P. V., Maroncelli M.: *Nature* 369, 471 (1994).
2. Zemanova M., Link G., Takayama S., Nuesch R., Janek M.: *App. Clay Sci.* 32, 271 (2006).
3. Benderskii A. V., Eisenthal K. B.: *J. Phys. Chem., A* 106, 7482 (2002).
4. Douhal A.: *Chem. Rev.* 104, 1955 (2004).
5. Hazra P., Chakrabarty D., Sarkar N.: *Chem. Phys. Lett.* 358, 523 (2002).

7L-03

MĚŘENÍ PARAMETRŮ TRYPTOFANOVÉ FLUORESCENCE VE SPOJENÍ S MOLEKULÁRNĚ-DYNAMICKÝMI VÝPOČTY JAKO NÁSTROJ PRO SLEDOVÁNÍ DYNAMIKY PROTEINŮ

MARTIN KUBALA^a, LENKA GRÝČOVÁ^b, PETER SKLENOVSKÝ^a, ZDENĚK LÁNSKÝ^b, MICHAL OTYEPKA^a a JAN TEISINGER^b

^a Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého, tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc, ^b Fyziologický ústav AV ČR, Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4
mkubala@prfnw.upol.cz

V současné strukturní biologii je nejpobulárnější metodou pro zkoumání proteinů krystalografie spojená s rentgenovou strukturní analýzou. Tato metoda má však některé zásadní nedostatky. Jednak proteiny krystalizují za podmínek, které bývají poměrně vzdálené těm fyziologickým, při nichž protein funguje, což může mít za následek deformaci výsledné struktury, jednak krystalografie není schopna postihnout dynamiku molekul, která je zásadní pro pochopení funkce enzymů.

Naproti tomu klasické spektroskopické metody tato omezení nemají a zejména fluorescenční spektroskopie se jeví jako příhodná pro studování proteinů, a to především pro její vysokou citlivost a širokou škálu experimentálních technik. Přirozeným fluoroforem je na proteinech aminokyselina tryptofan. Zhášení fluorescence neutrálním zřášeďedlem (akrylamid) umožňuje sledování prostorové přístupnosti rezidua, použití zřášeďedla s nábojem (jodid) pak umožňuje získat i informaci o rozložení povrchového náboje v okolí rezidua. Informace o dynamice rezidua pak doplňují časově rozlišená měření intenzity a anizotropie fluorescence. Nevýhodou fluorescenčních měření je, že poskytují pouze lokální informace z okolí tryptofanového rezidua. Naše zkušenost ukazuje, že spektroskopické výsledky je vhodné doplnit informacemi z počítačových molekulárně-dynamických simulací enzymu. Tyto simulace jednak slouží jako vodítko při interpretaci spektroskopických dat, jednak pomáhají při návrhu dalších experimentů.

Předmětem našeho studia byla dynamika velké cytoplazmatické kličky Na⁺/K⁺-ATPasy po navázání přirozených ligandů (ATP, Mg²⁺). Pro spektroskopickou analýzu jsme připravili 9 jednotryptofanových mutantů, kdy jsme tryptofany vkládali na různá místa povrchu kličky. Naše studie ukázala, že bez ligandu, v přítomnosti samotného Mg²⁺, nebo při současně přítomnosti Mg²⁺ i ATP se klička nachází v uzavřené konformaci, zatímco pokud je přítomno pouze ATP (bez Mg²⁺), nachází se klička v konformaci otevřené. Naše výsledky tedy naznačují, že zatímco vazba ATP kličku otevírá, následná vazba Mg²⁺ ji zase uzavírá, což je v rozporu s dosavadní představou, že nukleotid se váže na enzym jako komplex MgATP. Analýza povrchového náboje pak ukázala velké změny v okolí rezidua 648 a tyto změny mohou sloužit jako signál při komunikaci kličky s C-terminální částí enzymu.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 203/07/0564.

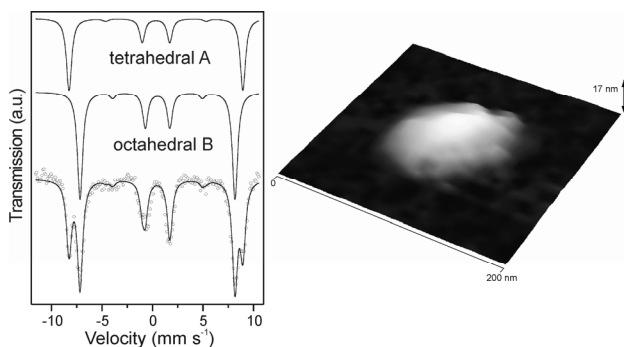
7L-04

NANOČÁSTICE OXIDŮ ŽELEZA Z TERMICKY INDUKOVANÝCH REAKCÍ V PEVNÉ FÁZI – SYNTÉZA, VLASTNOSTI A APLIKACE

RADEK ZBORIL

Katedra fyzikální chemie a Centrum výzkumu nanomateriálů, tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc
zboril@prfnw.upol.cz

Oxid železitý představuje typickou polymorfní sloučeninu nabízející řadu strukturních forem v závislosti na podmínkách přípravy či na geofyzikálních a geochemických parametrech při kterých vzniká v přírodě. V nanokrystalickém stavu vykazují všechny strukturní formy řadu unikátních vlastností, které jsou využitelné v různých oblastech moderních nanotechnologií. Termodynamicky nejstabilnější hexagonální α -Fe₂O₃ modifikace (hematit) je, ve formě nanočástic, velmi účinný katalyzátor v řadě procesů heterogenní katalýzy a také velmi perspektivní materiál pro fotokatalytické štěpení vody. Druhá nejčastější strukturní forma, kubický γ -Fe₂O₃ (maghemit), reprezentuje společně s magnetitem (Fe₃O₄) strategický materiál v řadě diagnostických i terapeutických lékařských aplikací. Díky kombinaci vhodných magnetických (ferimagnetických, superparamagnetických), povrchových a velikostních charakteristik je vhodně funkcionalizovaný (povrchově upravený) nanomaghemit používán pro vylepšení kontrastu při zobrazování metodou magnetické rezonance, jako magnetický nosič pro cílený transport léčiv, při léčbě nádorových onemocnění metodou hypertermie nebo při magnetickém značení a separaci buněk. Kosočtverečná ε -Fe₂O₃ modifikace byla doposud připravena téměř výhradně ve formě asymetrických tyčinkovitých nanočástic, které vykazují obrovskou koerzivní sílu okolo 2T při pokojové teplotě. Tato hodnota, která je nejvyšší naměřená mezi všemi oxidy kovů, činí ε -Fe₂O₃ velmi perspektivní fází pro vývoj nové generace magnetických záznamových médií. Poslední a nejvzácnější strukturní formou je kubický β -Fe₂O₃, který lze připravit metodou chemické depozice par (CVD) ve formě unikátních dutých nanočástic tvořených několika slupkami s tloušťkou 3-



Obr. 1. Mössbauerovo spektrum (2K/5T) a AFM snímek nanočástic maghemitu funkcionalizovaných kyselinou palmitovou

5 nm. Kromě zmíněných (nano)krystalických fází existuje oxid železitý i ve formě ultramalých (1–3 nm) nedifrakujících amorfních nanočástic s neperiodickou mříží, které, zejména ve formě nanokompozitů s SiO₂ a Au, fungují jako velmi účinné senzory vlhkosti a magneto-optické senzory^{1,2}.

Široký aplikační potenciál všech strukturálních modifikací Fe₂O₃ indukoval, zejména v posledních letech, extenzivní vývoj nových syntetických postupů směrem k monodisperzním nanočásticím s definovanou strukturou, velikostí a morfologií. Tyto preparační postupy zahrnují například sol-gel, sonochemické, depoziční, precipitační a pyrolytické syntézy. Termicky indukované dekompozice vhodných Fe-prekurzorů v pevné fázi („prekurzorové syntézy“) představují jednoduchý, levný a technologicky nejatraktivnější syntetický přístup, neboť umožňují jedнокrokovou přípravu velkého množství produktu. Navíc mohou být vlastnosti nanočástic úspěšně řízeny volbou reakčních podmínek (teplota, tlak, atmosféra, čas) a použitého prekurzoru (struktura, velikost, morfologie). Na příkladech teplotních dekompozicí hexakynoželednatanu železitého, šřavelanu a octanu železnatého na vzduchu bude demonstrován mnohdy složitý mechanismus tvorby nanočástic, způsob řízení jejich krystalinity, struktury a velikosti, stejně jako možnost přípravy oxidické fáze striktně kopírující morfologii prekurzoru („šablonové syntézy“)^{3–5}. Jestliže je dekompozice prováděna v přítomnosti vhodné biokompatibilní fáze, lze jedнокrokově připravit povrchově modifikované magnetické nanočástice, jak bude uvedeno na příkladu nanomaghemitu funkcionalizovaného kyselinou palmitovou⁶ (obr. 1).

V rámci přednášky budou diskutovány i některé mimořádné vlastnosti environmentálních a mimozemských nanočástic na bázi oxidů železa. Budou zmíněny například nejnovější výsledky v bioaplikacích nanočástic magnetitu z magnetotaktických bakterií nebo pozoruhodné magnetické vlastnosti ilmeno-hematitových lamelárních nanostruktur, které se vyskytují také na Marsu, a které vykazují neobvykle intenzivní magnetismus⁷. Nanokrystalické oxidy železa srážející se z kyselých důlních vod lze zase využít jako vysoce čisté prekurzory pro termickou syntézu nanočástic nulocného železa, reprezentujících ekologicky akceptovatelný a přitom neobyčejně efektivní materiál pro reduktivní technologie sanace podzemních vod⁸.

LITERATURA

- Zboril R., Mashlan M., Petridis D.: *Chem. Mater.* **14**, 969 (2002).
- Machala M., Zboril R., Gedanken A.: *J. Phys. Chem., B* **111**, 4003 (2007).
- Hermanek M., Zboril R., Mashlan M., Machala L., Schneeweiss O.: *J. Mater. Chem.* **16**, 1273 (2006).
- Zboril R., Machala M., Mashlan M., Sharma V. K.: *Crystal Growth & Design* **4**, 1317 (2004).
- Hermanek M., Zboril R., Medrik I., Pechousek J., Gregor C.: *J. Am. Chem. Soc.* **129**, 10929 (2007).
- Zboril R., Bakandritsos A., Mashlan M., Tzitzios V., Dallas P., Trapalis Ch., Petridis D.: *Nanotechnology* **19**, 095602 (2008).
- Robinson P., Harrison R. J., McEnroe S. A., Hargraves R. B.: *Nature* **418**, 517 (2002).
- Filip J., Zboril R., Schneeweiss O., Zeman J., Cernik M., Kvapil P., Otyepka M.: *Environ. Sci. Technol.* **41**, 4367 (2007).

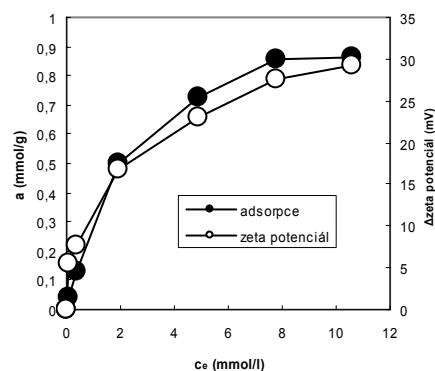
7L-05

VYUŽITÍ ZETA POTENCIÁLU K POSTIHNUTÍ JEVŮ NA FÁZOVÉM ROZHRAŇÍ

ROMAN MARŠÁLEK

*Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě,
30. dubna 22, 701 03 Ostrava
roman.marsalek@osu.cz*

Příspěvek se zabývá využitím zeta potenciálu jako veličiny, která má své místo při studiu jevů na fázovém rozhraní, v tomto případě především adsorpce z vodných roztoků na uhlíkatých materiálech. Změny zeta potenciálu byly sledovány ve dvou základních systémech. A to adsorpce iontů těžkých kovů na uhlíkatých materiálech a na jílových minerálech. Dále pak při studiu adsorpce tenzidů na různých typech uhlí. V obou případech naměřené hodnoty zeta potenciálu (resp. jeho změn) korespondují s naadsorbovaným množstvím těžkého kovů či povrchově aktivní látky.



Obr. 1. Adsorpční izoterma dodecylsulfátu sodného (SDS) na černém uhlí a vyvolané změny zeta potenciálu

Výše uvedené skutečnosti dokumentuje obr. 1, na kterém je patrné, že naadsorbované množství SDS (a) při dané rovnovážné koncentraci (c_e) je „přímo úměrné“ změně zeta potenciálu. Tento fakt je možné využít při hodnocení mechanismu adsorpce tenzidů. Výsledky lze dále aplikovat při odstraňování tenzidů z odpadních vod (adsorpci na vhodných sorbentech) nebo při studiu flotačního procesu, ve kterém se tenzidy uplatňují jako tzv. sběrače. V případě adsorpce iontů těžkých kovů byl, mimo jiné, kladen důraz na vliv pH na adsorpční proces. A také zde je možné nalézt souvislost mezi adsorpční kapacitou a zeta potenciálem. Mezi další studované případy využití měření zeta potenciálu lze jmenovat hodnocení oxidických katalyzátorů či anorganických pigmentů.

Tato práce vznikla za podpory grantu MPO č. 2A-ITP1/083 a GA ČR č. 105/07/P041.

7L-06 VYUŽITIE TERAHERTZOVEJ SPEKTROSKOPIE PRI CHARAKTERIZÁCI DIELEKTRICKÝCH VLASTNOSTÍ VRSTEVNATÝCH FYLOSILIKÁTŮV

**MARIÁN JANEK^{a,b}, IGNÁC BUGÁR^c, DUŠAN
LORENC^c, VOJTECH SZŐCS^d, DUŠAN VELIČ^{b,c}
a DUŠAN CHORVÁT^c**

^a Technologický inštitút, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 13 Bratislava, ^b Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina CH1, 842 15 Bratislava, Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, ^d Chemický ústav, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina CH2, 842 15 Bratislava, Slovenská republika
marian.janek@savba.sk

Dynamický rozvoj terahertzovej spektroskopie v časovej doméne, využívajúcej optoelektronické spínače na báze femtosekundových laserov (THz-TDS) zabezpečuje jej nasadenie pri charakterizácii dielektrických materiálov¹, polovodičov, tuhých látok napr. skiel ale aj organických zlúčenín ako polymérov a biomolekulárnych systémov² v ďalekej infračervenej oblasti. Ďalšie oblasti intenzívneho nasadenie tejto techniky sú pri obrane proti terorizmu, topografického zobrazovania, kontrole objemových materiálov a detekcie chemických zlúčenín.

Terahertzová spektroskopiu v časovej doméne sme použili na charakterizáciu ílových minerálov zo skupiny slúď pre stanovenie ich dielektrických vlastností. Použité optoelektronické spínače na báze nízkoteplotného GaAs nám umožnili detekciu vlnočtov v ďalekej infračervenej oblasti od 3,3 do 40,0 cm^{-1} ktorá zodpovedá frekvenciám 0,1 až 1,2 THz. Skúmané vzorky boli vybrané tak aby sa líšili svojím kryštalochemickým zložením jednak v izomorfných substitúciách jednotlivých vrstiev ale aj v obsahu medzivrstvových kationov. Merzivrstvové kationy boli ďalej jednak hydratované napríklad Mg^{2+} kation v prípade vermikulitu a dehydratované kationy napríklad K^+ a Mg^{2+} v prípade flogopitu, biotitu and muskovitu. Pre tieto prírodné vrstevnaté materiály bola stanovená frekvenčná závislosť komplexného indexu lomu zahŕňajúca porovnanie reálnej časti indexu lomu a absorpčného in-

dexu. Koherentná detekcia THz pulzov umožnila výpočet hrúbok použitých slúď priamo z jednotlivých meraní použitím iterácie z fixného bodu³.

Táto práca je podporovaná vedeckou grantovou agentúrou VEGA číslo 1/4457/07.

LITERATÚRA

1. Dai J., Zhang J., Zhang W., Grischkowsky D.: J. Opt. Soc. Am. B7, 1379 (2004).
2. Fischer B. M., Walther M., Jepsen P. U.: Phys. Med. Biol. 47, 3807 (2002).
3. Whitayachumnankul W., Ferguson B., Rainsford T., Mickan S. P., Abbott D.: Electronics Lett. 41, 800 (2005).

7L-07 PŘESNÉ STABILIZAČNÍ ENERGIE STAVEBNÍCH BLOKŮ BIOMAKROMOLEKUL: KVANTOVĚ- CHEMICKÉ VÝPOČTY

PAVEL HOBZA

*Ústav organické chemie a biochemie, AV ČR, 166 10 Praha 6
pavel.hobza@uochb.cas.cz*

Pomocí nejpřesnějších metod kvantové chemie (metoda spřažených klastrů se zahrnutím tříelektronových excitací, CCSD(T) a poruchové metody, MPn) byly studovány struktury a stabilizační energie molekulárních komplexů, které hrají významnou roli v biodisciplínách. Zvláštní pozornost byla věnována párům basí nukleových kyselin a to jak vázaných vodíkovou vazbou, tak i patrových. Stabilizační energie byly určeny na CCSD(T) úrovni při uvažování velkých basí atomových orbitalů, případně na úrovni limitu kompletní base. Výsledné stabilizační energie komplexů s vodíkovými vazbami a zvláště patrových komplexů jsou velké (30 a 15 kcal mol^{-1}), mnohem větší než bylo dosud známo. Analýza energetických příspěvků (pomocí poruchové metody SAPT) ukázala, že dominantním členem u patrových komplexů je Londonova dispersní energie, zatímco elektrostatická energie určuje orientaci basí v páru. Teoretický popis dispersní energie je velmi náročný a některé metody zcela selhávají (např metody DFT). Dispersní energie hraje v biologických systémech jedinečnou úlohu a bude ukázáno, že dvoušroubovicová struktura DNA je jednoznačně určena dispersními interakcemi. Podobný závěr platí i o struktuře hydrofobního jádra bílkovin.

7L-08

STABILITA NEGLOBULÁRNÍHO PROTEINU P18^{INK4c} A JEHO FRAGMENTŮ

PETR SKLENOVSKÝ, KATEŘINA KUBEŠOVÁ, PAVEL BANÁŠ a MICHAL OTYEPKA*

Katedra fyzikální chemie, Univerzita Palackého v Olomouci, tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc
 michal.otyepka@upol.cz

Protein p18^{INK4c} (p18) z rodiny inhibitorů proteinových kinás (INK) je modulární protein složený z pěti ankyrinových (ANK) motivů. Proteiny tvořené ANK motivy jsou předmětem intenzivního zájmu, protože jejich struktura je stabilizována zejména lokálními kontakty¹ a slouží tak jako modelové systémy pro hlubší pochopení stability a mechanismu skládání modulárních proteinů. Z hlediska biomechanických vlastností jde rovněž o velmi atraktivní biomolekuly². Zásadní otázkou stále zůstává, jakou roli hrají jednotlivé strukturální motivy v celkové stabilitě proteinu a co ji vlastně určuje.

Věnovali jsme se studiu stability p18 (156 reziduí) a jeho různě velkých fragmentů, tedy celkem 55 peptidovým fragmentům od velikosti jedné α -šroubovice (~10 reziduí) až po dva ANK motivy (~55 reziduí), metodou klasické molekulové dynamiky v explicitním solventu (detaily simulací programem AMBER 8.0 s použitím silového pole *parm99* jsou uvedeny v literatuře³). Stabilita p18 byla dále studována simulací tepelné denaturace (4×20 ns simulace za 500 K) podle Daggettové⁴. Celková délka simulací činila 3,2 μ s.

Simulace různě velkých fragmentů umožňuje posoudit stabilitu jednotlivých strukturálních motivů a také vliv strukturálního kontextu na stabilitu. Výpočty ukazují, že α -šroubovice, páry α -šroubovic a motivy α -šroubovice-otočka- α -šroubovice nejsou stabilní. Minimální stabilní motiv je tvořen alespoň systémem dvou motivů α -šroubovice-otočka- α -šroubovice. Toto zjištění koresponduje s experimentálním pozorováním, že nejmenší známý protein tvořený ANK motivy musí být vystavěn alespoň ze dvou ANK motivů. Simulace dále prokázaly, že stabilita N- a C-terminálních motivů je významně větší než stabilita stejných vnitřních motivů. To naznačuje, že na stabilitu proteinů tvořených ANK motivy mají významný vliv terminální ANK motivy.

Vysokoteplotní simulace ukázaly mechanismus teplem indukované denaturace p18, kde C-terminální ANK motivy (ANK III, IV a V) jsou na vysokou teplotu méně citlivé než N-terminální (ANK I a II). Systém má tendenci se denarovat ve směru od N-konce k C-konci.

Práce byla podpořena granty LC512 a MSM6198959216.

LITERATURA

1. Main E. R. G., Jackson S. E., Regan L.: *Curr. Opin. Struct. Biol.* 13, (2003).
2. Lee G., Abdi K., Jiang Y., Michaely P., Bennett V., Marszalek P. E.: *Nature* 440, 9 (2006).
3. Sklenovský P., Banáš P., Otyepka M.: *J. Mol. Model.*, v tisku (2008).
4. Daggett V.: *Chem. Rev.* 106, 5 (2006).

7L-09

TEORIE FUNKCIONÁLU HUSTOTY DOPLNĚNÁ EMPIRICKÝM DISPERZNÍM ČLEMEM – DFT-D. RYCHLÝ A PŘESNÝ NÁSTROJ PRO VÝPOČET MEZIMOLEKULOVÝCH INTERAKCÍ

PETR JUREČKA^{a,b}, JIŘÍ ČERNÝ^b, PAVEL HOBZA^{a,b} a DENNIS R. SALAHUB^c

^a Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc, ^b Ústav organické chemie a biochemie, v.v.i. a Centrum biomolekul a komplexních molekulových systémů, Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6, ČR, ^c University of Calgary, Faculty of Science, 2500 University Drive NW, Calgary, Alberta, Canada, T2N 1N4
 petr.jurecka@upol.cz

Teorie funkcionálu hustoty – DFT – se v krátké době prosadila jako jeden z nejužitečnějších a nejpoužívanějších nástrojů teoretické chemie. Vedle nesporných výhod v rychlosti a přesnosti popisu kovalentních systémů trpí ale i nedostatky, hlavně v oblastech excitovaných stavů a mezimolekulových interakcí. Nedávno bylo ukázáno, že jeden z těchto nedostatků – neschopnost popsat dlouhodobou disperzní interakci – může být efektivně odstraněn přidáním empirické disperzní korekce¹. Ta je založena na asymptotickém vztahu pro disperzní energii C_6/r^6 , který je pro malé vzdálenosti zatlučen. Navrhli jsme vylepšený tvar tlumící funkce s korektním chováním pro velké vzdálenosti a jednoduchým empirickým škálováním omezujícím dvojí započítání korelačních efektů². Škálovací parametry byly získány fitováním na vysoce kvalitní referenční výpočty. S rostoucím počtem aplikací DFT-D se postupně přesvědčujeme o kvalitě metody a přenositelnosti navržených parametrů. Umožňuje nám s výbornou přesností vypočítat nejen interakční energie, ale i geometrie. Přestože byly parametry původně navrženy pro popis nevazebných interakcí v molekulárních komplexech, ukazují se vhodnými i pro intramolekulovou disperzní interakci³. Spolehlivě předpovídají energeticky nejvýhodnější konformery malých peptidů a poskytují pro ně také kvalitnější geometrie, než náročnější metoda MP2. Vibrační frekvence jsou v lepší shodě s MP2, než samotná DFT (cit.⁴). Přestože je disperzní korekce v DFT-D empirická a je tedy třeba ji dále pečlivě testovat, prozatím se profiluje jako přesná a spolehlivá metoda spojující rychlost DFT s kvalitou výsledků jinak dostupnou pouze podstatně náročnějšími výpočty.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM 6198959216 a grantu LC 512.

LITERATURA

1. Grimme S.: *J. Comput. Chem.* 25, 1463 (2004).
2. Jurečka P., Černý J., Hobza P., Salahub D. R.: *J. Comput. Chem.* 28, 555 (2007).
3. Valdés H., Klusák V., Pitoňák M., Exner O., Starý I., Hobza P., Rulišek L.: *J. Comput. Chem.* 29, 861 (2007).
4. Černý J., Jurečka P., Hobza P., Valdés H.: *J. Phys. Chem., A* 111, 1146 (2007).

7L-10

**MECHANISMUS RNA KATALÝZY SAMOŠTĚPÍ
REAKCE RIBOZYMU VIRU HEPATITIDY D**

**PAVEL BANÁŠ^{a,c,d}, LUBOMÍR RULÍŠEK^{c,d},
VERONIKA HÁNOŠOVÁ^a, DANIEL SVOZIL^c, NILS G.
WALTER^c, JIŘÍ ŠPONER^{b,c} a MICHAL OTYEPKA^{a,b}**

^a Katedra fyzikální chemie a Centrum pro biomolekuly a komplexní molekulární systémy, Univerzita Palackého, tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc, ^b Biofyzikální ústav, Akademie věd České republiky, Královopolská 135, 612 65 Brno, ^c Ústav organické chemie a biochemie, Akademie věd České republiky a Centrum pro biomolekuly a komplexní molekulární systémy, Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6, ^d Gilead Sciences Research Center & IOCB, Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6, ^e Department of Chemistry, Single Molecule Analysis Group, University of Michigan, 930 N. University Avenue, Ann Arbor, MI 48109-1055, USA
ribicka.neonka@email.cz

Ribozym Hepatitidy D (HDV ribozym) je RNA motiv nacházející se v cirkulární RNA lidského viru Hepatitidy D, který je zodpovědný za autokatalytické samoštěpení multimerního RNA vlákna vznikajícího při replikaci viru prostřednictvím „double-rolling“ mechanismu. Předchozí experimentální studie ukázaly, že nukleotid C75 nacházející se v aktivním místě ribozymu je esenciální pro katalýzu, nicméně jeho konkrétní role v mechanismu reakce nebyla dosud identifikována.

Dva alternativní katalytické mechanismy, v nichž C75 hraje roli acido-bazického katalyzátoru, byly navrženy. Zatímco krystalové struktury jsou v souladu s modelem, v němž C75 vystupuje jako obecná báze deprotonující U-1(2'-OH) nukleofilní skupinu, která atakuje štěpený fosfát, biochemické studie jsou spíše konzistentní s modelem, v němž C75 je protonovaný a funguje jako obecná kyselina poskytující proton odstupující alkoholové 5'-O skupině.

V této práci byl studován reakční mechanismus genomické formy HDV ribozymu pomocí hybridní QM/MM metodologie. Bylo nalezeno, že nukleotid C75 je schopen působit v kontextu celkové struktury HDV ribozymu jako obecná báze s reakční bariérou $\sim 20 \text{ kcal mol}^{-1}$, která je srovnatelná s experimentální hodnotou. Naprotitomu, na základě dostupných strukturních dat nebylo dosud možno nalézt reakční cestu, v níž by nukleotid C75 vystupoval jako obecná kyselina.

Tato studie byla podporována granty LC512, LC06030, MSM0021622413 a MSM6198959216 Ministerstva Školství ČR, a granty IAA400040802 a IQS500040581 Grantové Agentury AV ČR, dále AV ČR, grant no. AV0Z50040507 a AV0Z50040702.

8L-01 FUNKČNÍ VLASTNOSTI BAKTERIÍ MLÉČNÉHO KVAŠENÍ

MILADA PLOCKOVÁ

Ústav technologie mléka a tuků, VŠCHT v Praze, Technická
3, 166 28 Praha 6-Dejvice
milada.plockova@vscht.cz

Bakterie mléčného kvašení (BMK) se podílí na obrovském množství fermentačních procesů, které probíhají v celém ekosystému. Lidstvem jsou využívány po staletí při výrobě potravin a krmiv, nověji i při výrobě potravních doplňků a léčiv.

BMK jsou Gram-pozitivní, nesporulující, katalasa-negativní, cytochromy postrádající, na živiny náročné, acidotolerantní bakterie, které mají striktně fermentativní metabolismus, kde je hlavním konečným produktem fermentace sacharidů kyselina mléčná. Vyskytují se v nutričně bohatých prostředích včetně potravin (mléko, maso, zelenina)¹.

Mezi rody BMK používané pro výrobu potravin se řadí *Lactococcus*, *Streptococcus*, *Enterococcus*, *Leuconostoc*, *Pediococcus*, *Carnobacterium* a *Lactobacillus*. V minulosti se k BMK řadil také rod *Bifidobacterium*. Další 11 rodů BMK nemá pro výrobu potravin význam¹.

Hlavními funkcemi BMK při výrobě potravin jsou funkce technologická, protektivní a probiotická. Technologická funkce je spojena se schopností BMK přeměňovat substráty např. sacharidy, bílkoviny a lipidy na metabolity, které ovlivní výslednou chuť, vůni a konzistenci potravin. Protektivní funkce souvisí s produkcí antimikrobiálně aktivních metabolitů jako jsou organické kyseliny, diacetyl, CO₂, H₂O₂, bakteriociny, deriváty aminokyselin a využívá se pro prodloužení trvanlivosti potravin a zvýšení jejich bezpečnosti. Probiotická funkce vyplývá z mnoha aktivit BMK chemické, biochemické i mikrobiologické povahy, jejichž výsledkem je pozitivní působení na zdravotní stav a kvalitu života lidí nebo zvířat².

Příkladem potravinářských výrobků, kde se mohou pozitivně uplatnit všechny funkce BMK, jsou přírodní sýry. S postupujícím stupněm poznání se původním empirickým znalostem spojeným s tradiční výrobou sýrů dostává vysvětlení zde probíhajících dějů až na molekulární úrovni. Významnou roli zde hraje pokrok v mikrobiologii BMK, kdy řada aktivit BMK je poznána na úrovni genů, kódujících produkci enzymů spojených s těmito aktivitami a vědci jsou schopni jednotlivé kmeny BMK modifikovat tak, aby bylo dosaženo jejich optimální funkčnosti při výrobě sýrů. Široké spektrum biochemických reakcí a mikrobiálních interakcí, které nastává během zrání sýrů, je základem požadované chuti, vůně a konzistence sýra, prevence mikrobiálního kažení, inhibice patogenních mikroorganismů a v neposlední řadě i modulace zdraví³.

Biochemické reakce, které nastávají při výrobě sladkých sýrů, jsou obvykle prezentovány ve čtyřech hlavních kategoriích: glykolýza reziduální laktosy a katabolismus laktátu, katabolismus citrátu, lipolýza a katabolismus volných mastných kyselin a proteolýza a katabolismus aminokyselin. Výsledkem těchto biochemických reakcí je vznik stovek netěkavých i těkavých sloučenin, které dávají každému typu sýra jeho osobitý charakter⁴.

Bohužel sýry jsou potravinářské výrobky, které v závislosti na svém složení, mohou v různé intenzitě podléhat mikrobiální zkáze působením nejrůznějších kontaminujících bakterií, kvasinek a plísní. Proto možnost využít BMK a jejich metabolitů v boji proti tomuto nebezpečí přitahuje zájem vědců na celém světě, přestože aplikace protektivních BMK při výrobě sýrů je značně komplikovaná vzhledem k nestabilitě kultur v prostředí sýra a možnosti ovlivnění finálních parametrů³. Příkladem úspěchu je příprava komerčního preparátu na bázi bakteriocinu lacticinu 3147 a generace více než 30 lacticin 3147 produkujících transkonjugovaných kmenů *Lactococcus lactis* vhodných pro aplikaci v sýrařství. Výhodou těchto kmenů je široké spektrum antimikrobiálních aktivit včetně aktivity proti klíčovým patogenům potravin *Listeria monocytogenes* a *Staphylococcus aureus*⁵.

Nejdůležitější probiotické mikroorganismy, které jsou v celosvětovém měřítku používány jako probiotické mikroorganismy, patří do rodů *Lactobacillus* a *Bifidobacterium*. Nejvíce publikovaných klinických dat dokumentujících antimikrobiální aktivity proti mikroorganismům způsobujícím gastrointestinální infekce, zlepšení malabsorbce laktosy, antimutagenní aktivitu antikarcinogenní aktivitu, stimulaci imunitního systému atd. jsou dostupné pro kmeny *Lactobacillus johnsonii* La1, *Lactobacillus rhamnosus* GG, *Lactobacillus casei* Sirota, *Lactobacillus acidophilus* NCFB 1478, *Bifidobacterium animalis* Bb12 a *Lactobacillus reuteri*. Vhodnými nosiči probiotických mikroorganismů byly shledány kromě fermentovaných mlék i sýry, které mají díky svému charakteru (vyšší pH, nižší redox-potenciál, vyšší pufrací kapacita) pozitivní vliv na životaschopnost probiotických bakterií⁶. Zajímavé jsou i proteolytické kmeny BMK (např. kmeny *Lactobacillus helveticus*) produkující během zrání sýrů tzv. bioaktivní peptidy, např. Val-Pro-Pro, Ile-Pro-Pro s antihypertenzní aktivitou, které dále zlepšují zdravotní výhody probiotických potravin⁷.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR
6046137305.

LITERATURA

1. Axelsson L., v knize *Lactic Acid Bacteria*, kap. 1, s. 4. Marcel Dekker, Inc., New York 1998.
2. Holzapfel W. H., Geisen R., Schillinger U.: *Int. J. Food Microbiol.* 24, 343 (1995).
3. Peláez C., Requena T.: *Int. Dairy J.* 15, 831 (2005).
4. McSweeney P. L. H., v knize *Cheese: Chemistry, Physics and Microbiology*, s. 347. Elsevier Ltd., London 2004.
5. Sobrino-López A., Martín-Belloso O.: *Int. Dairy J.* 18, 330 (2008).
6. Shah P. N.: *Int. Dairy J.* 17, 1262 (2007).
7. Korhonen H., Pihlanto A.: *Int. Dairy J.* 16, 945 (2006).

8L-02**ANTIMIKROBIÁLNÁ AKTIVITA *Lactobacillus reuteri*
A PRODUKTY METABOLIZMU POČAS
FERMENTÁCIE GLYCEROLU****EVA KRAJČOVÁ, MÁRIA GREIFOVÁ, ANTÓN
PAGURKO a ŠTEFAN SCHMIDT***Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU, Radlinského 9, 831 02 Bratislava, Slovensko
eva.krajcova@stuba.sk*

Zvýšený záujem o ochranné pôsobenie KMB je spojené s tendenciou nahradzovať chemické konzervačné látky látkami prírodnej povahy. *Lactobacillus reuteri* má trvalé miesto v gastrointestinálnom ekosystéme ľudí, hydiny, ošipáných a iných zvierat. Predpokladá sa, že má úlohu symbionta v črevnom ekosystéme produkciou antimikrobiálnych zložiek voči celej rade G^+ a G^- patogénov, kvasiniek a plesní. Reuterín, širokospektrálna antimikrobiálna zložka, opísaná z *Lactobacillus reuteri*, je jedna z najintenzívnejšie študovaných nízko molekulových inhibičných zložiek. Reuterín je produkovaný z glycerolu hladujúcimi bunkami za anaeróbných podmienok a aktívna zložka reuterín je rovnováhou zmesi monomernej, hydratovanej monomernej a cyklickej dimernej formy 3-HPA (cit.^{1,2}). V našej práci sme sa snažili poukázať na tvorbu a antimikrobiálny účinok metabolitov *L. reuteri*. Testovaný mikroorganizmus je schopný fermentovať rôzne sacharidy, je odolný voči vankomycínu, gentamicínu, netilmicínu a kyseline nalidixovej, ako heterofermentatívny druh produkuje okrem kyseliny mliečnej kyselinu octovú, etanol, CO_2 a 1,3-propándiol. *L. reuteri* produkuje antimikrobiálne a antifungálne produkty pri raste v MRS médiu s prídavkom a bez prídavku glycerolu, kde najväčší inhibičný účinok bol zaznamenaný v MRS médiu s prídavkom glycerolu. *L. reuteri* sa javí ako dobrý probiotický kmeň.

*Práca bola podporená projektom APVV-0310-06 a grantom VEGA 1/0746/08.***LITERATÚRA**

- Rodríguez E., Arqués J. L., Rodríguez R., Nuñez M., Medina M.: Lett. Appl. Microbiol. 37, 259 (2003).
- El-Ziney M. G., Arneborg N., Uyttendaele M., Devere J., Jakobsen M.: Biotechnol. Lett. 20, 913 (1998).

8L-03**CHARACTERIZATION OF EXTRACELLULAR
PRODUCTS OF MICROORGANISMS ISOLATED
FROM FISH MICROBIOTA AGAINST *Vibrio harvey*****JAKELINE TREJOS JIMENEZ^a, MÁRIA
ŠTURDÍKOVÁ^a, and MIGUEL ANGEL MORIÑIGO^b**^a *Institute of Biotechnology and Food Science, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37, Bratislava, Slovakia,*^b *Department of Microbiology, Faculty of Science, University of Málaga 29071, Málaga, Spain
jakeline.jimenez@stuba.sk*

Extracellular products (ECPs) are considered important determinants of *Vibrio harveyi* virulence. The main purpose of our study is a preliminary characterization of ECPs antimicrobial effects produced by studied probiotics, isolated from the farmed fish microflora, against the pathogen of *V. harveyi*, with the view of their application in its biocontrol.

We carried out the comparison of selected types of microflora ECPs analyzing the effect of microorganism growth phase upon the antimicrobial activity, evaluation of the antimicrobial properties against the pathogen of *V. harveyi* 234, ECPs enzymatic activities determination produced by the probiotic Pdp9 culture and by the mixed probiotic-*Vibrio* culture. Posteriorly, the effect of different treatments upon the ECPs antimicrobial activity was observed, according to Noonpakdee¹. We carried out various *in vitro* experiments in order to detect the production of antimicrobial substances inhibiting pathogens according to Tagg & McGiven², Dopazo³ and Liu⁴, regarding the references on the potential probiotic effects of the above mentioned microorganisms

Antimicrobial activities observed with probiotic Pdp9 extracellular products are probably the result of a bacteriocine-like substance (BLIS).

REFERENCES

- Noonpakdee W., Santivarangkna C., Jumriangrit P., Sonomoto K., Panyim S.: Int. J. Food Microbiol. 81, 137 (2003).
- Tagg & McGiven A. R.: Appl. Microbiol. 21, 934 (1971).
- Dopazo C. P., Lemos M. L., Lodeiros C., Bolinches J., Barja J. L.: J. Appl. Bacteriol. 65, 97 (1988).
- Liu P. V.: J. Bacteriol. 74, 718 (1957).

8L-04**INHIBICE RŮSTU BAKTERIÍ *Salmonella enteritidis*
A *Escherichia coli* NA LEDOVÉM SALÁTU SILICEMI
Satureja montana A *Thymus vulgaris* – ROSTLIN
OBSAHUJÍCÍCH FENOLICKÉ SLOŽKY TYMOL
A KARVAKROL****LENKA NEDOROSTOVÁ^a, PAVEL KLOUČEK^a,
LADISLAV KOKOŠKA^b A MILUŠE ŠTOLCOVÁ^a**

^a Katedra rostlinné výroby, Fakulta agrobiologie, potravinových a přírodních zdrojů, Česká zemědělská univerzita v Praze, Kamýcká 129, 165 21 Praha 6-Suchdol, ^b Katedra tropických subtropických plodin a agrolesnictví, Institut trpů a subtropů, Česká zemědělská univerzita v Praze, Kamýcká 129, 165 21 Praha 6-Suchdol
nedorostova@af.czu.cz

Je známo, že schopnost silic rostlin *T. vulgaris* a *S. montana* inhibovat bakteriální kmeny jako jsou *E. coli* a *S. enteritidis* souvisí přímo s obsahem jejich fenolických složek tymolu a carvacrolu¹.

Cílem této studie je ověření této skutečnosti přímo na konkrétní potravině, v našem případě na ledovém salátu, který byl vložen do Petriho misky, inokulován bakteriální suspenzí a do víčka dán filtrační papír s konkrétní dávkou silice. Následně byla miska uzavřena a ponechána 3 dny v optimální teplotě pro růst bakterií. Poté byly stanoveny počty bakterií standardní deskovou metodou na selektivních médiích.

Nárůst obou bakterií se v kontrole se pohyboval v řádech 10⁹. Silice *T. vulgaris* inhibovala růst obou bakterií v dávce 0,66 μl cm⁻³ o 4 řády (nárůst 10⁵). Silice *S. montana* inhibovala růst *E. coli* v dávce 0,66 μl cm⁻³ o 3 řády (nárůst 10⁶) a *S. enteritidis* v dávce 0,53 μl cm⁻³ o 4 řády (nárůst 10⁵). Lze tedy konstatovat, že silice *T. vulgaris* a *S. montana* inhibují růst bakterií *E. coli* a *S. enteritidis* nejen v podmínkách *in vitro*, ale i přímo v konkrétní potravině.

Tato práce vznikla za podpory grantu CIGA 20082009 a MSM 6046070901.

LITERATURA

1. Penalver P., Huerta B., Borge C., Astorga R., Romero R., Perea A.: *APMIS* 113, 1 (2005).

8L-05**CHARACTERISTICS OF THE SOME UNUSUAL
VEGETABLE OILS FOR EDIBLE USES****ŠTEFAN SCHMIDT, MARTINA TOPORKOVÁ,
STANISLAV SEKRETÁR, OYBEK ZUFAROV,
and EVA KRAJČOVÁ**

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava, Slovak Republic
stefan.schmidt@stuba.sk

In recent years many new oilseed species have been investigated as potential source of vegetable oils for edible and oleochemical uses¹. The basic chemical and physical

properties of unusual oleaginous raw materials of the plant origin and their oils were studied in this work. Sunflower seed, rapeseed, soyabeans, groundnuts and their oils were used as reference samples. The oil content was in the range of 4–46 % in the analysed fruit and vegetable seeds. The highest oil content was discovered in pumpkin seeds (46 %). Obtained oils were the semi-drying ones with the iodine number ranged between 100–150 (cit.¹).

The oleic acid dominated in the oils obtained from stone-fruit seeds². Its content was in range 43–69 wt.%. The linoleic acid predominated in the oils obtained from kernelled fruit (37–74 wt.%). The yellow oil pressed from paprika seeds contained the greatest percentage of essential linoleic acid (75 %). Only traces of the linolenic acid were present, besides the oil from currant rests.

Although the content of bioactive compounds in tested oils was different, all vegetable oils may be appropriate for edible uses.

This work was supported by the grant APVV-0310-06 and grant VEGA 1/0746/08.

REFERENCES

1. Angelini L., Moscheni E., Colonna G., Belloni P., Bonari E.: *Ind. Crop. Prod.* 6, 313 (1997).
2. Szentmihalyi K., Vinkler P., Lakatos B., Illes V., Then M.: *Bioresource Technol.* 82, 195 (2002).
3. Schmidt Š., Čanigová M., Ševcová J.: *Bull. Potravn. Výsk.* 26, 289 (1987).
4. Čanigová M., Schmidt Š., Koman V.: *Bull. Potravn. Výsk.* 27, 83 (1988).

8L-06**SOME RISK FACTORS OF MICROWAVE COOKING****STANISLAV SEKRETÁR, ŠTEFAN SCHMIDT,
and OYBEK ZUFAROV**

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava, Slovak Republic
stanislav.sekretar@stuba.sk

Microwave ovens are widely used for cooking and food processing for its advantages, which include speed and convenience. However, the safety of the microwaved food is still questionable. There are some health risk factors associated with microwave heating: the nutrient and probiotics losses, the formation of unknown chemicals, the migration of plasticisers from plastic packages into heated foods etc. Some studies have been published on the effects of microwaves on food nutrients, edible fats and its constituents^{1–5}.

In this work we summarize the effects of above mentioned factors and in detail we show the effects of microwave heating on lard, sunflower and rapeseed oils. The oxidation stability of various fat substrates (lard, rapeseed and sunflower oils) was investigated during 20 min microwave and conventional heating experiments and the degradation changes were examined and evaluated from the health risk point of view. It was confirmed that the microwave heating accelerates fats oxidation two or three times faster than con-

ventional heating at 155 °C. This effect only starts when the temperature of samples rises over 100 °C. Below this temperature the rate of oxidation was relatively slow. Generally, after 16 min of microwave heating the peroxide value of fat samples reached the value 60, which is nearly six times more than is the maximum permissible value for edible fats. In directed microwave heating experiments, when the temperature of samples was kept below 100 °C (by breaking the heating), only slight oxidation was observed. Further we observed the direct proportionality between the rate of fat oxidation and contact area of fat samples with the air.

Some attempts were made to minimize this undesirable effect with the addition of antioxidants (0,1 % of BHT or rosemary extract). The best results were observed for lard, moderate for sunflower and rapeseed oils.

This work was supported by the grant APVV-0310-06 and grant VEGA 1/0746/08.

REFERENCES

1. Cossignani L., Simonetti M. S., Neri A., Damiani P.: *J. Amer. Oil Chem. Soc.* 75, 931 (1998).
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. Farag R. S.: *Fat. Sci. Technol.* 96, 215 (1994).
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).

8L-07

CHANGES IN CHEMICAL COMPOSITION OF AGING BEER

DANIELA ŠMOGROVIČOVÁ and PAVOL NÁDASKÝ

*Department of Biochemical Technology FCHFT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava 1, Slovak Republic
daniela.smogrovicova@stuba.sk*

Currently, the main quality problem of beer is a gradual change in its chemical composition during storage, which negatively alters its sensory properties. Besides the storage temperature and conditions, the characteristics of aging beer are affected mainly by its chemical composition. Polyphenols present in beer act like antioxidants, which are involved in maintaining the physical and chemical stability of beer by elimination of free radicals¹.

This contribution summarises our current knowledge about the chemical origin of various aging flavours and the reaction mechanisms responsible for their formation. Changes in some characteristics and antioxidative activity of lager beers stored for nine weeks at different temperatures, or processed by a treatment simulating beer aging by oxidative damage were revealed.

In all samples, a decrease in the content of higher alcohols and total polyphenols was observed. Conversely, the content of esters and fatty acids increased. After nine weeks, a 15.4 % and 14.8 % decrease of the antioxidative activity at

a higher and lower temperature, respectively, was observed in beer of 10 % original gravity. In the case of lager beers of 12 % original gravity, the decrease of antioxidative activity was less pronounced – 13.4 % in beer exposed to 22 °C, and only 5.5 % in beer treated at 6 °C. After the oxidative treatment, the loss of antioxidative activity was 20 % in beer of original gravity 10 % and only 17.9 % in beer of original gravity 12 %. The antioxidative activity was determined by an EPR spin-trapping technique², ferric reducing antioxidant potential method (FRAP)³, and a method using the extinction of a synthetic radical cation ABTS⁺ – 2,2'-azinobis-(3-ethylbenzothiazoline-6-sulfonic acid) diammonium salt⁴.

The work was supported by the Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of Slovak Republic No. 1/0786/08.

REFERENCES

1. Vanderhaegen B., Neven H., Verachtert H., Derdelinckx G.: *Food Chem.* 95, 357 (2006).
2. Andersen M. L., Outtrup H., Skibsted, L. H.: *J. Agric. Food. Chem.* 48, 3106 (2000).
3. Benzie L. F., Strain J.: *Anal. Biochem.* 239, 70 (1996).
4. Re R., Pellegrini N., Proteggente A., Pannala A., Yang M., Rice-Evans C.: *Free Radical Biol. Med.* 26, 1231 (1999).

8L-08

RAFINÁCIA REPKOVÉHO, SLNEČNICOVÉHO A SÓJOVÉHO OLEJA

**OYBEK ZUFAROV, ŠTEFAN SCHMIDT
a STANISLAV SEKRETÁR**

*Oddelenie potravinárskej technológie Fakulty chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika
oybek.zufarov@stuba.sk*

Existujú dve metódy rafinácie rastlinných olejov, chemická a fyzikálna rafinácia. Najstaršou metódou rafinácie je chemická rafinácia. Druhá metóda je fyzikálna rafinácia. Na rozdiel od chemickej rafinácie sa pri fyzikálnej rafinácii voľné mastné kyseliny odstraňujú v procese destilácie, pomocou vodnej pary pri hlbokom vákuu¹⁻³.

Rastlinné oleje ako slnečnicový, repkový a sójový boli rafinované etanolaminom. Na základe výsledkov rafinácie repkového, sójového a slnečnicového oleja bolo možné vyvodiť, že táto metóda rafinácie olejov ma veľa výhod. Hlavná výhoda je v tom, že v jednom procese sa dá znížiť obsah fosforu v repkovom oleji od 863,6 mg kg⁻¹ do 11,6 mg kg⁻¹, v slnečnicovom oleji od 253,5 mg kg⁻¹ do 2 mg kg⁻¹ a v sójovom oleji od 715,6 mg kg⁻¹ do 2 mg kg⁻¹. Okrem toho číslo kyslosti u všetkých olejov kleslo na menej ako 0,5 mg KOH g⁻¹. Obsah vápniku, horčíku a železa tak isto klesol po spracovaní olejov etanolaminom.

Celý proces prebieha pri izbovej teplote, čo je ekonomický výhodné. Keď celý proces prebieha pri izbovej teplote, tak sa predpokladá že sa odstráni aj časť voskov v oleji, okrem toho farba olejov sa zlepšila s porovnaním s farbou vodne hydratovaných olejov. Táto metóda spojila v jednom procese

odstránenie voľných mastných kyselín, odslizovanie, čiastočnú venterizáciu a odfarbovanie olejov, počas celého procesu nie sú žiadne nároky na teplotu.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0746/08 a APVV – 0310–06.

LITERATÚRA

1. Gancedo B., Carlos J.: PCT Int. Patent Appl. WO 2007/036594 A 1.
2. Kellens M.: PCT Int. Patent Appl. US 6.953.499.
3. Kellens M., Harper T.: PCT Int. Patent Appl. EP1258524.

8L-09

„PŘÍRODNÍ=ZDRAVÝ“

VĚRA SCHULZOVÁ a JANA HAJŠLOVÁ

Ústav chemie a analýzy potravin, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6

vera.schulzova@vscht.cz; jana.hajslova@vscht.cz

Měníci se životní styl v rozvinutých zemích odráží pozornost veřejnosti otázkám životního prostředí a osobního zdraví. Zájem o „zdravé“ a „přírodní“ potraviny, které jsou šetrně zpracovány a neobsahují syntetická aditiva, exponenciálně vzrůstá. Percepce obsahu těchto pojmů odborníky a laickou veřejností je značně odlišná. Potraviny totiž mohou obsahovat řadu přirozených biologicky aktivních sloučenin s negativními efekty na zdraví člověka, které se řadí do kategorie přírodních toxinů, a proto často používaný antipační slogan „přírodní = zdravý“ neodpovídá zcela skutečnosti. Řada rostlin, včetně zemědělských plodin, totiž obsahuje toxické produkty sekundárního metabolismu rostlin, které jsou součástí jejich přirozeného ochranného systému. Z hlediska bezpečnosti potravin jsou nicméně nejvíce sledovanou skupinou mykotoxiny. Poslední výzkumy ukázaly, že kromě forem, pro které jsou stanoveny hygienické limity, představují riziko i tzv. maskované formy mykotoxiny. Konjugáty, které vznikají detoxikačními procesy v rostlinných buňkách mohou být při zpracování kontaminované suroviny uvolněny. Uvedené látky mohou v gastrointestinálním traktu lidí či hospodářských zvířat uvolnit a navýšit expoziční dávku daného organismu a potažmo zvýšit zdravotní riziko. Nové poznatky se týkají především *Fusariových* toxinů, zearalenu a deoxynivalenolu (DON). Vysoké hladiny DON-3-glukosidu byly nedávno prokázány v různých typech fermentovaných výrobků, včetně některých druhů piva.

Příklady rostlinných toxinů, které se staly cílem intenzivního výzkumu i předmětem často velmi kontroverzních postojů odborníků jsou uvedeny spolu se stručnými charakteristikami níže:

Glykoalkaloidy. Tak zvaný solanin se nachází v bramborách (*Solanum tuberosum*). Jde o komplex steroidních glykoalkaloidů tvořených zhruba z 95 % α -solaninem a α -chaconinem. V rajčatech (*Lycopersicon esculentum*) se nachází jako hlavní glykoalkaloid α -tomatin, minoritní složku tvoří dehydrotomatin. V České republice jsou hladiny glykoalkaloidů regulovány vyhláškou Ministerstva zdravotnictví č. 53/2002 Sb., která

stanovuje přípustné množství glykoalkaloidů (suma α -chaconinu, α -solaninu a α -tomatinu) ve výši 200 mg kg⁻¹. Glykoalkaloidy lze nalézt i v některých dalších druzích zeleniny, např. lilku.

Kalysteginy. V rostlinách rodu svlačcovité (*Convolvaceae*), morušovníkovité (*Maraceae*) a lilkovité (*Solanaceae*) byl prokázán obsah kalysteginů – nortropanových alkaloidů. V současné době bylo identifikováno 17 různých kalysteginových alkaloidů, vyskytují se i v bramborách.

Furanokumariny. Jde o toxické sekundární metabolity, které lze nalézt v rostlinách čeledi miříkovitých (*Apiaceae*), routovitých (*Rutaceae*) a morušovníkovitých (*Moraceae*). Podle chemické struktury se furanokumariny rozdělují na lineární (psoralen, bergapten, xanthotoxin, trioxsalen, isopimpinellin) a angulární (angelicin, sfondin, pimpinellin, isobergapten). Během skladování kořenové zeleniny dochází k nárůstu jejich obsahu.

Pyrrolizidinové alkaloidy. patří do široké skupiny přírodních toxinů, které se vyskytují ve 3 % všech kvetoucích rostlin, léčivých i pleveňných, v květech i plodech 6000 druhů rostlin z 13 čeledí (brutnákovité, hvězdčovitité, bobovité, řešetlákovitité, otočnickovitité...). Do cereálních potravin mohou proniknout nejen přenosem semeny či jinými fragmenty plevelných rostlin, nalézt je lze i v medu (přenos pylu) či v mléku (krmivo).

Fytoestrogeny. Jde o široké spektrum sloučenin interferujících s endokrinním systémem. Jejich účinek na lidský organismus je do jisté míry kontroverzní. Mohou vykazovat jak pozitivní, tak negativní zdravotní efekty, důležitý je nejenom jejich obsah v konzumovaných potravinách, ale věk a celkový zdravotní stav daného konzumenta. Látky s estrogenním potenciálem byly prokázány v asi 300 druzích rostlin. Mezi fytoestrogeny jsou zařazeny isoflavony luštěnin (daidzein a tenistein), pterokarpany v klíčících sójových bobech (*Glycine soja*) a picinách (kumestrol) a lignany lnu setého (*Linum usitatissimum*) (matairesinol a sekoisolarici-resinol).

Minimalizace hladin přírodních toxinů v dietě vychází z řady aspektů. Již v úvodní fázi je nutné vybírat odrůdy s přirozeně nízkými hladinami daných sekundárních metabolitů a pěstovat je za podmínek, které nevedou k iniciaci zvýšené jejich biosyntézy. V případě mykotoxinů je nutné komplexně zvážit způsob ochrany proti rozvoji toxigenních plísní, některé fungicidy, jako jsou třeba strobiluriny, sice ve značné míře eliminují tyto škodlivé činitele, nicméně hladiny mykotoxinů ve finální plodině mohou po ošetření vzrůst. Nezanedbatelnou roli hrají i vlastní zpracovatelské technologie, jejich správná volba vycházející ze znalostí distribuce a stability daného přírodního toxinu může významným způsobem přispět ke snížení terminálních hladin škodlivin.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR v rámci Výzkumného záměru MSM 6046137305.

LITERATURA

1. Lancová K., Hajslova J., Poustka J., Krplova A., Zachariasova M., Dostalek P., Sachambula L.: Food Addit. Contam. 25, 732 (2008).
2. Friedman M.: J. Chromatogr., A 1054, 143 (2004).
3. Hajšlová J., Schulzová V., Slanina P., Janné K., Hellenäs K. E., Anderson C.: Food Addit. Contam. 22, 514 (2005).
4. Hajšlová J., Schulzová V.: *Odborná studie VŠCHT*,

- ÚZPI Praha (2006).
- Peroutka R., Schulzová V., Botek P., Hajšlová V.: J. Sci. Food Agric. 87, 2152 (2007).
 - Hajšlová J., Schulzová V., Botek P., Lojza J.: Czech J. Food Sci. 13, 29 (2004).
 - Schulzová V., Hajšlová J., Botek P., Peroutka R.: J. Sci. Food Agric. 87, 2763 (2007).

8L-10**SLEDOVANIE VPLYVU PRÍDAVKOV CÍCEROVEJ ZMESI A CÍCEROVEJ MÚKY NA KVALITU PEKÁRSKÝCH VÝROBKOV**

MICHALA JANCUROVÁ, LUCIA MINAROVIČOVÁ, ALEXANDER DANDÁR a ZUZANA KUŠÍKOVÁ

*Oddelenie potravinárskej technológie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika
michala.jancurova@stuba.sk*

Cícer baraní (*Cicer arietinum* L., *Fabaceae*) je po fazuli a hrachu treťou najvýznamnejšou strukovinou na svete. Strukoviny sú podstatnou zložkou vyváženej ľudskej stravy vo viacerých krajinách sveta, vďaka vysokému obsahu bielkovín a škrobu a práve preto sme sa rozhodli preskúmať význam jednej z nich a to práve málo známeho cíceru. Cícer baraní patrí totiž z hľadiska nutričnej hodnoty a organoleptických vlastností medzi najkvalitnejšie strukoviny a je pomerne dobrým zdrojom lyzínu.

Cieľom nášho výskumu bolo sledovať vplyv prídavkov cícerovej zmesi, ktorá obsahovala rôzne zlepšujúce prípravky a prídavkov cícerovej múky a s tým spojené zmeny v objeme, tvare, klenutosti a tiež v senzorickej prijateľnosti (chuť, vôňa, farba) výrobkov.

Porovnanie štandardného pečiva s pečivom so 40% prídavkom cícerovej zmesi bolo jednou z našich úloh. Toto porovnanie sme vykonali na overenie vplyvu cícerovej zmesi, ktorá obsahovala aj iné aktívne látky ovplyvňujúce akosť výrobkov. V ďalšej časti našej práce sme sledovali vplyv rôznych prídavkov (20, 30, 40%) cícerovej zmesi, pričom sme sa zamerali najmä na objem, klenutosť, celistvosť výrobkov, vyrovnanosť chute a výraznosť cícerovej chute. Na záver sme porovnali cícerové pečivo (40% prídavok cícerovej zmesi), ktoré sme v tomto prípade považovali za náš štandard, s pekárskymi výrobkami, kde bola použitá cícerová múka v rôznych množstvách (5, 10, 15, 20%) z celkového množstva múky.

Naším výskumom sme dospeli k záveru, že senzoricke najvyhovujúcejší je 40% prídavok cícerovej zmesi oproti 30% a 20%, kde bola chuť hodnotiteľmi vyhodnotená ako nepostačujúca. Pri použití čistej cícerovej múky sa nedosiahli také priaznivé výsledky ako pri použití komerčnej cícerovej zmesi. Výrobky s obsahom čistej cícerovej múky (5, 10, 15, 20%) mali nevýraznú chuť a podľa niektorých hodnotiteľov mali až mierne nasladlú chuť, farbu striedky žltú a boli nízke.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA č. 1/0570/08.

8L-11**VPLYV KADMIA NA CELKOVÚ ANTIOXIDAČNÚ AKTIVITU V OLEJNINÁCH**

ĽUBOŠ HARANGOZO, ALENA VOLLMANNOVÁ, PAVOL TREBICHALSKÝ a RADOVAN STANOVIČ

*Katedra chémie, FBP, Slovenská poľnohospodárska univerzita, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, Slovensko
lubos.harangozo@uniag.sk, alena.vollmannova@uniag.sk*

Cieľom práce bolo sledovanie obsahu kadmia v semenách olejnin a následne zistiť ako dané množstvo kadmia vplýva na celkovú antioxidačnú kapacitu.

Na realizáciu experimentu sme použili poľnohospodársky využívanú pôdu z lokality Výchapy–Opatovce. V pokusoch sme použili mak siaty, ľan siaty, slnečnicu ročnú a horčicu bielu. Do jednej pokusnej nádoby sme navázili 5 kg záujmovej pôdy premiešanej s 1 kg kremičitanového piesku. Do každej nádoby sme aplikovali vypočítané dávky základného hnojenia NPK.

U každej plodiny boli realizované 4 varianty. Kontrolný variant len s prídavkom NPK (variant A) a ďalšie tri varianty B,C,D okrem základného hnojenia aj so stupňujúcim sa prídavkom kadmia vo forme vodorozpustnej soli CdCl₂.

Plodiny sme zberali v čase plnej zrelosti a po mineralizácii rastlinných vzoriek suchou cestou sme stanovili obsah kadmia metódou AAS na prístroji Varian AA 240FS.

Olejninu prijímajú pri zvýšenom množstve kadmia v pôde pomerne značné množstvo do zrna. Najviac kadmia do zrna prijala slnečnica v porovnaní s ostatnými olejninami. Najmenší príjem kadmia pri jeho najvyššej dávke v pôde sme zistili pri horčici. Nárast obsahu kadmia v nadzemnej biomase bol najvyšší u horčici.

Najväčšiu celkovú antioxidačnú kapacitu sme zaznamenali pri slnečnici ročnej vo variante B a to 82,41 %, s najnižším prídavkom kadmia do pôdy 4,6 mg kg⁻¹. V ostatných variantoch sa celková antioxidačná kapacita výrazne nezmenila. Najnižšia celková antioxidačná kapacita bola zistená pri ľane siatom vo variante D, s prídavkom kadmia 13,5 mg kg⁻¹ a to 9,76 %.

Aj keď výsledky naznačujú, že pri mierne zvýšenom množstve kadmia bola zvýšená aj celková antioxidačná kapacita v rastlinách, nie je možné zatiaľ definovať ich jednoznačný vzájomný vzťah.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1 – 3455–06.

8L-12

KADMIUM AKO ČINITEL VPLÝVAJÚCI NA OBSAH POLYFENOLOV V LIEKU ZEMIAKOVOM (*Solanum tuberosum*, L.)**LINDA PELTZNEROVÁ, JANETTE MUSILOVÁ, JUDITA BYSTRICKÁ a ĽUBOŠ HARANGOZO***Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre, Trieda A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, Slovensko
linda.peltznerova@uniag.sk*

Poľnohospodárska produkcia sa významným spôsobom podieľa na zabezpečovaní potravín a výžive obyvateľstva. Kumulácia ťažkých kovov v pôdach negatívne ovplyvňuje kvalitu poľnohospodárskej produkcie, a tým predstavuje neustále riziko ohrozenia potravinového reťazca.

Práca bola zameraná na sledovanie vplyvu obsahu ťažkých kovov (TK), v tomto prípade zámerne pridávaného kadmia, na obsah celkových polyfenolov v hľuzách ľuľka zemiakového.

Experiment bol realizovaný formou vegetačného nádobového pokusu. V experimente sme použili zmes pôdy odobratej v lokalite Výčapy-Opatovce a kremičitého piesku v pomere 21:4. Pôda z vybranej lokality mala kyslý charakter, ktorý výrazne ovplyvňuje prechod TK v systéme pôda-rastlina. Pokus bol realizovaný v 4 variantoch, z čoho bol jeden variant kontrolný, len s prídavkom základného hnojenia NPK v pomere 15: 10: 10. V ďalších variantoch bolo k základnému hnojeniu pridávané aj kadmium vo forme vodorozpustnej soli chloridu kademnatého. Kadmium bolo pridané v množstvách 3, 5 a 10 mg Cd kg⁻¹ pôdy. V experimente boli použité 2 rôzne odrody ľuľka zemiakového (*Solanum tuberosum*, L.). – stredne skorá: odroda Agria a skorá: odroda Livera. Každá odroda bola pestovaná v každom pôdnom variante.

Obsah celkových polyfenolov sme stanovili metódou podľa Lachmana. Merali sme na spektrofotometri pri vlnovej dĺžke 765 nm.

Z nameraných hodnôt sme zistili, že skorá odroda Livera má vyšší obsah celkových polyfenolov ako stredne skorá odroda Asterix. Po zámerom pridaní kadmia v množstvách 3 a 5 mg sme pri oboch odrodách zaznamenali postupný pokles obsahu celkových polyfenolov. Pri dávke kadmia 10 mg sme, v porovnaní s kontrolným variantom, u oboch odrôd zaznamenali nárast obsahu celkových polyfenolov. Keďže sa jedná o jednoročné výsledky, je nutné ich v budúcnosti overiť.

Táto práca vznikla za podpory projektu VEGA 1/4428/07.

LITERATÚRA

1. Bencko V, Cikrt M., Lener J: *Toxické kovy v životnóm a pracovnóm prostredí človeka*. Grada Publishing, Praha 1995.
2. Davídek J.: *Chemie potravín*. SNTL, Praha 1983.
3. Tomáš J., v: *Zborník Výživa a potraviny pre 3. tisícročie – Spoločné stravovanie. Nitra 2004*. s. 234–237. SPU, Nitra 2004.

8L-13

ÚROVEŇ PRECHODU ŤAŽKÝCH KOVOV DO JAČMEŇA JARNÉHO DOPESTOVANÉHO NA KONTAMINOVANEJ PÔDE**JUDITA BYSTRICKÁ, JÚLIUS ÁRVAY, ANNA HRUŠKOVÍČOVÁ a JURAJ ČÉRY***KCH, FBP, SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, Slovenská republika
judita.bystricka@centrum.sk*

K vstupu najdôležitejším toxickým prvkom, olova, kadmia, ortuti a arzenu do potravinového reťazca treba venovať zvýšenú pozornosť. Kvalita dopestovaných poľnohospodárskych produktov v značnej miere závisí od kvality pôdneho fondu¹. Ťažké kovy sa do potravín dostávajú rôznymi cestami, podobne ako ďalšie kontaminanty, ktoré sa vyznačujú rozdielnym zdrojom pôvodu, vlastnosťami ako aj pôsobením na živé organizmy². Ťažké kovy môžu mať na človeka karcinogénny vplyv, teratogénny a mutagénny účinok, ktorý je charakterizovaný indukciou kvalitatívnych a kvantitatívnych zmien v genetickej informácii organizmu.

V práci sme sledovali pozemok Suché lúky, ktorý sa nachádza pri obci Dudince. Z 12 odberných miest sme odobrali vzorky pôdy a uskutočnili sme chemické analýzy na ziskanie obsahu sledovaných rizikových prvkov. Obsah vybraných ťažkých kovov (Cd, Pb) sme sledovali vo výluhu NH₄NO₃ s c = 1 mol dm⁻³.

Z dosiahnutých výsledkov vyplýva, že na všetkých odberných miestach boli prekročené namerané hodnoty v porovnaní s limitnými hodnotami podľa Zákona č. 220/2004. V prípade kadmia namerané hodnoty boli v intervale od 0,11–0,28 mg kg⁻¹ a v prípade olova sme namerali hodnoty od 0,25–0,52 mg kg⁻¹. Takisto sme analyzovali úrodu zrna jačmeňa jarného (JERSEY E2). Obsah ťažkých kovov v zrne jačmeňa jarného sme získali po mineralizácii rastlinného materiálu suchou cestou. Obsah kadmia v zrne jačmeňa jarného dopestovaného na pozemku Suché lúky sa pohybovala v intervale od 0,10–0,32 mg kg⁻¹, obsah olova sa pohyboval od 0,70–6,5 mg kg⁻¹. Analytická koncovka bola AAS (VARIAN AA 240 FS).

Získané výsledky zo sledovaného pozemku naznačujú na zvýšený prechod kadmia a olova do dopestovanej produkcie čo má za následok zníženie kvality dopestovanej potravinárskej suroviny.

Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore projektu VEGA č. 1/2428/05.

LITERATÚRA

1. Tóth T., Tomáš T., Lazior P., Chlpík J., Jomová K., Hegedusová A.: *57. zjazd Chem. spoločnosti. Tatranské Matliare, 2005*, Book of abstracts, str. 285.
2. Bajčan D., Lahučký L., Stanovič R., Trebichalský P., TImoracká M.: *Výživa a potraviny pre tretie tisícročie „Výživa a nádorové ochorenia“*. Nitra 2006. SPU, Nitra 2006.

8L-14**URČENIE NAJMOBILNEJŠÍCH PODIELOV FRAKCIÍ
VYBRANÝCH RIZIKOVÝCH PRVKOV
STANOVENÝCH RÔZNYMI EXTRAČNÝMI
ČINIDLAMI****JURAJ ČÉRY, MÁRIA TIMORACKÁ, SILVIA
MELICHÁČOVÁ a JOZEF KULICH***Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva,
SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra, Slovensko
juraj.cery1@hotmail.com*

Ťažké kovy patria medzi základné skupiny znečisťujúcich látok, ktoré sa sledujú v rôznych zložkách životného prostredia. Ide o pomerne rozsiahlu skupinu kontaminantov, ktoré sa vyznačujú rozdielnymi vlastnosťami, účinkami i zdrojmi svojho pôvodu. Rizikovosť ťažkých kovov spočíva v ich toxickom účinku.

V práci sme hodnotili fytotoxicitu deviatich vybraných rizikových prvkov (Cd, Co, Zn, Mn, Ni, Pb, Cr, Cu, and Fe). Práca je zameraná na špecifitu väzieb medzi prvkami a pôdou z hľadiska mobility prvkov. V pôdach sa rizikové prvky nachádzajú v rôznych formách a ich obsah a dynamiku ovplyvňuje množstvo faktorov, ktoré pôsobia na obsah, formu a chovanie komplexne a často protichodne. Jedným z faktorov je aj pôdna reakcia. Pre určenie špecifity väzby z hľadiska jednotlivých frakcií v pôde sme použili dve selektívne sekvenčné extrakcie, Ziehen a Brümmer (1989); Tessier v modifikácii Leštan (2003). Špecifita väzieb spočíva v nasledovných frakciách ťažkých kovov: mobilné a potenciálne mobilné, rozpustné v pôdnom roztoku, viazané na výmenné pôdne koloidy v pôdnom roztoku, viazané na organickú hmotu, na oxidy Mn, Fe a reziduálnu frakciu pre vyrovnanosť pôdneho materiálu. Výsledky analýz potvrdili platné pravidlo mobility u väčšiny prvkov, teda čím je hodnota pôdnej reakcie nižšia, tým je mobilita vyššia.

Na základe dosiahnutých výsledkov sme zistili, že v oboch extrakčných metódach boli najmobilnejšie tieto anorganické prvky (Cd, Pb, Co, Zn), čo môže mať veľmi výrazný vplyv na biopristupnosť prvkov v potravinovom reťazci. Najmenej mobilné boli prvky (Fe, Ni, Cu). Suma I. a II. frakcie (anorganické prvky pre rastlinu najprístupnejšie) bola vyššia u sekvenčných extrakciách podľa Tessiera v modifikácii Leštana (2003) v porovnaní s metodikou Ziehen a Brümmer (1989).

Tato práce vznikla za podpory projektu VEGA č. 1/2428/05.

LITERATÚRA

1. Tomáš J.: *The contamination of haplic luvisols by heavy metals in chosen agricultural enterprise*. Nitra, 205–209 (2002).
2. Tóth T., Lazor P., Tomáš J., Vollmannová A., Halášová M., Lahučský L., Hegedusová A., Jómová K.: *Contents of heavy metals in various soil types determined by selective sequential extraction*, Nitra, 215 (2002).
3. Sabienė N., Brazauskienė D. M., Rimmer D.: *Ekologija* 1, 36, (2004).

8L-15**PÔDA AKO LIMITUJÚCI FAKTOR PESTOVANIA
KVALITNÝCH POTRAVINÁRSKYCH SUROVÍN****JÚLIUS ÁRVAY, JÁN TOMÁŠ, LADISLAV LAHUČKÝ
a DANIEL BAJČAN***Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre, Tr. A. Hlinku
2, 949 76 Nitra, Slovenská republika
julius.arvay@post.sk*

Úroveň kontaminácie životného prostredia ťažkými kovmi (ŤK) začala nadobúdať neúnosnú mieru na začiatku priemyselnej revolúcie. Zo začiatku sa dopad na environmentálny tlak len priemyselných oblastí, avšak s rozvojom industrializácie nadobudol tento problém globálny charakter.

V práci sme sa venovali monitoringu dvoch rôzne zaťažených oblastí, ktoré sa využívajú na produkciu potravinárskych surovín a potravín. Sledované pozemky (Komárno a Dudince) sa vyznačovali rôznymi chemickými a fyzikálnymi vlastnosťami, ktoré výrazne ovplyvňujú prechod ŤK v systéme pôda-rastlina. Konečným analyzovaným materiálom bolo zrno kukurice sietej – *Zea mays* L. (hybridy KWS GRANEROS a PIONEER PR 37M34).

Obsah sledovaných ŤK v pôde sme sledovali v extrakte lúčavky kráľovskej a výluhu NH_4NO_3 s $c = 1 \text{ mol dm}^{-3}$. Obidva pozemky sa vyznačovali nadlimitnými hodnotami ŤK, avšak úroveň kontaminácie bola výrazne vyššia na pozemku z lokality Dudince, kde bol obsah kadmia v porovnaní s pozemkom z lokality Komárno takmer 10 násobne vyšší a obsah olova prevyšoval koncentráciu viac ako 17 násobne. Mobilné formy kadmia a olova na sledovaných pozemkoch do určitej miery korelovali s ich celkovými obsahmi, čo sme pripísali najmä rozdielnej pôdnej reakcii.

V práci sme analyzovali úrodu zrna kukurice sietej z roku 2007. Obsah ŤK v zrne sme získali po mineralizácii rastlinného materiálu „suchou cestou“. Koncentrácia kadmia v zrne dopestovaného na pozemku z lokality Komárno sa pohybovala v intervale 0,04–0,23 mg kg^{-1} a z lokality Dudince 0,06–0,31 mg kg^{-1} . Obsah olova sa pohyboval v intervale 0,20–0,70 mg kg^{-1} v pôde z lokality Komárno a 0,30–0,95 mg kg^{-1} v pôde z lokality Dudince. Analytickou koncovkou bola AAS (VARIAN AA 240 FS).

Získané výsledky z obidvoch pozemkov poukazujú na fakt, že úroveň prechodu kadmia a olova je vo veľkej miere ovplyvnená pôdnou reakciou a kvalita dopestovanej produkcie je znížená z dôvodu prekročenia NPM stanovených potravinovým kódexom SR.

Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore projektu VEGA č. 1/2428/05.

LITERATÚRA

1. Tóth T., Pospíšil R., Pariláková K., Musilová J., Bystrická J.: *ChemZi* 1, 108 (2005).
2. Stanovič R., Melicháčová S., Trebichalský P.: *Zem v pasci? Analýza zložiek životného prostredia*. Zvolen: TU 2006.

8L-16

POROVNANIE ÚČINKU SÍRY A ORGANICKEJ HMOTY PRI ZNIŽOVANÍ FYTOTOXICITY KADMIA A ARZÉNU**RADOVAN STANOVIČ, JÚLIUS ÁRVAY, SILVIA MELICHÁČOVÁ a PAVOL TREBICHALSKÝ***Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra, Slovensko
radovan.stanovic@uniag.sk*

Cieľom práce bolo sledovanie vplyvu síry a organickej hmoty na fytoxicitu kadmia a arzénu. Pokusy sa realizovali v prirodzených podmienkach ako nádobové pokusy. Sledovaná plodina bola bôb konský. Kadmium sme aplikovali vo forme empirického roztoku $\text{CdCl}_2 \cdot 2 \frac{1}{2} \text{H}_2\text{O}$, arzén vo forme Na_3AsO_4 . Ako organickú hmotu sme použili maštalný hnoj. Každý variant okrem kontrolného obsahoval 10 mg kg^{-1} kadmia, resp. arzénu. Následne bolo samostatne dávkované 100 mg kg^{-1} organickej hmoty a 5 mg kg^{-1} síry. V sledovanej plodine sa prejavil vplyv organickej hmoty aj síry na fytoxicitu oboch ťažkých prvkov.

Čo sa týka potencionálnej schopnosti maštalného hnoja a síry znížiť kumuláciu kadmia a arzénu vo fytohmote bôbu, tá sa prejavila vo všetkých variantoch. Obsah kadmia sa znížil vo variante s kadmium a maštalným hnojom na stopové množstvá. V kombinácii kadmia so sírou klesol obsah kadmia o 4,76 % v porovnaní s variantom so samostatným kadmium. Aj vo variante s arzénom sa potvrdil pozitívny vplyv maštalného hnoja a síry na jeho fytoxicitu. Vo variante s arzénom a maštalným hnojom sa obsah arzénu vo fytohmote znížil o 5,82 % a v kombinácii arzénu so sírou o 29 %.

Porovnaním vplyvu organickej hmoty a síry na fytoxicitu kadmia a arzénu sa pozitívny vplyv prejavil s organickou hmotou aj so sírou v porovnaní s variantom, kde bolo kadmium a arzén aplikované samostatne. Organická hmota má rapídny vplyv na pokles obsahu kadmia, čo dokazuje aj štatistická preukaznosť.

Na základe týchto pokusov možno konštatovať, že organická forma sorbentu je efektívnejšia.

Táto práca bola podporovaná projektami KEGA 3508107 a VEGA 1-3455-06.

LITERATÚRA

1. Kočík K., Ducsay L. 1999. *Acta facultatis ecologiae*. s. 189–205. TU, Zvolen 1999.
2. Tóth T., Tomáš J., Lazor P., Chlpík J., Jomová K., Hegeďusová A.: *ChemZi 1*, 285 (2005).
3. Tomáš J., Vollmannová A., Bystrická J., Bajčan D.: *Výživa a potraviny pre tretie tisícročie, Nitra 2007*, s. 227–234. SPU, Nitra 2004.

1P-01

SYNTHESIS AND PROPERTIES
OF $[\text{Zn}(\text{2-BrC}_6\text{H}_4\text{COO})_2\text{.mpc}_2]$ ANNAMÁRIA ERDÉLYIOVÁ^{a*}, KATARÍNA
GYÓRYOVÁ^a, RÓBERT GYEPES^b, JANA
KOVÁŘOVÁ^c, and LADISLAV HALÁS^a

^a University of P. J. Šafárik, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovak Republic, ^b Charles University, Albertov 8, 128 43 Prague 2, Czech Republic, ^c Institute of Macromolecular Chemistry, AV ČR, Heyrovského nám. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic
annamaria.erdelyiova@student.upjs.sk

Zinc is one of the most important trace elements in the organism. It has a considerable effect on many biological processes. Some of aromatic carboxylic acids have antimicrobial properties and their carboxylic group is available to interact with zinc. For the preparation of effective antimicrobial species it is important to gain information about the structure of the compound. It is of our interest to study the compounds of halogenobenzoic acids with zinc and bioactive ligands.

New zinc(II) 2-bromobenzoate complex compound with methyl-3-pyridylcarbamate (mpc) was prepared by the reaction of zinc 2-bromobenzoate and methyl-3-pyridylcarbamate ($\text{C}_{28}\text{H}_{24}\text{O}_8\text{N}_4\text{Br}_2\text{Zn}$ (Mh: 770.49): Calc.: C, 43.61; H, 3.14; N, 7.27; Zn, 8.49. Exp.: C, 43.93; H, 3.13; N, 7.25; Zn, 8.46 %).

The obtained compound $[\text{Zn}(\text{2-BrC}_6\text{H}_4\text{COO})_2\text{.mpc}_2]$ was characterized by elemental analysis, thermal and spectral methods of analysis. It was found that the studied complex compound is stable up to 165°C. Above this temperature the thermal decomposition is accompanied with the loss of methyl-3-pyridylcarbamate, which is followed by the decomposition of carboxylate anion. Mass spectrometer was used for the determination of intermediate products of thermal decomposition.

X-ray diffraction experiment was carried out to characterize the structural properties of $[\text{Zn}(\text{2-BrC}_6\text{H}_4\text{COO})_2\text{.mpc}_2]$. We found out that two 2-bromobenzoates are chelated to the zinc atom and two methyl-3-pyridylcarbamate ligands are coordinated to zinc by the nitrogen atom of the pyridine ring.

Financial support of the Slovak Ministry of Education (VEGA project 1/0122/08) is gratefully acknowledged.

REFERENCES

1. Győryová K., Chomič J., Szunyogová E., Píknová L., Zelenák V., Vargová Z.: J. Therm. Anal. Cal. 84, 727 (2006).
2. Szunyogová E., Mudroňová D., Győryová K., Nemcová R., Kovářová J., Píknová-Findoráková L.: J. Therm. Anal. Cal. 88, 355 (2007).
3. Zelenák V., Sabo M., Massa W., Llewellyn P.: Inorg. Chim. Acta 357, 2049 (2004).

1P-02

TOXICITA SYNTETICKÝCH Ni(II), Cu(II) a Zn(II)
DITHIOKARBAMÁTŮ V NÁDOROVÉ LINII HELABORIS CVEK^{**a}, JAN TARABA^b, ZDENĚK DVOŘÁK^a
a JITKA ULRICHOVÁ^a

^a Ústav lékařské chemie a biochemie, Univerzita Palackého, 775 15 Olomouc, ^b Katedra anorganické chemie, Masarykova Univerzita, 611 37 Brno
cvekb@seznam.cz

V nedávné studii se ukázalo, že lék disulfiram (antabus), užívaný desítky let klinicky při léčbě alkoholismu, dokáže, je-li podáván se zinkem, *in vivo* potlačit růst melanomu¹. Autoři tuto terapii úspěšně použili u pacientky s metastází v játrech. Disulfiram tvoří s kovy dithiokarbamátové komplexy, které jsou schopny vstoupit do buňky a selektivně *in vitro* potlačit melanom bez poškození zdravých melanocytů². Podstatou efektu je *in vivo* prokázána inhibice proteazomu³. Cílem naší studie bylo u syntetických, dobře charakterizovaných komplexů určit jejich cytotoxicitu.

Komerčně dostupné ligandy diethyldithiokarbamát (DDTC) a dibenzylidithiokarbamát (BZDTC) byly ve vodném prostředí smíchány s Cu(II), Zn(II) a dosud netestovaným Ni(II) v poměru 2:1. Ihned vzniklé sraženiny byly rekrystalizovány z organických rozpouštědel. Výsledky rtg. difrakce jsou v souladu s publikovanými údaji: čtvercové planární či tetraedrická koordinační sféra s možnou tvorbou dimerů (cit.⁴⁻⁶).

Toxicita na modelové nádorové linii HeLa byla stanovena pomocí MTT testu. Oba zinečnaté komplexy byly srovnatelně toxické ($\text{Zn}(\text{DDTC})_2$ $\text{IC}_{50} = 3,5 \mu\text{M}$, $\text{Zn}(\text{BZDTC})_2$ $\text{IC}_{50} = 7 \mu\text{M}$), naopak oba nikelnaté komplexy nevykazovaly cytotoxicitu ani při maximální dostupné koncentraci (20 μM). Mezi toxicitou měďnatých komplexů byl zásadní rozdíl: zatímco sloučenina $\text{Cu}(\text{DDTC})_2$ byla 10× toxicitější než $\text{Zn}(\text{DDTC})_2$, sloučenina $\text{Cu}(\text{BZDTC})_2$ nedosáhla hodnoty IC_{50} ani při nejvyšší dosažitelné koncentraci (20 μM). Toxické komplexy jsou inhibitory proteazomu^{7,8}.

Tato práce je součástí projektu podporovaného granty MSM 6198959216 a GA ČR 303/08/P137.

LITERATURA

1. Brar S. S., Grigg C., Wilson K. S., Holder W. D., Dreaux D., Austin C.: Mol. Cancer Ther. 3, 1049 (2004).
2. Cén D., Brayton D., Shahandeh B., Meyskens F. L.: J. Med. Chem. 47, 6914 (2004).
3. Chen D., Cui Q. C., Yang H., Dou Q. P.: Cancer Res. 66, 10425 (2006).
4. Hogarth G.: Prog. Inorg. Chem. 53, 71 (2005).
5. Decken A., Gossage R. A., Chan M. Y.: Appl. Organomet. Chem. 18, 101 (2004).
6. Cvek B., Husárek J., Pastorek R., Šindelář Z.: Acta Univ. Palacki. Olom., Chemica 43, 68 (2004).
7. Cvek B., Dvořák Z.: Curr. Pharm. Des. 13, 3155 (2007).
8. Dou Q. P.: nepublikované výsledky.

1P-03

TARTARÁTKOMPLEXY VANÁDU(V)

JANA GÁLIKOVÁ^a, PETER SCHWENDT^a a ZDIRAD ŽÁK^b

^a Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovenská republika, ^b Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Masarykova Univerzita, Kotlářská, 611 37 Brno, Česká republika
galikova@fns.uniba.sk

Tmavočervené tartarátokomplexy vanádu(V) zloženia $M_4[V_4O_8(\text{rac-C}_4\text{H}_2\text{O}_6)_2] \cdot \text{aq}$ ($M = \text{K}^+, \text{Na}^+$) alebo $M_4[V_4O_8(\text{R,R-C}_4\text{H}_2\text{O}_6)_2] \cdot \text{aq}$ ($M = \text{N}(\text{CH}_3)_4^+, \text{N}(\text{C}_2\text{H}_5)_4^+, \text{NH}_4^+, \text{K}^+, \text{Na}^+$) boli izolované z mierne kyslého prostredia (pH~6). Štvorjadrové oxokomplexy vanádu(V) s kyselinou 2R,3R-vínnou obsahujú štvorjadrový anión, ktorý sa skladá z cyklického skeletu $V_4O_8^{4+}$ a z dvoch ligandov $(\text{R,R-C}_4\text{H}_2\text{O}_6)^{4-}$. V prípade oxokomplexu s racemickou kyselinou vínnou základná bunka obsahuje štvorjadrové anióny s rozdielnymi enantiomérmi kyseliny vínnej $[V_4O_8(\text{R,R-C}_4\text{H}_2\text{O}_6)_2]$ a $[V_4O_8(\text{S,S-C}_4\text{H}_2\text{O}_6)_2]^1$.

Z kyslého prostredia (pH ~ 2) sa podarilo izolovať červené komplexy typu $(\text{N}(\text{CH}_3)_4)_2[V_2O_2(\text{rac-C}_4\text{H}_2\text{O}_6)_2]$ **I**, $(\text{N}(\text{C}_2\text{H}_5)_4)_2[V_2O_2(\text{rac-C}_4\text{H}_2\text{O}_6)_2]$ **II** a žltý komplex $(\text{N}(\text{CH}_3)_4)_2[V_2O_4(\text{R,R-C}_4\text{H}_2\text{O}_6)_2] \cdot 6 \text{H}_2\text{O}$ **III**. Komplexy **I**, **II** a **III** boli charakterizované pomocou spektrálnych metód (IČ a Ramanovou spektroskopiou, ⁵¹V NMR spektroskopiou) a pomocou rtg. štruktúrnej analýzy.

Komplexy s racemickou kyselinou vínnou obsahujú dvojjadrový anión, kde dve VO^{3+} skupiny sú spojené mostíkovými bis-didentátnymi tartarátoligandami, jedným R,R- a jedným S,S-tartarátoligandom. V látke **III** sa dvojjadrový anión skladá z dvoch VO_2^+ skupín spojených bis-didentátnymi R,R-tartarátoligandami. Tvorba dvojjadrových aniónových tartarátokomplexov vanádu(V) je teda stereospecifická.

Táto práca vznikla s podporou Univerzity Komenského a MŠ SR (Grant VEGA 1/4462/07).

LITERATÚRA

- Schwendt P., Tracey A. S., Tatierysky J., Gáliková J., Žák Z.: Inorg. Chem. 46, 3971 (2007).

1P-04

DEKAVANADIČNAN AKO MOSTÍKOVÝ LIGAND

LENKA KLIŠTINCOVÁ, ERIK RAKOVSKÝ a PETER SCHWENDT

Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, SR
klistincova@fns.uniba.sk

Boli pripravené tri nové zlúčeniny, v ktorých dekanadičnanový anión figuruje ako mostíkový ligand – $(\text{NH}_4)_2[\text{Cu}_2(\text{NH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{COO})_4(\text{V}_{10}\text{O}_{28})] \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$ (**I**), (2-

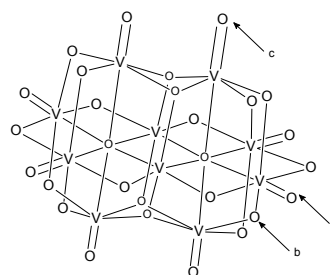


Schéma 1. Dekavanadičnanový anión

-hydroxyetylpyridinium)₂[{Cu (H₂O)₂ (O,N-2-hydroxyetylpyridin)}₂(V₁₀O₂₈)] · x H₂O (**II**) a (2-hydroxyetylpyridinium)₂[{Mn(H₂O)₅}₂(V₁₀O₂₈)] · 2 H₂O (**III**). Štruktúra **I** pozostáva z 1D polymérnych reťazcov, ktoré tvoria pravidelne sa opakujúce dvojjadrové jednotky Cu₂(NH₃CH₂CH₂COO)₄⁴⁺ premostované dekanadičnanovým aniónom. Štruktúra **II** je tvorená komplexnými kationmi {Cu(H₂O)₂(O,N-hydroxyetylpyridin)}⁴⁺ a mostíkovými {V₁₀O₂₈}⁶⁻ aniónmi, ktoré spájajú vždy dva atómy medi. Štruktúra obsahuje voľné kationy organického ligandu a molekuly kryštálovej vody. Štruktúra **III** obsahuje jednotky, v ktorých dekanadičnanový anión spája dva atómy mangánu. Atómy mangánu majú oktaedrickú koordinačnú sféru doplnenú molekulami vody. Štruktúra obsahuje voľné kationy organického ligandu a molekuly kryštálovej vody. Porovnanie štruktúr týchto zlúčenín je veľmi zaujímavé. V štruktúre **I** sa dekanadičnanový anión koordinuje cez terminálne atómy kyslíka V=O ležiace v hlavnej rovine aniónu (schéma 1, poloha a), v štruktúre **II** sa viaže cez mostíkové atómy kyslíka V–O–V (schéma 1, poloha b) a v štruktúre **III** dochádza ku koordinácii cez terminálne atómy kyslíka, ktoré neležia v hlavnej rovine aniónu (schéma 1, poloha c). Dosiaľ bola publikovaná len jedna štruktúra zlúčeniny, kde sa dekanadičnanový anión viaže ako ligand kovalentnou väzbou V–O–M na centrálny atóm prechodného kovu [Cu(2,2'-bpy)₂](H₂V₁₀O₂₈) · 2,2'-bpy · H₂O (**IV**) (bpy = 2,2-bipyridín)¹. V tomto prípade sú donorovými atómami mostíkové atómy kyslíka (schéma 1, poloha b).

Táto práca vznikla s podporou Univerzity Komenského a MŠ SR (Grant Vega 1/4462/07).

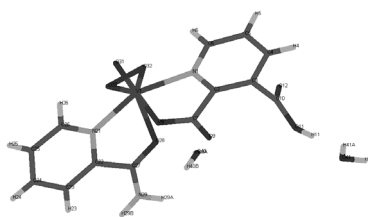
LITERATÚRA

- Li T. H., Lü J., Gao S., Li F., Cao R., Chem. Lett. 36, 356 (2007).

IP-05

MONOPEROXOKOMPLEXY VANÁDU(V)
S ORGANICKÝMI LIGANDAMI S NO A NOO
DONOROVÝM SETOMSILVIA PACIGOVÁ^a, MICHAL SIVÁK^a a ROBERT
GYEPES^b^a Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta,
Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava,
SR, ^b Katedra anorganické chemie, Karlova Univerzita, Pří-
rodovědecká fakulta, Albertov, 128 00 Praha, ČR
pacigova@fns.uniba.sk

Z reakčního systému $V_2O_5 - H_2O_2 - L - H_2O - S$ (L – kyselina chinolinová (H_2quin), pikolinová ($Hpic$) alebo 2,6-pyridindikarboxylová (H_2dipic), pikolinamid (pa); S – isopropanol pri (1-2), acetonitril pri (3)) boli pripravené nové jednojadrové monoperoxokomplexy vanádu(V) zloženia: $[VO(O_2)(pic)(pa)] \cdot H_2O$ (1), $[VO(O_2)(Hquin)(pa)] \cdot 2 H_2O$ (2) a $[Hpa][VO(O_2)(dipic)(H_2O)] \cdot H_2O$ (3). Ich RTG štruktúrna analýza ukázala, že koordinačným polyédrom vanádu v uvedených komplexoch je pentagonálna bipyramída. V štruktúre 1 a 2 (obr. 1), sú štyri „voľné“ polohy polyédra (3 ekvatoriálne a 1 axiálna) obsadené dvomi bidentátnymi organickými ligandami s NO donorovým setom ($Hquin(1-)$, $pic(1-)$ resp. pa). Obsadenie týchto polôh v polyédri vanádu donorovými atómami je v súlade s empiricky odvodenými stereochemickými pravidlami: dva atómy dusíka sú v ekvatoriálnych polohách a dva atómy kyslíka v ekvatoriálnej a axiálnej polohe. V štruktúre 3 tridentátny $dipic(2-)-N,O,O$ ligand obsadzuje tri ekvatoriálne polohy a akva ligandom axiálnu polohu. Štruktúra komplexu 3 je tvorená aj kationmi $Hpa(1+)$ s protonizovaným dusíkom aromatického kruhu. Supramolekulovú architektúru komplexov 1-3 tvoria popri klasických vodíkových väzbách aj C–H...O väzby. Ku stabilizácii štruktúry komplexov prispievajú π – π interakcie medzi pyridínovými kruhmi $pic(1-)$, $dipic(2-)$ a pa ligandov.

Obr. 1. Molekulová štruktúra $[VO(O_2)(Hquin)(pa)] \cdot 2 H_2O$ (2)Táto práca vznikla s podporou Univerzity Komenského
a MŠ SR (Grant VEGA 1/4462/07).

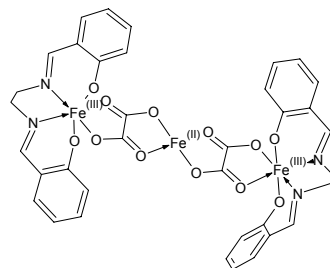
LITERATÚRA

1. Tatiensky J., Schwendt P., Sivák M., Marek J.: Dalton Trans. 13, 2305 (2005).

IP-06

HETEROTRIJADERNÉ (Fe(III))₂ - M(II) SALENOVÉ
KOMPLEXY S OXALÁTOVÝMI MŮSTKY A JEJICH
MAGNETICKÉ A SPEKTRÁLNÍ VLASTNOSTIZDENĚK ŠINDELÁŘ^a, RADOVAN HERCHEL^a,
ZDENĚK TRÁVNÍČEK^a a RADEK ZBOŘIL^b^a Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta Uni-
verzita Palackého Olomouc, Křížkovského 10, 771 47 Olo-
mouc, ^b Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta,
Univerzita Palackého Olomouc, Třída svobody 26, 771 46
Olomouc
zdenek.sindelar@upol.cz

Bylo připraveno celkem šest komplexů o složení, které nejlépe vyjadřuje obecný vzorec $[Fe^{III}(salen)]_2\{\mu-(M^{II}(ox)_2)\} \times 3 H_2O$. Kde $M^{II} = Mn^{II}, Fe^{II}, Co^{II}, Ni^{II}, Cu^{II}, Zn^{II}$. H_2salen je Schiffova báze vzniklá kondenzací salicylaldehydu a ehylen-diaminu, $ox = oxalátový$ anion $C_2O_4^{2-}$. Komplexy byly připraveny reakcemi $[Fe(salen)Cl]$ s oxalátem amonným, kdy tyto reakce vedly ke vzniku komplexu $[Fe(salen)]_2(\mu-ox)$. Ten následně reagoval s dihydráty oxalátů příslušných kovů $M^{II}(C_2O_4) \cdot 2H_2O$ za vzniku komplexů výše uvedeného složení. Reakce probíhaly v prostředí voda-etanol. Předpokládaná struktura připravených sloučenin je zřejmá z obrázku:



Připravené komplexy byly charakterizovány chemickou analýzou prvků, UV-VIS, FT-IR a Moessbauerovou spektroskopii, metodami termické analýzy (TG/DTA), vodivostními měřeními a studiem teplotní závislosti magnetické susceptibilitivity (300 – 2 K). V současnosti probíhají pokusy o přípravu monokrystalů vhodných pro monokrystalovou rentgenovou strukturní analýzu. Geometrie komplexů je také optimalizována na využití DFT výpočtů.

Popsané sloučeniny mají při nízkých teplotách, 2 až 5 K, magnetické vlastnosti molekulárních magnetů s relativně vysokými hodnotami koercitivity, řádově až 100 G. Při vyšších teplotách vykazují tyto komplexy složité výměnné interakce, pro jejichž popis hledáme vhodné modely. Připravené heteronukleární komplexy mohou také sloužit jako prekurzory pro přípravu dobře definovaných směsných oxidů spinelového typu, které jsou rovněž magneticky zajímavými materiály.

Tato práce vznikla za podpory grantu Ministerstva školství
mládeže a tělovýchovy České republiky, Výzkumný záměr
MSM619895218.

IP-07

TETRAKYANOPLATNATANY MEDI: ŠTYRI $\nu(\text{C}\equiv\text{N})$ PÁSY – PREDPOKLAD ZLOŽITEJ ŠTRUKTÚRY**MARTIN VAVRA^a, IVAN POTOČNÁK^a, MICHAL DUŠEK^b a KARLA FEJFAROVÁ^b**

^a Katedra Anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovensko, ^b Fyzikálny ústav AV ČR, v. v. i., Na Slovance 2, 182 21 Praha 8, Česká republika
martin.vavra@upjs.sk

Dôležitým údajom pre charakterizáciu tetrakyanoplatnatanových komplexov je poloha a počet absorpčných pásov $\nu(\text{C}\equiv\text{N})$ v IČ spektrách. Tieto pásy sú zvyčajne pozorované v intervale 2120–2210 cm^{-1} a keďže sa v tejto oblasti spektra nevyskytujú takmer žiadne iné absorpčné pásy, ľahko sa identifikuje ich poloha i počet, ktorý súvisí s počtom rôznych typov kyanidových skupín v štruktúre danej látky. Jedným z cieľov nášho výskumu je príprava nízkorozmerných (iónových, jedno- a dvojrozmerných) mednatých zlúčenín s aniónom $[\text{Pt}(\text{CN})_4]^{2-}$, pričom k načrtnutiu možnej štruktúry danej látky využívame aj výsledky IČ spektroskopie.

Väčšina nami pripravených tetrakyanoplatnatanových komplexov medi obsahuje vo svojich spektrách jeden alebo dva $\nu(\text{C}\equiv\text{N})$ absorpčné pásy čo znamená, že daná zlúčenina obsahuje nízky počet rozdielnych kyanidových skupín a jej štruktúra je jednoduchá. Toto sme potvrdili vyriešením ich štruktúr, ktoré ukázali že ide o jednorozmerné zlúčeniny obsahujúce jeden typ mostíkovej a jeden typ koncovo viazanej kyanidovej skupiny¹. Ale v prípade niekoľkých zlúčenín sme pozorovali až štyri $\nu(\text{C}\equiv\text{N})$ absorpčné pásy, čo znamená väčší počet rôznych kyanidových skupín a teda zložitejšiu štruktúrny typ. Na overenie tohto predpokladu sme vyriešili kryštalové štruktúry týchto látok. Tieto ukázali, že zlúčeniny obsahujú alebo viacjadrové komplexné kationy a nekoordinované anióny $[\text{Pt}(\text{CN})_4]^{2-}$, alebo sú tvorené nekonečnými neutrálnymi dvojrozmernými sieťami, pričom v súlade so štyrmi nameranými $\nu(\text{C}\equiv\text{N})$ absorpčnými pásmi obsahujú tieto zlúčeniny štyri rôzne typy kyanidových skupín. V zlúčeninách s viacjadrovými kationmi sú dva typy koncovo viazanej a dva typy mostíkovej kyanidovej skupiny, zatiaľ čo v prípade dvojrozmerných zlúčenín má anión $[\text{Pt}(\text{CN})_4]^{2-}$ tri rôzne mostikové kyanidové skupiny a štvrtá je viazaná koncovo. V tomto príspevku uvidíme prípravu, fyzikálnochemickú charakterizáciu a kryštalové štruktúry týchto zlúčenín, ako aj príslušné spektrálno-štruktúrne korelácie.

Táto práca vznikla za podpory grantov APVV 20-005204, VVGS 45/07-08, VEGA 1/0079/08, VVGS PF 18/2008/CH a za podpory Grantovej agentúry ČR 202/06/0757.

LITERATÚRA

1. Vavra M., Potočňák I., Dušek M., Wagner C., Steinborn D., v zborníku: *Chemistry, environment & human activity in civilization development*, poster S2-PS2-47, s. 114, Toruń, Poľsko 2007.

IP-08

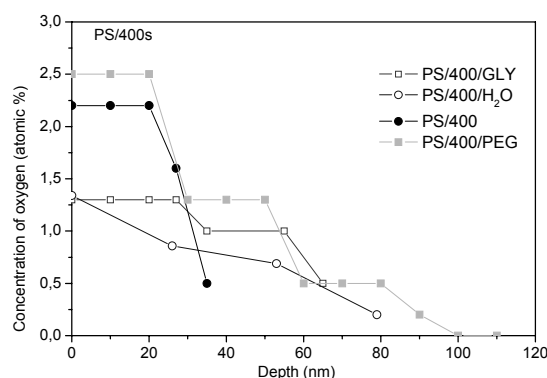
ZMĚNA POVRCHOVÝCH VLASTNOSTÍ U MODIFIKOVANÉHO POLYSTYRENU

KATEŘINA KOLÁŘOVÁ^a, ANNA MACKOVÁ^b, PETR SLEPIČKA^a a VÁCLAV ŠVORČÍK^a

^a VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, ^b ÚJF AV ČR, 250 68 Řež u Prahy
Kolarova@vscht.cz

Díky variabilitě a dobré dostupnosti jsou v medicínské praxi stále více využívány polymerní materiály. Jejich nejširší použití je pro zdravotnický pomocný materiál, nosný materiál pro růst a přenos buněk resp. pro implantáty. U materiálů používaných pro tyto účely má zásadní význam vzájemná interakce mezi povrchem materiálu a buňkami, které na něm rostou. Materiál poskytuje mechanickou stabilitu a buněčná složka vytváří novou tkáň díky extracelulární matrix. Pro podpoření či naopak potlačení buněčné adheze a růstu se povrch materiálu různým způsobem modifikuje. Jedním ze způsobů modifikace je expozice polymeru v plasmě a následné roubování chemických sloučenin. V závislosti na složení plynu přispívá plasma k úpravě polymeru, k jeho ablaci, aktivaci a nebo zesíťování. Díky tomu je možné kontinuálně měnit chemické a fyzikální vlastnosti jako například: smáčivost, přilnavost, index lomu, tvrdost, chemickou odolnost, lubricitu či biokompatibilitu. Dochází ke změně povrchové morfologie. Je to způsobeno tím, že v plasmě jsou přednostně degradovány amorfní oblasti polymeru. Fyzikálně chemické změny na povrchu modifikovaného polymeru byly studovány pomocí goniometrie, mikroskopie atomárních sil (AFM), Rutherfordova zpětného rozptylu (RBS) a infračervené spektroskopie (FTIR).

Po modifikaci PS v plasmě dochází k oxidaci povrchu polymeru a tím i ke změně jeho polaritě. Nejvyšší koncentrace kyslíku na povrchu byla stanovena u vzorků roubovaných polyethylenglykolem (PEG). Při máčení vzorku ve vodě dochází k poklesu oxidovaných struktur na povrchu materiálu,



Obr. 1. Koncentrační profil kyslíku u modifikovaného PS

což potvrzuje i měření obsahu a profilu kyslíku pomocí RBS, neboť došlo k odleptání povrchové modifikované vrstvy PS. Obdobné výsledky byly naměřeny po roubování glycinem (GLY).

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR č. 204/06/0225, MŠMT MSM č. 6046137302 a LC 06041, GA AV ČR č. KAN400480701 a 200100801.

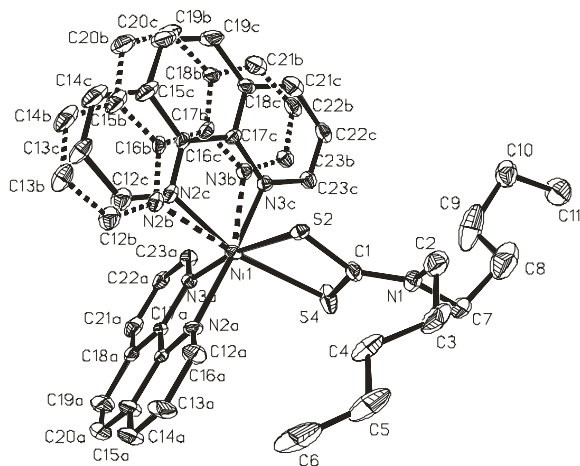
1P-09

STRUKTURA KOMPLEXU $[\text{Ni}(\text{Pe}_2\text{dtc})(\text{phen})_2]\text{ClO}_4$

**JIRÍ KAMENÍČEK^{a*}, RICHARD PASTOREK^a
a VÁCLAV PETŘÍČEK^b**

^a Katedra anorganické chemie PřF UP, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc, ^b Fyzikální ústav Akademie věd, Na Slovance 10, 182 21 Praha
jiri.kamenicek@upol.cz

Komplex $[\text{Ni}(\text{Pe}_2\text{dtc})(\text{phen})_2]\text{ClO}_4$ byl připraven reakcí jemně rozpráskovaných výchozích komponent $[\text{Ni}(\text{Pe}_2\text{dtc})_2]$ (Pe_2dtc^- = dipentyldithiokarbamat)¹, *o*-fenanthrolinu (phen) a $\text{LiClO}_4 \cdot 3 \text{H}_2\text{O}$ v methanolu (molární poměr 1:2:1). Přesný pracovní postup syntézy a další výsledky fyzikálně chemického studia lze nalézt v práci². Odtud vyplynulo, že se jedná o paramagnetický komplex ($\mu_{\text{eff}}/\mu_{\text{B}} = 3,21$), elektrolyt typu 1:1 (v acetonu). Nyní bylo nově rentgenostrukturální analýzou (obr. 1) potvrzeno deformované oktaedrické uspořádání chromoforu NiN_4S_2 , přičemž skupina ClO_4^- není koordinována na centrální atom. Struktura vykazuje značný disorder jak u chloristanu, tak u jednoho z fenanthrolinových ligandů (obsazovací poměr b/c = 0,41/0,59). Veškeré další podrobnosti o struktuře lze nalézt v databázi CCDC³.



Obr. 1. Molekulová struktura komplexu $[\text{Ni}(\text{Pe}_2\text{dtc})(\text{phen})_2]\text{ClO}_4$; ClO_4^- není zakreslena z důvodu přehlednosti

LITERATURA

- Pastorek R., Kameníček J., Cvek B., Pavlíček M., Šindelář Z., Žák Z.: J. Coord. Chem. 56, 1123 (2003).

- Trávníček Z., Pastorek R., Slovák V.: Polyhedron 27, 411 (2008).
- Cambridge Crystallographic Data Centre, 12 Union Road, CB2 1EZ, UK; deposit No. CCDC 626512.

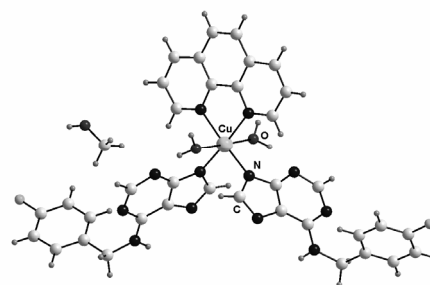
1P-10

JEDNOJADERNÉ Cu(II) KOMPLEXY S KOMBINACÍ DVOU RŮZNÝCH DUŠÍKATÝCH AROMATICKÝCH HETEROCYKLŮ V KOORDINAČNÍ SFÉŘE

ALENA KLANICOVÁ^a, JOSEPH D. HOUCK^b, PETER BARAN^b a ZDENĚK TRÁVNÍČEK^a

^a Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc, ČR, ^b Juniata College, von Liebig Science Center 2035, 1700 Moore Street, Huntingdon PA, 166 52 USA
alena.klanicova@upol.cz

Výzkum derivátů adeninu probíhá již desítky let kvůli jejich různorodé biologické aktivitě, např. stimulace růstu a dělení buněk nebo naopak inhibice cyclin-dependentních kinas, enzymů klíčových pro zdárný průběh buněčného cyklu. Jejich biologický účinek může být výrazně ovlivněn, resp. rozšířen, koordinací těchto organických molekul na vhodný přechodný kov. Byla připravena série jednojaderných oktaedrických Cu(II) komplexů s heterogenní koordinační sférou obsahující kombinaci derivátů 6-(benzylamino)purinu (L) a 1,10-fenanthrolinu (phen). Připravené látky byly charakterizovány chemickou analýzou prvků, FTIR, UV/VIS a MS spektroskopií, měřením magnetické susceptibility, vodivostním měřením, termickou analýzou (TG/DTA) a některé z nich monokystalovou rentgenovou strukturální analýzou (Obrázek 1). Z výsledků uvedených technik vyplývá, že připravené látky mají složení $[\text{Cu}(\text{L})_2(\text{H}_2\text{O})_2(\text{phen})] \times n$ (MeOH), kde $n = 1$ nebo 2. Studium biologické aktivity (cytotoxicity, anti-radikálové aktivity) je předmětem dalšího studia, stejně jako rozšíření řady těchto látek o další sloučeniny.



Obr. 1. Molekulová struktura komplexu $[\text{Cu}(\text{L})_2(\text{H}_2\text{O})_2(\text{phen})] \times \text{MeOH}$; L = 6-(4-fluorbenzylamino)purin

Tato práce vznikla za podpory grantu MSM6198959218.

IP-11 CONTRIBUTION TO FERROCENYL SUBSTITUTED CARBORANES AND METALLACARBORANES

JOSEF HOLUB^{a,*}, BOHUMIL ŠTÍBR^a, and PETR ŠTĚPNIČKA^b

^a Institute of Inorganic Chemistry of the ASCR, v.v.i., 250 68 Řež near Prague, ^b Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Charles University, Hlavova 2030, 128 42 Prague 2
holub@iic.cas.cz

The reaction between 4-Me₂S-*arachno*-B₉H₁₃ and alkynes is known to generate the derivatives of *nido*-5,6-C₂B₈H₁₂ (ref.¹). Herein we report that analogous treatment of 4-Me₂S-*arachno*-B₉H₁₃ with ethynylferrocene, FcC≡CH (Fc = ferrocenyl) in boiling benzene afforded an inseparable 2:1 mixture of 6-Fc-*nido*-5,6-C₂B₈H₁₁ and 5-Fc-*nido*-5,6-C₂B₈H₁₁. This was converted to pure 6-Fc-*nido*-5,6-C₂B₈H₁₁ by the action of Proton sponge (PS), followed by acidification. Dehydrogenation by heating of 6-Fc-*nido*-5,6-C₂B₈H₁₁ at 400 °C led to the isolation of 1-Fc-*closo*-1,10-C₂B₈H₉, while treatment of 6-Fc-*nido*-5,6-C₂B₈H₁₁ with *t*-BuNC and PS generated pure tautomers 7-*t*-BuNH₂-8-Fc-*nido*-7,8,9-C₃B₈H₉ and 7-*t*-BuNH-8-Fc-*nido*-7,8,9-C₃B₈H₁₀ via dissolution in MeCN and CH₂Cl₂, respectively. Both tautomers sharply differ in NMR properties and gave rise to a pair of cage isomeric *closo* ferratricarbollides, 1-η⁵-C₅H₅-2-Fc-12-*t*-BuNH-*closo*-1,2,4,12-FeC₃B₈H₉ and 1-η⁵-C₅H₅-2-Fc-10-*t*-BuNH-*closo*-1,2,4,10-FeC₃B₈H₉, upon heating with [(η⁵-C₅H₅)Fe(CO)₂]₂ in mesitylene at reflux.

Supported by the Ministry of Education of the Czech Republic (project no. LC 523).

REFERENCE

- Štíbr B., Teixidor F., Viñas C., Fusek J.: J. Organomet. Chem. 690, 125 (1998).

IP-12 THE SAME COMPOUND CAN BE ISOLATED IN TWO DIFFERENT STRUCTURES ABSOLUTE TAUTOMERISM IN THE ELEVEN- VERTEX *NIDO*-TRICARBABORANE SERIES

**MARIO BAKARDJIEV^a, JOSEF HOLUB^{a,*},
BOHUMIL ŠTÍBR^a, DRAHOMÍR HNYK^a, and IVANA
ČÍSAŘOVÁ^b**

^a Institute of Inorganic Chemistry of the ASCR, v.v.i., 250 68 Řež near Prague, ^b Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Charles University, Hlavova 2030, 128 42 Prague 2
mario@iic.cas.cz

We reported previously on the synthesis, polyhedral rearrangement and metal-insertion reactions involving the “zwitterionic” eleven-vertex *nido*-tricarbaboranes of the 7-*L*-*nido*-7,8,9-C₃B₈H₁₀ type (where L = amines)¹. Herein, we

demonstrate that the 7-*t*-BuNH₂-8,9-R₂-*nido*-7,8,9-C₃B₈H₈ zwitterions (where R = combinations of H, Me and/or Ph) undergo quantitative conversion into structurally different neutral tautomers 7-*t*-BuNH-8,9-R₂-*nido*-7,8,9-C₃B₈H₉ in proton non transferring solvents (PNTS), e.g. CH₂Cl₂, CHCl₃, and hexane. Proton transferring solvents (PTS), e.g. CH₃CN, EtOH, and acetone, convert, also quantitatively, compounds 7-*t*-BuNH-8,9-R₂-*nido*-7,8,9-C₃B₈H₉ into zwitterions 7-*t*-BuNH₂-8,9-R₂-*nido*-7,8,9-C₃B₈H₈ and the conversion proceeds via common anions [7-*t*-BuNH-8,9-R₂-*nido*-7,8,9-C₃B₈H₈]⁻. The tautomeric pairs of each compound sharply differ in NMR parameters and melting points. The conversions described above represent the first case of absolute tautomerism² in the whole area chemistry.

Supported by the Ministry of Education of the Czech Republic (project no. LC 523).

REFERENCES

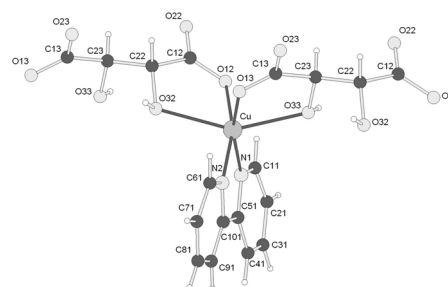
- Štíbr B.: J. Organomet. Chem. 690, 2694 (2005).
- Bakardjiev M., Holub J., Hnyk D., Čísařová I., Londeborough M. G. S., Perekalin D. S., Štíbr B.: Angew. Chem. Int. Edit. 44, 6222 (2005).

IP-13 PRÍSPEVOK K ŠTÚDIU KRYŠTÁLOVÝCH ŠTRUKTÚR TARTARÁTO KOMPLEXOV

**IVANA SABOVÁ^a, JURAJ ČERNÁK^{a,*}, JURAJ
KUCHÁR^a a ZDIRAD ŽÁK^b**

^a Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesova 11, 041 54 Košice, SR, ^b Ústav chémie, Prírodovedecká fakulta, Masarykova univerzita Kotlářska 2, 611 37 Brno, ČR
ivana.sabova@upjs.sk

Štúdium magnetických vlastností koordinačných zlúčenín predstavuje v súčasnosti jeden z hlavných smerov výskumu v koordinačnej chémii. Významnú skupinu molekulo- vých magnetov tvoria komplexy na báze karboxyláto ligandov, napr.^{1,2} V rámci tejto práce sa zo sústavy voda-etanol (2:1) obsahujúcej Cu(II)-bpy-tar (bpy = 2,2'-bipyridín, tar = tartarát = C₄H₆O₆⁴⁻) izolovala nová zlúčenina [Cu(bpy)(tar)] · 5 H₂O (obr. 1), ktorá sa charakterizovala chemickou prvkou-



Obr. 1. Fragment štruktúry [Cu(bpy)(tar)] · 5 H₂O

vou analýzou, infračervenou spektroskopiou a termickou analýzou. Z výsledkov monokryštálovej štruktúrnej analýzy sa zistilo, že štruktúra je tvorená reťazcami zloženia $[-Cu(bpy)-(\mu_4-tar)-]_n$ a molekulami kryštálovej vody. Atóm Cu (II) je v oktaedrickom obklopení tvorenom dvoma atómami dusíka pochádzajúcich z chelátovo viazanej molekuly *bpy* a štyroch atómov kyslíka pochádzajúcich z dvoch chelátovo viazaných molekúl tartarátu ligandov. Výsledky sa diskutujú.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA (1/3550/06) a APVV (20-005204).

LITERATÚRA

1. Sarkar S., Mondal A., Chopra D., Ribas J., Rajak K. K.: Eur. J. Inorg. Chem. 17, 3510 (2006).
2. Chailuecha C., Youngme S., Pakawatchai C., Chaichit N., van Albada G. A., Reedijk J.: Inorg. Chim. Acta 359, 4168 (2006).

IP-14

KOMPLEXY ŽELEZA S DVOJFUNKČNÝMI N-DONOROVÝMI LIGANDAMI A PSEUDOHALOGENIDOVÝMI ANIÓNMÍ

IVAN POTOČNÁK^a, LUCIA VÁHOVSKÁ^a a PETER HERICH^b

^a Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovensko, ^b Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc, Česká republika
ivan.potocnak@upjs.sk

Spin crossover (SC, spinový prechod) je jav, pozorovaný hlavne pre Fe(II) komplexy s donorovými atómami dusíka, ktorý reprezentuje prechod z vysoko-spinového stavu 5T_2 ($S = 2$) do nízko-spinového stavu 1A_1 ($S = 0$) a je sprevádzaný magnetickými a štruktúrnymi zmenami. Tento prechod môže byť indukovaný malými zmenami vonkajších podmienok, ako je zmena teploty, tlaku alebo svetelného žiarenia, vďaka čomu sa takéto systémy využívajú ako funkčné materiály v rôznych oblastiach, ako napríklad zobrazovacie zariadenia alebo nárazové indikátory a pod.¹

Prvý spinový prechod pre Fe(II) zlúčeniny bol zaznamenaný v roku 1964 v komplexoch $[Fe(phen)_2X_2]$ ($X = NCS$, $NCSe$ a $phen = 1,10$ -fenantrolín)². Keďže v našej predchádzajúcej práci sme používali podobné pseudohalogenidové anióny X, konkrétne $N(CN)_2$, $ONC(CN)_2$ a $C(CN)_3$, rozhodli sme sa preštudovať možnosti prípravy molekulových zlúčenín všeobecného vzorca $[Fe(L)_2X_2]$, kde $L = phen$, 2,2'-bipyridín (*bpy*) a 4,4'-di-*tert*-butyl-2,2'-bipyridín (*tbppy*), $X = N(CN)_2$, $ONC(CN)_2$ a $C(CN)_3$, ktoré by mohli vykazovať SC.

V tomto príspevku uvádzame fyzikálnochemickú charakterizáciu a kryštálovú štruktúru viacerých kryštálických zlúčenín Fe(II) s menovanými ligandami L a aniónmi X, pri príprave ktorých sa postupovalo podľa nasledovnej reakčnej schémy:

1. $FeY_2 + 2 L \rightarrow [Fe(L)_2Y_2]$
2. $[Fe(L)_2Y_2] + 2 NaX \rightarrow [Fe(L)_2X_2] + 2 NaY$

($Y = Cl, ClO_4, \frac{1}{2} SO_4$; $X = N(CN)_2, ONC(CN)_2, C(CN)_3$; $L = phen, bpy, tbppy$).

Zo získaných výsledkov je zrejmé, že väčšina nami pripravených zlúčenín nemá požadované zloženie, ale ide o iónové látky so zložením $[Fe(L)_3]X_2 \cdot n H_2O$, ktoré sú pri izbovej teplote diamagnetické a nevykazujú SC.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA č. 1/0079/08. Ďakujeme prof. W. Massovi (PU Marburg) a Dr. M. Matikovej-Mařarovej (UP Olomouc) za meranie štruktúrnych dát.

LITERATÚRA

1. Gütlich P., Garcia Y., Goodwin H. A.: Chem. Soc. Rev. 29, 419 (2000).
2. Baker W.A. Jr., Bobonich H. M.: Inorg. Chem. 3, 1184 (1964).

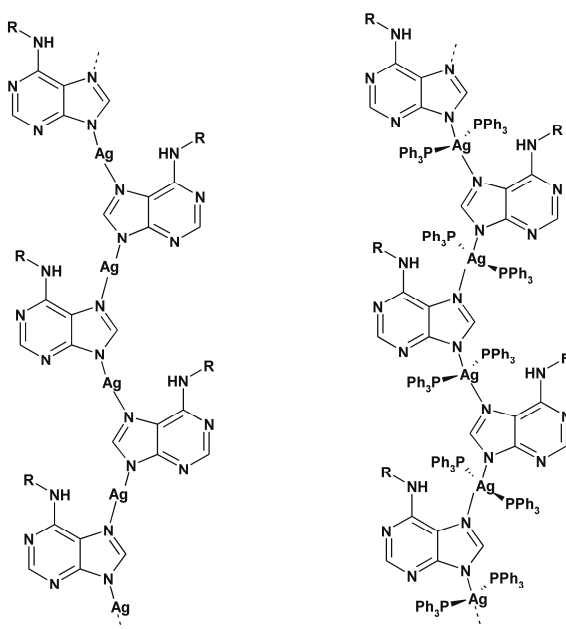
IP-15

SYNTEZA A STUDIUM KOMPLEXNÍCH SLOUČENIN STRĚBŘA S DERIVÁTY AROMATICKÝCH CYTOKININŮ

TOMÁŠ ŠILHA, JIŘÍ MIKULÍK a ZDENĚK TRÁVNÍČEK

Katedra anorganickej chémie, PŘF UP, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc
tomassilha@centrum.cz

Naše práce zahrnuje syntézu a charakterizáciu dvoch typů komplexů Ag^I (obr. 1) se substitučními deriváty 6-benzylaminopurinu. Komplexy byly připraveny reakcemi $AgNO_3$ s organickým ligandem v methanolu za přítomnosti NaOH



Obr. 1. Schéma předpokládané struktury dvou typů připravených Ag-komplexů

v poměru 1:2:2, a následně studovány řadou fyzikálních technik, jmenovitě chemickou analýzou prvků (C, H, N, Ag), UV-VIS FT-IR a Ramanovou spektroskopií, a termickou (TGA / DTA / DSC) analýzou. Na základě výsledků výše uvedených metod bylo zjištěno, že se jedná sloučeniny obecného složení $[\text{Ag}(\text{L})]_n$ (kde HL je derivát 6-benzylaminopurinu), v nichž organická molekula vystupuje jako můstkující ligand koordinující se pravděpodobně přes donorové atomy N7 a N9 imidazolového cyklu. Reakce výše uvedených Ag komplexů s PPh_3 pak následně vede ke vzniku komplexů o složení $[\text{Ag}(\text{L})(\text{PPh}_3)_2]_n$. Vzhledem k možnosti výskytu antibakteriální aktivity u připravených sloučenin bude další studium zahrnovat i provedení relevantních biologických testů.

Tato práce vznikla za podpory grantu MSM6198959218.

1P-16 COMPUTED STRUCTURES OF KNOWN AND NEW MACROPOLYHEDRAL CLUSTERS

**DRAHOMÍR HNYK, JAN MACHÁČEK, and MICHAEL
G.S. LONDESBOROUGH**

*Institute of Inorganic Chemistry of the ASCR, v.v. i., No.
1001, 250 68 Husinec-Řež
hnyk@iic.cas.cz*

Despite considerable progress that has been achieved in the area of structural chemistry of “free” boranes and heteroboranes by means of the *ab initio*/GIAO/NMR method^{1,2}, such an approach has been sparsely applied in the area of macropolyhedral boron clusters. Some macropolyhedral clusters have been known for decades [e.g. $\text{B}_{20}\text{H}_{16}$ consisting of two fused *closo* B_{12} icosahedra with 4-vertex of two fused *closo* B_{12} icosahedra with 4-vertex sharing³, *anti*- $\text{B}_{18}\text{H}_{22}$, *syn*- $\text{B}_{18}\text{H}_{22}$ with a joint edge through which two *nido*- B_{10} arrangements are fused⁴] but their computational studies using the above approach are entirely missing. On the recent experimental front, two anions, $[\text{B}_{19}\text{H}_{22}]^-$ and $[\text{B}_{19}\text{H}_{21}]^{2-}$, have been prepared in the Institute of Inorganic Chemistry of the Academy of the ASCR, v.v.i.. Macropolyhedral cluster in which there are two face-shared *closo* B_{12} icosahedra, i.e. $[\text{B}_{18}\text{H}_{21}]^-$, referred to as “*twinned icosahedra*” (fig. 1), has also been recently prepared but elsewhere and has been ¹¹B NMR-characterized experimentally⁵. In order to get a deeper insight into structural parameters that can be referred to the corre-

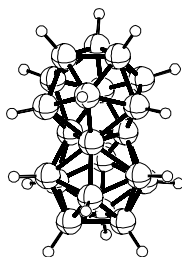


Fig. 1 $[\text{B}_{21}\text{H}_{18}]^-$

sponding solutions, we report here the computed geometries (MP2/6-31G*) of the above compounds checked using GIAO-computed ¹¹B NMR shifts calculations, in which Huzinaga-type II basis set was employed.

Supported by Grant Agency of the Academy of Sciences of the Czech Republic (project no. IAA400320601) and by the Ministry of Education of the Czech Republic (project LC523).

REFERENCES

- Hnyk D., Holub J.: Dalton Trans. 22, 2620 (2006).
- Bühl M., Holub J., Hnyk D., Macháček J.: Organometallics 25, 2173 (2006).
- Miller N. E., Forstner J. A., Muetterties E. L.: Inorg. Chem. 3, 1690 (1964).
- Pitochelli A. R., Hawthorne M. F.: J. Am. Chem. Soc. 84 3218 (1962).
- Bernhardt E., Bauer D. J., Finze M., Willner H: Angew. Chem., Int. Ed. Engl. 46, 2927 (2007).

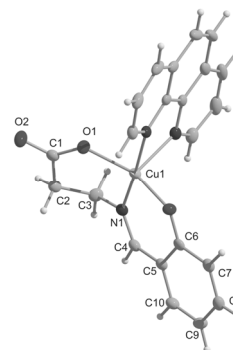
1P-17 ŠTRUKTÚRA A PRO/ANTI-OXIDAČNÁ AKTIVITA MOLEKULOVÝCH Cu(II) KOMPLEXOV ODVODE- NÝCH OD N-SALICYLIDÉN-β-ALANÍNU

**JÁN VANČO^{a,b}, JAROMÍR MAREK^{a,c} a ZDENĚK
TRÁVNÍČEK^a**

^a Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc, ^b Ústav chemických léčiv, Farmaceutická fakulta, Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, Palackého 1/3, 612 42 Brno, ^c Ústav experimentální biologie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova Univerzita, Kamenice 5/A2, 625 00 Brno vancoj@vfu.cz

V rámci skriningu významných biologických aktivit u komplexných zlúčenín s trojdonorovými Schiffovými zásadami bola testovaná skupina látok všeobecného vzorca $\text{Cu}(\text{sal-}\beta\text{-ala})(\text{L})\cdot x\text{H}_2\text{O}$, kde sal- β -ala je *N*-salicylidén- β -alanín(2-), L sú ligandy voda, 8-hydroxychinolín (quin) a 1,10-fenantrolín (phen).

Cieľom výskumu týchto látok bola snaha o potenciáciu



Obr. 1. Molekulová štruktúra komplexu $\text{Cu}(\text{sal-b-ala})(\text{phen})\cdot 3\text{H}_2\text{O}$

ich afinity k molekule DNA a sledovanie vplyvu ligandov na štruktúru a aktivitu východiskového antioxidačne vysoko účinného akvakomplexu.

Výsledky *in vitro* a *in vivo* testov antioxidačnej aktivity potvrdili, že koordináciu *N*-donorových ligandov nie je zásadne ovplyvnená antisuperoxidová aktivita komplexov. Predovšetkým v prípade komplexu s 1,10-fenantrolínom sa ale významne zvýšila jeho afinita k DNA a v modeli peroxidom vodíka indukovaného oxidačného stresu aj schopnosť posobiť ako vysokoúčinná chemická nukleáza. Táto je spojovaná s prooxidačným pôsobením indukciou Fentonovej reakcie. Komplex s 1,10-fenantrolínom tiež prejavil významnú cytotoxicitu na piatich ľudských karcinómálnych líniiach.

Táto práca vznikla s podporou grantov MŠMT MSM 6198959218 a MSM 6215712403.

1P-18

PRÍPRAVA A CHARAKTERIZÁCIA [Zn₂(2-BrC₆H₄COO)₄.phen₂]

ANNAMÁRIA ERDÉLYIOVÁ^{a*}, KATARÍNA GYÓRYOVÁ^a, RÓBERT GYEPES^b, JANA KOVÁŘOVÁ^c a LADISLAV HALÁS^a

^a Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovenská republika, ^b Univerzita Karlova v Prahe, Albertov 8, 128 43 Praha 2, Česká republika, ^c Ústav makromolekulárnej chémie AV ČR, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika
katarina.gyoryova@upjs.sk

Je dobre známe, že zinok je biogénny prvok s imunostimulačným účinkom. Je súčasťou viac ako 300 enzýmov, a preto je nenahraditeľný pre základné metabolické procesy v ľudskom organizme. Niektoré aromatické karboxylové kyseliny môžu mať antimikrobiálne vlastnosti. Fenazón (phen) patrí k bioaktívnym ligandom s antipyretickým a anestetickým účinkom.

Za účelom štúdia fyzikálnochemických vlastností a biologickej aktivity sme pripravili v literatúre doteraz nepopísanú zlúčeninu [Zn₂(2-BrC₆H₄COO)₄.phen₂], reakciou kyseliny 2-brómbenzoátu zinočnatého s fenazónom.

Pripravenú zlúčeninu sme charakterizovali elementárnou analýzou, termickými a spektrálnymi metódami. Prítomnosť jednotlivých funkčných skupín sme potvrdili IČ spektrami. Študovaná zlúčenina je stála do teploty 180 °C a potom sa rozkladá za uvoľnenia fenazónového ligandu a následne dochádza k rozkladu karboxylátového aniónu. Medziprodukty tepelného rozkladu boli dokázané hmotnostnou spektrometriou.

Po vyriešení kryštálovej štruktúry sme zistili, že ide o dvojjadrový komplex, pričom dva atómy zinku sú mostikovo viazané cez väzby -O-C-O- dvoch karboxylátových skupín. Na každý atóm zinku sa koordinuje ďalší 2-brómbenzoát cez kyslík karboxylátovej skupiny. Fenazónový ligand sa na zinok viaže atómom kyslíka C=O skupiny.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0122/08.

LITERATÚRA

1. Szunyogová E., Mudroňová D., Gyóryová K., Nemcová R., Kovářová J., Píknová-Findoráková L.: *J. Therm. Anal. Cal.* 88, 355 (2007).
2. Zelenák V., Sabo M., Massa W., Llewellyn P.: *Inorg. Chim. Acta* 357, 2049 (2004).

1P-19

STRUKTURA A SPEKTRÁLNÍ VLASTNOSTI KOMPLEXŮ Fe(II) a Fe(III) S DUSÍKATÝMI HETEROCYKLY

MICHAL ČAJAN a ZDENĚK TRÁVNÍČEK

*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Palackého Univerzita v Olomouci, Křížkovského 10, 771 41 Olomouc
michal.cajan@upol.cz*

Heterocyklické sloučeniny jsou látky obecně vykazující rozsáhlou škálu nejrůznějších fyziologických účinků. Například, některé *N6*-substituované deriváty adeninu mohou mimo jiné významným způsobem ovlivňovat procesy související s regulací buněčného cyklu, s čímž je také dána jejich schopnost více či méně inhibovat růst rakovinných buněk. Bylo také zjištěno, že fyziologické účinky těchto molekul mohou být výrazně zesíleny koordinací heterocyklu na vhodné ionty přechodných kovů. K pochopení mechanismu působení těchto látek je nezbytné získat přesné údaje o jejich struktuře, distribuci elektronové hustoty a souvisejících vlastnostech. Kombinace experimentálních metod strukturní analýzy a metod teoretické chemie představují velmi účinný nástroj pro získání těchto informací.

Mezi významné biogenní prvky patří bezesporu také železo. Kromě standardních fyzikálně chemických technik lze ke studiu strukturních vlastností koordinačních sloučenin železa s výhodou využít ⁵⁷Fe Mössbauerovy spektroskopie. V prezentované práci se tedy zabýváme schopností Fe^{II} a Fe^{III} iontů vytvářet komplexní sloučeniny s heterocyklickými sloučeninami, především deriváty 6-(benzylamino)purinu (*Bap*) různě substituovaného na fenylovém i purinovém jádře (např. [Fe^{III}(*Bap*)Cl₃], [Fe^{II}(*Bap*H⁺)Cl₃(H₂O)], apod.). Kromě analýzy struktury, resp. způsobu koordinace purinového jádra na ion přechodného kovu, je zvláštní důraz kladen na charakterizaci oxidačního a spinového stavu centrálního kovu a jejich souvislost se složením a geometrií koordinační sféry využitím právě ⁵⁷Fe Mössbauerovy spektroskopie. Experimentálně získaná spektroskopická data, včetně Mössbauerových parametrů, jsou v příspěvku konfrontována s údaji získanými na úrovni teorie funkcionálu hustoty (DFT). Míra přesnosti výpočtu Mössbauerových parametrů různými DFT funkcionály byla testována na řadě již známých komplexů železa s jednoduchými ligandy.

Práce vznikla za podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR (grant č. MSM6198959218).

1P-20
VÝZNAM VODÍKOVÝCH VÄZIEB V ŠTRUKTÚRE
NITROBENZOÁTOMEĎNATÝCH KOMPLEXOV
S NIKOTÍNAMIDOM

ZUZANA VASKOVÁ^a, JÁN MONCOL^a, MARIA KORABIK^b a DUŠAN VALIGURA^a

^a Oddelenie anorganickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, Bratislava 812 37, Slovenská republika,

^b Faculty of Chemistry, University of Wrocław, Wrocław 50-383, Poland
 zuzana.vaskova@stuba.sk

Vodíkové väzby hrajú kľúčovú rolu vo vytváraní kryštálovej štruktúry a našli široké uplatnenie v kryštálovom inžinierstve pri budovaní metalloorganických sietí¹, s možným uplatnením v heterogénnej katalýze, molekulovej elektronike, príp. ako magnetické a optické materiály².

Pri štúdiu nitrobenzoátov meďnatých s nikotínamidom (nia), boli pripravené tri nové jednojadrové komplexy. Reakcie so stechiometrickým pomerom Cu : nia = 1 : 2 v sústave s aniónom kyseliny 4-nitrobenzoovej (4-O₂Nbz) poskytli látku zloženia [Cu(4-O₂Nbz)₂(nia)₂(H₂O)₂] **I** (podobne ako s aniónom kyseliny 2-nitrobenzoovej³). Atóm meďi je v ekvatoriálnej rovine koordinovaný dvojicami atómov dusíka pyridínových kruhov a atómov kyslíka karboxylových skupín. Axiálne polohy sú doplnené atómami kyslíka molekúl vody. Reakciami so zmeneným pomerom Cu : nia = 1 : 1 sa izoloval komplex zloženia [Cu(4-O₂Nbz)₂(nia)₂·2(4-O₂NbzH)] **II**. Axiálne polohy koordinačného polyédra sú obsadené atómami kyslíka karbox. skupiny aniónov. Molekuly nekoordinovanej kyseliny sa karbox. skupinou viažu na karboxamidovú skupinu nikotínamidu. Reakcie s aniónom kyseliny 3-nitrobenzoovej (3-O₂Nbz) poskytli vždy iba produkt neobvyklého zloženia [Cu(3-O₂Nbz)₂(nia)(H₂O)₂] **III**. Atóm meďi je koordinovaný v tvare tetragonálnej pyramídy. Ekvatoriálnu rovinu tvoria atómy kyslíka aniónov kyselín, dusík pyridínového kruhu a atóm kyslíka vody. V axiálnej polohe je atóm kyslíka ďalšej molekuly vody. V štruktúre komplexu **III** sa nachádza systém medzimolekulových vodíkových väzieb, ktorý je rovnaký ako v dimére [Cu(μ₂-nia)(5-methoxysalicylato)₂(H₂O)]₂⁴. Tieto dve odlišné látky prejavili rovnaké správanie v magnetickom poli. Komplex **III** je dôkazom, že neobvyklé magnetické správanie je podmienené prítomnosťou uvedených vodíkových väzieb.

Táto práca vznikla s podporou grantov MŠ SR (VEGA 1/4454/07 a 1/0353/08).

LITERATÚRA

1. Beatty A. M.: *Coord. Chem. Rev.* 246, 131 (2003).
2. Burrows A. D.: *Structure and Bonding* 108, 55 (2004).
3. Stachová P., Melník M., Korabik M., Mrozinski J., Koman M., Glowiak T., Valigura D.: *Inorg. Chim. Acta* 360, 1517 (2007).
4. Valigura D., Moncol J., Korabik M., Pučeková Z., Lis T., Mrozinski J., Melník M.: *Eur. J. Inorg. Chem.* 2006, 3813.

1P-21
TWO NOVEL COMPLEXES BASED ON
TETRACYANOPALLADATES OF Cu(II)

JURAJ KUCHÁR, MIROSLAVA MARTONOVÁ,
 and JURAJ ČERNÁK

Department of Inorganic Chemistry, Institute of Chemistry, P. J. Šafárik University, Moyzesova 11, 041 54 Košice, SR
 juraj.kuchar@upjs.sk

Studies of various physical phenomena associated with magnetism are of current interest of chemists and physicists. It is well known that besides covalent bonds also weak interactions may play an important role in mediating magnetic exchange interactions. As a continuation of our previous studies^{1,2} we have from the aqueous systems Cu²⁺-L_N-[Pd(CN)₄]²⁻ (L_N = 2(2-aminoethyl)pyridine (2epy) and 3(2-aminoethyl)pyridine (3epy)) isolated two novel complexes exhibiting composition Cu(2epy)Pd(CN)₄ (**I**) and Cu(3epy)Pd(CN)₄·H₂O (**II**), respectively.

The crystal structure of **I** is formed of a complicated 3D framework built up of [Cu(2epy)]²⁺ and [Pd(CN)₄]²⁻ building units linked via μ₂-bridging cyano ligands (Fig. 1).

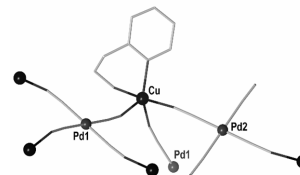


Fig. 1. Part of the structure of **I**

Substitution of 2epy ligand by the 3epy one leads to formation of [Cu(μ₂-NC)₄Pd]_n square net layers in which pairs of hexacoordinated Cu(II) atoms are additionally bridged by 3epy ligand (Fig. 2). The results are discussed.

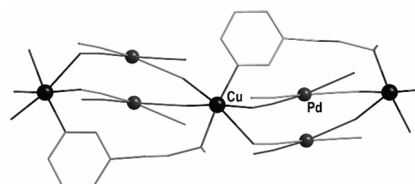


Fig. 2. View of the layer in **II**

Financial support from the part of Grants VEGA (No. 1/3550/06) and VVGS (45/07-08) are acknowledged. One of the authors (JK) thanks DAAD for scholarship.

REFERENCES

1. Kuchár J., Černák J., Mayerová, Z., P. Kubáček, Žák Z.: *Solid State Phenomena* 90-91, 328 (2003).
2. Čižmár E., Orendáčová A., Orendáč M., Kuchár J., Vavra M., Potočňák I., Černák J., Casini E., Feher A.: *Phys. Status Solidi B* 243, 268 (2006).

1P-22

VLIV MOLEKULOVÉ HMOTNOSTI PEG NA POVRCHOVÉ VLASTNOSTI MODIFIKOVANÉHO PE

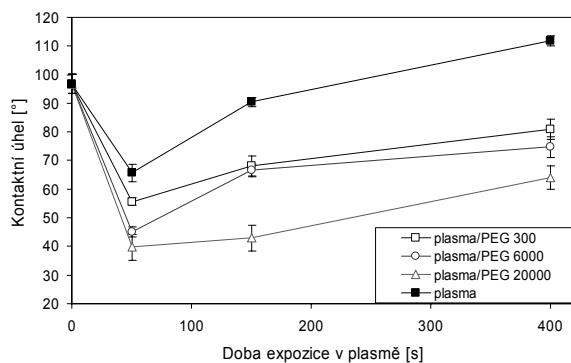
ZUZANA MAKAJOVÁ, NIKOLA KASÁLKOVÁ, PETR SLEPIČKA, KATEŘINA KOLÁŘOVÁ a VÁCLAV ŠVORČÍK

Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
zuzana.makajova@vscht.cz

Polymerní materiály mají využití např. v medicíně nebo ve tkáňovém inženýrství a v dalších technických odvětvích. Pro řadu aplikací polymerů je potřeba povrch polymerů vhodně modifikovat. Pro bioaplikace bývá povrch polymeru exponován v plasmatickém nebo laserovém výboji a posléze roubován např. aminokyselinami nebo jinými sloučeninami.

V této práci byly studovány fyzikálně-chemické vlastnosti polyethylenu (PE). PE folie byla modifikována po dobu 50, 150, 400s plasmatickým výbojem a následně roubována z vodného roztoku poly(etylen glykolem) (PEG) o různé molekulové hmotnosti (300, 6000, 20 000). Změny smáčivosti povrchu byly studovány goniometricky, změny v povrchové morfologii mikroskopem atomárních sil (AFM).

Bylo zjištěno, že v závislosti na době expozice vzorků v plasmě dochází ke změně hodnot kontaktního úhlu (smáčivosti). Roubováním vzorků PEG dochází k poklesu kontaktního úhlu, který závisí na molekulové hmotnosti PEG. Povrchová modifikace vede také k výrazným změnám povrchové morfologie.



Obr. 1. Závislost kontaktního úhlu HDPE na době expozice v plasmě a následném roubování při různých molekulových hmotnostech PEG

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR č. 204/06/0225, MŠMT MSM č. 6046137302 a LC 06041, GA AV ČR č. KAN400480701 a 200100801.

1P-23

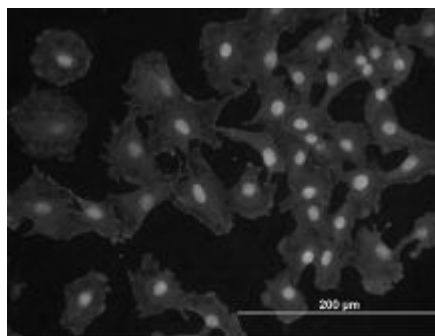
POVRCHOVÁ MODIFIKACE POLYETHYLENU PRO TKÁŇOVÉ INŽENÝRSTVÍ

NIKOLA KASÁLKOVÁ^a, MARTIN PAŘÍZEK^b, LUCIE BAČÁKOVÁ^b, PAVEL RAUCH^c, MARTINA BLAŽKOVÁ^c, PETR SLEPIČKA^a a VÁCLAV ŠVORČÍK^a

^a Ústav inženýrství pevných látek, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, ^b Fyziologický ústav AV ČR, Videňská 1083, 142 20 Praha 4, ^c Ústav biochemie a mikrobiologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
nikola.kasalkova@vscht.cz

Polymerní materiály nacházejí uplatnění ve vědě i praktických aplikacích, např. v tkáňovém inženýrství. Jeho cílem je nahradit nebo vytvořit tkáň a orgány poškozené onemocněním, zraněním nebo vrozenou anomálií¹. Polymery přicházejí do přímého kontaktu s organismem, a proto odezva živého organismu na biomateriál závisí na jeho vlastnostech², které lze různými metodami modifikovat a tím získat polymery s vyšší biokompatibilitou. Byly studovány fyzikálně-chemické a biologické vlastnosti lineárního polyethylenu (HDPE). HDPE folie byla modifikována plasmatickým výbojem a následně roubována následujícími látkami: bovinním sérovým albuminem (BSA), uhlíkem ve formě nanočástic (C) a jejich kombinací (BSA+C). Povrchová morfologie byla studována pomocí mikroskopie atomárních sil (AFM). Změny kontaktního úhlu byly měřeny goniometricky. Metodou kultivace *in vitro* byla zjišťována adheze a proliferace hladkých svalových buněk z aorty potkana (VSMC).

Bylo zjištěno, že modifikací plazmatem dochází ke změnám povrchové morfologie a kontaktního úhlu. Z testů *in vitro* vyplývá, že modifikace a následné roubování výrazně zvyšuje počet adherovaných a proliferujících buněk.



Obr. 1. Morfologie VSMC buněk po 48 hod na HDPE modifikovaném plazmatem a následně roubovaném BSA

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR č. 204/06/0225, MŠMT MSM č. 6046137302 a LC 06041, GA AV ČR č. KAN400480701 a 200100801.

LITERATURA

1. http://www.ceskahlava.cz/files/Zpravodaj_3_Veda_media_06-2007.pdf, staženo 31.3.2008.
2. Ikada Y.: Biomaterials 15, 725 (1994).

1P-24

Au NANOVRSTVY NA POLYMERU
MODIFIKOVANÉM V PLAZMĚ

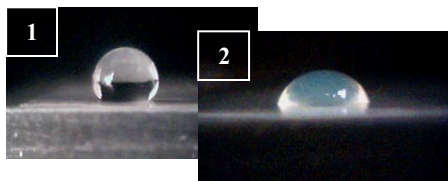
PETR SLEPIČKA^a, ZDENKA KOLSKÁ^b, JOSEF NÁHLÍK^a, TOMÁŠ HUBÁČEK^a, OLGA BLÁHOVÁ^c a VÁCLAV ŠVORČÍK^a

^a Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha, ^b Katedra chemie, Univerzita J. E. Purkyně, České Mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem, ^c Západočeská univerzita v Plzni, Nové technologie - výzkumné centrum v západočeském regionu, Univerzita 8, 306 14 Plzeň, petr.slepicka@vscht.cz

Povrchová modifikace ovlivňuje interakci kov-polymer a umožňuje transformovat polymerní materiály na vysoce ceněné finální produkty, které se uplatňují zejména v průmyslu plastů, potravinářství, elektronice a biomedicině. Modifikaci lze provádět např. laserovým svazkem¹ či plazmatickým výbojem². Plazmatická expozice polymeru mění jeho povrchové vlastnosti a to může vést ke zvýšení adheze kovových vrstev.

V této práci byly modifikovány PET a PTFE Ar⁺ plazmou při odlišných dobách expozice. Na studovaných vzorcích byl goniometricky měřen kontaktní úhel. Povrchová morfologie byla studována AFM. Na povrch polymerů byly naprášeny Au vrstvy a studována jejich tloušťka metodami AFM a AAS. Adheze a scratch testy na stukturu Au/polymer byly provedeny nanoindentační technikou. Elektrické vlastnosti Au vrstev na polymeru (resistance, koncentrace nosičů náboje) byly studovány metodou van der Pauw. Některé z těchto veličin byly také popsány matematickými modely s cílem předpovědět hodnoty veličin pro odlišné podmínky modifikace.

Plazmatická expozice vede k okamžitému růstu smáčivosti polymerního povrchu a mění povrchovou drsnost polymeru a následně deponované Au vrstvy. Elektrické vlastnosti kovové vrstvy závisí na její tloušťce a povrchové drsnosti polymeru.



Obr. 1. Fotografie kapky H₂O na povrchu PTFE; (1) nemodifikovaný, (2) ihned po modifikaci

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR č.102/06/1106, MŠMT MSM č. 6046137302 a LC 06041, GA AV ČR č. KAN 400480701 a 200100801.

LITERATURA

1. Slepicka P., Rebollar E., Heitz J., Švorčík V.: App. Surf. Sci. 254, 3585 (2008).
2. Park S. C., Yoon S. S., Nam J. D.: Thin Solid Films 516, 3028 (2008).

1P-25

MODIFIKACE POVRCHOVÉ VRSTVY PP A PTFE
PLAZMATEM

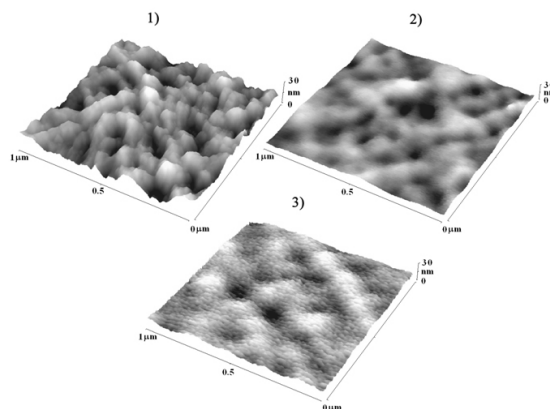
ALEŠ CHALOUPKA, TOMÁŠ HUBÁČEK, PETR SLEPIČKA, JAKUB SIEGEL a VÁCLAV ŠVORČÍK

Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha ales.chaloupka@vscht.cz

Polymery nacházejí uplatnění v různých oborech lidské činnosti, např. biomateriály, vrstvy a ochranné povlaky, kompozity, mikroelektronika. Obecně lze říci, že pro uplatnění v těchto oborech jsou požadovány speciální povrchové vlastnosti polymerů, např. chemické složení, hydrofilita, drsnost, el. vodivost, krystalinita, a mechanické vlastnosti. Polymery většinou všechny tyto vlastnosti nemají, ale mají výborné objemové fyzikální a chemické vlastnosti. Dále jsou relativně levné a jednoduše se zpracovávají. Další zlepšení jejich vlastností se dosahuje povrchovou modifikací¹. Jednou z těchto metod je modifikace plazmatem.

Tato práce se zabývá působením Ar⁺ plazmatu na povrch PP a PTFE. Goniometricky byla studována změna kontaktního úhlu v závislosti na době modifikace polymerů a na výkonu plazmatu. Dále byl sledován i proces stárnutí polymeru po expozici. Morfologie povrchu a drsnost obou polymerů byla měřena metodou AFM.

Po modifikaci dochází ke snížení kontaktního úhlu. Vlivem stárnutí polymeru se kontaktní úhel zvyšuje. Povrchová morfologie se působením plazmatu výrazně mění. Drsnost PTFE i PP je závislá na době expozice vzorků plazmatem.



Obr. 1. AFM snímky povrchu biaxiálně orientovaného PP; (1) nemodifikovaný PP, (2) modifikovaný PP 60 s, (3) modifikovaný PP 140 s

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR č. 102/06/1106, MŠMT MSM č. 6046137302 a LC 06041, GA AV ČR č. KAN400480701 a 200100801.

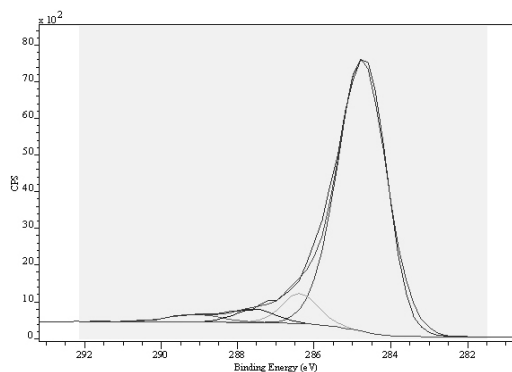
LITERATURA

1. Kotál V., Švorčík V., Slepicka P., Bláhová O., Šutta P., Hnatowicz V.: Plasma Proc. Polym. 4, 69 (2007).

1P-26**UHLÍKOVÉ NANOVRSTVY NA POLYMERNÍM SUBSTRÁTU****TOMÁŠ HUBÁČEK^a, ALEŠ CHALOUPKA^a, PETR SAJDL^b a VÁCLAV ŠVORČÍK^a**

^a Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha, ^b Ústav energetiky, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha
hubacekt@vscht.cz

Uhlíkové vrstvy lze využít pro mnoho rozdílných aplikací od automobilového průmyslu po průmysl oděvní. Využití těchto vrstev závisí na jejich chemickém složení a metodě depozice. Atraktivní je využití uhlíkových vrstev v tkáňovém inženýrství jako povlaky pro různé implantáty¹. Tyto vrstvy mohou být použity jako materiály bioinertní nebo bioaktivní, což závisí na jejich povrchových vlastnostech a chemickém složení². V této práci byly studované vrstvy připraveny metodou napařování. Byl sledován vliv vzdálenosti vzorku od zdroje uhlíku. Jako substrát byl použit PET. Na vzorcích byl goniometricky měřen kontaktní úhel. Tloušťka připravených vrstev byla studována profilometrem a AFM. AFM byla také



Obr. 1. XPS spektrum – nafitovaná uhlíková část spektra

studována povrchová morfologie a drsnost připravených vrstev. Chemické složení povrchu bylo charakterizováno pomocí metody XPS. Po nanesení uhlíkové vrstvy dochází ke zvýšení smáčivosti vzorku a nedochází k významné změně drsnosti povrchu. Podle očekávání, se vzdáleností zdroje uhlíku od substrátu klesá tloušťka deponované vrstvy. V povrchové uhlíkové vrstvě bylo detekováno “malé” množství kyslíku navázaného na atomy C.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR č. 204/06/0225, MŠMT MSM č. 6046137302 a LC 06041, GA AV ČR č. KAN400480701 a 200100801.

LITERATURA

1. Ritwik K. R., Kwang-Ryeol L.: J. Biomed. Mater. Res., B 83, 72 (2006).
2. Kubová O., Švorčík V., Heitz J., Moritz S., Romanin Ch., Matějka P., Macková A.: Thin Solid Films 515, 6765 (2007).

1P-27**ELEKTRICKÉ VLASTNOSTI KOMPOZITNÍCH VRSTEV NA BÁZI CNT A POLYMERŮ****ONDŘEJ KVÍTEK, OLEKSIY LYUTAKOV, IVAN HUTTEL a VÁCLAV ŠVORČÍK**

Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha
Lyutakoo@vscht.cz

Kompozity díky kombinaci vlastností několika odlišných materiálů mohou vykazovat naprosto odlišné vlastnosti než materiály výchozí. V posledních letech jsou studovány „atraktivní“ kompozitní materiály na bázi polymerů a nové modifikace uhlíku – karbonových nanotrubic (CNT). V těchto strukturách polymer slouží jako matrice, ve které jsou dispergované CNT. Vhodně připravené kompozity vykazují specifické mechanické, elektrické a optické vlastnosti, které mohou být používány v mikro- a optoelektronice.

V této práci byly připraveny struktury CNT v maticích polymerů (PMMA, PS). Byly studovány teplotní závislosti elektrických vlastností těchto vrstev pro různé koncentrace CNT. Tloušťka připravených vrstev byla měřena profilometrem Hommel 1000, jejich elektrické vlastnosti pikoampermetrem Keithley 487 a fázové změny metodou DSC.

Bylo ukázáno, že různě dotované vrstvy vykazují tři principiálně odlišné oblasti volt-amperového chování, tzn. tři mechanismy transportu náboje. Elektrické vlastnosti kompozitů taky závisí na teplotě a fázových přechodech.



Obr. 1. Schéma sítě CNT dispergovaných v polymerní matici mezi kovovými elektrodami

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR č. 102/06/0424, MŠMT MSM č. 6046137302 a LC 06041, GA AV ČR č. KAN400480701 200100801.

LITERATURA

1. Gruner G.: J. Mat. Chem. 16, 3533 (2006).
2. Ajayan M., Tour J.: Nat. Mat. Sci. 447, 1066 (2007).

1P-28**KORÓZNA ODOLNOSŤ ZLIATIN VO FLUORIDOVÝCH TAVENINÁCH****MARTA AMBROVÁ, VLADIMÍR DANIELIK a PAVEL FELLNER**

*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika
marta.ambrova@stuba.sk*

Korózna odolnosť kovových zliatin MONICR (Ni-Mo-Cr) sa merala elektrochemickými metódami v tavenine LiF-NaF-KF eutektického zloženia (46,5 mol.% LiF; 11,5 mol.% NaF; 42,0 mol.% KF) pri teplote 680 °C v inertnej atmosfére argónu a za prístupu vzduchu. Rýchlosť korózie sa skúmala dvomi metódami: meraním polarizačného odporu¹ a stanovením koncentrácie korózných produktov chronopotenciometriou, kde sa zisťovala časová závislosť koncentrácie korózných produktov na povrchu elektródy. Výsledky získané oboma metódami boli porovnané digitálnou simuláciou difúzie rozpustných korózných produktov do elektrolytu založenou na vzťahoch uverejnených v práci². Predpokladal sa kontinuálny vznik korózných produktov a ich následná difúzia od kovovej vzorky. Zisťovala sa koncentrácia korózných produktov na povrchu vzorky ako aj jej distribúcia v elektrolyte v čase 1, 2, 3 a 4 hodiny. Zo získaných výsledkov vyplynulo, že obe metódy sú v dobrej zhode.

Povrch vzoriek bez a za prítomnosti korózných produktov sa analyzoval pomocou SEM, RTG difrakčnej analýzy a RTG mikroanalýzy. Zloženie zatuhnutých tavenín sa analyzovalo pomocou RTG difrakčnej práškovej analýzy.

Táto práca vznikla za podpory agentúry VEGA, č. projektu 1/0535/08.

LITERATÚRA

1. Joska L., Novák P.: Polarizační odpor – standardní technika monitorování koroze, Sborník přednášek z II. konference s mezinárodní účastí „Koroze a její vliv na pevnost a životnost konstrukcí z oceli“, Brno, 12 – 13. 3. 2001, s. 61–66.
2. Feldberg S. W.: Electroanal. Chem. 3, 199 (1969).

1P-29**VYLUČOVANIE POVLAČOV VOLFRÁMU Z TAVENÍN****VLADIMÍR DANIELIK a MARGARÉTA MRKVOVÁ**

*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, SR
vladimir.danielik@stuba.sk*

Rozvoj nových technológií často vyžaduje materiály so špecifickými vlastnosťami ako odolnosť voči korózii, vysokým teplotám, tvrdosť a pod. Je potrebné pripravovať nové materiály, resp. netradične využiť tradičné materiály. Vylučovanie povlakov na vhodných podkladoch nám dáva možnosť

prípraviť materiál s jedinečnými vlastnosťami pri rozumnej cene. Žiaruvzdornosť, korózna odolnosť, odolnosť voči oderu a oteru, tvrdosť molybdénu, volfrámu a ich karbidov ich predurčujú ako sľubné anorganické materiály v odvetviach, kde sa používajú vysokoteplotné, agresívne prostredia. V porovnaní so súčasnými výrobnými metódami by elektrochemické vylučovanie povlakov alebo práškov volfrámu a molybdénu bolo ekonomicky výhodnejšie. Avšak tieto kovy nie je možné pripraviť v čistom stave elektrolyzou vodných roztokov kvôli nízkemu nadpätíu vodíka^{1,2}.

Cieľom tejto práce bolo vylúčiť volfrámové povlaky na oceli (obyčajnej i nehrdzavejúcej) z tavenín. Pre porovnanie sa použili tiež niklové a molybdénové matrice). Elektrolytické vylučovanie sa realizovalo jednosmerným prúdom v taveninách Na₃AlF₆ – NaCl (900 °C), LiF – NaCl (800 °C; 850 °C) a LiF – NaF – KF (480 °C). Experiment sa realizoval v argónovej atmosfére, v grafitovom tégliku pri katódových prúdových hustotách v rozsahu 0,02–0,07 A cm⁻². Pri teplotách nad 800 °C sa vylučovali povlaky volfrámu, ktoré však mali dentritickú štruktúru. Pri teplotách pod 800 °C sa vylučoval práškový volfrám.

Hladké povlaky pri teplotách nad 800 °C sa podarilo pripraviť použitím impulzového prúdu, kde anódový impulz rozpúšťal zárodky dentritickej štruktúry. Príprava povlakov pomocou impulzového prúdu pri teplotách pod 800 °C je zatiaľ v štádiu experimentov.

Táto práca vznikla s podporou agentúry VEGA, č. projektu 1/0535/08 a podporou Ministerstva školstva SR v rámci projektu MVTs Ukr/SR/STU/08.

LITERATÚRA

1. Socha J., Zak T., Safarzynski S.: Powloki Ochronne 6, 2, (1978).
2. Gerlach G., Coumans C.: Galvanotech. 88, 767 (1997).

1P-30**INTERAKCIA TAVENINY OKTADECYLAMÍNU S KAOLINITOM****VLADIMÍR ŠTEFAN FAJNOR^a, NOÉMI BOHÁKOVÁ^a a JANA HRACHOVÁ^b**

^a Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava,

*^b Ústav anorganickej chémie, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, SR
fajnor@fns.uniba.sk*

Diferenčnou termickou analýzou, termogravimetriou, röntgenovou fázovou analýzou a infračervenou spektroskopiou sa študoval organokaolinit, ktorého príprava spočívala v zahriatí zmesi kaolinitu z lokality Sedlec (Karlove Vary, Česká republika) s oktadecylamínom na vodnom kúpeli počas troch hodín a následnom premytí taveniny chloridom uhličitým.

Zistilo sa, že vzniknutý organoílový komplex oktadecylamin-kaolinit sa termicky rozkladá v teplotnom intervale 200–500 °C, a to v troch na seba naväzujúcich stupňoch.

V atmosfére dusika ide o endotermické deje spojené s hmotnostnými úbytkami zachytenými na termogravimetrických krivkách. V atmosfére vzduchu ide o exotermické oxidačné reakcie, pričom sú hmotnostné úbytky v oboch prípadoch prakticky zhodné. Teplota topenia čistého oktadecylamínu (~ 52 °C) sa na termoanalytických krivkách neprejavuje samostatným termickým efektom. Pozoruhodné je, že priebeh dehydroxylácie a ani priebeh kryštalizácie vysokoteplotných fáz kaolinitu (mullit a cristobalit) nie je prítomnosťou oktadecylamínu zásadne ovplyvnený. Z analýzy infračervených spektier však vyplýva, že tavenina oktadecylamínu s kaolinitom vytvára organoilový komplex. Potvrzuje to vznik pásov pri vlnkách 2930 a 2860 cm⁻¹ charakterizujúcich asymetrické a symetrické valenčné C-H vibrácie CH₂ skupín. V oblasti deformačných vibrácií sa nachádza komplexný pás pozostávajúci z dvoch zložiek približne pri 1488 a 1470 cm⁻¹, ktoré patria deformačným C-H vibráciám CH₃ a CH₂ skupín. Intenzita pásu pri 1488 cm⁻¹ je v porovnaní s pásmom pri 1470 cm⁻¹ výrazne nižšia, keďže oktadecylamín obsahuje len jednu CH₃ skupinu v alkylamóniovom reťazci. Z celkového hmotnostného úbytku 60 % vypočítaného z termogravimetrických kriviek (do teploty 1050 °C) vyplýva, že kaolinit a oktadecylamín tvoria organoilový komplex v hmotnostnom pomere 1 : 1.

1P-31

FÁZOVÉ ROVNOVÁHY V SÚSTAVÁCH S OBSAHOM ZLÚČENÍN ŽIARUVZDORNÝCH KOVOV

JANA GABČOVÁ a **VLADIMÍR DANIELIK**

*Oddelenie anorganickej technológie FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, SR
jana.gabcova@stuba.sk*

Rozvoj nových technológií si vyžaduje nové materiály so špecifickými vlastnosťami, ako sú odolnosť voči vysokým teplotám, tvrdosť apod. Je teda potrebné pripraviť takéto materiály, resp. netradične využiť materiály známe.

Táto práca je súčasťou rozsiahleho projektu, ktorého cieľom je štúdium mechanizmu a kinetiky elektrochemických reakcií pri vylučovaní volfrámu, molybdénu a karbidov týchto kovov z tavenín fluoridov a chloridov alkalických kovov a kovov alkalických zemín a hliníka.

Taveniny anorganických solí majú vlastnosti, pre ktoré sú mnohé z nich vhodným, častokrát jediným, médiom pre celý rad technicky dôležitých procesov. Majú tiež význam pri výskume a vývoji nových technológií. Využíva sa pritom mimoriadna schopnosť tavenín rozpúšťať ťažko rozpustné oxidy, vysoká elektrická vodivosť a u väčšiny z nich relatívne nízky tlak pár pri vysokých teplotách. Podmienkou ďalšieho využitia tavenín v praxi je štúdium ich fyzikálnochemických vlastností, ako sú: rozpustnosť, elektrická vodivosť, hustota a pod.

Úvodná časť projektu sa venuje štúdiu fázových rovnováh v taveninových sústavách LiF – NaCl a NaCl – Na₃AlF₆ s postupným pridávaním zlúčeniny s obsahom žiaruvzdorného kovu. Študovala sa rozpustnosť eutektických zmesí (LiF – NaCl)_E a (NaCl – Na₂AlF₆)_E s prídavkom rôznych množstiev Na₂MoO₄ z hľadiska výberu vhodného kúpeľa na elektrolytic-

ké vylučovanie molybdénu.

Rozpustnosť sa študovala metódou klasickej termickej analýzy. Experiment sa realizoval v elektricky vyhrievanej peci. Jednotlivé vzorky sa navažovali do Pt-téglíkov. Celkový návažok bol 20 g. Na meranie teploty sa použil termočlánok PtRh 10 – Pt. Údaje termočlánku (krivky chladnutia) sa zaznamenávali počítačom. Rýchlosť chladnutia nepresiahla 2 °C min⁻¹.

Táto práca vznikla s podporou grantov MŠ SR VEGA č. 1/0535/08 a Ukr/SR/STU/08.

1P-32

ŠTÚDIUM MODIFIKOVANÝCH FORIEM PRÍRODNÉHO ZEOLITU TYPU KLINOPTILOLITU S OBSAHOM FARMACEUTICKY ÚČINNÝCH LÁTOK

MÁRIA REHÁKOVÁ^a, **VLADIMÍRA TOMEČKOVÁ^b**
a **MICHAELA HLINKOVÁ^a**

*^a Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, 041 54 Košice, ^b Ústav lekárskej chémie, biochémie, klinickej biochémie, Lekárska fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, 040 66 Košice, SR
maria.rehakova@upjs.sk*

Chalkóny a ich syntetické cyklické analógy (*E*-2-arylmetylén-1-indanóny, *E*-2-arylmetylén-1-tetralóny a *E*-2-arylmetylén-1-benzosuberóny) sú biologicky aktívne zlúčeniny s protirakovinovou aktivitou. Cytotoxita a interakcia týchto látok bola potvrdená *in vitro* na rakovinových bunkách, mitochondriách ako aj proteínach pomocou fluorescenčných excitačných a emisných spektier^{1,2}.

Pokračovaním tohto výskumu v súčasnosti je štúdium prípravy a charakterizácie modifikovaných foriem prírodného zeolitu typu klinoptilolitu z domáceho východoslovenského ložiska v Nižnom Hrabovci s obsahom chalkónov, konkrétne Q510 (*E*-2-4'-metoxy-1-benzosuberón) a Q525 (*E*-2-4'-dimetylamo-1-benzosuberón). Cieľom tohto štúdia je dosiahnuť synergickú cytoprotektívnu a protinádorovú aktivitu študovaných produktov. Z literatúry³ sú známe, údaje o protinádorovej aktivite prírodného zeolitu typu klinoptilolitu. Z toho dôvodu prírodný zeolit typu klinoptilolitu v našich študovaných produktoch je jednak ako prírodný nosič a regulátor uvoľňovania cytostaticky účinných látok, ale jednak sám má prispieť k protinádorovej aktivite.

Súčasný štúdium je zamerané na rôzne alternácie prípravy modifikovaných foriem prírodného zeolitu typu klinoptilolitu s rôznym obsahom chalkónov a ich charakterizáciu CHN analýzami, RTG, IČ, NMR spektroskopiou a metódami termickej analýzy TG, TDA a DTG.

Táto práca vznikla s podporou grantového projektu Vedeckej grantovej agentúry Slovenskej republiky, č. 1/0107/08 a rakúskeho vedeckého grantu ASO SK-06/07-14/2007.

LITERATÚRA

1. Tomečková V., Perjési P., Guzy J., Kušnír J., Chovanová Z., Chavková Z., Mareková M.: *J. Biochem. Biophys. Methods* 61, 135 (2004).

2. Tomečková V., Fodor K., Kušnír J., Perjési P.: *IIIrd Congress of the Society of the Hungarian Molecular and Predictive Epidemiology 3–4 November 2006, Pécs*, p. 85.
3. Pavelić K., Pavelić J.: *J. Mol. Med.* 78, 708 (2001).

1P-33**VPLYV VYMENITELNÝCH KATIÓNOV ALKALICKÝCH KOVOV NA REKRYŠTALIZÁCIU MONTMORILLONITU Z LOKALITY „JELŠOVÝ POTOK“****VLADIMÍR ŠTEFAN FAJNOR^a a JANA HRACHOVÁ^b**^a *Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava,*^b *Ústav anorganickej chémie, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, SR*
fajnor@fns.uniba.sk

Kryštalová štruktúra dioktaédrického smektitu montmorillonitu pretrváva až do teplotného intervalu 800–900 °C. Vymeniteľné katióny v medzivrstvovom priestore ovplyvňujú nielen dehydratáciu a dehydroxyláciu tohto ílového minerálu, ale majú vplyv aj na jeho rekryštalizáciu.

Z montmorillonitu, izolovaného plavením bentonitu z lokality Jelšovský potok pri Starej Kremničke, sa pôsobením roztokov chloridov alkalických kovov pripravili monoiónové vzorky. Dvoj a osemhodinovým žiňaním vzoriek montmorillonitu v elektrickej téglikovej peci pri teplote 800 °C a 900 °C sa vyvinuli vysokoteplotné fázy, ktoré boli identifikované röntgenovou (rtg) práškovou analýzou v rozsahu merania 4–64 °2θ.

Po dvojhodinovom žiňaní sa na rtg zázname Li-montmorillonitu objavilo 7 difrakcií β-kremeňa. Všetky ostatné vzorky boli röntgenoamorfne. Z uvedeného vyplýva, že lítový katión pôsobí ako mineralizátor. Po dvoj a osemhodinovom žiňaní pri teplote 900 °C vykazuje Li-montmorillonit na rtg zázname 6 difrakcií β-kremeňa, 3 difrakcie β-cristobalitu a 3 difrakcie spinelu. β-kremeň postupne rekryštalizuje na β-cristobalit. Na-montmorillonit vykazuje po dvoch hodinách žiňania 4 difrakcie β-kremeňa, 2 difrakcie β-cristobalitu a 2 difrakcie spinelu. Po ôsmich hodinách žiňania sa počet difrakcií týchto troch minerálov zvyšuje. K-montmorillonit ostáva po dvoch hodinách žiňania röntgenoamorfny, ale po ôsmich hodinách sa objavujú 3 difrakcie β-kremeňa a 3 difrakcie spinelu. K rekryštalizácii kremeňa na cristobalit nedochádza. V rtg zázname Rb-montmorillonitu sa po dvoch hodinách žiňania objavuje jedna difrakcia kremeňa a jedna difrakcia spinelu. Po ôsmich hodinách sú pozorované dve difrakcie kremeňa a 3 difrakcie spinelu, ale žiadna difrakcia cristobalitu. Cs-montmorillonit zostáva po dvoch hodinách žiňania pri teplote 900 °C röntgenoamorfny. Po ôsmich hodinách žiňania sa objavujú tri difrakcie spinelu, ale žiadna difrakcia kremeňa, resp. cristobalitu. Veľký polomer Cs iónov neumožňuje zapadnutie tohto katiónu do hexagonálnych dutín siete tetraédrov a tým blokuje kryštalizáciu vysokoteplotných fáz montmorillonitu.

1P-34**CHARAKTERIZÁCIA PRÍRODNÝCH A SYNTETICKÝCH ZEOLITICKÝCH MATERIÁLOV PROTÓNOVOU MAGNETICKOU REZONANCIOU****STANISLAVA NAGYOVÁ^a, MÁRIA REHÁKOVÁ^b a DUŠAN OLCÁK^a**^a *Katedra fyziky, Fakulta elektrotechniky a informatiky, Technická Univerzita, 042 00 Košice,* ^b *Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, 041 54 Košice, SR*

stanislava.nagyova@tuke.sk

Protónová magnetická rezonancia ¹H NMR významne prispela ku charakterizácii modifikovaných prírodných a syntetických zeolitických produktov. Boli to predovšetkým organomodifikované zeolitické produkty o obsahom oktadecylamóniového aniónu, ktoré boli študované v spolupráci s Prírodovedeckou fakultou UK^{1,2} a to z hľadiska ich využitia v environmentálnej oblasti ako nanosorbenty pri znižovaní obsahu polutantov vo vodách s hlbším zameraním na toxické zlúčeniny arzenu a chrómu. Ďalšou skupinou študovaných organomodifikovaných zeolitov boli syntetické zeolitické materiály s obsahom organických diamínov, zaujímavé z hľadiska heterogénnej katalýzy³.

¹H NMR metóda má veľký význam aj pri výskume zeolitických materiálov typu prírodného klinoptilolitu, uzatvárajúcich vo svojich dutinách farmaceuticky účinné látky s protinádorovou aktivitou. Umožňuje identifikáciu prítomných látok v materiáli a spolu s MAS NMR meraniami aj na iných jadrách okrem jadier vodíka aj detailný popis vnútorného usporiadania.

V súčasnosti sa zaoberáme sorpciou pyridínu a jeho derivátov do pórovitého zeolitického materiálu, kde predpokladáme ich naviazanie koordinačnou väzbou na prechodný kov v štruktúre zeolitu, čo umožňuje ich odstránenie z okolitého prostredia alebo zníženie ich obsahu. Skúmané mednaté formy prírodného klinoptilolitu s obsahom pyridínu a jeho derivátov boli pripravené viacerými postupmi syntézy, ktoré ovplyvňovali výsledné produkty. Ich vplyv sa prejavil na obsahu pyridínu a jeho derivátov a na vlastnostiach, vrátane farieb konečných produktov. Pripravené zeolitické produkty boli charakterizované termickou analýzou (TG, DTA, DTG), RTG, IČ, NMR spektroskopiou, CHN analýzou a metódami na stanovenie merného povrchu a objemu pórov nízkoteplotnou adsorpciou dusíka s cieľom posúdiť proces sorpcie a desorpcie.

Táto práca vznikla s podporou grantu VEGA č. 1/0107/08.

LITERATÚRA

1. Reháková M., Chmielewská E., Nagyová S.: *Solid State Phenomena* 90–91, 411 (2003).
2. Chmielewská E., Nagyová S., Reháková M., Bogdančíkova N.: *Chemistry for the Protection of the Environment 4, Wastewater, Sludge Environmental Impact and Planning*, Springer, vol. 59, 1–17 (2005).
3. Reháková M., Wadsten T., Nagyová S., Bastl Z., Briančin J.: *J. Incl. Phenom.* 39, 181 (2001).

IP-35

**MEĎNATÉ FORMY PŘÍRODNÝCH
A SYNTETICKÝCH ZEOLITOV S OBSAHOM
PYRIDÍNU A JEHO DERIVÁTŮV****LUBICA FORTUNOVÁ^{a*}, STANISLAVA NAGYOVÁ^b,
SILVIA ČUVANOVÁ^c a MÁRIA REHÁKOVÁ^a**

^a Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, 041 54 Košice, ^b Katedra fyziky, Elektrotechnická fakulta, Technická Univerzita, 042 00 Košice, ^c Ústav Geotechniky SAV, Watsonova 45, 043 53 Košice, SR lubica.fortunova@upjs.sk

Štúdium prípravy a charakterizácie meďnatých foriem prírodného zeolitu typu klinoptilolitu z domáceho východoslovenského ložiska v Nižnom Hrabovci a syntetického zeolitu ZSM5 s obsahom pyridínu a jeho derivátov naväzuje na naše predchádzajúce štúdium organomodifikovaných meďnatých foriem ZSM5^{1,2}. Súčasné štúdium zeolitických materiálov bude príspevkom pre výskum a vývoj materiálov využiteľných v environmentálnej oblasti pri znižovaní obsahu toxických látok (pyridínu a jeho derivátov). Sorpciou pyridínu alebo jeho derivátov do priestorov pórovitého materiálu a ich naviazaním koordinačnou väzbou na prechodný kov, prítomný v štruktúre pórovitého materiálu je možné dosiahnuť zníženia ich obsahu alebo ich odstránenie z okolitého prostredia. Štúdium naväzuje aj na výskum biomodifikovaných foriem zeolitu³ mikroorganizmami *Thiobacillus ferrooxidans*, s cieľom zväčšenia sorpčného povrchu, a tým získania efektívnejších výsledkov sorpčných procesov, ako aj možnosti využívania mikroorganizmov v procesoch biosorpcie toxických iónov, zameranej v tomto štádiu na meďnaté kationy.

Výsledné produkty meďnatých foriem s obsahom pyridínu a jeho derivátov boli ovplyvňované experimentálnymi podmienkami syntézy. Ich vplyv sa prejavil na obsahu pyridínu a jeho derivátov, ako aj vlastnostiach, vrátane farieb konečných produktov. Pripravené modifikované zeolitické produkty boli charakterizované metódami termickej analýzy (TG, DTA, DTG), RTG, IČ, NMR spektroskopiou, CHN analýzou a metódami stanovením merného povrchu objemov pórov nízkoteplotnou adsorpciou dusíka cielené k posudzovaniu sorpcie a desorpcie.

Táto práca vznikla s podporou grantu VEGA č. 1/0107/08.

LITERATÚRA

1. Reháková M., Wadsten T., Nagyová S., Bastl Z., Briančin J.: *J. Incl. Phenom.* 39, 181 (2001).
2. Čuvanová S., Reháková M., Finocchiaro P., Pollicino A., Bastl Z., Nagyová S., Fajnor V.Š.: *Termochimica Acta* 452, 13 (2007).
3. Reháková M., Kušnierová M., Gaberová L., Fortunová L., Čuvanová S.: *Chem. Listy* 8, 717 (2007).

IP-36

**KOMPLEXNÍ POSOUZENÍ VLIVU FYZIKÁLNĚ-
CHEMICKÝCH VLASTNOSTÍ HORNIN NA JEJICH
TEPELNOU ROZTAŽNOST****EVA PLEVOVÁ, ALENA KOŽUŠŇÍKOVÁ a LENKA
VACULÍKOVÁ**

Ústav geoniky AV ČR, v.v.i., Studená 1768, 708 00 Ostrava
plevova@ugn.cas.cz

Fyzikálně-chemické vlastnosti hornin mají výrazný vliv na chování hornin během jejich tepelného namáhání¹. S nárůstem teploty dochází v horninách k chemickým přeměnám a polymorfním transformacím minerálů spojených s projevy roztažnosti². Soubor těchto fyzikálně-chemických změn lze velmi dobře sledovat zejména pomocí metod termické analýzy. Intenzita vlivu působení teploty na horniny je závislá především na mineralogickém složení horniny, na její struktuře a textuře a na prostorové orientaci minerálů³.

Předložený příspěvek se zabývá posouzením vlivů složení a stavby vybraných pískovců, žul a mramorů na jejich teplotní roztažnost spolu s vlivem fázových změn a dalších reakcí probíhajících vlivem nárůstu teploty. Vybrané orientované vzorky hornin byly podrobeny měření tepelné roztažnosti metodou TMA ve třech na sebe kolmých osách na konečnou teplotu 800 a 1000 °C. Ze tří sledovaných typů horninových materiálů je nejvýraznější vliv teploty na tepelnou roztažnost pozorován u mramorů, méně u žul a nejméně pak u pískovců.

V případě mramorů dochází k nestejně dilatace usměrněných zrn kalcitu a mramory tudíž vykazují výraznou anizotropii v jednom směru. V případě žuly při zahřívání sice také dochází k různé dilataci zrn jednotlivých horninotvorných minerálů (křemene, draselných živců, plagioklasů), avšak tyto minerály nejsou přednostně usměrněné, a proto rozdíly tepelné roztažnosti v jednotlivých osách nejsou tak výrazné jako u vzorků mramoru. U pískovce je pak mezizrnový prostor vyplněn sice heterogenní, ale relativně jemnozrnnou směsí jílových minerálů, které způsobují zmírnění dopadu dilatace horninotvorných minerálů a tudíž vliv orientace vzorku na výslednou tepelnou roztažnost je zanedbatelný.

Pro získání komplexních informací o změnách roztažnosti v závislosti na minerálním složení a fyzikálně-chemických přeměnách během tepelného namáhání materiálu byly dané vzorky dále podrobeny simultánnímu měření TG/DTA, FT-IR spektroskopie a RTG difrakce.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 105/07/P416 a výzkumného záměru CEZ: AV0Z30860518.

LITERATURA

1. Romeo I., Capote R., Lunar R.: *J. Struct. Geol.* 29, 1353 (2007).
2. Rawley R.: *Appl. Clay Sci.* 8, 449 (1994).
3. Battaglia S.: *Nuovo Cimento C*, 16C, 453 (1993).

1P-37

CHARACTERIZATION OF THE BROWN COAL AFTER MICROWAVE-ASSISTED EXTRACTION

SILVIA ČUVANOVÁ^a, MICHAL LOVÁS^a, ŠTEFAN JAKABSKÝ^a, and LENKA VACULÍKOVÁ^b

^a Institute of Geotechnics of SAS, Watsonova 45, 043 53 Košice, Slovak Republic, ^b Institute of Geonics AS CR, Studentská 1768, 708 00 Ostrava-Poruba, Czech Republic
cuvanova@saske.sk

This article presents a new approach to evaluation of coal with implementation microwave extraction of powders. It is known from literature¹ that coal is a chemically and physically extremely complex and heterogeneous material, consisting of organic (carbon) and inorganic (minerals) constituents. The organic part of the coal also contains sulphur, oxygen, and nitrogen in the functional groups. The microwave extraction (MAE) was realised in microwave furnace with using different solvent (methanol, toluene, dichloromethane). The temperature of boiling was increased about 13–40 °C depending on the type of solvent in open loop system at conditions of the microwave heating.

The sample of brown coal was from locality Handlová in Slovakia. The samples before and after extraction were analysed by Fourier Transform Infrared (FT-IR) spectroscopy. This technique is a widely used analytical technique for determining the different functional groups of a coal structure^{2,3}. The method by which the spectra can be subtracted one from the other, allows the distinguishing of one coal from another by characteristic functional groups. It confirmed the presence of aliphatic CH_x stretching vibration at 3000–2800 cm⁻¹ and deformation vibration occur at 1470–1450, 1380–1375, 720–700 cm⁻¹. More intense aromatic C=C ring stretching vibration is at 1600 cm⁻¹. The peaks 900–750 cm⁻¹ are due to two to four adjacent H atoms in the aromatic nuclei. The broad band at 3500–3400 cm⁻¹ represents –OH stretching vibration of water.

The knowledge of the structural parameters can provide a whole vision of the structural changes of the coal.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-51-035505 and the Slovak Grant Agency for Science VEGA grant No. 2/7163/27.

REFERENCES

1. Georgakopoulos A., Iordanidis A., Kapina V.: Energy Sources 25, 995 (2003).
2. Vassilev S. V., Tascón J. M. D.: Energy Fuels 17, 271 (2003).
3. Xuguang S.: Spectrochim. Acta, Part A 62, 557 (2005).

1P-38

SEPARÁCIA A IDENTIFIKÁCIA ÍLOVÝCH MINERÁLOV Z HALDOVÝCH POLÍ LOŽISKA ĽUBIETOVÁ PRE ÚČELY ŠTÚDIA ICH SORPČNÝCH VLASTNOSTÍ

PETER ANDRÁŠ*, IVETA NAGYOVÁ a ZUZANA MELICHOVÁ

Fakulta prírodných vied, Univerzita Mateja Bela, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica, SR
andras@savbb.sk

Pokles pH a redoxného potenciálu (Eh) v sedimentoch haldových polí Cu-ložiska Ľubietová spôsobuje uvoľnenie ťažkých kovov (predovšetkým Cu, Fe, Cd, As, Sb, Pb, Zn, Mn, Ni, Co) z tuhej fázy, kde sa tieto nachádzajú vo forme ťažšie rozpustných minerálov alebo v sorpčnom komplexe, do podzemnej a povrchovej vody. Odolnosť krajinných zložiek voči kontaminácii ťažkými kovmi je významne podmienená rôznymi prírodnými sorbentami¹.

Ako sorbenty na fixáciu kovov možno použiť predovšetkým ílové minerály. Tieto zväčša kryštalické hlinitokremičitany s vrstevnatou štruktúrou, sú väčšinou nositeľmi stálych negatívnych povrchových nábojov², ktoré môžu sorbovať kationy Ca(II), Mg(II), K(I), Na(I), Al(III), Mn(II) a kationy ťažkých kovov.

V oblasti haldových polí sme identifikovali rtdifrakčnou analýzou hlavne illit a montmorillonit, menej kaolinit a chlority.

Pre štúdium sorpčných vlastností ílových minerálov sme získali uvedené monominerálne frakcie podľa metodiky, ktorá pozostáva z odstránenia organickej hmoty, uhličitanov, železa a chloridov. Suspenzia ílových minerálov sa vysušila pri laboratórnej teplote na sklíčku. Týmto postupom sa dosiahne súhlasná orientácia šupinek ílových minerálov, ktorá zvýrazní difrakčné reflexy, výhodné pre identifikáciu jednotlivých minerálov³.

Táto práca vznikla za podpory grantu MŠ SR VEGA, č. 1/0789/08.

LITERATÚRA

1. Rusková J.: Acta Universitatis Matthiae Belii, Séria environmentálna ekológia, IV./V., 22 (2003).
2. Kozáč J.: Mineralia Slovaca, Geovestník 28, 5 (1969).
3. Šucha V., Šrodoň J., Zatkalíková V., Francú J.: Mineralia Slovaca 23, 267 (1991).

1P-39**INTERAKCIA TAVENINY KYSELINY STEÁROVEJ S ALOFÁNOM****VLADIMÍR ŠTEFAN FAJNOR^a, NOÉMI BOHÁKOVÁ^a a JANA HRACHOVÁ^b**^a *Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava,*^b *Ústav anorganickej chémie, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, SR fajnor@fns.uniba.sk*

Analýza pomerne rozsiahlej literatúry vedie k záverom, že organoily možno pripraviť štyrmi rôznymi spôsobmi:

- sorpciou organických molekúl z plynnej fázy,
- interakciou v kvapalnom prostredí,
- interakciou v tuhom skupenstve v procese mletia,
- sorpciou organickej látky z jej taveniny na ílový minerál.

Hoci alofány tvoria skupinu dôležitých amorfných ílových minerálov, ich interakcia s organickými látkami je na okraji záujmu, i keď sa preukázalo, že značne spomaľujú oxidáciu organických látok pri vyšších teplotách.

Vzorka alofánu sa získala z mineralogickej zbierky Slovenského národného múzea v Bratislave. Snímky z elektrónového mikroskopu ukázali, že vzorka pozostáva z veľmi malých agregátov sférických častíc, bez výraznejších a určitejších tvarov. Vo väčšom počte sa vyskytujú pre elektrónový lúč nepriehľadné izometrické zrná s ostrým ohraničením, ktoré patria karbonátom. Prítomnosť kalcitu v alofáne potvrdila röntgenová fázová analýza, ako aj diferenčná termická analýza.

Výskum metódami infračervenej spektroskopie, rtg a termickej analýzy ukázal, že po roztavení kyseliny steárovej dochádza k jej chemisorpcii na alofáne a k oxidácii komplexu alofán-kyselina steárová dochádza (za prítomnosti vzduchu) až pri neobvykle vysokej teplote 500 °C. V atmosfére dusíka dochádza k niekoľkostupňovému (endotermickému) rozkladu v teplotnom intervale 300–600 °C a plynným produktom rozkladu je popri CO₂ a H₂O celý rad uhlíkovodíkových plynov.

1P-40**DEPOZICE TENKÝCH VRSTEV Ge₂Sb₂Te₅ TECHNIKOU RADIOFREKVENČNÉHO MAGNETRONOVÉHO NAPRAŠOVÁNÍ****JAN GUTWIRTH^a, TOMÁŠ WÁGNER^a, PETER BEZDIČKA^b, JIŘÍ ORAVA^a, EVA KOTULANOVÁ^b, MILAN VLČEK^c a MILOSLAV FRUMAR^a**^a *Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra obecné a anorganickej chémie a Výzkumné centrum LC 523, nám. Čs. legii 565, 532 10 Pardubice,* ^b *Ústav anorganickej chémie AV ČR v.v.i., 250 68 Husinec-Řež,* ^c *Společná laboratoř chemie pevných látek Ústavu makromolekulární chemie AV ČR v.v.i. a Univerzity Pardubice, Studentská 84, 532 10 Pardubice Jan.Gutwirth@upce.cz*

Jednou ze současných aplikací chalkogenidových materiálů je jejich použití jakožto aktivního materiálu paměti založených na fázové změně. Reversibilní fázové změny se docílují optickými pulsy (přepisovatelné optické disky) resp. pulsy elektrickými (PC-RAM paměti). Detekce je založena na rozdílné optické reflektivitě resp. elektrickém odporu amorfni a krystalické fáze. V současnosti komerčně nejužívanějším je systém Ge-Sb-Te.

Tenké vrstvy Ge-Sb-Te byly deponovány technikou magnetronového naprašování s radiofrekvenčně buzeným plazmatem. Složení, chemická homogenita a povrchová morfologie deponovaných filmů byly studovány technikou SEM-EDX, zatímco krystalinita byla stanovována technikou XRD. Optické vlastnosti (optické energie zakázaného pásu E_g^{opt}, spektrální závislost indexu lomu) a tloušťky připravených tenkých vrstev byly určeny na základě UV-Vis-NIR spektroskopie a spektrální elipsometrie VASE.

Byl určen vliv depozičních parametrů (RF výkon, tlak Ar, úhlová odchylka od planoparalelní geometrie) na složení, krystalinitu, optické vlastnosti a depoziční rychlost tenkých vrstev.

Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy (grant Výzkumného centra LC 523, grant MSM 0021627501), Grantové agentuře ČR (grant GA 203/06/1368) a Evropské komisi (FP 6 project IST-2004-017406) za finanční podporu.

1P-41**SYNTHESIS AND PHOTOCATALYTIC ACTIVITY OF TiO₂ THICK FILMS DEPOSITED ON Al₂O₃ CERAMIC FOAMS****MELINDA VARGOVÁ^a, MICHAL GORBÁR^b, KAROL JESENÁK^a, ULRICH VOGT^b, and GUSTAV PLESCH^a**^a *Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina, Bratislava, 842 15, Slovak Republic,* ^b *EMPA, Swiss Federal Laboratories for Materials Testing and Research, Laboratory for High Performance Ceramics, Ueberlandstr. 129, CH-8600 Dübendorf, Switzerland vargova@fns.uniba.sk*

Photocatalytic degradation of organic pollutants is presently becoming one of the most promising technologies of environmental chemistry. TiO₂ has a unique performance for photoactivated degradation of various contaminants in water or air. It can be used either in form of water suspensions or as films deposited on various carriers. Although numerous reports have been made on preparation and photocatalytic activity studies of TiO₂ films on flat substrates, e.g. glass, research on TiO₂ films on other supports has been largely lacking. Ceramic foams with open porosity exhibit interesting combination of properties such as high porosities (85–90 %) with spherical-like cells connected to each other through openings and windows, high temperature stability, high permeability, low thermal conductivity and low heat capacity. These make them to highly suitable substrates for various catalytic applications.

In this work the use of Al₂O₃ foams as substrates for thick films of TiO₂ is reported. Al₂O₃ foam substrates with

pore sizes of 10 and 15 ppi (ppi = pores per inch), which were fabricated by “Schwartzwalder” replica method and sintered at 1400 °C. TiO₂ was synthesized by sol-gel method and by coprecipitation. The phase composition of the obtained titania powders was characterized by XRD and their specific surfaces were determined by BET. The porous foams were coated with TiO₂ aqueous slurries by wash coating technique and subsequently annealed above 600 °C. The sol-gel synthesized TiO₂ was deposited by dip-coating and annealed at same temperatures. The final sol coating was the result of three coating cycles. The microstructure of the deposited TiO₂ thick films was studied by SEM. The obtained results show that the above deposition conditions led to crack-free coatings with a thickness of about 10 μm, where anatase clearly prevails over rutile. For comparison thick films containing of TiO₂ photochemical standard Degussa P25 were prepared under the same conditions. The photocatalytic activity of the obtained samples was investigated by the determination of total organic carbon (TOC) in the process of photochemical decomposition of phenol in aqueous TiO₂ solution. The relations between the technique of the TiO₂ synthesis and the photocatalytic activity of the obtained films are discussed.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency (project APVT-20-0011804).

1P-42

NANOSTRUKTURNÍ NIKL PRO PALIVOVÉ ČLÁNKY

TEREZA UHLÍŘOVÁ^a, PETER BARATH^{a,b} a JAKUB REITER^{a,*}

^a Ústav anorganické chemie AV ČR, v. v. i., 250 68 Řež,

^b Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií VUT v Brně, 602 00 Brno
peter.barath@phd.feec.vutbr.cz

V devadesátých letech 20. století přinesl objev tzv. lyotropních kapalných krystalů (LLC) zcela nové možnosti přípravy nanostrukturních látek^{1–3}. Jde o vysoce organizované struktury systému neionogenní surfaktant – voda, ve kterých lze připravovat celou řadu mezoporézních materiálů, především oxidů a kovů. Náplní našeho současného výzkumu je příprava a studium niklu pro katalyzátor oxidace vodíku v nízkoteplotních H₂-O₂ palivových člancích.

Nanostrukturní nikl byl galvanostaticky vyloučen na elektrodu (skelný uhlík) z lyotropního kapalného krystalu o složení 50:50 hm.% Brij® 56 (Fluka) – vodná niklovací lázeň (0,2 M (CH₃COO)₂Ni, 0,5 M CH₃COONa, 0,2 M H₃BO₃). Srovnávací vzorek byl vyloučen z vodné niklovací lázně za shodných podmínek. Elektrochemické měření a studium oxidace vodíku bylo provedeno na rotační diskové elektrodě (Metroohm) a potenciostatu PGSTAT 30 (Eco Chemie).

Voltametrická měření ukázala, že při potenciálech mezi 0,1 a 0,5 V vs. Hg/HgO dochází k tvorbě a následné redukci několika monovrstev Ni(OOH) nezávisle na metodě přípravy niklu. Vzhledem ke shodnému náboji, jímž byl nikl v obou případech vyloučen, je jediným faktorem ovlivňujícím reaktivitu vzorku přítomnost kanálů a pórů ve struktuře niklu vy-

loučeného z LLC. Poměr ploch píků oxidace niklu je 8,9 : 1 ve prospěch mezoporézního niklu, který je zároveň více reaktivní, neboť k jeho oxidaci dochází při nižším potenciálu. Vlastní píky oxidace a redukce jsou také výrazně ostřejší. Tyto výsledky svědčí o rychlém transportu látek k mezoporézní struktuře. Měření při vyšších rychlostech polarizace (20 a 100 mV s⁻¹) ukázala vysokou rychlost výměny náboje.

Současný výzkum je zaměřen na studium oxidace vodíku (HOR) na připraveném nanostrukturním niklu, kde se uplatní vyšší reaktivita niklu a rychlý transport molekul vodíku k elektrodě a H₃O⁺ iontů od elektrody. Naše první výsledky měření na rotační diskové elektrodě ukázaly výraznou katalytickou aktivitu.

Tato práce vznikla za podpory Akademie věd ČR (AV0Z40320502), MŠMT ČR (LC523) a Grantové agentury AV ČR (B200320801).

LITERATURA

1. Attard G. S., Bartlett P. N., Coleman N. R. B., Elliott J. M., Owen J. R.: *Langmuir* 14, 7340 (1998).
2. Nelson P. A., Elliott J. M., Attard G. S., Owen J. R.: *Chem. Mater.* 14, 524 (2002).
3. Bartlett P. N., Birkin P. N., Ghanem M. A., de Groot P., Sawicki M.: *J. Electrochem. Soc.* 148, C119 (2001).

1P-43

VLIV MINERALIZÁTORŮ NA BAREVNOST SLOUČENINY Ce_{0,8}Tb_{0,05}Y_{0,15}O_{1,925}

LUCIE VITÁSKOVÁ a PETRA ŠULCOVÁ

*Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice
lucie.vitaskova@student.upce.cz*

Vysokoteplotní keramické pigmenty jsou jednou z oblastí výzkumu na katedře anorganické technologie, které je v poslední době věnována velká pozornost. Pigmenty na bázi CeO₂ patří mezi nové netradiční keramické pigmenty, které lze díky jejich vysoké termické a chemické stabilitě označit jako vysokoteplotní pigmenty. Tyto pigmenty poskytují zajímavý barevný odstín v glazuře, který se pohybuje od růžově oranžového až po červenohnědý a vyznačují se také ekologickou bezproblémovostí.

Cílem našeho výzkumu bylo zhodnotit především barevné možnosti sloučeniny Ce_{0,8}Tb_{0,05}Y_{0,15}O_{1,925}, která byla připravována klasickým suchým způsobem, přičemž byla ověřována možnost přidávků různých mineralizátorů, které by mohly příznivě ovlivnit výsledný barevný odstín. Jako mineralizátory byly použity: NaCl, H₃BO₃, Na₂SiF₆, Na₃AlF₆, LiF, NaF, K₂CO₃, AlF₃, Li₂CO₃ a Na₂CO₃, a to v množství 10 hm.%. Kalcinace byla prováděna při teplotách 1300–1500 °C.

Všechny připravené pigmenty byly aplikovány do organického pojivového systému (Balakom, a.s.), a keramické glazury G 05091 (Glazura, s.r.o., Roudnice nad Labem) s teplotou glazování 1000 °C. Všechny pigmentové aplikace byly objektivně hodnoceny pomocí barevných souřadnic

systému CIE L*a*b* (1976) v oblasti viditelného světla (400 až 700 nm). Měření barevnosti bylo provedeno pomocí spektrofotometru ColorQuest XE (HunterLab, USA). Vedle koloristických vlastností byl sledován také vliv mineralizátorů a teploty výpalu na velikost pigmentových částic.

Na základě získaných výsledků barevných vlastností bylo ověřeno, že přítomnost mineralizátorů může výrazně ovlivnit výsledný barevný odstín pigmentu $Ce_{0,8}Tb_{0,05}Y_{0,15}O_{1,925}$, který je při teplotě výpalu 1600 °C a po aplikaci v keramické glazuře oranžový. Bylo zjištěno, že při teplotě výpalu 1300 °C podporuje přítomnost mineralizátoru Li_2CO_3 vznik příspěvku červeného odstínu v konečné barvě pigmentu a způsobuje tak její posun do sytějších odstínů oranžové barvy. Naopak zbývající mineralizátory způsobují posun odstínů ke světlejším žlutě oranžovým odstínům. Zvýšením teploty výpalu na 1400 °C dochází k tvorbě sytějšího oranžového odstínu v přítomnosti mineralizátoru Na_2CO_3 a LiF, při použití Li_2CO_3 se již u pigmentu projevuje jeho tendence ke spékání a dochází tak k jeho znehodnocení. Naopak při použití mineralizátoru NaCl dochází k tvorbě žlutého zbarvení, tento trend se projevovat i při vyšší teplotě výpalu, a to 1500 °C. Příznivým zjištěním je skutečnost, že při použití některých mineralizátorů (např. NaCl či K_2CO_3) dochází ke snižování velikosti pigmentových částic.

Tato práce vznikla za podpory GA ČR (projekt č. 104/08/0289).

1P-44

VLIV DOPUJÍCÍCH ELEMENTŮ NA BAREVNÉ VLASTNOSTI PIGMENTU $M_{1-x}Pr_xFeO_3$

JANA LUXOVÁ*, PETRA ŠULCOVÁ a MIROSLAV TROJAN

*Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice
petra.sulcova@upce.cz*

Perovskity představují důležitou skupinu chemických sloučenin z důvodu jejich široké aplikace, neboť se používají např. jako katodové materiály pro pevné oxidické palivové články¹, katalyzátory² či magnetické materiály³. Náš zájem je zaměřen na takové perovskitové sloučeniny, které by byly jednak ekologické, ale také zajímavé z pigmentářského hlediska⁴.

V rámci této práce byly připraveny a hodnoceny pigmenty typu $M_{1-x}Pr_xFeO_3$, kde $M = Y^{3+}, Al^{3+}, Zn^{2+}$ atd., přičemž byl sledován vliv dopujících elementů na barevné vlastnosti výchozího pigmentu $PrFeO_3$.

Pigmenty byly připraveny reakcí v pevné fázi, kdy byly zhomogenizované výchozí suroviny, jež byly ve stechiometrickém poměru, kalcinované v elektrické peci. Kalcinace probíhala při teplotě 1000 °C s výdrží 120 min na maximální teplotě. Jako výchozí suroviny byly použity oxidy resp. uhličitany příslušných elementů.

Hlavním cílem bylo posoudit vliv dopujících prvků na výsledný barevný vzhled pigmentu. Vzorky testovaných pigmentů byly dispergovány do dvou pojivových systémů, a to

do transparentní glazury P 04791 a do akrylátového pojiva v tónu plném a ředěném s TiO_2 v hmotnostním poměru 1:1 a 1:4. Barevné vlastnosti byly měřeny pomocí přístroje ColourQuest XE (HunterLab, USA) a barva byla hodnocena v systému CIE L*a*b*. Barevný vzhled pigmentů se pohyboval v různých odstínech hnědé barvy a to v závislosti na použitém dopujícím prvku.

Dalším úkolem bylo zjistit velikost částic připravených pigmentů. k těmto účelům byl použit přístroj Mastersizer 2000 MU (Malvern Instr., VB).

Tato práce byla podporována projektem GA ČR č. 104/08/0289.

LITERATURA

1. Kušcer D., Hrovat M., Holc J., Bernik S., Kolar D.: *J. Power Sources* 61, 161 (1996).
2. Yamazoe N., Teraoka Y.: *Catalysis Today* 8, 175 (1990).
3. Schmool D. S., Keller N., Guyot M., Krishnan R., Tessier M.: *J. Appl. Phys.* 86, 5712 (1999).
4. Trojan M., Šolc Z., Novotný M.: *Pigments, Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*, Vol. 19. J. Wiley and Sons, New York 1996.

1P-45

ELEKTROCHEMICKÉ REDOXNÍ PROCESY V LYOTROPNÍCH KAPALNÝCH KRYSTALECH

TEREZA UHLÍŘOVÁ^a, JAKUB REITER^{a*} a JOHN R. OWEN^b

^a Ústav anorganické chemie AV ČR, v. v. i., 250 68 Řež, ČR,
^b University of Southampton, Highfield, Southampton, Hants SO17 1BJ, United Kingdom
teruhl@seznam.cz

Některé neionogenní surfaktanty mohou vytvářet s vodou kapalně lyotropní krystaly (LLC) ve formě vysoce organizovaných struktur¹, v jejichž prostředí je možné připravovat celou řadu nanomateriálů, kovů i oxidů. Tyto látky se připravují především elektrochemicky, kdy je během elektrodepozice limitujícím faktorem rychlost difúze iontů uvnitř organizované struktury kapalného krystalu. Na rozdíl od kapalných roztoků, kde jsou ionty rovnoměrně solvatovány, v LLC je možná distribuce iontů mezi dvě fáze – polární vodnou a nepolární fází surfaktantu. Pro studium difúze a transportu iontů v prostředí LLC byly zvoleny dva elektrochemicky vysoce reverzibilní systémy $[Fe(CN)_6]^{3-} / [Fe(CN)_6]^{4-}$ a ferrocen (Fc) / ferricinium (Fc^+)².

LLC byl připraven smícháním neionogenního surfaktantu Brij® 56 (Fluka) s vodným roztokem 1M KCl v poměru 50:50 hm.% a příslušnými komplexy při 50 °C. Ochlazením vznikl krystal, který za těchto podmínek vytváří hexagonální strukturu. Elektrochemická měření byla prováděna na potenciostat PGSTAT 30 (Eco Chemie) s použitím elektrody (\varnothing 1,6 mm) a ultramikroelektrody (\varnothing 20 μ m) z platiny.

Ferro-ferricyanidový systém vykázal vysoce reverzibilní chování v prostředí LLC v širokém rozsahu polarizačních rychlostí 10^{-4} – 10^{-1} V s⁻¹. Srovnání s měřením ve vodném roztoku ukázalo posun půlvalného potenciálu o –80 mV, který lze

vysvětlit sníženou stabilitou vysoce nabitého iontu $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$ v méně polárním prostředí LLC. Z voltametrických dat byly vypočítány difúzní koeficienty ferro-ferryanidového páru 6,2, resp. $6,7 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$.

Pár Fc/Fc^+ se od $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-/4-}$ liší především výrazně nižší rozpustností ferrocenu ve vodě (pod 10^{-5} M), což zneumožňuje přímé srovnání elektrochemického chování ve vodě a v LLC. Vzhledem k nižší polaritě je ferrocen dobře rozpustný v LLC a podléhá zde vysoce reverzibilní elektrochemické oxidaci. Je-li v prostředí LLC rozpuštěna sůl Fc^+BF_4^- , míra reverzibility redoxní reakce byla nižší. Difúzní koeficient ferrocenu v LLC je přibližně $2,5 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$.

Tato práce vznikla za podpory Akademie věd ČR (AV0Z40320502), MŠMT ČR (LC523), Grantové agentury AV ČR (B200320801) a British Council Chevening Scholarship.

LITERATURA

- Attard G. S., Glyde J. C.: *Nature* 378, 366 (1995).
- Reiter J., Uhlířová T., Owen J. R.: *Electrochim. Acta*, připravováno.

IP-46

BAREVNÉ VLASTNOSTI SLOUČENIN TYPU $(\text{Bi}_2\text{O}_3)_{0,6}(\text{Ln}_2\text{O}_3)_{0,4}$

EVA PROKLEŠKOVÁ a PETRA ŠULCOVÁ

*Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. Legií 565, 532 10 Pardubice, Česká republika
eva.prokleskova@student.upce.cz*

Za nejuniverzálnější anorganické pigmenty s oranžovými a žlutými odstíny byly ještě donedávna pokládány chromové oranže a žlutě, jejichž základem jsou z chemického hlediska chromany olovnaté. Jejich hlavní nevýhodou je však toxicita podmíněná přítomností olova a šestimocného chromu. V současné době jsou tedy na pracovišti autorů hledány nové anorganické pigmenty, které eliminují použití těžkých kovů, a jenž by svoji barevností i ostatními pigmentovými vlastnostmi zmíněné žluté a oranžové pigmenty nahradily. Za takové pigmenty lze označit sloučeniny, jejichž podstatou je Bi_2O_3 , který sám o sobě má světle žlutou barvu, ovšem vhodným dopováním (zejména lanthanoidy) lze docílit výrazné změny barevných vlastností a také zvýšení termické stability¹.

V této práci byla hlavní pozornost soustředěna na sledování barevných vlastností sloučenin typu $(\text{Bi}_2\text{O}_3)_{0,6}(\text{Ln}_2\text{O}_3)_{0,4}$, kde Ln = Eu, Gd, Lu, Tm, Yb a Ce. Příprava pigmentů $(\text{Bi}_2\text{O}_3)_{0,5}(\text{Ln}_2\text{O}_3)_{0,5}$ je založena na suché homogenizaci výchozích oxidů, tj. Bi_2O_3 (Lachema Pliva, ČR), Eu_2O_3 , Gd_2O_3 , Lu_2O_3 , Tm_2O_3 , Yb_2O_3 a CeO_2 (Bochemie, ČR). Připravené směsi byly kalcinovány v elektrické peci při teplotě 850 °C. Pigmenty byly následně aplikovány do organického pojivového systému (Balakom, a.s.) v plném tónu a v ředěném tónu s TiO_2 v poměru 1:1. Tyto aplikace byly objektivně hodnoceny pomocí barevných souřadnic systému CIE $L^*a^*b^*$. Měření barevnosti bylo provedeno pomocí spektrofotometru ColorQuest XE (HunterLab, USA)². U pigmentů bylo dále po-

mocí přístroje Mastersizer 2000 MU (Malvern Instruments, Velká Británie) sledováno rozdělení velikosti jejich částic.

Syntetizované pigmenty typu $(\text{Bi}_2\text{O}_3)_{0,6}(\text{Ln}_2\text{O}_3)_{0,4}$, kde Ln = Eu, Gd, Tm, Lu, Yb a Ce, pokrývají žádaný sortiment žluto-oranžových a oranžových odstínů. Zároveň lze konstatovat, že vzhledem k použitým výchozím surovinám, jsou tyto sloučeniny z hygienického a ekologického hlediska bezproblémové. Připravené pigmenty mají poměrně velkou hodnotu střední velikosti částic d_{50} (2,2–7,8 μm). Pro využití těchto práškových materiálů do organických pojivových systémů bude nutné snížit velikost jejich částic na cca 1 μm .

Tento výzkum je na pracovišti autorů podporován GA ČR (projekt č. 104/08/0289).

LITERATURA

- Šulcová P., Jurčíková D., Voženílková J., Trojan M.: *Sb. konf. „Nové trendy v anorganické technologii 2005“*, 26.5.–27.5.2005, Praha, str. 134–141.
- Šulcová P.: *Vlastnosti anorganických pigmentů a metody jejich hodnocení*, 1. vydání. Univerzita Pardubice, Pardubice 2000.

IP-47

DITHIOKARBAMÁTY NIKLU JAKO KATALYZÁTORY OXIDACE GRAFITU

VÁCLAV SLOVÁK^a, RICHARD PASTOREK^b a PETR SLOVÁK

^a *Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava,* ^b *Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc
vaclav.slovak@osu.cz*

V rámci hledání vztahů mezi strukturou anorganických látek a jejich katalytickou aktivitou při oxidaci nebo oxidační pyrolyze uhlíkatých materiálů byl sledován vliv 27 komplexních dithiokarbamátů niklu na oxidaci grafitu.

Průběh oxidace vzorků grafitu dopovaných katalyzátory (0,01 mol.%) byl sledován termogravimetricky. Kinetické parametry byly vypočteny metodou přímé nelineární regrese¹ s použitím modelu reakce n-tého řádu. Vliv složení komplexu na aktivační energii oxidace jako míry katalytické účinnosti byl posuzován analýzou rozptylu na hladině významnosti 0,05.

Všechny použité komplexy výrazně snižovaly aktivační energii oxidace z původních 217 kJ mol^{-1} u nedopovaného grafitu na hodnoty v rozmezí 120–160 kJ mol^{-1} .

Přes známý vliv přítomnosti halogenidů na katalytickou aktivitu sloučenin kovů² se ve skupině sledovaných komplexů, z nichž 9 obsahovalo halogenidy, tento faktor statisticky významně neprojevil.

Vzhledem k povaze použitých komplexů byl studován především vliv typu dithiokarbamátového ligandu, který se ukázal statisticky významný. Katalytická účinnost komplexů podle přítomného dithiokarbamátu roste v řadě hmidtc (hexamethylenimindithiokarbamát) < dpedtc (dipentylidithiokarbamát) < bzbdtc (benzylbutylidithiokarbamát) < bzmdtc

(benzylmehyldithiokarbamát) < HPhdtc (fenyldithiokarbamát). Výraznější efekt tedy vykazovaly dithiokarbamáty s aromátem ve struktuře.

Významný se také ukázal i vliv dalších ligandů. Přítomnost dusíkatých heterocyklů (phen, bpy) katalytickou účinnost snižuje, naopak přítomnost PPh₃ vede k výraznějšímu snížení aktivační energie oxidace grafitu.

Statisticky významně se na katalytické účinnosti projevuje také vliv přítomného aniontu respektive neiontová povaha komplexu. Právě neiontové komplexy nejvýrazněji snižovaly aktivační energii. Anionty zvyšovaly katalytickou účinnost v řadě BPh₄⁻<FeCl₄⁻≈ClO₄⁻<PF₆⁻. Sloučeniny boru jsou známy svou schopností inhibovat hoření, proto nejmenší katalytická účinnost komplexů s BPh₄⁻ nepřekvapuje. Naopak překvapující je vysoká katalytická účinnost komplexů obsahujících fosfor (PF₆⁻ nebo PPh₃), neboť i fosfáty jsou častou složkou retardérů hoření.

Nejvýraznějším katalyzátorem ($E_a = 123 \text{ kJ mol}^{-1}$) oxidace grafitu ze skupiny studovaných komplexů byl [NiI(bzmdtc)(PPh₃)], který vyhovuje zjištěným kritériím pro účinný katalyzátor – neiontový komplex s aromatickým dithiokarbamátem a PPh₃ jako ligandy.

LITERATURA

1. Slovák V.: *Thermochim. Acta.* 372, 175 (2001).
2. Mul G., Kapteijn F., Moulijn J. A.: *Appl. Catal., B* 12, 33 (1997).

1P-48

GLASS FORMATION IN THE Bi₂O₃ – PbCl₂ – TeO₂ SYSTEM

PETR KOSTKA^a, JULIEN GAURY^b and CLEMENT CONSEIL^b

^a*Institute of Inorganic Chemistry of the ASCR, v. v. i., V Holešovičkách 41, 182 00 Praha 8 – Kobylisy, Czech Republic,* ^b*Université de Rennes 1, UFR Structure et Propriétés de la Matière, Campus de Beaulieu, 350 42 Rennes, France*
kostka@iic.cas.cz

Tellurium oxide glasses have been observed in a large range of compositions. They have potential applications as optoelectronic materials for optical amplification or fiber sensors^{1,2}. In previous work we studied glass formation in PbCl₂-Sb₂O₃-TeO₂ system³. The aim of this research is to investigate analogical TeO₂ based vitreous phases containing Bi₂O₃ instead of Sb₂O₃.

New glass compositions have been investigated in the Bi₂O₃-PbO-TeO₂ and Bi₂O₃-PbCl₂-TeO₂ systems. Glass preparation is carried out in open tubes at room atmosphere, using chemically pure (>99 %) reagents. Glass samples were obtained by quenching for less stable compositions and by casting in metal moulds for bulks.

Vitreous regions have been determined in both ternary systems. The glass formation is predominantly observed along the TeO₂-PbCl₂ binary line. The use of lead chloride instead of lead oxide increases the resistance against devitrification and extends the vitreous composition range.

The investigation of physical properties is focused on

thermal properties (glass transition temperature T_g, crystallization temperature T_x, thermal stability etc.) and optical properties (especially optical transmissivity in visible and infrared region of spectra).

This work was supported by the Czech Science Foundation (grant No. 104/08/0734).

REFERENCES

1. Wang J. S., Vogel E. M., Snitzer E.: *Optical Materials* 3, 187 (1994).
2. Dutreilh-Colas M., Thomas P., Champarnaud-Mesjard J.-C., Fargin E.: *Phys. Chem. Glasses* 44, 349 (2003).
3. Kostka P., Lezal D., Poulain M., Pedlikova J., Novotna M.: *Solid State Phenom.* 90&91, 241 (2003).

2P-01

CÍLENÉ DERIVÁTY PACLITAXELU

**MARIE PŘIBYLOVÁ^{a,b}, MARCELA DVOŘÁKOVÁ^{a,b}
a TOMÁŠ VANĚK^a**

^a Laboratoř rostlinných biotechnologií, Spojená laboratoř ÚEB AV ČR, v.v.i. a VÚRV, v.v.i., Rozvojová 263, 161 06 Praha 6, ^b Katedra Chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Albertov 6, 128 43 Praha 2
pribylova@ueb.cas.cz

Paclitaxel (PTX) je cytostatikum pocházející z tisu *Taxus brevifolia*. Dnes je PTX využíván při léčbě rakoviny vaječníku a prsu¹. Příprava cílených derivátů paclitaxelu je možností jak snížit jeho vedlejší negativní účinky. Cílený derivát je komplexem tří molekul: cytostatika, raménka a navigační molekuly.

Navigační molekula je biologicky aktivní látka, na jejíchž receptorech je cílený derivát zachycen, a proto dochází k zakoncentrování léku pouze na vybraných tkáních. Navigační molekulou jsme zvolili peptidický hormon GnRH. Cílem hormonu jsou GnRH receptory na povrchu buněk rakoviny prsu, vaječnicků a prostaty, na nichž se vyskytují ve zvýšené koncentraci².

Byla připravena raménka vhodná pro navázání GnRH např. PTX-sukcinyl-triethylenglykol, PTX-sukcinyl-Phe-Phe-OH, PTX-chloracetyl-glycin, PTX-maleimidomáselná kyselina a mnoho dalších^{3–5}. Byly také připraveny kompletní cílené deriváty paclitaxelu. Aktivita těchto látek je testována na vybraných tkáňových kulturách.

Tato práce vznikla za podpory grantu AVOZ50380551.

LITERATURA

- Rowinsky E. K., Donehower R. C.: *New. Eng. J. Med.* 332, 1004 (1995).
- Volker P., Grundker C., Schmidt O., Schulz K. D., Emons G.: *Am. J. Obstet. Gynecol.* 186, 171 (2002).
- Vaněk T., Velek J., Starý I., Barth T.: Patent PV 2000-2817 (2000).
- Vaněk T., Velek J., Starý I., Barth T.: Patent PV 2000-2818 (2000).
- Vaněk T., Dvořáková M., Přibyllová M., Barth T.: Patent PV 2007-441 (2007).

2P-02

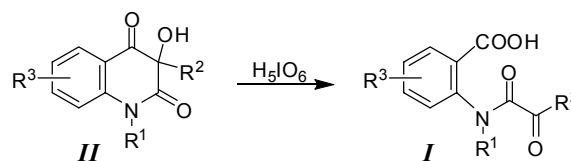
NEW APPROACH TO

N-(α -KETOACYL)ANTHRANILIC ACIDS

STANISLAV KAFKA^a, JANEZ KOŠMRLJ^b, and VĚRA KAŠPÁRKOVÁ^a

^a Faculty of Technology, Tomas Bata University in Zlín, 762 72 Zlín, Czech Republic, ^b Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, 1000 Ljubljana, Slovenia
kafka@ft.utb.cz

Surprisingly, there are only few literature precedents for the synthesis of *N*-(α -ketoacyl)anthranilic acids **I**, despite the



R¹ = H, Me; R² = Et, Ph; R³ = H, 6-OMe, 7-OMe, 8-OMe

fact that this entities possess interesting chemical and biochemical properties. For example, *N*-pyruvoylanthranilic acid and its derivatives are metabolites of a number of microorganisms¹. From the synthetic standpoint, *N*-(α -ketoacyl)anthranilic acids **I** and derivatives promise to be useful synthons for construction of different heterocycles, which has already been exemplified by the synthesis of 4*H*-benzo[*d*][1,3]oxazin-4-one^{2,3}, 1*H*-benzo[*e*][1,4]oxazepine-2,5-dione,² and quinazolin-4(3*H*)-one skeletons⁴. As a part of our continued interest in the reactivity of 3-hydroxyquinoline-2,4(1*H*,3*H*)-diones **II**⁵, we have studied their reactivity towards paraperiodic acid, and found out that an oxidative ring opening takes place to afford **I**. Factors that influence the reactivity of compounds **II**, including the substitution pattern (R¹ – R³), reaction medium, and temperature were studied. *N*-(α -Ketoacyl)anthranilic acids **I** were obtained in moderate to good yields.

This study was supported by the Czech Science Foundation (Grant No. 203/07/0320), by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Project MSM7088352101 and Joint Project Nr 9-06-3 of Programme KONTAKT), and the Slovenian Research Agency (Projects P1-0230-0103 and Joint Project BI-CZ/07-08-018).

REFERENCES

- Wegfahrt P. F., Rapoport H.: *J. Org. Chem.* 34, 3035, (1969) and references cited therein.
- Lingens F., Sproessler B.: *Justus Liebigs Ann. Chem.* 702, 169 (1967).
- Andreichikov Y. S., Krylova I. V.: *Zh. Org. Khim.* 24, 2212 (1988).
- Freed J. D., Hart D. J., Magomedov N. A.: *J. Org. Chem.* 66, 839 (2001).
- Kafka S., Košmrlj J., Klásek A., Pevc A.: *Tetrahedron Lett.* 49, 90 (2008) and references cited therein.

2P-03

POROVNÁNÍ BIODISTRIBUCE MONOKLONÁLNÍ PROTILÁTKY TU-20 A JEJÍHO SCFV FRAGMENTU ZNAČENÝCH ¹²⁵I VE ZDRAVÝCH MYŠÍCH A V MYŠÍCH S ALS

**VERONIKA KLEINOVÁ^{a,b}, HELENA ŠVECOVÁ^a,
HANA CHALOUPKOVÁ^a a MIROSLAV FIŠER^a**

^a Ústav jaderné fyziky AV ČR, v. v. i., Oddělení radiofarmak, 250 68 Řež, ^b ČVUT v Praze, FJFI, Břehová 7, 115 19 Praha 1
kleinova@ujf.cas.cz

III beta-tubulin se hromadí v místě degradace neuronů, což vybízí k využití jako perspektivního diagnostika

k identifikaci neurodegradčních procesů. TU-20 je myši monoklonální protilátka IgG1 specificky syntetizovaná proti C-konci lidské třídy III beta-tubulinu¹.

Pro ověření specifity TU-20 a jejího scFv fragmentu² bylo zvoleno srovnání biodistribuční farmakokinetiky obou preparátů radioaktivně značených ¹²⁵I – jak ve zdravých myších, tak v myších s rozvinutou amyotropní laterální sklerózou (ALS – exprimace SOD1 mutace)³. Jodace protilátky a jejího scFv fragmentu probíhala při oxidaci chloraminem-T⁴, purifikace probíhala na gelové koloně, bioanalytické vlastnosti byly ověřeny pomocí bis-tris gelové elektroforézy a testem ELISA. V biodistribuční studii u zdravých myši (typ wild-type (+/+ B6CBA) byly u ¹²⁵I-scFv i ¹²⁵I-TU-20 zvoleny časové intervaly 3 až 144 h. U ¹²⁵I-scFv TU-20 byly poločasy eliminace vypočítány podle dvoukompartimentového modelu 2,3 h a 62,4 h, ¹²⁵I-TU-20 vykazovala poločasy 8,6 h a 150,7 h. Aktivita navázaná na scFv fragment se primárně akumuluje ve štítné žláze a trávicím ústrojí. Zatímco TU-20 se během šesti hodin distribuuje v orgánech hrudní a břišní dutiny.

V komparativní studii byla zvolena transgenní populace G93A1 Gur. Vzhledem k obtížnému množení byly zvoleny jednočlenné kinetické body – u ¹²⁵I-scFv 3 h a u ¹²⁵I-TU-20 6 h. Nejvýznamnější rozdíly v distribuci byly pozorovány v oblasti svalů končetin, míchy a páteře. Největší retenci aktivity preparátů vykazovala kaudální část míchy i páteře.

Závěrem lze shrnout, že TU-20 vykazuje lepší imunospecifitu vůči neurodegradčním procesům, ale má pomalejší kinetiku, zatímco její scFv fragment má nižší imunospecifitu, ale vykazuje výrazně rychlejší kinetiku.

Studie byla vypracována za podpory projektů E13177–DIAGIM (IP040E167), E12510–NEUROTUB(0E91) a IB-S1048301.

LITERATURA

1. Dráberová E., Lukáš Z., Ivanyi D., Viklický V., Dráber P.: *Histochem. Cell. Biol.* 109, 231 (1998).
2. Holliger P., Hudson P. J.: *Nat. Biotechnol.* 23, 1126 (2005).
3. Rosen D. R., Siddique T., Patterson D., Figlewicz D. A., Sapp P., Hentati A., Donaldson D., Goto J., O'Regan J. P., Deng H.X.: *Nature* 362, 59 (1993).
4. Robbles A. M., Balter H. S., Oliver P., Welling M. M., Pauwels E. K.: *Nucl. Med. Biol.* 28, 999 (2001).

2P-04

O-(2-[¹⁸F]FLUORETHYL)-L-TYROSIN: SYNTÉZA A PREKLINICKÁ STUDIE

HELENA ŠVECOVÁ a FRANTIŠEK MELICHAR

*Oddělení radiofarmak, Ústav jaderné fyziky AV ČR, v.v.i., 250 68 Řež
svecova@ujf.cas.cz*

Klinický zájem o aminokyseliny radioaktivně značené fluorem-18 stoupá spolu s rozvojem pozitronové emisní tomografie (PET). O-(2-[¹⁸F]fluorethyl)-L-tyrosin ([¹⁸F]FET) patří mezi slibné sloučeniny pro diagnostiku mozkových nádorů¹. Rychlá akumulace v nádorové tkáni a nízká absorpce

v normální tkáni jsou hlavními výhodami [¹⁸F]FET oproti 2-[¹⁸F]fluoro-2-deoxy-D-glukóze, která je dnes nejčastěji užívanou sloučeninou pro PET. Naším cílem bylo [¹⁸F]FET připravit na našem pracovišti a provést s ním preklinickou studii na potkanech.

Syntéza [¹⁸F]FET je založená na nukleofilní ¹⁸F-fluoraci prekurzoru O-(2-tosyloxyethyl)-N-trityl-L-tyrosinu tert. butyl-esteru v acetonitrilu za přítomnosti soli tetrabutyl amonia². Následná deprotektce chirálního uhlíku se provádí 5M HCl. Vzorek získaný separací reakční směsi pomocí HPLC na reverzní fázi (10% ethanol jako mobilní fáze) se nakonec zbaví nadbytku ethanolu odpařením a jeho pH se upraví acetátovým pufrům.

Pro preklinickou studii se použili potkani s podkožně implantovaným nádorem typu C6³, kterým byl podán roztok [¹⁸F]FET o průměrné aktivitě 43 MBq. Poté byli potkani snímání na PET kameře. Fyziologická distribuce byla provedena ve zdravých potkanech v intervalech 30 a 60 min.

Radiochemický výtěžek korigovaný na rozpad byl 53±5 % při celkovém čase přípravy 110 minut. Vyššího výtěžku by bylo možné dosáhnout použitím trifluoroctové kyseliny k deprotektci. Ta musela být nahrazena HCl, protože komponenty automatizovaného systému, který byl použit, jsou k TFA citlivé. Radiochemická čistota byla přes 95 %, enantiomerická čistota byla 100 % a pH se pohybovalo kolem 5,0.

PET studií potkanů s implantovanými nádorovými buňkami byly všechny gliomy zobrazeny s vysokým kontrastem. Při fyziologické distribuce se ukázalo, že absorpce aktivity v orgánech je rovnoměrná kromě slinivky, ve které se fluorované aminokyseliny zvýšeně akumuluji.

Závěrem lze říci, že jsme na našem pracovišti připravili O-(2-[¹⁸F]fluorethyl)-L-tyrosin v kvalitě vhodné pro PET studie.

Tato práce vznikla za podpory grantu MPO ČR 2A-ITP1/055.

LITERATURA

1. Wester H. J., Herz M., Weber W., Heiss P., Senekowitsch-Schmidtke R.: *J. Nucl. Med.* 40, 205 (1999).
2. Hamacher K., Coenen H. H.: *Appl. Radiat. Isot.* 57, 853 (2002).
3. Groben B., De Deyn D. D., Slegers H.: *Cell Tissue Res.* 310, 257 (2002).

2P-05

SYNTÉZA DERIVÁTŮ INDOLU V ANALOGII S PURINOVÝMI CDK-INHIBITORY

ROMAN BUCHTIK, MICHAL ČAJAN a ZDENĚK TRÁVNÍČEK

*Katedra anorganické chemie Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého, Křížkovského 10, 771 47 Olomouc
roman.buchtik@upol.cz*

Chemie a syntéza indolu a jeho derivátů se těší pozornosti organických chemiků již více než 120 let. Za tuto dobu bylo připraveno a objeveno statisíce přírodních, významně biologicky aktivních, ale i syntetických sloučenin. Ať už jsou

to různé psychotropní látky (psilocin, psilocibin), neurotransmitery a regulátory biorytmů (serotonin, melatonin), rostlinné hormony (indolyl-3-octová kyselina) nebo jeden z nejvýznamnějších derivátů indolu, esenciální aminokyselina tryptofan.

Naším zájmem je využít této velké biokompatibility indolového skeletu k přípravě nových biologicky aktivních látek. Dosud neexistovala analogie, tedy žádná strukturní podobnost s již známými inhibitory cyklin-dependentních kinas, tzv. CDK inhibitory, na bázi 6-(benzylamino)purinu (olomoucín, roskovitín, apod.). V této práci se snažíme chybějící mezeru vyplnit. To znamená, připravit skupinu derivátů indolu, které jsou substituovány v poloze 1, 4 a 6, což odpovídá substituentům na skeletu purinu v polohách 2, 6 a 9 (viz Schéma 1). Při přípravě se vychází buď z odpovídajících dinitroderivátů indolu nebo je výchozí látkou 4-substituovaný halogenindol.



Schéma 1. Schématické zobrazení skeletu indolu a purinu

Studované látky jsou charakterizovány širokým spektrem fyzikálně-chemických technik (CHN analýza, FTIR, hmotnostní a multinukleární NMR spektroskopie). V současnosti jsou činěny pokusy o přípravu vhodných monokrystalů. Geometrie sloučenin, stejně tak jako výpočet některých fyzikálně-chemických vlastností sloučenin, bude studován pomocí DFT výpočtů. Předpokládáme také, že biologická aktivita těchto indolových sloučenin bude přinejmenším stejně významná jako je tomu v případě jejich purinových analogů.

Tato práce vznikla za podpory Výzkumného záměru MSM619895218.

2P-06 MONOSUBSTITUCE PIPERAZINU NA ATOMU DUSÍKU

**BARBORA ANDĚLOVÁ, DANA NĚMEČKOVÁ
a PAVEL PAZDERA**

*Centrum pro syntézy za udržitelných podmínek a jejich management, Ústav chemie, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Lučební závody Draslovka Co. Kolín, Havlíčková 605, 280 99 Kolín
pazdera@chemi.muni.cz*

Piperazinový motiv je součástí struktury mnoha léčiv. Vyskytuje se např. v léčivech působících proti zhoubnému dělení buněk. Dále tento strukturní motiv můžeme najít v látkách, které mají léčebné účinky při schizofrenii, mániích atd.

Z literatury je známo mnoho reakcí přípravy monosubstituovaných piperazinů. Jedním z velmi často v syntéze používaných derivátů piperazinu je methoxykarbonylpiperazin,

jehož příprava je popsána ve vodném roztoku reakcí methylesteru chlormravenčí kyseliny s piperazinem při pH 3. Reakce probíhá s 30% výtěžkem¹. Dalším v průmyslu využívaným derivátem je benzylpiperazin, např. ve formě hydrochloridu, který se připravuje reakcí bezvodého piperazinu s piperazinem dihydrochloridem a benzylchloridem v ethanolu. Výtěžek této reakce se pohybuje kolem 90% (cit.², vztaženo na bezvodý piperazin), ale vedlejším „odpadním“ produktem je piperazin dihydrochlorid, který je z reakční směsi izolován ve stejném množství, jako byl do reakce vložen. Z literatury je také známa příprava butylpiperazinu a to reakcí piperazinu s butylbromidem v ethanolu za použití triethylaminu. Výtěžek reakce je 31% (cit.³).

V příspěvku budou prezentovány výsledky studie monosubstituce piperazinu na atomu dusíku alkylními, acylními činidly a monosubstituce reakcí s kaprolaktamem.

Tato práce vznikla za podpory grantu Ministerstva průmyslu a obchodu České republiky, projekt č. 2A-ITP1/090.

LITERATURA

1. Stewart H. W., Turner R. J., Denton J. J., Kushner S., Brancone L. M., McEwen W. L., Hewitt R. I., Subbarow Y.: *J. Org. Chem.* 13, 134 (1948).
2. Cymerman C. J., Young R. J.: *Org. Synth. Coll. V*, 88 (1973).
3. Yamane T., Hashisume T., Yamashita K., Konishi E.: *Pharm. Bull.* 41, 148 (1993).

2P-07 SYNTEZA A ANTIMYKOBAKTERIÁLNÍ AKTIVITA 1-[4-(ALKYLSULFANYL)FENYL]-3,3-DIMETHYL- GUANIDINŮ

**KAREL PALÁT^a, EVGHENIA EMELIN^a a JARMILA
KAUSTOVÁ^b**

*^aKatedra anorganické a organické chemie, Farmaceutická fakulta Univerzity Karlovy, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, ^bZdravotní ústav se sídlem v Ostravě, Partyzánské nám. 7, 702 00 Ostrava
palat@faf.cuni.cz*

V návaznosti na dříve syntetizované sloučeniny¹ byla několikastupňovou syntézou vycházející ze 4-substituovaného nitrobenzenu^{1,2} připravena série titulních látek (viz Schéma 1).

Připravené sloučeniny byly podrobeny testování na aktivitu proti následujícím kmenům mykobakteria: *M. tuberculosis* (My 331/88), *M. kansasii* (My 235/80 a My 6509/96) a *M. avium* (My 330/88).

Sloučeniny s alkylsulfanylsubstitucí s délkou řetězce C7-C16 vykazují dobrou antimykobakteriální aktivitu, která se blíží proti kmenům *M. tuberculosis* (My 331/88) a *M. kansasii* (My 6509/96) aktivitě standardu, kterým byl isoniazid. Aktivita těchto látek proti kmenům *M. kansasii* (My 235/80) a *M. avium* (My 330/88) je výrazně vyšší než účinnost standardu. Sloučeniny s kratším řetězcem a s fenylsulfanylsubstitucí vykazují daleko nižší antimykobakteriální aktivitu. Nejúčinnější látky vykazují hodnoty MIC = 4–8 μmol l⁻¹

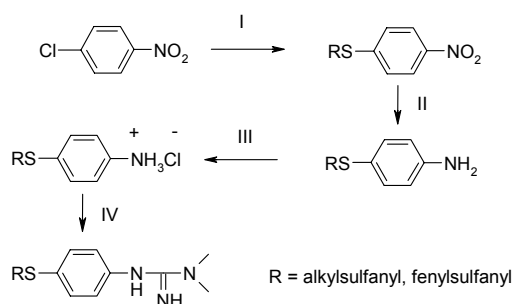


Schéma 1. I – thiol, akt. mēď, uhličitán draselný, DMF¹; II – chlorid cínnatý²; III – chlorovodík; IV – 1, N,N-dimethylkvanamid¹

na všechny kmeny mykobaktéria na rozdíl od isoniazidu, který je velice málo účinný proti některým testovaným kmenům.

Práce byla podpořena výzkumným záměrem MSM 0021620822 a grantem GA UK 299/2006/B-CH/FaF.

LITERATURA

- Braunerová G., Buchta V., Silva L., Kuneš J., Palát K.: *Farmaco* 59, 443 (2004).
- Bellamy F. D., Ou K.: *Tetrahedron Lett.* 25, 839 (1984).

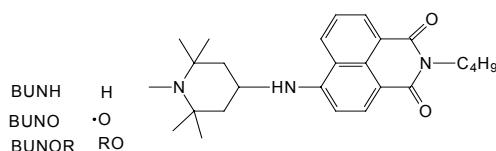
2P-08

SPECTRAL CHARACTERISTICS OF ADDUCTS 1,8-NAPHTHALENEIMIDES – STERICALLY HINDERED AMINES; MONORADICALS

JOZEF KOLLÁR, PAVOL HRDLOVIČ, and ŠTEFAN CHMELA

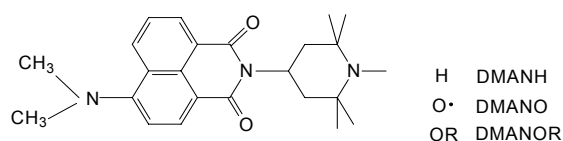
Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovakia
upolhrdl@savba.sk

1,8-Naphthaleneimide is chromophore exhibiting interesting spectral and photophysical properties. Its simple and complex adducts with sterically hindered amines were investigated with fluorescence spectroscopy^{1,2}. In order to complete these studies the novel probes containing 1,8-naphthalimides as chromophore and one structural units of sterically hindered amine stabilizer (HAS) in different positions were synthesized. One probe has got HAS unit situated on naphthalene ring in position 4 and imino nitrogen was substituted by *n*-butyl groups (BUNR).



Another type of probe represented HAS unit in imino composition, along with substitution of position 4 of naphtha-

lene ring by electron donating dimethylamino group (DMANR).



Absorption and fluorescence spectra of probes based on adducts of 1,8-naphthaleneimide and sterically hindered amine were taken in solution as well as in polymer films. In absorption spectrum the longest wavelength band of both types of probes lies in the range 390 up to 430 nm, depending on the medium. In fluorescence spectrum the maximum lies in the range 460 up to 530 nm. In polar media the maxima of absorption and fluorescence are red shifted as compared with less polar media. The fluorescence is observed for all probes but there is distinctly higher fluorescence intensity for parent amine and alkoxyamine as respective monoradical. The extent of fluorescence enhancement comparing amine and alkoxyamine derivatives with biradical is in the range 2–10 depending on the medium and for both pairs BUNH/BUNO and DMANH/DMANO. The extent of intramolecular quenching is slightly larger for the BUNH/BUNO pair.

Authors thank agency VEGA for support through the projects 2/6015/26 and 2/5108/25 and Grant agency for APVV-51-004904.

REFERENCES

- Hrdlovič P., Chmela Š., Danko M.: *J. Photochem. Photobiol., A* 112, 197 (1998).
- Kollár J., Hrdlovič P., Chmela Š.: *J. Photochem. Photobiol., A* 195, 64 (2008).

2P-09

MOŽNOSTI ZVÝŠENIA ÚČINNOSTI SIEŤOVANIA BIODEGRADOVATEĽNÉHO POLYESTERU

ZUZANA NÓGELLOVÁ, IVICA JANIGOVÁ, SILVIA PODHRADSKÁ a IVAN CHODÁK

Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovenská republika
upolnoge@savba.sk

Sieťovanie polymérov je často používanou metódou modifikácie vlastností materiálov. V poslednom čase sú zaujímavým objektom štúdia biodegradovateľné plasty. Z nich sme ako matricu pre drevoplasty úspešne testovali polykaprolaktón. Podobným materiálom je aj kopolymér kyseliny adipovej a tereftalovej a 1,4-butándiolu, ktorý pod obchodným názvom Ecoflex vyrába firma BASF. Vzhľadom na možné využitie sieťovania na modifikáciu tohto polyméru (či už samotného, alebo ako matrice pre kompozity, či ako zložky zmesi dvoch polymérov), v tejto práci sme sa zaoberali testovaním účinnosti sieťovania Ecoflexu.

Na sieťovanie sme použili dva typy peroxidu: 2,5-dimetyl-2,5-ditercetylperoxyhexín (Luperox 130) a tercetyl-

perbenzoát (t-BPB). Kvôli zvýšeniu účinnosti sieťovania sme na porovnanie pridávali aj koagent sieťovania – triallylkyanurát (TAK).

Zosietenie bez koagenta sieťovania nie je veľmi efektívne – maximálna hodnota nerozpustného podielu (percento gélu) sa dosiahla len okolo 70 hm.%, a to pri najvyššej koncentrácii 2 hm.% peroxidu. Po pridaní koagenta sieťovania sa nerozpustný podiel zvyšoval so zvyšovaním koncentrácie triallylkyanurátu, pričom sa dosiahla hodnota % gélu až do 98 %. Mechanické vlastnosti, ako pevnosť v ťahu, ťažnosť a Youngov modul pružnosti, sa u vzoriek bez koagenta sieťovania so zvyšovaním obsahu Luperoxu mierne znižujú, v prípade t-BPB sú rozdiely veľmi malé. So zvyšovaním koncentrácie TAK sa pevnosť aj ťažnosť znižovala a podobný trend sa zaznamenal aj pri zvyšovaní koncentrácie peroxidu. O niečo lepšie výsledky z hľadiska mechanických vlastností sa získali použitím Luperoxu.

Napriek tomu, že sieťovaním samotného Ecoflexu sa nedosiahlo zlepšenie mechanických vlastností ani v prítomnosti koagenta, sieťovanie by mohlo mať význam pre kompatibilizáciu najmä zmesí nemiešateľných biodegradovateľných polymérov, ako aj pre prípravu kompozitov na báze Ecoflexu plneného organickými časticami.

Táto práca bola finančne podporená z projektu APVV 51-010405.

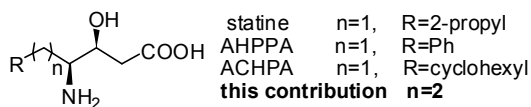
2P-10

β -HYDROXY- γ -AMINO ACIDS. SYNTHESIS OF THE STATINE CONGENERS

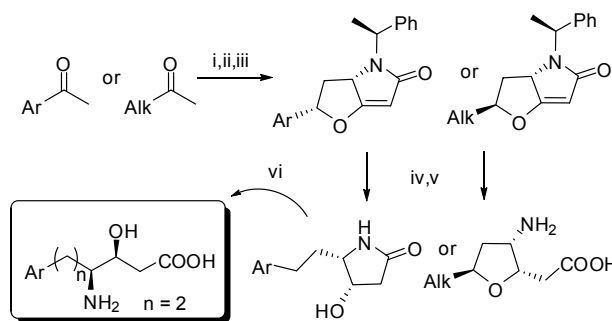
ANDREJ ĎURIŠ and **DUŠAN BERKEŠ***

*Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic
dusan.berkes@stuba.sk*

Statine and its congeners (AHPPA, ACHPA, isostatine,...) have attracted considerable attention as the vital components of potentially therapeutic small peptides including pepstatine, Hapalosin, Tamandarin A, ...¹. The β -hydroxy group of statine is important for tight binding of pepstatine and its stereochemistry has a large effect on protease inhibition, a *syn*-diastereomeric relationship between amine and hydroxy group being required².



Here we would like to present an effective synthesis of AHPPA homologues (n = 2) based on our CIAT applications in tandem with Mannich reaction and acid-catalyzed lactonization^{3–5}, follow-up by non-classical Wittig reaction of the enantiomerically pure α -amino- γ -substituted butyrolactones (Scheme 1).



Scheme 1. (i) Mannich reaction + CIAT; (ii) acid-catalyzed lactonization + CIAT; (iii) non-classical Wittig reaction; (iv) reduction; (v) debenzylation; (vi) hydrolysis

Financial support by the Slovak Grant Agency No. 1/0629/08 is gratefully acknowledged.

REFERENCES

- Ordonez M., Catiavela C.: *Tetrahedron: Asymmetry* 18, 3 (2007).
- Risch D. H.: *J. Med. Chem.* 28, 263 (1985).
- Berkeš D., Kolarovič A., Mandúch R., Baran P., Považanec F.: *Tetrahedron* 16, 1927 (2005).
- Jakubec P., Berkeš D., Kolarovič A., Považanec F.: *Synthesis* 2006, 4032.
- Berkeš D., Jakubec P., Winklerová D., Považanec F., Daich A.: *Org. Biomol. Chem.* 2007, 121.

2P-11

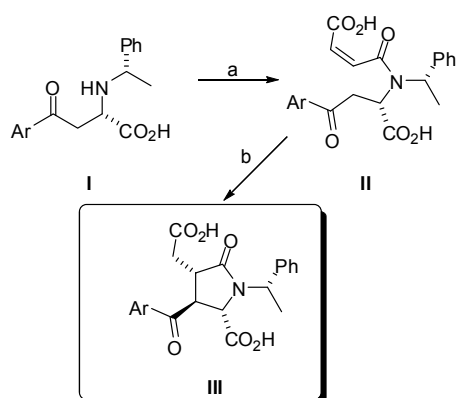
INTRAMOLECULAR MICHAEL ADDITION IN THE SYNTHESIS OF PROLINE ANALOGUES

DANIELA MORAVČÍKOVÁ^a, ANNA KOREŇOVÁ^a, NADEŽDA PRÓNAYOVÁ^b, and DUŠAN BERKEŠ^{a*}

*^aDepartment of Organic Chemistry, Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, ^bNMR and MS department, Institute of Analytical Chemistry, FCHPT, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic
anna.korenova@stuba.sk, dusan.berkes@stuba.sk*

The asymmetric synthesis of chiral nonracemic prolines has received an enormous amount of attention due to the interest in study conformational rigidity into peptides that influence their biological properties¹. Replacement of natural amino acids in bioactive peptides by proline analogues possessing the characteristics of other amino acids (namely proline-amino acid chimeras) has led, in some cases, to better understanding of their bioactive conformation². Some of non-proteinogenic pyrrolidine dicarboxylic acids exhibit potent neuroexcitatory activity³. This property is attributed to their action as conformationally restricted analogues of the neurotransmitter glutamic acid.

In this contribution we describe synthetic approach to substituted oxoproline analogues **III** from *N*-acylated derivatives **II** obtained through acylation of 2-amino-4-oxobutanoic acids **I** (ref.⁴) (Scheme 1.)



Scheme 1. a) acylation with maleic anhydride; b) intramolecular Michael addition

Financial support by the Slovak Grant Agency No. 1/0629/08 is gratefully acknowledged.

REFERENCES

1. Gante J.: *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* 33, 1699 (1994).
2. Plucinska K., Kataoka T., Yodo M., Cody W. L., He J. X., Humblet C., Lu G. H., Lunney E., Major T. C., Panek R. L., Schelkun P., Skeeane R., Marshall G. R.: *J. Med. Chem.* 36, 1902 (1993).
3. Parsons A. E.: *Tetrahedron* 52, 4149 (1996).
4. Berkeš D., Kolarovič A., Mandúch R., Baran P., Považanec F.: *Tetrahedron* 16, 1927 (2005).

2P-12

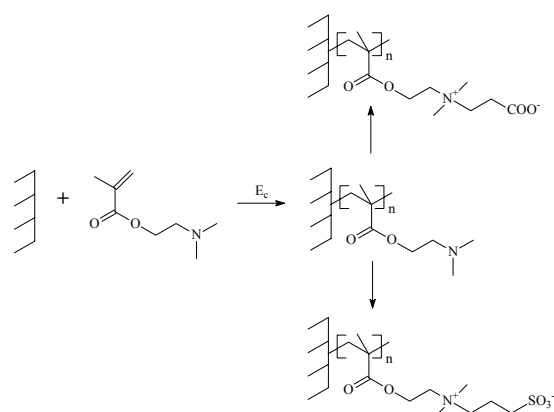
ZWITTERIONIC NON-BIOFOULING SURFACES VIA ELECTROGRAFTING POLYMERIZATION

MAREK STACH, PETER KASÁK, ZUZANA KRONEKOVÁ, and IGOR LACÍK*

*Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovak Republic
marek.stach@savba.sk*

Biofouling represents one of the major problems in long-term biomedical applications due to accumulation of proteins and cells on the surfaces of implanted biomaterials. The adsorption of proteins and cells leads to the reduced diffusion of nutrients and/or analytes¹. Polymers bearing zwitterionic group are known for their non-biofouling properties. Consequently, surfaces grafted by these polymers exhibit significant reduction of biofouling.

Electrografting is a relatively new and powerful technique for modification of electroconductive surfaces with organic material. A very stable polymer/metal interface produced by the cathodic electrografting is due to formation of metal-carbon chemical bonds². Electrografting is thus very suitable for covalent attachment of various polymers onto the (semi)conductive surfaces, which by themselves or after the appropriate chemical modification (Scheme 1) can exhibit required non-biofouling properties. Electrografted polymer



Scheme 1. Electrografting and modification of polymers

brushes of a zwitterionic character bearing different groups investigated *in vitro* have shown a significantly reduced adhesion of fibroblast cells.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. RPEU-0007-06 and by Sixth Framework Program of the EU, IP-031867, P. Cézanne.

REFERENCES

1. Wisniewski N., Reichert M.: *Colloids Surf., B* 18, 197 (2000).
2. Bureau C., Chong D. P., Lécayon G., Delhalle J.: *J. Electrochem. Soc.* 144, 227 (1997).

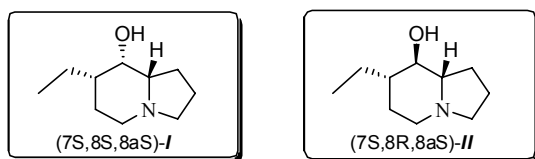
2P-13

AN EXPEDIENT SYNTHESIS OF EPIMERIC (8a*S*,7*S*)-7-ETHYLINDOLIZIDIN-8-OLS BASED ON A THIOPHENE REDUCTIVE DESULFURIZATION

PETER ŠAFÁŘ^a, JOZEFÍNA ŽÚŽIOVÁ^a, ŠTEFAN MARCHALÍN^a, NADEŽDA PRÓNAYOVÁ^b, and ADAM DAICH^c

*^a Department of Organic Chemistry, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava, Slovak Republic, ^b Central Laboratories, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava, Slovakia, ^c Laboratoire de Chimie, URCOM, EA 3221, UFR des Sciences et Techniques de l'Université du Havre, BP 540, 25 rue Philippe Lebon, F-76058 Le Havre Cedex, France
peter.safar@stuba.sk*

We have successfully introduced a new and expedient synthetic entry to 7(*S*)-ethyl-8(*R* or *S*)-indolizidinol alkaloid^{1–6} cores **I** and **II** in 5- and 8 steps and overall yields of 20 % or 8 %, respectively⁷. Our uncommon strategy uses as key step a reductive desulfurization of the thiophene ring with a Raney-nickel reductant in which the thiophene constitutes an original alkyl source. The targets (7*S*,8*S*,8a*S*)-**I** and (7*S*,8*R*,8a*S*)-**II** were obtained ultimately by lactam reduction



or by a configurational alcohol inversion with Mitsunobu reaction followed by lactam reduction, respectively. In the latter case, a chemical separation via an easy *O*-benzylation reaction, lactam reduction and debenylation were also advantageously used.

REFERENCES

1. Karanjule N. S., Markad S. D., Shinde V. S., Dhavale D. D.: *J. Org. Chem.* 71, 4667 (2006).
2. Cronin L., Murphy P. V.: *Org. Lett.* 7, 2691 (2005).
3. Martin R., Murruzzo C., Pericas M. A., Riera A.: *J. Org. Chem.* 70, 2325 (2005).
4. Carmona A. T., Fuentes J., Robina I., Garcia E. R., Demange R., Vogel P., Winters A. L.: *J. Org. Chem.* 68, 3874 (2003).
5. Kim I. S., Zee O. P., Jung J. H.: *Org. Lett.* 8, 4401 (2006).
6. Chaudhari V. D., Ajish Kumar K. S., Dhavale D. D.: *Tetrahedron* 62, 4359 (2006).
7. Marchalín Š., Žúžiová J., Kadlečíková K., Šafář P., Baran P., Dalla V., Daich A.: *Tetrahedron Lett.* 48, 697 (2007).

2P-14

PROPERTIES STUDY OF SA-CS /PMCG MICROCAPSULES USED FOR ENCAPSULATION OF THE BIOACTIVE SUBSTANCES

GABRIELA KOLLÁRIKOVÁ^a, IGOR LACÍK^{a*}, EVA PAPAJOVÁ^a, DUŠAN CHORVÁT JR.^{a,b}

^a Polymer Institute of SAS, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovakia, ^b International Laser Center, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovakia
gabriela.kollarikova@savba.sk, igor.lacik@savba.sk

An important progress has been achieved in the immobilization of biological materials using polymers. Polymers employed in these applications involve different types of gelling polysaccharides and synthetic polymers with the ability to form hydrogels via different mechanisms.

The aim of this contribution is to present the further details on characterization of microcapsules based on polyelectrolyte complexation made of sodium alginate, cellulose sulfate and poly(methylene-co-guanidine) hydrochloride (SA-CS/PMCG)¹. The effect of various parameters playing role in the design of SA-CS/PMCG microcapsule is demonstrated, such as concentration and composition of polyanion solution, molecular weight of polyanions, the effect of additional coating layer and the stability of microcapsules under the *in vitro* conditions in the CMRL medium were also studied. Inverse size exclusion chromatography² by employing narrow mo-

lecular weight distribution pullulan standards was used for determination of molecular weight cut-off. These data were supported by the diffusion measurements of fluorescently labeled dextrans and proteins into the microcapsules using a confocal laser scanning microscopy. The mechanical properties were tested on a Texture Analyzer TA-2Xi. The optical analysis provided the results on the average microcapsule size and membrane thickness.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No APVV-51-033205 and by the Chicago Project coordinated by the University of Illinois at Chicago and the Christopher Foundation.

REFERENCES

1. Lacík I.: *Aust. J. Chem.* 59, 508 (2006).
2. Briššová M., Petro M., Lacík I., Powers A. C., Wang T.: *Anal. Bioch.* 242, 141 (1996).

2P-15

LINEÁRNÍ POLYURETHANY NA BÁZI MODIFIKOVANÝCH KAPALNÝCH KAUCUKŮ

JIŘÍ PODEŠVA^a, JANA KOVÁŘOVÁ^a, LUBOŠ PROKŮPEK^b, MICHAL BĀRTÍK^b, JAROSLAV UDATNÝ^b, MILUŠE HRDLÍČKOVÁ^a, MILOŠ NETOPIĹÍK^a, VLADIMÍR ŠPAČEK^c a MIROSLAV VEČEŘA^b

^a Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6; ^b Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 95, 532 10 Pardubice; ^c Synpo, a.s., S. K. Neumanna 1316, 532 07 Pardubice
podesva@imc.cas.cz

Reakcí diisokyanátů s OH-telechelickými nízkomolekulárními polybutadieny (tj. kapalnými kaučuky) lze za vhodné katalýzy připravit nízkomolekulární elastomerní polyurethany (PUR)¹. V našem případě (2,4-diisokyanato-1-methylbenzen, katalýza dibutylcindilaurátem) vznikly PUR, které obsahovaly 4–6 polybutadienových sekvencí. Na část visících vinylů kapalného kaučuku (cca 5–10 %) byly předem – radikálovou adicí prostřednictvím SH skupiny – připojeny boční řetězce obsahující stéricky bráněné fenolické antioxidanty (FAO)², takže vznikl PUR, nesoucí na svých řetězcích proměnlivý počet chemicky vázaných antioxidačních struktur. Ty – na rozdíl od běžných nízkomolekulárních antidegradantů přidávaných ve formě fyzikální příměsi – se z materiálu nevy-pařují, ani je nelze vymýt žádným rozpouštědlem, což představuje značnou technologickou výhodu. Jeho struktura je znázorněna na schématu 1.

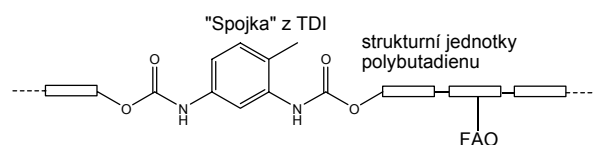


Schéma 1.

Připravené PUR byly charakterizovány jednak SEC s dvojí detekcí (evaporativní a UV), jednak ^1H NMR. První metoda ukázala, že distribuce molárních hmotností má dle očekávání více maxim odpovídajících různému počtu polybutadienových sekvencí. Druhá metoda sloužila ke stanovení poměru dienové a nedienové složky PUR. Dále byly zkoumány PUR, které byly připraveny tak, že LBH byl nejprve částečně hydrogenován, takže adice FAO nesoucího thioskupinu probíhala pouze na zbylých visících vinylech. Metoda ^1H NMR zde sloužila rovněž ke stanovení stupně hydrogenace. DSC a TGA měření v reaktivní atmosféře vzduchu byla využita pro stanovení termooxidací stability těchto látek a tím i stabilizační účinnosti polymerně vázaných fenolických antioxidantů.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR č. 203/07/0987.

LITERATURA

1. Pytela J.: Chem. Listy 93, 441 (1999).
2. Podešva J., Kovářová J.: J. Appl. Polym. Sci. 87, 885 (2003).

2P-16

NEW SYNTHESIS AND SYNTHETIC UTILISATION OF PENTAFLUOROBENZALDEHYDE, TETRAFLUORO-TEREPHTHALIC ALDEHYDE AND 2,3,5,6-TETRAFLUOROBENZENE-1,4-DIAMINE AS BUILDING BLOCS FOR NOVEL OPTOELECTRONIC MATERIALS

DANIEL VÉGH, TOMÁŠ SOLČÁN, PETER TISOVSKÝ, and ANITA ANDICSOVÁ

Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, 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 (**I**), tetrafluoroterephthalic aldehyde (**II**) and 2,3,5,6-tetrafluorobenzene-1,4-diamine (**III**) important starting materials for the above mentioned research have so far been hardly investigated. With the sole exception of the reduction of pentafluorobenzonitrile¹ to **I** and pentafluoronitrobenzene² to **III** all the known methods for the synthesis of **I** and **III** 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 **I** and **III** we were intrigued by the possible deployment of the hexafluorobenzene and pentafluoroaniline 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-benzene³ – a compound easily undergoing the Neff reaction when treated with KOH and KMnO_4 with good yields. The procedure represents a novel, as yet unpublished synthesis of **I** and **II**.

We investigated the reactivity of fluorine substituents in pentafluoroaniline and *N*-pentafluorophenylpyrrole⁴ towards azide anion and prepared **III** in 70 % yield. The target compounds **I** and **III** can be used as building blocks for novel materials with optoelectronic properties and supramolecular structure in solid state. Structures of target compounds **I** and **III** were proved by IR, UV, ^1H NMR, ^{13}C NMR and ^{19}F NMR spectral methods, and by X-ray analysis³.

This work was financially supported by grants from the Ministry of Education of the Slovak Republic No. 1/4453/07.

REFERENCES

1. Chapman N. B., Clarke K., Pinder R. M., Shavney S. N.: J. Chem. Soc. C. 293 (1967).
2. Chehade K. A., Spielmann H.: J. Org. Chem. 65, 4949 (2000).
3. Perašinová L., Svoboda I., Végh D., Solčán T., Kožíšek J.: Acta Cryst Sect E62, 1689 (2006).
4. Hrnčariková K., Végh D.: Molecules 8, 536 (2003).

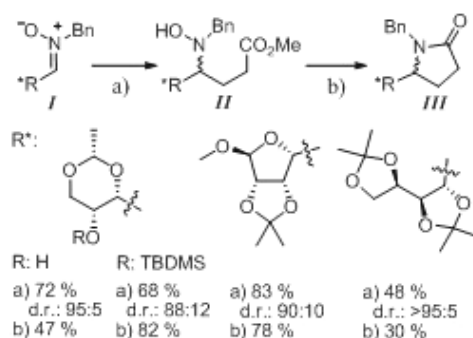
2P-17

SAMARIUM INDUCED DIASTEREOSELECTIVE COUPLING OF SUGAR DERIVED NITRONES IN THE SYNTHESIS OF CHIRAL PYRROLIDINONES

JURAJ REHÁK^a, LUBOR FIŠERA^a, and JOZEF KOŽÍŠEK^b

^a *Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Slovak University of Technology, 821 37 Bratislava, Slovak Republic,* ^b *Institute of Physical Chemistry, Slovak University of Technology, 821 37 Bratislava, Slovak Republic*
juraj.rehak@stuba.sk

The SmI_2 induced diastereoselective reductive coupling of nitrones with α,β -unsaturated carbonyl derivatives represents very useful methods for the synthesis of the precursors for the biological active γ -amino acids or pyrrolidones^{1,2}. The prepared lactams could be effective glycosidase inhibitors and



Scheme 1. a) SmI_2 , methyl acrylate, H_2O , THF, -78°C . b) Zn/AcOH

also effective intermediates for the synthesis of diversely substituted sugar mimics (azasugars). In this communication we report the SmI_2 induced coupling of chiral nitrones for the preparation of biologically important chiral γ -*N*-hydroxyl amino esters. The reaction of sugar derived nitrones **I** with methyl acrylate afforded the γ -*N*-hydroxyl amino esters **II** that were subsequently transformed to new diversely substituted chiral lactams **III** (ref.^{3,4}). The obtained pyrrolidinones were reduced with LiAlH_4 in THF to afford the chiral pyrrolidines.

The authors are grateful to the Slovak Grant Agency (No. 13549/06) and APVV (No. 20/000305).

REFERENCES

1. Masson G., Zeghida W., Cividino P., Py S., Vallée Y.: *Synlett* 2003, 1529.
2. Desvergnès S., Py S., Vallée Y.: *J. Org. Chem.* 70, 1459 (2005).
3. Reháč J., Fišera L., Kožíšek J., Perašínová L., Steiner B., Kooš M.: *Arxivoc viii*, 18 (2008).
4. Reháč J., Fišera L., Podolan G., Kožíšek J., Perašínová L.: *Synlett* 2008, 1260.

2P-18

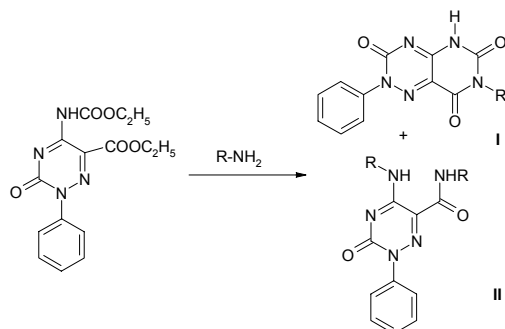
SYNTÉZA 3-*N*-SUBSTITUOVANÝCH DERIVÁTŮ 6-AZALUMAZINU

JAKUB STÝSKALA, **MARKÉTA PAVLÁSKOVÁ**
a **JAN SLOUKA**

Katedra organickej chémie PĚF UP Olomouc, Tř. Svobody 8,
771 46 Olomouc
styskala@orgchem.upol.cz

Předmětem tohoto sdělení je syntéza 3-*N*-substituovaných derivátů 6-fenyl-7-oxo-6-azalumazinu **I**. Což jsou dvoujaderné heterocyklické sloučeniny mající jako základ pyrimido[4,5-*e*][1,2,4]triazinový skelet. Sloučeninám obsahujícím pyrimido[1,2,4]triazinový skelet je neustále věnována pozornost, neboť se jedná o sloučeniny s prokázanou biologickou účinností^{1–3}. Z tohoto pohledu jsou zvlášť zajímavé přírodní antibiotika jako reumycin, toxoflavin a fervenulin jejichž základem je pyrimido[1,2,4]triazinový skelet a vykazují tak silné bakteriostatické účinky.

Příprava zmíněných 3-*N*-substituovaných-6-fenyl-7-oxo-6-azalumazinů **I** je založena na amonolýze ethyl-1-fenyl-*N*-



-ethoxykarbonyl-6-azacytosin-5-karboxylátu⁴ primárními aminy, kdy následně dochází k uzavěru pyrimidinového cyklu. Tato reakce však není jednoznačná a je doprovázená i konkurenční reakcí, kdy dochází k nukleofilní substituci celé ethoxykarbonylamínové skupiny za vzniku *N*-substituovaných-1-fenyl-6-azacytosin-5-karboxamidů **II**. Tuto konkurenční reakci lze v obou směrech ovlivnit vhodným rozpouštědlem a koncentrací aminu.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM6198959216.

LITERATURA

1. Wamhoff H., Tzanova M.: *Coll. Czech. Chem. Commun.* 68, 965 (2003).
2. Wamhoff H., Tzanova M.: *Arxivoc ii*, 98 (2003).
3. Kuschler C., Kuschler W., Heinisch L.: *Arzneim. Forsch.* 16, 1122 (1966).
4. Stýskala J., Slouka J., Švecová V.: *Arxivoc i*, 68 (2006).

2P-19

SYNTÉZA FARMAKOFÓROVÝCH LIGANDŮ PRE VEGFR-2 INHIBÍCIU

SILVIA KOVÁČOVÁ, **LUCIA KUŠNIEROVÁ**, **LUCIA LINTNEROVÁ**, **MIROSLAV MEDVEĎ**, **MARTA SALIŠOVÁ** a **ANDREJ BOHÁČ**

Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Mlynská dolina CH-2, 842 15 Bratislava, Slovensko
salisova@fns.uniba.sk

Angiogenéza je proces novotvorby ciev. Nové cievy sú nevyhnutné pre progresiu tumorov. Rakovinové bunky preto produkujú cievné rastové faktory (napr. VEGF). VEGF sa viaže na extracelulárnu časť receptora VEGFR-2, nachádzajúcom sa na povrchu endoteliálnych buniek. Aktivácia vnútrocelulárnej tyrozín kinázovej domény VEGFR-2 je začiatkom zložitého biologického procesu vedúceho k deleniu, migrácii a špecializácii endoteliálnych buniek, čo má za následok neovaskularizáciu a progresiu tumoru a metastáz.

V príspevku prezentujeme možnosť prípravy nových inhibitorov VEGFR-2 tyrozín kinázy za pomoci 1,3-dipolárnej cykloadície „Click chemistry“ z vhodných derivátov azidov a terminálnych alkinov. Z literatúry¹ je známe, že *N*-[5-(ethylsulfonyl)-2-metoxyfenyl]-5-(hydroxymetyl)-oxazol-

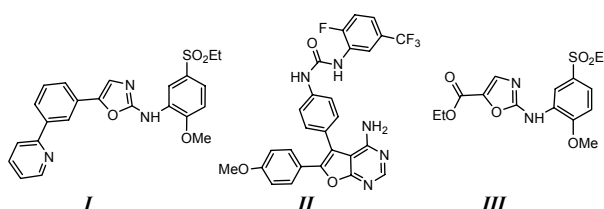


Schéma 1. Štruktúry VEGFR-2 inhibitorov **I** – **III**

-2-amin (I) je účinný nanomolární inhibitor VEGFR-2 tyrozin kinázy. Podobně aktivnou zláčeninou je aj *N*-{4-[4-amino-6-(4-metoxy-fenyl)furo[2,3-*d*]pyrimidin-5-yl]fenyl}-*N'*-[2-fluór-5-(trifluór-metyl)fenyl]močovina (II).² Pre „Click chemistry“ knižnicu pripravujeme ligandy fluór derivátov arylmočoviny a oxazolu (napr. III) (Schéma 1).

Predpokladáme, že spojením dvoch vhodne vybraných farmakofórových fragmentov potvrdených „in Silico“ predikciou získame nové, účinnejšie VEGFR-2 inhibitory.

Táto práca vznikla za podpory grantov APVV LPP 0153-06, VEGA 1/4467/07, COST CM0602.

LITERATÚRA

- Harris P. A., Cheung M., Hunter III. R. N., Veal J. M., Nolte R. T., Wang L., Liu W., Crosby R. M., Johnson J. H., Epperly A. H., Kuma R., Luttrell D. K., Stafford J. A.: *J. Med. Chem.* 48, 1610 (2005).
- Miyazaki Y., Matsunaga S., Tang J., Maeda Y., Nakano M., Philippe R. J., Shibahara M., Liu W., Sato H., Wang L., Nolte R. T.: *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 15, 2203 (2005).

2P-20

NUKLEOSIDY A NUKLEOTIDY S 8-AZA-7,9-DIDEAZAXANTHINEM

DAVID MAŘÁK, MIROSLAV OTMAR*, MARTIN
DRAČÍNSKÝ, IVAN VOTRUBA a ANTONÍN HOLÝ

Výzkumné centrum Nová antivirotika a antineoplastika, Výzkumné centrum Gilead Sciences a ÚOCHB, Ústav organické chemie a biochemie, v.v.i., Akademie věd České republiky, Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6
otmar@uochb.cas.cz

Pyrrolopyrimidiny zaujímají významné místo mezi biologicky aktivními analogy purinu zejména díky svým protinádorovým účinkům. Pyrrolo[2,3-*d*]pyrimidiny (7-deazapuriny) jsou známými antagonisty kyseliny listové, zatímco pyrrolo[3,2-*d*]pyrimidiny (9-deazapuriny) jsou silné inhibitory purin-nukleosidfosforylasy. Na druhou stranu další látky této série – pyrrolo[3,4-*d*]pyrimidiny (8-aza-7,9-dideazapuriny) nebyly dosud pro přípravu analogů nukleosidů a nukleotidů využity vůbec. Naším cílem byla tedy syntéza analogů nukleosidů a nukleotidů nesoucích místo přirozené nukleobase 8-aza-7,9-dideazapurin. Tak byla připravena série acyklických nukleosidfosfonátů, z nichž některé se ukázaly být silnými inhibitory thymidinofosforylasy (TP) – enzymu, jenž je nezbytný pro angiogenezi v nádorových tkáních. Např. u *N*¹- a *N*⁸-(8-fosfonooktyl)-8-aza-7,9-dideazaxanthinu byly nalezené hodnoty IC₅₀ pro inhibici zmíněného enzymu izolovaného z různých zdrojů (lidská TP exprimovaná v buňkách V79, lidská placenta, *Escherichia coli*) v rozsahu 3–23 μM.

Tato práce je součástí výzkumného projektu Ústavu OZ40550506. Byla financována z Programu cílových projektů Akademie věd České republiky #IQS400550501, z Výzkumného centra Nová antivirotika a antineoplastika IM0508 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České

republiky, z NIH grantu 1UC1A1062540-01 a z Výzkumného centra Gilead Sciences a ÚOCHB.

LITERATURA

- Zimmerman M. N., Nemeroff N. H., Bock C. W., Bhat K. L.: *Heterocycles* 53, 205 (2000).
- Senda S., Hirota K., Asao T., Yamada Y.: *Synthesis* 6, 463 (1978).

2P-21

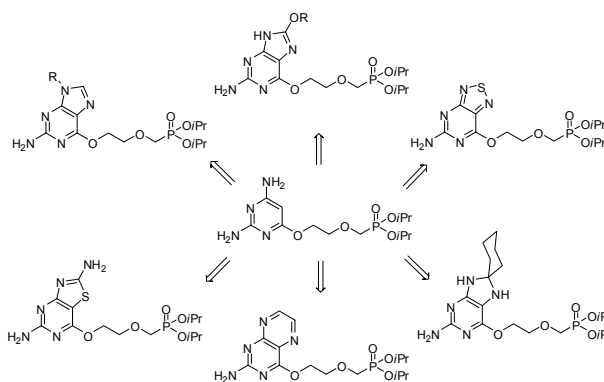
EFEKTIVNÍ SYNTÉZY ACYKlickÝCH NUKLEOSID- FOSFONÁTŮ S JEDNÍM OTEVŘENÝM A JEDNÍM NOVĚ UZAVŘENÝM KRUHEM

PETR JANSÁ, ANTONÍN HOLÝ a MARTIN
DRAČÍNSKÝ

Centrum pro Nová antivirotika a antineoplastika, Ústav organické chemie a biochemie, Akademie věd České republiky, v.v.i., Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6
jansa@uochb.cas.cz

Nová generace acyklických nukleosidfosfonátů (ANPs) je strukturně odvozena od 2,4-diamino-6-hydroxypyrimidinu. Tyto sloučeniny mohou být považovány za purinové deriváty s otevřeným imidazolovým kruhem (“open-ring“ ANPs)¹. Nové možnosti zvýšení biologické aktivity přináší modifikace polohy 5 pyrimidinového kruhu. 5-substituované “open-ring“ ANPs jsou exkluzivními inhibitory HIV a MSV replikace².

V rámci studia vztahů mezi strukturou a biologickou aktivitou byly připraveny deriváty s nově uzavřeným kruhem mezi polohami 4 a 5 vůdčí struktury. Bylo vypracováno několik syntetických postupů pro formování imidazolového, thiazolového, 1,2,5-thiadiazolového, 1,3-dihydro-2-*H*-imidazolového a pyrazinového kruhu (Schéma).



Tato práce vznikla za podpory projektu OZ40550506 Institutu organické chemie a biochemie, programem cílených projektů #IQS400550501 (AV ČR), Centrem pro Nová antivirotika a antineoplastika IM0508 (Ministerstvo školství), NIH grantem 1UC1A1062540-01 a výzkumným centrem Gilead Sciences a IOCB.

LITERATURA

- Holý A., Votruba I., Masojdková M., Andrei G., Snoeck

R., Naesens L., De Clercq E., Balzarini J.: *J. Med. Chem.* 45, 1918 (2002).

- Hocková D., Holý A., Masojídková M., Andrei G., Snoeck R., De Clercq E., Balzarini J.: *J. Med. Chem.* 46, 5064 (2003).

2P-22

SYNTEZA A VLASTNOSTI SUBSTITUOVANÝCH TRIAZOLŮ – ACYKlickÝCH ANALOG RIBAVIRINU

MICHAL ČESNEK, MARTIN DRAČINSKÝ
a ANTONÍN HOLÝ

Ústav organické chemie a biochemie, v.v.i, Flemingovo nám.
2 166 10 Praha 6
cesnekm@uochb.cas.cz

Ribavirin – strukturně blízký analog guanosinu, je znám svojí protivirovou aktivitou proti RNA i DNA virům^{1,2}, mj. proti hepatitidě C. Ribavirin je fosforylován buněčnými kinasami a mechanismus účinku u HCV spočívá pravděpodobně v inhibici inosin monofosfát dehydrogenasy³. Acyklická analoga nukleotidů jsou rovněž známá svojí antivirovou aktivitou⁴⁻⁶. Do dnešních dnů nebyly známy látky acyklická analoga ribavirinových nukleotidů. Proto bude prezentována syntéza a vlastnosti těchto látek a jejich analogů s guanidinem.

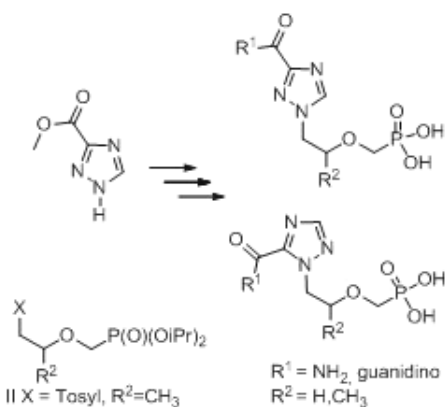


Schéma 1. a) 1/ NaH, II/III, DMF; b) NH₃/guanidine solution in DMF; c) TMSBr/ CH₃CN (DMF)

Tato práce vznikla za podpory výzkumného projektu ústavu OZ40550506. Dále byla podpořena „Centrem pro nová antivirovika a antineoplastika“ (IM0508) a Gilead Sciences, Inc. (Foster City, CA, U. S. A.).

LITERATURA

- Sidwell R. W., Hoffman J. H., Khare G. P., Allen L. B., Witkowski J. T., Robins R. K.: *Science* 177, 705 (1972).
- De Clercq E.: *Adv. Virus Res.* 42, 1 (1993).
- Lanford R. E., Chavez D., Guerra B., Lau J. Y. N., Hong Z., Brasky K. M., Beames B.: *J. Virol* 74, 8074 (2001).
- Holý A.: *Antivir. Res.* 71, 2 (2006).
- De Clercq E.: *Antivir. Res.* 75, 1 (2007).
- De Clercq E.: *Biochem. Pharmacol.* 73, 911 (2007).

2P-23

PŘÍPRAVA FPMP DERIVÁTŮ
N⁶-SUBSTITUOVANÝCH ADENINŮ
A 2,6-DIAMINOPURINŮ

ONDŘEJ BASZCZYŃSKI, ANTONÍN HOLÝ, MARTIN
DRAČINSKÝ a BLANKA KLEPETÁŘOVÁ

Centrum pro nová antivirovika a antineoplastika, Ústav organické chemie a biochemie, Akademie věd České republiky,
v.v.i. Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6
baszczyński@uochb.cas.cz

V minulosti byla objevena zajímavá skupina látek, N⁶-(3-fluoro-2-phosphonylmethoxypropyl) (FPMP) derivátů¹ purinových a pyrimidinových bází jež vykazují specifickou aktivitu proti některým retrovirům² (zahrnující také lidský imunodeficitní virus typ 1 (HIV-1) a typ 2 (HIV-2)).

V našem studiu strukturně-aktivitních vztahů jsme se zaměřili na N⁶-substituované FPMP derivativy adeninu a 2,6-diaminopurinu z důvodu, že tato N⁶-substituce často vede k podstatnému zvýšení antivirové a cytostatické aktivity³ ANPs.

Příprava těchto látek byla provedena dle schématu 1. V současné době je celá série FPMP derivátů testována na antiretrovirovou aktivitu.

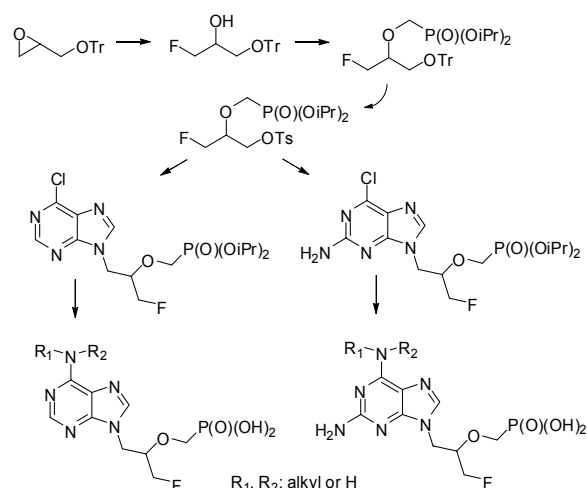


Schéma 1.

Tato práce vznikla za podpory projektu OZ40550506, programem #IQS400550501, Centrem pro Nová Antivirovika a Antineoplastika IM0508, grantem IUC1A1062540-01, Gilead Sciences a UOCHB centrem.

LITERATURA

- Jindřich J., Holý A., Dvořáková H.: *Collect. Czech. Chem. Commun.* 58, 1645 (1993).
- Balzarini J., Holý A., Jindřich J., Dvořáková H., Hao Z., Snoeck R., Herdewijn P., Johns D. G., De Clercq E.: *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 88, 4961 (1991).
- Holý A.: *Curr. Pharm. Des.* 9, 2567 (2003).

3P-01 STUDIUM SYSTÉMOVÝCH PORUCH V HPLC

**KVĚTA KALÍKOVÁ, VLASTIMIL HRUŠKA,
BOHUSLAV GAŠ a EVA TESAŘOVÁ**

*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Albertov 2030, 128 43 Praha 2
Kveta.Kalikova@centrum.cz*

Během chromatografického separačního procesu se při průtoku mobilní fáze systémem ustavuje rovnováha (mezi stacionární a mobilní fází). Tato rovnováha je porušena náhlou změnou mobilní fáze, např. po nadávkování vzorku. Po narušení rovnováhy začne chromatografický systém ihned směřovat k novému rovnovážnému stavu. Výsledkem je chromatogram obsahující kromě pík analytů i píky složek mobilní fáze, tj. systémové píky¹, které jsou často chybně interpretovány a zaměňovány s píky měřených analytů². Základní vlastností systémových pík je nezávislost jejich retenčních faktorů na charakteru dávkovaných analytů.

Ke sledování tvorby systémových pík byl použit reverzní separační systém s chromatografickou kolonou Discovery® RP Amide C16. Mobilní fáze byly tvořeny dvou- nebo tříložkovými vodnými pufrů, tj. pufrů složenými z kyseliny benzoové a hydroxidu litného nebo kyseliny benzoové, kyseliny 3-hydroxy-2-fenylpropionové a hydroxidu litného o různých koncentracích a pH. Dávkované poruchy obsahovaly stejné složky jako používaná mobilní fáze, vždy se změnou koncentrací jedné z nich. V chromatogramech se vyskytovaly 2 nebo 3 systémové píky v závislosti na použitém pufru. Jeden pík byl vždy stacionární, zatímco ostatní měnily svou polohu v závislosti na složení pufru.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA UK 305/2006 BCH a za podpory dlouhodobého výzkumného záměru MŠMT MSM0021620857.

LITERATURA

1. Levin S., Grushka E.: *Anal. Chem.* 59, 1157 (1987).
2. Srbek J., Coufal P., Bosáková Z., Tesařová E.: *J. Sep. Sci.* 28, 1263 (2005).

3P-02 ANALYSIS OF CYTOKININ NUCLEOTIDES BY HPLC-MS/MS

TIBOR BÉRES^a, PETR TARKOWSKI^{a,b}, and KAREL DOLEŽAL^a

^aLaboratory of Growth Regulators, Palacký University & IEB AS CR, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, ^bDepartment of Biochemistry, Palacký University, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc berestibor@seznam.cz

Formation of nucleotides is a first step in cytokinin biosynthesis. The key part of this process is the addition of an isopentenyl moiety from DMAPP to the N-6 of AMP. Kakimoto¹ suggested, that cytokinin nucleotides also occur in

plants in form of di- and triphosphates, which, however, have not been identified in plants yet. The main problem is that nucleotides are extremely polar, retention and separation on reverse phase is therefore crucial. Previous analytical methods for cytokinin nucleotides were based on fractionation and cleavage of phosphate moiety with alkaline phosphatase, followed by LC/MS analysis of the corresponding riboside form². Different approach, derivatization of intact nucleotides, was used by Nordstrom³ to achieve retention and separation of monophosphates. Ge⁴ analyzed cytokinin nucleotides by capillary zone electrophoresis with MS detection in coconut milk, once again only monophosphates were identified.

We have developed a method based on complete separation of cytokinin phosphates by HPLC with tandem MS detection after SPE and immunoaffinity chromatography purification. This method is validated by accuracy, sensitivity, linearity and precision. Accurate determination of cytokinin nucleotides will help to elucidate their biosynthetic pathway and physiological role in plants.

It has been shown that leukemia cells convert ribosides into nucleotides when treated with adenosine analogues. Phosphorylation is essential for triggering cell death. Some cytokinin ribosides showed significant cytotoxicity on human leukemia cell. Accurate quantification of the intracellular levels is an important pharmacodynamic study and helps to elucidate the molecular effect of adenosine derivatives.

This work was supported by the Grant Agency of the Czech Republic (GA 522/06/0108) and Czech Ministry of Education (MSM 6198959216).

REFERENCES

1. Kakimoto T.: *Plant. Cell. Physiol.* 42, 677 (2001).
2. Takei K., Yamaya T., Sakakibara H.: *J. Plant. Res.* 116, 265 (2003).
3. Nordstrom A., Tarkowski P., Tarkowska D., Dolezal K., Astot C., Sandberg G., Moritz T.: *Anal. Chem.* 76, 2869 (2004).
4. Ge L., Yong J. W. H., Tan S. N., Yang X. H., Ong E. S.: *J. Chromatogr., A* 1133, 322 (2006).

3P-03 ANALYSIS OF CYTOKININ-DERIVED CDK-INHIBITORS BY HPLC/EC/MS

**MICHAL KARÁDY^a, BOHUMILA KULICHOVÁ^b,
ALEŠ HORNA^{b,c}, and KAREL DOLEŽAL^a**

^aLaboratory of Growth Regulators, Palacký University and Institute of Experimental Botany, AS CR, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, ^bRADANAL Ltd., Okružní 613, 530 03 Pardubice, ^cTomas Bata University in Zlín, University Institute, Food Research Centre, Mostní 539, 760 01 Zlín yradak@seznam.cz

Cytokinins play a crucial role in regulation of proliferation and differentiation of plant cells. They also control various processes in plant growth and development, such as delay of senescence, transduction of nutritional signal, control of shoot/root balance and increased crop productivity¹. Virtually,

all naturally occurring cytokinins identified to date, are adenine species substituted at N6 with an isoprenoid or aromatic side chain. An additional modification of a cytokinin molecule can lead to a dramatic changes of action in a control of growth and development. Olomoucine and its derivatives roscovitine and bohemine, are a C2, N9-substituted 6-benzylaminopurine derivatives, which specifically inhibit Cdk-2 related kinases².

Coulometric electrochemical (EC) flow cells are widely used as high performance liquid chromatography detectors (HPLC-ECD) for the study of various redox-active compounds. Primary use of EC cells has been for quantitative bioanalysis of these compounds and using the EC cells as simple means of producing redox reactions, the products of which may then be studied by mass spectrometry (MS)³.

We present a validated HPLC/EC/MS method for quantitative analysis of above mentioned Cdk-inhibitors and compare it to existing HPLC/MS and HPLC/MS-MS methods.

The prediction of metabolism of these compounds is an important task, considering the fact that for example, Roscovitine (also labeled as CYC202) is now in Phase II clinical trials for breast and lung cancer⁴. Besides some established *in-vitro* and *in-vivo* methods using biological systems⁵, we have developed a biomimetic model using the cell as an electrochemical reactor for simulation of in situ oxidative reactions, which occur in metabolism of mentioned Cdk-inhibitors, and identification of products by MS. This utilization of electrochemical cell also opens possibilities to prepare various metabolites in a sufficient amount for further biological testing, thus bypassing the need to synthesize them.

REFERENCES

1. Sakakibara H.: *Annu. Rev. Plant. Biol.* 57, 431 (2006).
2. Havlíček L., Hanuš J., Veselý J., Leclerc S., Meijer L., Shaw G., Strnad M.: *J. Med. Chem.* 40, 408 (1997).
3. Gamache P., Smith R., McCarthy R., Waraska J., Acworth I.: *Spectroscopy* 18, 6 (2003).
4. www.cyclacel.com
5. McClue S. J., Stuart I.: *Drug. Metab. Dispos.* 36, 561 (2007).

3P-04

THE INVESTIGATION OF VOLATILE ORGANIC COMPOUNDS COMPOSITION IN UNIFLORAL HONEYS WITH SPME-GC-MS

ANTÓNIA JANÁČKOVÁ and IVAN ŠPÁNIK

Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical Technology, Slovak Technical University, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic
ivan.spanik@stuba.sk

SPME in connection with chromatography coupled to mass spectrometry was used to identify botanical origin of unifloral honeys. Several SPME parameters were optimized (fibre polarity, sample matrix, sample volume, equilibration, extraction times and temperatures). The temperature of water bath in SPME extraction was set to 60 °C. The higher temperature caused the decomposition of thermo labile substances and creation of novel thermal degradation products.

The effects of various equilibration and extraction times have been also studied (10, 30, 60 min). The best results were obtained for 30 and 60 min absorption period. However, comparison of chromatograms did not show significant differences in terms of number of extracted compounds and their areas, thus 30 min have been selected for further experiments. The best fibre stationary phase for extraction of honey volatiles was PDMS/DVB. The reproducibility of SPME procedure has been evaluated by 4 replicates injections of the honey sample under identical experimental conditions. After optimization of SPME conditions several unifloral honeys (rape, sunflower, raspberry, chestnut and other) were analysed to identify VOC by MS spectra and calculation their linear retention indices.

This work was supported by the Project VEGA no. 1/0827/08.

3P-05

GC SEPARATION OF ALKYL ESTERS OF 2-CN CARBOXYLIC ACID ENANTIOMERS ON PERMETHYLATED AND 2,6-DIMETHYL-3-PENTYL β - AND γ -CYCLODEXTRINS STATIONARY PHASES

KATARÍNA REPASKÁ^a, IVAN ŠPÁNIK^a, JÁN KRUPČÍK^a, PAT SANDRA^b, and DANIEL W. ARMSTRONG^c

^a *Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical Technology, Slovak Technical University, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovak Republic,* ^b *Laboratory of Organic Chemistry, University of Gent, Krijgslaan 281 S4, B-9000 Gent, Belgium,* ^c *Department of Chemistry and Biochemistry, University of Texas, Arlington, Arlington, TX, USA*
katarina.repaska@stuba.sk

In this work, the separation of enantiomers of alkyl esters of 2-CN carboxylic acid derivatives on the permethylated and 2,6-di-methyl-3-pentyl β - and γ -cyclodextrins stationary phases has been studied. The influence of structure in alkyl substituents bonded to the asymmetric carbon atom, as well as in the ester group of the selected 2-CN carboxylic acid derivatives; and selectivity of modified β - and γ -cyclodextrin phases was studied. A model set of 12 derivatives were separated on four columns. The separation of enantiomers was evaluated in terms of the interactions of the alkyl substituents bonded to the stereogenic carbon (R_1), as well as, to the ester group (R_2) of studied derivatives. Similarly, the effect of 3-O-alkyl chain length of 2,6-di-O-methyl-3-O-alkyl- β - and γ -cyclodextrins was studied. It was proven that the variation of enantiomeric separation with temperature on a given cyclodextrin capillary column depends both on the nature of alkyl groups bonded both to asymmetric carbon atom and in ester group. The temperature dependencies of retention factors, $\ln k$ versus $1/T$, was linear for both enantiomers of all studied derivatives on all considered cyclodextrin columns. However, the temperature dependencies of selectivity factors, $\ln \alpha$ on $1/T$, were non-linear. The thermodynamic data characterizing overall and enantioselective interactions and enthalpic-entropic compensation were used to gain more insight into the

mechanistic aspects of enantioseparation on modified cyclodextrins.

This work was supported by the Project VEGA no. 1/0827/08.

3P-06

ENANTIOSELECTIVE HPLC SEPARATION OF INDOLE PHYTOALEXINS ON A TEICOPLANIN

TATÁNA GONDOVÁ^{a*}, JÁN PETROVAJ^a, PETER KUTSCHY^b, ANETA SALAYOVÁ^b, DANIEL W. ARMSTRONG^c, RASTISLAV SERBIN^a

^a Department of Analytical Chemistry, Faculty of Science, P.J. Šafárik University, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovak Republic, ^b Department of Organic Chemistry, Faculty of Science, P.J. Šafárik University, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovak Republic, ^c Department of Chemistry and Biochemistry, University of Texas Arlington, Arlington, TX 76019 USA

tatana.gondova@upjs.sk

Enantioselective chromatography still remains the most important method for the chiral separation of pharmaceutically and biologically important substances. Especially, chiral high-performance liquid chromatography (HPLC) with the variety of columns and mobile phases can utilise a multitude of different separation mechanisms.

The macrocyclic glycopeptides belong to the preferred group of chiral selectors that have been used as the efficient chiral stationary phase in HPLC. The variety of their structure and functionalities provide a unique range of interactions for chiral recognition¹.

In the present study, teicoplanin-based chiral stationary phase was used for the chiral analysis of cruciferous phytoalexins. Phytoalexins are low molecular weight secondary metabolites produced de novo by plants (family cruciferae) in response to various types of stress, including microbial attack. These compounds are of great interest in their biological activity, including antimicrobial, antitumor and cancer chemoprotective properties². Therefore it is important to investigate synthesis of indole phytoalexins and their analogs as well as the absolute configuration in connection with the biological activity of the corresponding stereoisomers³.

For direct chiral separation of some indole cruciferous phytoalexins analogs a HPLC method with teicoplanin CSP was developed. The normal phase mode proved to be most effective for the chiral separation of the studied compounds. The conditions for the best resolution were found by selection and variation of the mobile phase composition and the effect of analyte structure was observed.

This work was supported by the Grant Agency of the Slovak Republic, grant No. 1/4461/07 and by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-0514-06.

REFERENCES

1. Armstrong D.W, Tang S., Chen S., Zhou Z., Bagwill C.: *Anal. Chem.* 66, 1473 (1994).

2. Mezenec R., Mojžiš J., Pilátová M., Kutschy P.: *Neoplasma* 50, 239 (2003).
3. Monde K., Taniguchi T., Miura N., Kutschy P., Čurillová Z., Pilátová M., Mojžiš J.: *Bioorg. Med. Chem.* 13, 5206 (2005).

3P-07

KAPILÁRNÍ ZÓNOVÁ A GELOVÁ ELEKTROFORÉZA JAKO ÚČINNÉ SEPARAČNÍ NÁSTROJE PRO BÍLKOVINY A PEPTIDY V PROTEOMICE

TOMÁŠ KRÍŽEK^a, PAVEL COUFAL^a, ZUZANA BOSÁKOVÁ^a, EVA TESÁŘOVÁ^b a JANA SOBOTNÍKOVÁ^a

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, ^a Katedra analytické chemie, ^b Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Albertov 2030, 128 40 Praha *pcoufal@natur.cuni.cz*

Po úspěšném zmapování celého lidského genomu se pozornost chemiků, biochemiků a biologů upřela směrem k proteomu a proteomice. Celý lidský genom byl přečten mnohem dříve, než se původě předpokládalo, díky nesmírně výkonné, separačně velmi účinné, snadno automatizovatelné a dostatečně citlivé kapilární elektroforéze. Na základě těchto zkušeností byly k charakterizaci a kompletnímu popisu proteomu, a to nejen lidského, nasazeny též analytické separační metody, jako je kapilární zónová (CZE) a kapilární gelová elektroforéza (CGE), vhodné pro bílkoviny a peptidy. CZE je účinná separační technika pro ionty lišící se dostatečně svými elektroforetickými pohyblivostmi. Chceme-li však uspět při separaci směsí bílkovin či peptidů, které se mohou lišit navzájem v rámci svých elektroforetických pohyblivostí zcela nepatrně, je třeba postavit do cesty migrujícím iontům vhodné separační prostředí, které bude diskriminovat ty větší, těžší a nepravidelné, čímž je odliší od těch menších, lehčích a tvarově pravidelných. Takovým vhodným separačním prostředím pro bílkoviny a peptidy může být právě gel používaný v CGE. Kromě chemických gelů, jež jsou pevně zachyceny v separační kapiláře a jež jsou velmi náchylné k nevratnému poškození, lze s výhodou využít gelů fyzikálních, nazývaných též propletenými polymery. Fyzikální gely lze jednoduše připravit rozpouštěním pevného polymeru ve vhodném základním elektrolytu, lze je snadno naplnit do separační kapiláry a lze je velmi jednoduše vyměnit v separační kapiláře před každou analýzou. Tato práce je zaměřena na porovnání CZE a CGE s fyzikálními gely jako účinnými separačními nástroji pro bílkoviny a peptidy, tedy klíčové látky v proteomice. Separací možnosti a účinnost CZE a CGE s fyzikálními gely byly hodnoceny na základě výsledků získaných s bílkovinami lišícími se svými M_r a pI, peptidy lišícími se svojí délkou a zastoupením jednotlivých aminokyselin, a peptidy pocházejícími z hydrolytického štěpení bílkovin trypsinem. Získané výsledky ukázaly, že CGE skýtá větší separační možnosti a účinnosti pro biolátky v porovnání s prostou CZE, avšak nemusí být vždy tou lepší alternativou z hlediska citlivosti, účinnosti, reprodukovatelnosti a jednoduchosti provedení. Na CZE a CGE lze tedy pohlížet jako na komplementární vysoce účinné separační nástroje, které mají nezastupitelné místo

v dnešní proteomice.

TK a PC děkují za finanční podporu grantovému projektu GA ČR 203/07/0392, ZB a JS děkují výzkumnému záměru MŠMT MSM0021620857 a ET děkuje projektu Kontakt ME895.

3P-08

ANALÝZA LIDSKÉHO SPERMATU KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZOU

OLGA RYPAROVÁ^{a,b}, JAN PETR^a, PETRA HINNEROVÁ^a, JOANNA ZNALEZIONA^a, RADIM KNOB^a, VÍTĚZSLAV MAIER^a, JURAJ ŠEVČÍK^a

^a Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Třída Svobody 8, 771 46 Olomouc, ^b Gymnázium Hranice, Zborovská 293, 753 01 Hranice olga.ryparova@yahoo.com

Kapilární elektroforéza (CE) patří k vysoce účinným separačním technikám používaných v moderní chemii. Tato technika je využívána jak pro separaci malých anorganických iontů, tak pro separaci složitějších molekul jako jsou sacharidy, proteiny, fragmenty nukleových kyselin a dokonce i pro separace nanočástic, virů, bakterií a eukaryotických buněk.

Poměrně netradiční využití CE bylo ukázáno v roce 2003, kdy skupina prof. D. W. Armstronga publikovala studii životnosti býčích spermií pro inseminační účely právě pomocí CE s LIF detekcí¹. Cílem naší práce bylo studium podmínek pro CE analýzu lidských spermií především pro účely forenzní analytiky, která se v této oblasti zabývá problémem oddělení mužských pohlavních buněk od poševního sekretu v případech sexuálního zločinu pro získání DNA pachatele. CE přináší do této oblasti nové možnosti, vyvinutou metodou za použití elektrolytu obsahujícím Tris, citrát a fruktosu bylo možné analyzovat spermie a zároveň je oddělit od ostatních složek dávkovaného vzorku.

Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy (Výzkumný záměr číslo MSM6198959216 a Program Kontakt ME 895) za finanční podporu práce. OR a JP děkují projektu Badatel (STM-Morava 2E06029) za poskytnutou podporu.

LITERATURA

1. He L., Jepsen R. J., Evans L. E., Armstrong D. W.: Anal. Chem. 75, 825 (2003).

3P-09

STANOVENÍ POLYCYKlickÝCH AROMATICKÝCH UHLOVODÍKŮ V SEDIMENTECH ŘEKY MORAVY V OBLASTI CHKO LITOVELSKÉ POMORAVÍ

MICHAL ZAPADLO^a, JANA SENAJOVÁ^a, PETER HEKERA^b, LUBOMÍR ČÁP^a a PETER BARTÁK^a

^a Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc,

^b Katedra ekologie a životního prostředí, Přírodovědecká fa-

kulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc mikzap@seznam.cz

CHKO Litovelské Pomoraví patří k nejvýznamnějším chráněným územím Olomouckého kraje. Jádro CHKO a současně hlavní přírodovědný fenomén oblasti tvoří vnitrozemská říční delta, vytvářená přirozeným meandrováním toku řeky Moravy a větvením do mnoha ramen a tůní. Jedná se o unikátní lokalitu s mnoha zajímavými živočichy a rostlinami.

V této studii byl sledován obsah polycyklických aromatických uhlovodíků (16 PAU dle US EPA 610) jednak v sedimentech samotné řeky Moravy na vstupu a výstupu z jižní části CHKO mezi Litovlí a Olomoucí a také v sedimentech významných přítoků v samotné jižní části CHKO.

Pro izolaci a prekoncentraci PAU byla použita soxhletova extrakce a vysokotlaká extrakce rozpouštědlem (PSE). Analýza analytů byla provedena plynovou chromatografií s hmotnostním detektorem v SIM modu z důvodu zvýšení citlivosti metody.

Limity detekce (LOD) se pohybovaly v rozmezí 0,02 až 0,2 ppm a limity kvantifikace (LOQ) byly 0,1–0,4 ppm.

Byl stanoven obsah vybraných 16 PAU a zhodnocen vliv řeky Moravy na celkovou akumulaci těchto sloučenin v sedimentech řeky Moravy v CHKO Litovelské Pomoraví.

Tato práce vznikla za podpory MŠMT ČR (grant MSM 6198959216) a Národního programu výzkumu II (projekt č. 2B060101).

LITERATURA

1. Kostkan V., Lehký J.: Global Ecol. Biogeogr. Letts. 6, 307 (1997).
2. Giergielewicz-Mozajska H., Dabrowski L., Namiesnik J.: Crit. Rev. Anal. Chem. 31, 149 (2001).
3. Richter B.E.: J. Chromatogr., A 874, 217(2000).
4. Buseti F., Hertz A., Cuomo M., Badeor S., Traverso P.: J. Chromatogr., A 1102, 104 (2006).

3P-10

IONTOVÉ KAPALINY A POLYMERNÍ ELEKTROLYTY PRO CHEMICKÉ SENZORY PLYNŮ

MARTINA NÁDHERNÁ^{a,b,*}, FRANTIŠEK OPEKAR^b a JAKUB REITER^a

^a Ústav anorganické chemie AV ČR, v. v. i., 250 68 Řež,

^b Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, 128 40 Praha 6 nadherna@iic.cas.cz

Iontové kapaliny jsou perspektivními látkami pro základní i aplikovaný výzkum díky svým výborným vlastnostem: nulová tenze par, vysoká tepelná stabilita (až do 400 °C) a nízká toxicita¹. Také jejich výborné elektrochemické vlastnosti umožňují jejich použití nejen v lithno-iontových bateriích^{2,3}, ale také v elektrochemických senzorech plynů. Současný výzkum je zaměřen na vývoj nových kompozitních materiálů polymer-iontová kapalina pro elektrochemický senzor NO₂. Zde bude tento materiál sloužit jako elektrolyt a zároveň

jako matrice pro dispergované částice indikační elektrody (Au, Pt, retikulovaný skelný uhlík).

Vzhledem ke značně odlišné polaritě polymeru a iontové kapaliny byly použity více polární monomery s -OH nebo $(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{O})_n$ skupinou v molekule a hydrofobní iontové kapaliny na bázi 1-methylimidazolu. Příslušné polymerní elektrolyty byly připraveny přímou, tepelně iniciovanou radikálovou polymerizací výchozí směsi monomeru, iontové kapaliny a iniciátoru polymerizace (2,2'-azobis(isobutyro-nitril)). Elektrochemická charakterizace připravených elektrolytů byla provedena na potenciostatu PGSTAT 30 (Eco Chemie, Holandsko).

Jako nejvhodnější pro další výzkum byl vybrán elektrolyt polyethylenglykol methylether methakrylát (PEGMEMA) – hexafluorofosforečnan 1-butyl-3-methylimidazolia (BMIPF_6), u kterých vzorky vykazují dobré mechanické vlastnosti. Impedanční měření ukázalo přijatelnou iontovou vodivost $2,4 \cdot 10^{-4} \text{ S cm}^{-1}$ při 20°C u vzorku PEGMEMA- BMIPF_6 43 : 57 mol.%. Voltametrická měření na platinové elektrodě ukázala široké potenciálové okno od $-2,3$ do $2,5 \text{ V vs. Cd-Cd}^{2+}$. Výše popsané elektrolyty budou nyní testovány ve vlastním elektrochemickém senzoru vyvinutém během předchozího výzkumu^{4,5}.

Tato práce vznikla za podpory Akademie věd ČR (AV0Z40320502), MŠMT ČR (LC523 a MSM0021620857) a Grantové agentury AV ČR (B400320701).

LITERATURA

1. Bonhote P., Dias A. P., Papageorgiou N., Kalyanasundaram K., Gratzel M.: *Inorg. Chem.* 35, 1168 (1996).
2. Ohno H. (ed.): *Electrochemical Aspects of Ionic Liquids*. John Wiley, NY 2005.
3. Reiter J., Vondrák J., Michálek J., Mička Z.: *Electrochim. Acta* 52, 1398 (2006).
4. Hrnčířová P., Opekar F., Štulík K.: *Sens. Actuators, B* 69, 199 (2000).
5. Hoherčáková Z., Opekar F.: *Sens. Actuators, B* 97, 379 (2004).

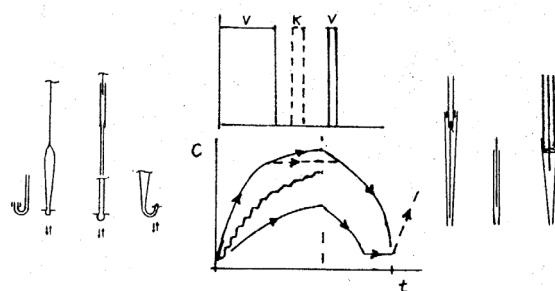
3P-11

UŽITÍ MINI- AŽ NANOOBJEMŮ ELEKTROD ZAHRNÚJÍCÍCH SKLENĚNÉ ČI PLASTOVÉ (VYMĚNITELNÉ) ÚSTÍ, NA BÁZI RTUTI, AMALGAMU, KOMPOZITŮ (AMALGAM) ČI PAST

LADISLAV NOVOTNÝ

Univerzita Pardubice, FCHT, nám. Čs. Legií 565, 532 10 Pardubice 19, ČR
nvt.l@seznam.cz

Součástí hledání a rozšiřování možností studia, diagnostiky a analýzy eko- a bioaktivních látek^{1,2} je i užití nově navržených³⁻⁷ konstrukcí, pracovních režimů či funkčních módů elektrod zejména na bázi rtuti, amalgam, past, inkoustů, gelů a dalších pevných nebo rheologicky vhodných materiálů. Příkladem toho jsou elektrody se širokým rozsahem funkčních parametrů ve formě kapek, menisků, disků, válečku,



Obr. 1. Příklady pracovních schémat

vrstviček apod., ve velikostech obvyklých, mini-, semimikro-, mikro- až nanoobjemů, zahrnujících kapilární, skleněná či plastová podle potřeby i vyměnitelná ústí na bázi rtuti, amalgam kompozitů či kompozitních amalgam, past apod., v módech jako jsou HMDE, SMDE, DME, menisky, po stupních rostoucí, kompresně-expanzní a jiné průběhy, s orientací ústí dolů nebo nahoru, s využitím specifické elektrochemické předúpravy či jiné modifikace atp. Jde o dostupné elektrody (senzory, přinášející v oblasti měření i diagnostiky stávající i nové možnosti.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR (VZ 0021627502-UPa a LC06035).

LITERATURA

1. Paleček E., Fojta M.: *Anal. Chem.* 73, 74A (2001).
2. Štulík K., Yosypchuk B., Kouřilová A., Novotný L., Paleček E.: *Anal. Chem.* 74, 4788 (2002).
3. Novotný L.: *Fresenius' J. Anal. Chem.* 362, 184 (1998); 363, 55 (1999).
4. Novotný L.: *Electroanalysis* 12, 1240 (2000); 8, 135 (1996).
5. Novotný L.: *Chem. Listy* 95, 147 (2001).
6. Novotný L.: *Čs. patenty PUV 7103-1997; PV 1-2001; PUV 19501-2007.*
7. Yosypchuk B., Novotný L.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 32 (2), 141 (2002).

3P-12

PODSTATA ELEKTROCHEMICKÉHO ČIŠTĚNÍ/ OBNOVOVÁNÍ RTUŤOVÝCH A PŘÍBUZNÝCH ELEKTROD

LADISLAV NOVOTNÝ a PETRA POLÁŠKOVÁ

Univerzita Pardubice, FCHT, nám. Čs. Legií 565, 532 10 Pardubice 19, ČR
polaskovap@centrum.cz

Opakované užívání elektrod pro citlivá elektrochemická (zejm. elektroanalytická) měření si žádá průběžné obnovování jejich povrchu¹⁻³. U rtuťových kapkových elektrod se dosud osvědčilo např. mechanické obnovení kapky^{4,5}. Snaha minimalizovat spotřebu rtuti, miniaturizovat rozměry elektrody a dále automatizovat měření vedla k pokusu alespoň do znač-

né míry nahradit mechanické obnovení povrchu jeho elektrochemickým čištěním či obnovováním. Využívá se při tom poznatku, že lze při vhodně zvolených (nalezených) potenciálech, polarizačních režimech a dalších experimentálních podmínkách posílit žádané elektrochemické procesy a potlačit děje nežádoucí. Tak např. platí, že bez přítomnosti povrchové aktivní látky PAL v roztoku a v přítomnosti PAL lze pro povrchové napětí elektrody psát:

$$d\gamma_0 = -\gamma_0 dE - \sum_i \Gamma_i d\mu_i$$

$$d\gamma = -q dE - \Gamma_{\text{PAL}} d\mu_{\text{PAL}} - \sum_i \Gamma_i d\mu_i$$

kte γ , q , E , Γ a μ značí povrchové napětí, hustotu náboje, potenciál, povrchovou koncentraci a chemický potenciál. Změny E , q nebo dalších veličin vyvolávají tedy žádoucí změny Γ_{PAL} . Experimenty provedené zatím s vybranými anorganickými a více méně reverzibilně adsorptivními organickými depolarizátory či látkami ukázaly, že kombinace občasného mechanického a pravidelného elektrochemického obnovování uvedených elektrod může být v praxi dobře využitelná. V rámci dalšího studia možností využití popsaných experimentálních režimů probíhají nebo budou provedena měření i v systémech obsahujících silně adsorptivní, katalyticky, chemisorpčně či jinak aktivní látky.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR (VZ 0021627502-UPa a LC06035).

LITERATURA

1. Wang J.: *Analytical Electrochemistry*. VCH Publ., New York 1994.
2. Barek J.: *Možnosti inovací v elektroanalytické chemii*. PACI (Eds: ESF; VŠCHT), Praha 2006.
3. Štulík K., Kalvoda R. (ed.): *Electrochemistry for Environmental Protection*. UNESCO ROSTE, Venice 1996.
4. Heyrovský J., Kůta J.: *Základy polarografie*. NČSAV, Praha 1962.
5. Novotný L.: Chem. Listy 95, 147 (2001).

3P-13

MODIFIKACE UHLÍKOVÉ PASTOVÉ ELEKTRODY JEDNOVRSTVÝMI NANOTRUBIČKAMI

ZUZANA JEMELKOVÁ*, JIŘÍ ZIMA a JIŘÍ BAREK

*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, Albertov 6, 128 43 Praha 2
Zuzana.Jemelkova@seznam.cz*

Uhlíkové nanotrubičky objevené v roce 1991 (cit.¹) představují nový typ uhlíkového materiálu s jedinečnými strukturálními, geometrickými, mechanickými i chemickými vlastnostmi². Jde o grafitový list stočený do trubičky. Podle počtu stočených listů se nanotrubičky dělí do dvou skupin. SWNT (z ang. single-wall nanotube) tvořené jedním listem a MWNT (z angl. multi-wall nanotube), které obsahují několik listů o různém průměru, z nichž nejmenší je 2,2 nm (cit.¹). Pro

schopnost chovat se jako kovy či polovodiče jsou nanotrubičky využívány jako biosenzory², např. ve formě uhlíkových pastových elektrod^{3–6}.

Uhlíková pastová elektroda modifikovaná 10, 20 nebo 30 % (m/m) SWNT byla použita pro voltametrické stanovení adrenalinu a získané výsledky byly porovnány s čistou uhlíkovou pastovou elektrodou. Nanotrubičky byly přečištěny promýváním v 2,2 M kyselině dusičné podle dříve popsaného postupu⁷. Pro přípravu pasty byly nejprve nanotrubičky promíchány s uhlíkovým práškem a ke směsi byl přidán minerální olej. Měřeno bylo technikou DPV v prostředí Brittonova-Robinsonova pufru. Nejprve byl studován vliv pH na voltametrické chování adrenalinu a ve vybraném prostředí pH 6 byly měřeny kalibrační závislosti adrenalinu. Metodou AdS DPV byla testována také schopnost nanotrubiček ovlivnit akumulaci adrenalinu na uhlíkovou pastovou elektrodu.

Přidávání nanotrubiček do uhlíkové pasty vedlo ke zvýšení citlivosti metody pro stanovení adrenalinu a k akumulaci adrenalinu na povrch uhlíkové pastové elektrody. Na čistou uhlíkovou pastovou elektrodu se adrenalin neakumuluje.

Práce byla finančně podporována Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (projekt 34607/2007/B) a Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy ČR (projekty LC 06035 a MSM 0021620857).

LITERATURA

1. Ijima S.: Nature 354, 56 (1991).
2. Zhao Q., Gan Z., Zhuang O.: Electroanalysis 14, 1609 (2002).
3. Rivas G. A., Rubianes M. D., Pedano M. L., Ferreyra N. F., Luque G. L., Rodriguez M. C., Miscoria S. A.: Electroanalysis 19, 823 (2007).
4. Zheng L., Song J.: Talanta 73, 943 (2007).
5. Chicharro M., Sanchez A., Bermejo E., Zapardiel A., Rubianes M. D., Rivas G. A.: Anal. Chim. Acta 543, 84 (2005).
6. Rubianes M. D., Rivas G. A.: Electroanalysis 17, 73 (2005).
7. Valentini F., Amine A., Orlanducci S., Terranova M. L., Palleschi G.: Anal. Chem. 75, 5413 (2003).

3P-14

VYUŽITÍ NETRADIČNÍCH ELEKTRODOVÝCH MATERIÁLŮ PRO STANOVENÍ STOPOVÝCH MNOŽSTVÍ HERBICIDU DINOSEBU

JAN FISCHER, JIŘÍ BAREK, KAROLINA PECKOVÁ a JIŘÍ ZIMA

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

V současné době roste poptávka po citlivých a spolehlivých metodách stanovení stopových množství látek, které znečišťují životní prostředí. Jednou z důležitých cest pronikání biologicky aktivních organických látek do prostředí je chemická ochrana užívaná v zemědělství. Z milionů tun

chemických přípravků, které jsou v zemědělství ročně aplikovány, se méně než 5 % dostane do kontaktu s cílovými organismy¹.

Jednou z látek využívaných v zemědělství je Dinoseb (2-(1-methylpropyl)-4,6-dinitro-fenol), herbicid používaný při pěstování zeleniny, ovoce a citrusových plodů pro selektivní kontrolu trav a širokolistých plevelů. Je také používán jako insekticid při pěstování vína a jako sušící činidlo obilnin. Dinoseb má ve své struktuře dvě snadno redukovatelné nitroskupiny na aromatickém jádře a také hydroxy skupinu, kterou je možné elektrochemicky oxidovat, tudíž lze k jeho stanovení s výhodou využít moderní polarografické² a voltametrické techniky³.

Při sledování redukčních dějů se nejčastěji používá rtuťová kapková elektroda, ale manipulace se rtuťí vyžaduje zvýšené nároky na bezpečnost práce vzhledem k její toxicitě. Slibnou alternativou se jeví netoxické tuhé stříbrné amalgámové elektrody, připravené ze směsi stříbrného prášku a rtuti. Při hledání optimální podmínek byl sledován vliv pH a složení základního roztoku. Pro stanovení stopových koncentrací Dinosebu byla využita i adsorpční rozpouštěcí voltametrie. Pro sledování oxidačních dějů byla použita uhlíková pastová elektroda připravená ze směsi uhlíkového prášku a minerálního oleje. Sledování koncentrace Dinosebu v oxidační části potenciálového okna je možné i v přítomnosti kyslíku, který neruší stanovení.

Další zajímavou novinkou pro sledování oxidačních i redukčních dějů jsou elektrody na bázi bórem dopovaného diamantového filmu. Potenciálové okno u tohoto typu elektrod je relativně velké (až 3,5 V) a umožnilo stanovit Dinoseb na základě jeho oxidace i redukce na jediném elektrodovém povrchu.

Tento výzkum byl finančně podporován MŠMT ČR (projekty LC 06035 a MSM 0021620857).

LITERATURA

1. Kazda J.: *Chemická ochrana rostlin a předpisy*. ČZU, Praha 2005.
2. Polák J.: *Chem. Listy* 77, 306 (1983).
3. Pedrero M., de Villena F. J. M., Pingarron J. M., Polo L. M.: *Electroanalysis* 3, 419 (1991).

3P-15

MOŽNOSTI VYUŽITÍ AMALGÁMOVÝCH ELEKTROD PRO STANOVENÍ PROTINÁDOROVÝCH LÉČIV ZE SKUPINY N-NITROSOMOČOVIN

KAROLINA PECKOVÁ^{a*}, LUCIE VRZALOVÁ^a, VLADIMÍR BENČKO^b a JIŘÍ BAREK^a

^a Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 230, 128 43 Praha 2, ^b I. LF UK & VFN, Ústav hygieny a epidemiologie, Studničkova 7, 128 00 Praha 2
kpeckova@natur.cuni.cz

Protinádorová léčiva ze skupiny N-nitrosomočoviny se využívají při léčbě mozkových a jiných nádorů¹. Analytické

metody stanovení těchto látek jsou používány při farmakokinetických studiích, dále při stanovení těchto látek ve farmaceutických přípravcích a testování jejich stability či při monitorování jejich obsahu v klinických odpadních materiálech².

Elektroanalýza těchto látek je založena na elektrochemické redukci N-nitroso skupiny, jak bylo v minulosti prokázáno pro rtuťové elektrody³. V této studii jsme se zaměřili na využití stříbrné tuhé amalgámové elektrody jako stále rozšířenější netoxické alternativy ke rtuťovým elektrodám⁴ pro stanovení carmustinu (BCNU) a lomustinu (CCNU), které patří v klinické praxi mezi stále používané N-nitrosomočoviny. K voltametrickému stanovení látek byla použita metoda DC voltametrie a diferenční pulsní voltametrie, jednostupňová redukce obou látek ve smíšeném vodně-methanolickém (9:1) či vodném prostředí (Ph 2,0–10,0) probíhá při zápornějších potenciálech ($\Delta \sim 300$ mV) než na rtuťových elektrodách. Kalibrační závislosti BCNU naměřené v Brittonově-Robinsonově pufru (pH 7,0) a CCNU naměřené v 0,05 mol l⁻¹ octanovém pufru (pH 4,0) jsou lineární v rozsahu (2–100)·10⁻⁶ mol l⁻¹, dosažené meze stanovitelnosti se pro oba analyty a zmíněné voltametrické techniky pohybují v rozmezí (2–6)·10⁻⁶ mol l⁻¹.

Dále byla pro stanovení modelových analytů ověřena možnost použít indikační stříbrnou tuhou amalgámovou elektrodu v ampérometrické detekční cele ve „wall-jet“ uspořádání pro průtokovou injekční analýzu.

K. P. děkuje za finanční podporu Grantové agentury České republiky (grant 203/07/P261), výzkum byl dále podporován MŠMT ČR (projekty LC 06035 a MSM 0021620857).

LITERATURA

1. URL: <http://www.chemocare.com/BIO>, staženo 28. 2. 2008.
2. Kiffmeyer T., Gotze H. J., Jursch M., Luders U.: *Fresenius' J. Anal. Chem.* 361, 185 (1998).
3. Snycerski A., Fijalek Z.: *Chem. Anal.* 41, 1025 (1996).
4. Barek J., Fischer J., Navratil T., Peckova K., Yosypchuk B., Zima J.: *Electroanalysis* 19-20, 2003 (2007).

3P-16

VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ STOPOVÝCH MNOŽSTVÍ GENOTOXICKÉHO 2-NITRO-9-FLUORENONU NA MENISKEM MODIFIKOVANÉ STŘÍBRNÉ PEVNÉ AMALGÁMOVÉ ELEKTRODĚ

VLASTIMIL VYSKOČIL^{a*}, PETRA POLÁŠKOVÁ^b, KAROLINA PECKOVÁ^a a JIŘÍ BAREK^a

^a Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 43 Praha 2, ^b Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra analytické chemie, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice
vyskocil@natur.cuni.cz

Emise benzinových a dieselových motorů přispívají velkou měrou ke stálému znečišťování životního prostředí. Jistá část výfukových plynů je tvořena nitrovanými polycyk-

lickými aromatickými uhlovodíky, které patří mezi látky přispívající ke zvýšenému výskytu onemocnění rakovinou¹. Proto neustále roste potřeba mimořádně citlivých a selektivních metod stanovení těchto látek.

Studovaná látka 2-nitro-9-fluorenon (2-NFN), známá jako prokázaná mutagenní složka výfukových plynů¹, byla stanovována na meniskem modifikované stříbrné pevné amalgamové elektrodě² (m-AgSAE) – netoxické alternativě k tradičním rtuťovým elektrodám. Optimální podmínky pro stanovení 2-NFN byly zkoumány ve vodně-methanolickém prostředí pufrovaném Brittonovým-Robinsonovým pufrem. Pro stanovení co nejnižších koncentrací 2-NFN byly zvoleny voltametrické techniky DC voltametrie (DCV) na m-AgSAE a diferenční pulsní voltametrie (DPV) na m-AgSAE. Proměřena byla závislost elektrochemického chování 2-NFN na pH a při optimálních podmínkách byly proměřeny kalibrační závislosti; mez stanovitelnosti je řádově 10^{-6} mol L⁻¹ pro metodu DCV na m-AgSAE a 10^{-7} mol L⁻¹ pro metodu DPV na m-AgSAE. Získané výsledky byly porovnány s výsledky předchozích stanovení 2-NFN na rtuťových elektrodách³. Dále byl učiněn pokus o zvýšení citlivosti stanovení 2-NFN použitím techniky adsorpční rozpouštěcí voltametrie na m-AgSAE. Za pomoci cyklické voltametrie byl zkoumán charakter elektrochemických přeměn studované látky při redukčních procesech na m-AgSAE.

Tato práce byla finančně podpořena MŠMT ČR (projekty LC 06035 a MSM 0021620857) a GA UK (projekt 6107/2007/B-Ch/PrF).

LITERATURA

1. Bechtold W. E., Henderson T. R., Brooks A. L.: *Mutat. Res.* 173, 105 (1986).
2. Barek J., Fischer J., Navrátil T., Pecková K., Yosypchuk B.: *Sensors* 6, 445 (2006).
3. Vyskočil V., Bologa P., Pecková K., Barek J.: *Proc. 4th International Student Conference* (Opekar F., Svobodová E., ed.), str. 108. Ševčík Consultancy, Prague 2008.

Tabulka I

Parametry kalibračních závislostí pro voltametrická stanovení 5-nitrobenzimidazolu

Elektroda / technika	medium BR pufr	koncentrační rozmezí [mol L ⁻¹]	směrnice [nA mol ⁻¹ L]	úsek [nA]	korelační koeficient	limit kvantifikace [mol L ⁻¹]
DCV / HMDmE	pH 4.0	$(2 - 10) \times 10^{-7}$	1.69×10^7	-0.2	0.9977	3.5×10^{-7}
DPV / HMDmE	pH 5.0	$(2 - 10) \times 10^{-8}$	6.57×10^7	-4.1	0.9858	2.7×10^{-8}
DCV / CPE	pH 3.0	$(2 - 10) \times 10^{-5}$	4.07×10^7	-114.2	0.9981	3.0×10^{-5}
DPV / CPE	pH 3.0	$(2 - 10) \times 10^{-6}$	5.40×10^7	+1.3	0.9979	3.5×10^{-6}

3P-17 VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ 5-NITROBENZIMIDAZOLU

**DANA DEÝLOVÁ, JIŘÍ BAREK, KAROLÍNA
PECKOVÁ a VLASTIMIL VYSKOČIL**

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Albertov 6, 128 43 Praha 2

barek@natur.cuni.cz

5-Nitrobenzimidazol (5-NBIA) je genotoxický derivát nitrovaných heterocyklických aromatických sloučenin, jejichž přítomnost může mít negativní dopad na zdravý vývoj organismů. Výskyt této látky lze očekávat v úzkém spojení s chemickými procesy probíhajícími při spalování fosilních paliv¹. 5-NBIA, látka v minulosti užívaná a polarograficky stanovovaná jako součást roztoku ustalovače pro barevné fotografie², je dnes prokázaným karcinogenem a mutagenem³.

Ke stanovení látky bylo využito metod DC voltametrie (DCV) a DP voltametrie (DPV) na visící rtuťové kapkové elektrodě (HMDE) a uhlíkové pastové elektrodě (CPE) v prostředí Brittonova-Robinsonova pufru.

Jako další metoda byla použita cyklická voltametrie (CV), která sloužila především k objasnění mechanismu elektrodové reakce a její reversibility či irreversibility. Pro stanovení počtu vyměněných elektronů byla také použita coulometrie na rtuťovém dně, která potvrdila výsledky z CV.

Optimální podmínky a mechanismus zjištěných lineárních kalibračních závislostí jsou uvedeny v tabulce I.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR 62808 (projekty LC 06035 a MSM 0021620857) a GA UK (projekt 6107/2007/B-Ch/PrF).

LITERATURA

1. Barek J., Cvačka J., Muck A., Quaiserová V., Zima J.: *Electroanalysis* 13, 779 (2001).
2. Canterford D. R.: *J. Photogr. Sci.* 26, 65 (1978).
3. Rosenkranz H. S., Karol M. H.: *Mutat. Res.* 431, 81 (1999).

3P-18**STANOVENÍ NITROFENOLŮ POMOCÍ HPLC S ELEKTROCHEMICKOU DETEKČÍ NA BOREM DOPOVANÉ DIAMANTOVÉ FILMOVÉ ELEKTRODĚ****JANA MUSILOVÁ^a, JIŘÍ BAREK^a, PAVEL DRAŠAR^b a KAROLINA PECKOVÁ^a**

^a Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Hlavova 8, 128 43 Praha 2, ^b Vysoká škola chemicko-technologická, Fakulta potravinářské a biochemické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6
Jana.Musilova@seznam.cz

V posledních letech roste uplatnění borem dopovaného diamantového (BDD) filmu jako elektrodového materiálu. Mezi jeho výhodné vlastnosti patří mechanická i chemická stabilita, široké potenciálové okno, malá náchylnost k pasivaci, nízký zbytkový proud a nízká adsorpce látek na jeho povrchu¹. BDD filmové elektrody jsou vhodným elektrochemickým detektorem pro HPLC².

Zdrojem nitrofenolů v životním prostředí jsou produkty degradace pesticidů, zplodiny automobilů a průmyslové odpadní vody z výroby herbicidů, pesticidů, barviv a rozpouštědel. Podle US Environmental Protection Agency (US EPA) patří nitrofenoly mezi přední polutanty a je u nich prokázána či předpokládána karcinogenita a mutagenita³. Směs tří nitrofenolů (2-nitrofenol, 4-nitrofenol a 2,4-dinitrofenol) je v zemědělství používána jako stimulant růstu⁴. Nitrofenoly jsou vhodnými modelovými látkami při studiu nitrovaných výbušnin⁵.

Příspěvek se zabývá nalezením vhodných podmínek pro stanovení nitrofenolů pomocí HPLC s elektrochemickou detekcí na BDD elektrodě a jejich stanovením v porovnání se vsádkovými metodami.

Tato práce byla finančně podporována Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy (projekt LC 06035 a MSM 0021620857), grantem NATO (CBP.EAP.CLG.982972) a Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (GA UK 6107/2007/B-Ch/PrF).

LITERATURA

1. Cvačka J., Quaiserova V., Park J., Show Y., Muck A., Swain G. M.: *Anal. Chem.* 75, 2678 (2003).
2. Compton R. G., Foord J. S., Marken F.: *Electroanalysis* 15, 1349 (2003).
3. Jinadasa K., Mun C. H., Aziz M. A., Ng W. J.: *Water Sci. Technol.* 50, 119 (2004).
4. Kolektiv autorů SRS: List of the Registered Plant Protection Products, The State Phytosanitary Administration, Brno 2006.
5. Zaleska A., Hupka J.: *Waste Manage. Res.* 17, 220 (1999).

3P-19**MOŽNOSTI STANOVENIA ŤAŽKÝCH KOVŮ ROZLIČNÝMI VOLTAMPÉROMETRICKÝMI METÓDAMI****SILVIA ŠTEFÁNOVÁ a LUBOMÍR PIKNA**

*Katedra chémie, Hutnícka fakulta TU v Košiciach, Letná 9, 042 00 Košice, SR
silvia.stefanova@tuke.sk*

Ťažké kovy patria medzi základné skupiny znečisťujúcich látok, ktoré veľmi závažne poškodzujú ľudské zdravie a životné prostredie. Preto je potrebné stále vyvíjať rôzne analytické metódy na ich stanovenie s čo najnižšími hranicami detekcie.

Voltampérometrické techniky ako diferenčná pulzná voltampérometria, anodická alebo katodická stripping voltampérometria umožňujú presné a súčasné stanovenie prvkov v stopových množstvách. Diferenčnou pulznou voltampérometriou je možné pomerne jednoduché a citlivé súčasné stanovenie olova, kadmia a medi použitím octanového tlmivého roztoku¹.

Uhlíkové nanorúrky sa použili na modifikáciu rôznych konvenčných elektródových povrchov, z ktorých bola zatiaľ najviac opísaná elektróda zo sklovitého uhlíka².

Elektrody modifikované uhlíkovými nanorúrkami boli úspešne použité pri voltampérometrickom stanovení napr. Sudánu I – azofarbiva používaného v chilli alebo kari prášku³. Hranica detekcie bola po optimalizácii podmienok $2 \cdot 10^{-7}$ mol dm⁻³.

Modifikácia elektródy zo sklovitého uhlíka kompozitným materiálom Nafionu a uhlíkových nanorúrok bola použitá pri elektrochemickom stanovení Pb²⁺ vo vzorkách vody⁴.

Cieľom tejto práce je porovnanie možnosti stanovenia vybraných analytov klasickými voltampérometrickými metódami použitím ortuťovej kvapkovej elektródy a elektród modifikovaných uhlíkovými nanorúrkami.

Príspevok vznikol s podporou agentúry APVV- grant č. 20-009404 a grantovej úlohy VEGA 1/0459/08.

LITERATURA

1. Zehnálek J., Hanuštiak P., Petřek J., Potěšil D., Adam V., Havel L., Babula P., Kizek R.: *LCAŘ* 121, 142 (2005).
2. Wang J., Kawde A. N., Musameh M.: *Analyst* 128, 912 (2003).
3. Ming L., Xi X., Chen T. T., Liu J.: *Sensors* 8, 1890 (2008).
4. Xie X. F., Gan T., Sun D., Wu K. B.: *Fuller. Nanotub. Carbon Nanostruct.* 16, 103 (2008).

3P-20

MATRICOVÝ EFEKT FULLERÉNU A UHLÍKOVÝCH NANORÚROK V HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRII SEKUNDÁRNÝCH IÓNOV**MONIKA STUPAVSKÁ^a, MONIKA ARANYOSIOVÁ^{a,b}
a DUŠAN VELIČ^{a,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, SR
stupavska@fns.uniba.sk

Hmotnostná spektrometria sekundárných iónov (Secondary Ion Mass Spectrometry, SIMS) je metóda na analýzu chemického zloženia rôznych typov povrchov, s vysokou citlivosťou s hodnotou až do ppb¹.

Metóda SIMS je založená na bombardovaní povrchu vzorky iónmi s energiou 25 keV. Výsledkom je emisia atómov, molekúl a klastrov z povrchu. Pre SIMS analýzu sú dôležité ionizované častice – sekundárne ióny, ktoré sú analyzované na základe doby letu (Time of Flight, ToF). Množstvo sekundárných iónov, ktoré je vyrazené z povrchu – iónový výťažok, závisí na chemickom prostredí – matici. Tento matricový efekt predstavuje množstvo prekážok pri kvantifikácii SIMS analýz, ale vytvára aj možnosť zvyšovania iónových výťažkov prostredníctvom modifikácie chemického prostredia².

Výskum matricového efektu bol zameraný na aplikáciu a možné využitie vysoko stabilnej zlúčeniny fullerénu a uhlíkových nanorúrok, ako vrstiev efektívne transportujúcich energiu v procese tvorby kolíznej kaskády pri SIMS analýze vysokohmotnostného oligosacharidu β -cyklodextrínu. Pritomnosť vrstiev fullerénu zabezpečila pozitívnu modifikáciu chemického prostredia, došlo k výraznému zvýšeniu iónového výťažku analyzovaného β -cyklodextrínu, bolo pozorované aj značné zníženie fragmentácie emitovaných častíc. Teóriu funkčných vrstiev podporili aj merania SEM a AFM, kde sa potvrdilo štruktúrne usporiadanie molekúl na povrchu, čo je jeden z faktorov, ktoré zodpovedajú za spôsob transportu energie v bulku vzorky.

Moderné prístupy k riešeniu problémov matricového efektu v SIMS formou modifikácie chemického prostredia predstavujú nový pohľad na uplatnenie SIMS ako nového snímacieho nástroja, predovšetkým v oblasti biológie a medicíny, kde možno pozorovať vzrastajúci záujem o skúmanie priestorového usporiadania biomolekúl priamo na biologických tkanivách.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/2447/05, APVT-20-029804 a APVV-0491-07.

LITERATÚRA

1. Vickermann J., Briggs D.: *ToF – SIMS: Surface Analysis by Mass Spectrometry*. Charlesworth group, Huddersfield 2001.
2. Grade H., Cooks R. G.: *J. Am. Chem. Soc.* 100, 5615 (1978).

3P-21

TRLFS STUDY OF URANYL INTERACTION WITH HUMIC ACID**EVA HOMZOVÁ^a, JIŘÍ MIZERA^b, and ALEŠ VETEŠNÍK^c**

^a Department of Nuclear Chemistry Czech Technical University in Prague, Břehová 7, 115 19 Praha 1, ^b Nuclear Physics Institute, Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., AV ČR, 250 69 Řež u Prahy, ^c Radiochemistry and Radiation Chemistry Center Czech Technical University in Prague, Břehová 7, 115 19 Praha 1
homzova@jfi.cvut.cz

Study of uranyl speciation in the presence of humic acid (HA) by TRLFS has been based on extremely short fluorescence lifetime of uranyl-HA complex, which cannot be observed by ordinary TRLFS systems. This enables to determine the degree of complexation of U(VI) by the apparently nonluminescent ligand using the static quenching effect, i.e., formation of the UO₂-HA complex causes a decrease in the fluorescence emission signal without change in its lifetime^{1,2}.

Using TRLFS, U(VI) fluorescence in slightly acidic solution in the presence of HA Aldrich was measured in the dependence on uranium concentration. For the experiment evaluation, a calibration curve constructed from the dependence of UO₂²⁺ fluorescence intensity on its concentration in solution without HA was used similarly to Czerwinski et al.². The extent of interaction of U(VI) with HA was determined from the emission signal of uncomplexed UO₂²⁺ in the dependence on the total uranium concentration (10⁻⁶–10⁻⁵ mol l⁻¹) at a constant HA concentration (20 mg l⁻¹) and pH (3,2±0,15).

The system containing no other complexing agent besides HA is relatively simple. The only luminescent uranyl forms in the solution are OU₂²⁺ and products of its hydrolysis, restricted to UO₂ OH⁺ in the sufficiently acidic medium (pH<4). Evaluation of the uranyl fluorescence decay curves within pH range of about 1–4 revealed two species with significantly different lifetimes of 1.4 μ s (UO₂²⁺) and 66 μ s (UO₂OH⁺). Deconvolution of the fluorescence spectra provided as well two species with the emission bands at 471, 488, 509, 533, 559 nm (UO₂ OH⁺). Although UO₂ OH⁺ represent minor species in the slightly acidic solution, its intensive fluorescence is observed from pH>1, and at pH>3 represents a major component in the spectrum.

This research has been supported by MŠMT grant No. MSM 6840770020 and by RAWRA.

REFERENCES

1. Geipel G.: *Coord. Chem. Rev.* 250, 844 (2006).
2. Czerwinski K.R. et al., *Radiochim. Acta* 65, 111 (1994).

3P-22**STUDIUM SPECIACE EUROPIA S KYSELINOU GLYKOLOVOU METODOU TRLFS**

**JAN KRMELA^a, JAROSLAVA JEVÍKOVÁ^{a,b},
KATEŘINA ČUBOVÁ^a, ALEŠ VETEŠNÍK^{a,b}, KAREL
ŠTAMBERG^a a JAN JOHN^{a,b}**

^a Katedra jaderné chemie, ^b Centrum pro radiochemii a radi-
ační chemii, ^{a,b} ČVUT v Praze – FJFI, Břehová 7, 115 19
Praha 1

konankr@seznam.cz

Europium je často využíváno jako model štěpných produk-
tů ze skupiny lanthanoidů a zároveň minoritních aktinoidů
(Am, Cm). Kyselina glykolová je součástí moderních dekon-
taminačních roztoků a je rovněž navrhována jako komplexo-
tvorné činidlo při přepracování vyhořelého jaderného paliva.
Protože komplexy Eu s kyselinou glykolovou vykazují dobré
fluorescenční vlastnosti, byla pro jejich studium zvolena me-
toda TRLFS (Time-resolved Laser Fluorescence Spectroscopy).
Byly provedeny dvě série experimentů. V 1. sérii byla měřena
fluorescenční spektra komplexů v roztocích s různou koncent-
rací kyseliny glykolové, která se pohybovala v rozsahu od
0,01 do 0,5 mol l⁻¹, v prostředí 10⁻³ M Eu + 0,1 M NaClO₄
při pH 3. Ve druhé sérii byl studován vliv pH na tvorbu kom-
plexů v rozsahu pH 2–12 v prostředí 10⁻³ M Eu +
2 M NaClO₄ + 1 M kyselina glykolová. Byla zaznamenávána
fluorescenční spektra jednotlivých vzorků a doba fluorescence
vzniklých komplexů. Z naměřených dat byly stanoveny rov-
novážné konstanty stability komplexů a získané výsledky
byly porovnány s publikovanými údaji¹.

Tato práce vznikla za podpory grantu MSM 6840770020.

LITERATURA

1. Stumpf T., Franghanel T., Grenthe I.: J. Chem. Soc.,
Dalton Trans. 20, 3799 (2002).

3P-23**EVALUATION OF MESOPHASE PROPERTIES BY
MICROSCOPY, THERMAL ANALYSIS AND FT-IR
SPECTROSCOPY**

**VĚRA ŠUGÁRKOVÁ, EVA PLEVOVÁ a LENKA
VACULÍKOVÁ**

Ústav geoniky AV ČR, v.v.i., Studencká 1768, 708 00 Ostrava
plevova@ugn.cas.cz.

Currently, we understand coal to be also a source of
valuable carbochemical compounds. Some authors have sug-
gested the options of „a direct transformation“ of coal to some
suitable form of carbon. We can put forward investigations of
Prof Marsh, especially his publications¹, as well as his princi-
pal works. Another reason is represented by the fact that coal
tar, as an aromatic raw product, contains not only hydrocar-
bons but also a remarkable amount of oxygen, nitrogen, and
sulphurous compounds². It also contains substances produced
by processing of distillation fractions and tars. These are often

subject of thermal and atmosphere oxygen exposure; at which
point a kind of a polycondensation reaction of particular com-
pounds takes place. This represents another reason for the
investigation of transformation processes at tempering of tar
products³.

This project investigated effect of final temperature on
coal tar mesophase properties. A precursor coal tar pitch was
brought into a temperature range of 450–490 °C with heating
rate 0,7 °C min⁻¹ inside of aluminium calottes. Obtained
mesophase was investigated by microscopy, thermal analysis
and infrared spectroscopy.

Microscopy analysis indicated different rate in anisot-
ropy as well as different anisotropic texture occurrence. Ther-
mal analysis implied that best structure had appeared at sam-
ples with the highest temperatures of oxidation velocity. In-
frared spectra of more or less heated samples show apprecia-
ble differences in the CH stretching region. IR spectra of the
samples heated at lower temperature display more intensive
bands in the 3000–2800 cm⁻¹ region, where the CH stretching
vibrations of aliphatic hydrocarbons occur. In contrast, the
higher intensities of absorption bands at 3400–3000 cm⁻¹,
corresponding to C-H stretching vibrations of aromatic hydro-
carbons, were observed in IR spectra of samples heated at
higher temperature.

The resultant data from microscopy analysis, thermal
analysis and infrared spectroscopy well corresponded to-
gether. A more detailed evaluation including screening and
RTG analysis will be subject of further investigation.

This project has been supported by CEZ: AV0Z30860518.

REFERENCES

1. Marsh H., Rodriguez-Reinoso F.: *Science of Carbon
Materials*, 674 (2000).
2. Fernandez A. L., Lee T. Y., Reyes C., Prock A., Giering
W. P.: *Energy Fuels* 12, 949 (1998).
3. Mora E.: *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 68, 409 (2003).

3P-24**FT-IR SPECTROSCOPY – A USEFUL TOOL IN
STRUCTURAL ANALYSIS OF POLYSACCHARIDE
DERIVATIVES WITH DIFFERENT FUNCTIONAL
GROUPS**

**VLASTA SASINKOVÁ^a, ANNA MALOVÍKOVÁ^a,
ANNA EBRINGEROVÁ^a, ALŽBETA ČÍŽOVÁ^b,
ZDENKA HROMÁDKOVÁ^a, and IVA SROKOVÁ^b**

^a Institute of Chemistry, Center for Glycomics, Slovak Acad-
emy of Sciences, 845 38 Bratislava, ^b Faculty of Industrial
Technologies, Trenčín University of Alexander Dubček,
020 32 Púchov, Slovakia
chemsasi@savba.sk

Due to the increasing demand for polysaccharide materi-
als of new and/or improved functional properties, tailored
chemical modification has been the most investigated. FTIR
spectroscopy is a very useful tool for monitoring the modifi-
cation process. In the recent years it became of importance
also in direct quantification of various functional groups in

polysaccharides, such as of carboxyl, acetyl, acyl and amide groups^{1–4}. The techniques are usually based on calibration curves, constructed either with low molar mass standards containing the corresponding functional groups studied or by mixing of unmodified polysaccharide with well defined derivatives of the same polysaccharide. Calibration can be also achieved with the help of other techniques, such as chemical methods or the time-consuming NMR spectroscopy. Problems occur at very low degrees of substitution or in cases, when similar functional groups are native to the parent polysaccharide or different functional groups are simultaneously introduced.

The aim of the present study was to evaluate the applicability of FT-IR spectroscopy in characterization fatty acid esters of various polysaccharide types from the viewpoint of qualitative and semi-quantitative analysis. For this purposes, series of:

- (i) fatty acid derivatives of hydroxyethylcellulose (HEC) and carboxymethylstarch (CMS),
- (ii) octenyl succinates of CMS and
- (iii) C₄- and C₁₂-alkyl amides of citrus pectate and methoxylated citrus pectin (DE 89 and 60%) were characterized by changes in the regions of ester carbonyl, carboxylate, OH stretching, and amide vibrations, and the FT-IR results were discussed in terms of their mutual relations.

REFERENCES

1. Sinitsya A., Čopíková J., Prutyánov V., Skoblyá S., Machovič V.: *Carbohydr. Polym.* **42**, 359 (2000).
2. Malovíková A., Kohn R.: *Collect. Czech. Chem. Commun.* **48**, 3154 (1983).
3. Chatjigakis A. K., Pappas C., Proxenia N., Kalantzi O., Rodis P., Polissiou M.: *Carbohydr. Polym.* **37**, 395 (1998).
4. Pappas C. S., Malovíková A., Hromádková Z., Tarantilis P. A., Ebringerová A., Polissiou M. G.: *Carbohydr. Polym.* **56**, 465 (2004).

3P-25

TOTAL LUMINESCENCE SPECTRA OF LIGNITE HUMIC ACID AND SODIUM HUMATE

NADĚŽDA FASUROVÁ a **TOMÁŠ MLČOCH**

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry,
Purkyňova 118, 612 00 Brno
fasurova@fch.vutbr.cz*

Humic acids are known as compounds which bind heavy metals and besides fulvic acids as the next class of humic substances they can positively influence the quality of humus. The aim of present work was to investigate differences in fluorescence spectral characteristics between lignite humic substances.

Fluorescence spectroscopy (Total luminescence spectra = TLS, excitation spectra, emission spectra and synchronous fluorescence spectra = SFS) can be used for characterization of humic substances. These mixtures (humic acids = HA, fulvic acids = FA) contain aromatic moieties like phenolic groups, coumarins etc. Total luminescence spectra (1,2,3) can

be displayed in two ways: 3D spectra or contour plot diagrams.

Lignite humic acids were isolated from lignite (locality of Mikulčice, South Moravia of Czech Republic) by alkaline extraction. Lignite sodium humate (HU) was prepared from lignite humic acid solution by titration with HCl solution to pH 7, dialyzed and freeze-dried. Sample of humic acid was prepared by dissolving HA in 0,5 M-NaOH at pH 13 and sodium humate solution by dissolving HU in MilliQ water at pH 7. Concentration of the samples was 50 mg l⁻¹. Fluorescence measurements were done on spectrofluorimeter Aminco Bowman, Series2 at temperature 20 °C.

TLS spectra were corrected at 900 V. Range of excitation was set to 300–500 nm, 430–525 nm and for emission from 300 to 600 nm, 370–470. Slits of both monochromators were 4 nm. Step of scanning was set to 1 nm. Contour plots were generated using Origin 6.1. software.

Fluorescence spectra of lignite humic acid and sodium humate are different. TLS-contour plot of lignite HA exhibited three peaks at $\lambda_{ex}/\lambda_{em}$ =448/506, 395/490 nm, 355/458 nm. TLS of lignite humate contains three peaks at 450/504, 420/491 and 359/470 nm. From examining the peak positions we can tell that spectra of humate have higher relative intensity of fluorescence and third peak is shifted to the longer wavelength. In accordance with literature, fluorophores of lignite samples emit at wavelengths that Leonardite humic acid standard (IHSS).

This project was supported with help of GA ČR 103/05/D135.

REFERENCES

1. Alberts J. J., Takács M.: *Org. Geochem.* **35**, 243 (2004).
2. Sierra M. M. D., Giovanela M., Parlanti E., Soriano-Sierra E. J.: *Chemosphere* **58**, 715 (2005).
3. www.ihss.gatech.edu

3P-26

METHOD FOR SEPARATION, PRECONCENTRATION AND SPECTROPHOTOMETRIC DETERMINATION OF PLATINUM

JAROSLAV BAZEL^{a*}, **TAĀANA KULAKOVA^b**, **JAROSLAV STUDENYAK^b**, and **RASTISLAV SERBIN^a**

*^aP.J. Šafárik University in Košice, Faculty of Sciences, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovakia, ^bUzhorod National University, Faculty of Chemistry, Pidhirna 46, 880 00, Uzhorod, Ukraine
yaroslav.bazel@upjs.sk*

The specificity of extractive separation, preconcentration and spectrophotometric determination of platinum in the form of ion associate (IA) with thiocyanate ions and the basic polymethine dye Astra Phloxine FF from aqueous and aqueous-organic media was studied. An introduction of the water-soluble donor-active organic solution, DAS substantially increases the extraction of IA and suppresses simultaneously that of the ordinary dye salts. Toluene (amyl acetate) was used as extractant for further experiments due to its lower toxicity. The concentration of DAS necessary for reaction the

maximum extraction of IA reduced in the row of solvents: formamide-*N*-methylformamide-*N,N*-dimethylformamide-*N,N*-diethylformamide-*N,N*-diethylacetamide-hexamethylformamide. In the optimum condition of complexation and extraction the basic chemico-analytic characteristics of the coloured extracts were found. The molar absorptivities of the IA extracts are $(8.1-13.3) \cdot 10^4$.

Recovery of the extraction of platinum IA by aromatic hydrocarbons and esters of acetic acids is 84–96 % at the ratio of aqueous : organic phase (1–50) : 1. A new extractive-spectrophotometric method for the determination of micro amounts of platinum in the presence of various elements such as Cu, Ag, Pb, Pd, Ir, Rh, Ru was developed. The method optimized for the determination of platinum was applied to the drugs Cykloplatin.

This work has been supported by the Scientific Grant Agency VEGA (Project VEGA N 1/4450/07) and MVTs (Project Mad'/Ukr/SR/UPJŠ07) of the Ministry of Education Slovak Republic and Slovak Academy of Sciences.

3P-27 THE DEVELOPMENT OF NEW *IN VITRO* METHODS FOR EVALUATION OF SUNSCREEN'S UVA PROTECTION AND PHOTOSTABILITY

ANDREA MEDOVČÍKOVÁ*, JARMILA HOJEROVÁ, MILAN MIKULA, and MARTINA BOREKOVÁ

*Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia
medov.ann@gmail.com*

Although sunscreens with UVB filters have been for 60 years on the market, skin cancer is increasing at an alarming rate. Nowadays has been recognized a necessity to protect organism against UVA rays, because of the reactive oxygen species' are created which caused acute and chronic injury. The next important question is stability of UV filters, because of the possibility of photoprotection decrease. While *in vivo* measurement of the UVB protection (SPF – Sun Protection Factor) has been used for years, adequate methods for the assessment of the UVA protection and photostability should be standardised in the EU only. Preference should be given to *in vitro* methods as *in vivo* methods raise ethical concern. The aim of present study was an implementation of techniques *in vitro* UVA protection and photostability, because nowadays is neither verified in Slovakia. As models were tested 11 sunscreens from the European market with the same SPF 20. Evaluation were based on measurements of UV transmission through 2 mg cm^{-2} (as by *in vivo* COLIPA method) layer of sunscreens applied on UV-transparent substrate by UV/VIS Spectrophotometer 1601 Shimadzu and UV/VIS/IR Spectrophotometer 3600 with integrating sphere Shimadzu, Japan. UVA and UVB protection and critical wavelength were calculated. Photostability was investigated as UV transmission before and after exposure by solar simulator (xenon long-arc lamp, Applied Photophysics, UK). Each sample was exposed to 4200 J m^{-2} , so 20 Minimal Erythematol Doses (MEDs).

Although the same SPF 20 labelled, 3 sunscreens offered

no UVA protection, 6 insufficient UVA protection and 2 sunscreens offered good UVA protection, only.

An “ideal” sunscreen absorbs a constant part of the applied dose before exposition and after exposition. Sunscreen that is photounstable, absorbs a downward amount of UV dose when exposed to ultraviolet radiation. An absolutely photostable under exposition 20 MEDs were 3 sunscreens only, nearly photostable (90 %) were 3 sunscreens, 5 sunscreens were photounstable ($\leq 80 \%$).

The verified *in vitro* methods are suitable to predict of the sunscreen's UV protection and photostability. Determination of the critical wavelength provides an inexpensive and reliable way to measure of the broad-spectrum protection' size.

The research was realized as diploma thesis of Bc. Andrea Medovčíková with a support of the scientific grant agency of Slovak Republic under the project VEGA 1/0438/08, 1/0746/08 and 1/0815/08.

3P-28 SLEDOVÁNÍ FOTOCHEMICKÝCH ZMĚN FLUOROFORŮ V HUMINOVÝCH LÁTKÁCH POMOCÍ EEMS

DALIBOR KRÍŽ a ŠÁRKA KLEMENTOVÁ

*Přírodovědecká fakulta JU, Branišovská 31, 370 05 České Budějovice
Dalibor.Kriz@prf.jcu.cz*

Fluorescenční metoda vyhledání maxim $\lambda_{\text{ex}}/\lambda_{\text{em}}$, tj. excitační vlnové délky, při níž je emise maximální (Fluorimetr Shimadzu R 1501, programové vybavení Panorama Fluorescence 1.1) huminových látek izolovaných z vrchních půdních horizontů z oblasti Šumavy a ke sledování fotochemických přeměn huminových fluoroforů UV zářením (300–400 nm, reaktor Rayonet, lampy 3500 Å). Nalezené maximum $\lambda_{\text{ex}}/\lambda_{\text{em}} = 315/435 \text{ nm}$ odpovídá dvojici skupin „humic – like“ fluorescence podle klasifikace P. Coble¹. Při ozařování dochází ke snižování intenzity fluorescence (po 12 h ozařování pokles na 8 % původní intenzity). Stanovení organického uhlíku (analýzátor Shimadzu, TOC 5000A) prokázalo mineralizaci organické hmoty (po 24 h ozařování je 88 % organického uhlíku mineralizováno).

Přídavek Fe^{3+} iontů urychlil všechny pozorované změny ve fluorescenci. Přídavek iontů Al^{3+} vedl k vytvoření nového fluoroforu s $\lambda_{\text{ex}}/\lambda_{\text{em}} = 325/425$ s nižší intenzitou fluorescence, což je v rozporu s údajným zvyšováním fluorescence huminových látek po přídavku hlinitých iontů². Nový fluorofor je nestabilní vůči ozařování, po 4 h ozařování klesla intenzita fluorescence na 50 %, po 7 h ozařování vymizela úplně.

Dusičnany jakožto zdroje hydroxylových radikálů v přírodních vodách³ nevykazovaly žádný vliv na změny fluorescence huminových látek.

Tato práce vznikla za podpory projektu GA ČR 206/06/0410.

LITERATURA

1. Coble P. G.: Mar. Chem. 51, 325 (1996).

2. Sharpless C. M., McGown L.: Environ. Sci. Technol. 33, 3264 (1999).
3. Vaugham P., Blough N. V.: Environ. Sci. Technol. 32, 2947 (1998).

3P-29**CHEMOMETRICKÉ ŠTÚDIUM ANESTETICKEJ AKTIVITY ESTEROV ALKOXYFENYLKARBÁMOVÝCH KYSELÍN A ICH MOLEKULOVÝCH VLASTNOSTÍ****TATIANA ĎURČEKOVÁ^a, JÁN MOCÁK^{a,b}, JOZEF LEHOTAY^{a,b} a JOZEF ČIZMÁRIK^c**

^a Katedra chémie, Univerzita sv. Cyrila a Metoda, J. Herdu 2, Trnava, 917 01, ^b Ústav analytickej chémie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ^c Katedra farmaceutickej chémie, Univerzita Komenského, Odbojárov 10, 832 32 Bratislava, SR
tatiana.durcekova@ucm.sk

Predmetom štúdia bola anestetická aktivita morfolinoetyl-, piperidinoetyl-, piperidinopropyl- a azepanoetyl- esterov alkoxyfenylkarbámovej kyseliny. Vzájomné súvislosti vlastností a štruktúry boli študované chemometrickými technikami. Povrchová anestetická aktivita, $\log A$, a infiltračná anestetická aktivita, $\log B$, boli korelované s lipofilitou, vyjadrenou logaritmom HPLC retenčného faktora, $\log k$, dĺžkou postranného alkoxy reťazca, danou počtom uhlíkových atómov n a mólovou hmotnosťou M . Oba typy anestetické aktivity spomínaných zlúčenín boli korelované s chemickými posunmi ^1H NMR a ^{13}C NMR spektra. Spolu päť ^1H NMR chemických posunov a deväť ^{13}C NMR chemických posunov bolo simulovaných pomocou softvérového balíka ACD Labs, ver. 7.0. Niektoré z posunov významne korelovali s $\log A$ a/alebo s $\log B$. Bola zistená významná závislosť $\log A$ a $\log B$ s $\log k$ a hlavne s δCH_3 (^1H NMR posun metylovej skupiny). Významné boli tiež nasledovné závislosti: $\log A - n$, $\log A - M$, $\log B - \delta\text{NH}$, kde δNH je ^1H chemický posun protónu esterovej NH skupiny. Výsledky klastrovej analýzy potvrdili, že anestetická aktivita $\log A$ závisí hlavne od počtu uhlíkov postranného alkoxy reťazca n , potom od M a od $\log k$. Klastrovou analýzou sa zistila podobná, ale slabšia korelácia aj pre $\log B$. Medzi NMR posunmi bola zistená významná korelácia medzi δCH_3 a $\log A$ ako aj $\log B$. Analýza hlavných komponentov a hlavne discriminačná analýza boli použité na predikciu obidvoch typov anestetické aktivity esterov alkoxyfenylkarbámovej kyseliny.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/3584/06 a APVV - 0057-06.

LITERATÚRA

1. Hatrík Š., Lehotay J., Čizmárik J.: Collect. Czech. Chem. Commun. 60, 1410 (1995).
2. Hatrík Š., Lehotay J., Čizmárik J.: Collect. Czech. Chem. Commun. 60, 960 (1995).

3P-30**EXTRAKCE MAGNETICKOU TUHOU FÁZÍ****MICHAELA ELCNEROVÁ^a, KAREL KOMÁREK^a, MIRKA ŠAFAŘIKOVÁ^b a IVO ŠAFAŘÍK^{b,c}**

^a Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legii 565, 532 10 Pardubice, ^b Oddělení biomagnetických technik, Institut systémové biologie a ekologie AV ČR, Na Sádkách 7, 370 05 České Budějovice, ^c Katedra obecné biologie, Fakulta biologických věd, Jihočeská univerzita, Branišovská 31, 370 05 České Budějovice
M.Elcnerova@seznam.cz

Extrakce magnetickou tuhou fází (MSPE) je metodou vsádkové prekoncentrace stanovených analytů např. xenobiotik a biologicky aktivních látek, organických látek z vodných vzorků a i ze vzorků z klinické praxe. Výhodou MSPE je možnost provést extrakční kroky velmi jednoduše, bez potřeby drahého vybavení. Prekoncentraci cílových analytů je možné provádět nejen z čirých vodných vzorků, ale i ze vzorků obsahující suspendované částice¹.

Při extrakci magnetickou tuhou fází se cílový analyt zpravidla sorbuje na magneticky modifikovaný sorbent, z něhož je v dalším kroku eluován rozpouštědlem. Potom je eluát analyzován různými instrumentálními technikami.

Pro separace v magnetickém poli je potřebné základní vybavení, především vhodně zvolený magnetický sorbent a vhodný magnetický separátor.

MSPE se uplatňuje v mikrobiologii, lékařství, biochemii a v ekologii¹. Pomocí MSPE byly analyzovány ve vzorcích kontaminovaných vod organická barviva, neionické tenzidy^{2,3}, letecký petrolej, nafta⁴ a MEŘO⁵.

Tato práce vznikla za podpory grantu FRVŠ ČR 879/2008.

LITERATURA

1. Šafaříková M., Šafařík I.: Chemické listy 89, 280 (1995).
2. Šafaříková M., Kibriková I., Ptáčková L., Hubka T., Komárek K., Šafařík I.: J. Magn. Magn. Mat. 293, 377 (2005).
3. Šafaříková M., Luňáčková P., Komárek K., Hubka T., Šafařík I.: J. Magn. Magn. Mat. 311, 405 (2007).
4. Komárek K., Šafaříková M., Šafařík I., Kandelová M.: Chem. listy 100, 711 (2006).
5. Elcnerová M., Komárek K., Opatrná L., Kandelová M., Šafaříková M., Šafařík I.: Sborník 2. konference HYDROANALYTIKA 2007, VŠCHT Praha, 2007, str. 165.

3P-31 SORPCE ALKYLAMONIOVÝCH KATIONTŮ NA MONTMORILLONIT

**LENKA VACULÍKOVÁ^a, ZUZANA NAVRÁTILOVÁ^b,
PAVLA KRAJANCOVÁ^b, VĚRA ŠUGÁRKOVÁ^a a EVA
PLEVOVÁ^a**

^a Ústav geoniky AV ČR, v.v.i., Studencká 1768, 708 00 Ostrava,
^b Ostravská univerzita v Ostravě, Dvořákova 7, 708 00
Ostrava 1
vaculikova@ugn.cas.cz

Sorpce alkylamoniových solí – hexadecyltrimethylamonium (HDTMA) bromidu a benzyldimethylhexadecylamonium (BDHDA) chloridu byla studována na různých typech montmorillonitu. Byly použity standardy montmorillonitů Společnosti pro jílové minerály, USA: MMT(SWy-2) (naleziště Crook County, USA, velikost částic pod 10 μm), MMT(SAz-1) (naleziště Apach County, USA, velikost částic pod 5 μm) a dále MMT(JP) (oblast Jelšového Potoka (Slovensko) s velikostí částic pod 1 μm). Sorpce byla prováděna vsádkovou technikou z vodných roztoků o různé koncentraci alkylamoniových kationtů za podmínek, které byly již dříve odzkoušeny¹. V oblasti nízkých koncentrací se sorpce benzyldimethylamonium chloridu řídila sorpční izotermou Freundlichova typu². Infračervená spektroskopie potvrdila přítomnost alkylamoniových kationtů v modifikovaných montmorillonitech. S rostoucí koncentrací kationtu použitého k sorpci (příp. alkylamoniového kationtu) se současně zvyšovala intenzita a plocha absorpčních pásů 2928 a 2855 cm^{-1} odpovídajících valenčním vibracím C-H vazeb. Rtg difrakce potvrdila interkalaci alkylamoniového kationtu pouze při vyšších koncentracích alkylamoniového kationtu. V případě MMT(SAz-1) nedošlo po provedení sorpce ke zvýšení hodnoty $d(001)$ až do koncentrací 2,6 mmol l^{-1} . Pokud byla koncentrace vyšší (např. 0,1 mol l^{-1}), došlo ke zvětšení mezivrstevné vzdálenosti ve struktuře MMT. Charakter DTA křivek vzorků montmorillonitu modifikovaných HDTMA i BDHDA se nijak výrazně nezměnil ve srovnání s původním minerálem. Došlo pouze k mírnému posunu teplot jednotlivých píků v závislosti na koncentraci přidaného alkylamoniového kationtu. S rostoucí koncentrací obou kationtů došlo k mírnému snížení teploty příslušející ztrátě sorbované vody a ke zvýšení teploty příslušející destrukci mřížky montmorillonitu. Sorpce alkylamoniových kationtů na montmorillonity je značně závislá na koncentraci sorpčních roztoků, k interkalaci kationtů dochází až při vyšších koncentracích. Termická charakteristika připravených modifikovaných montmorillonitů je rovněž závislá na koncentraci sorbovaného kationtu.

Tato práce vznikla za podpory CEZ: AV0Z30860518.

LITERATURA

1. Navrátilová Z., Wojtowicz P., Vaculíková L., Šugárková V.: Acta Geodyn. Geomater. 4/3, 59 (2007).
2. Krajancová P.: *Bakalářská práce*. Ostravská Univerzita v Ostravě, Ostrava 2008.

3P-32 ELEKTROKINETICKÁ DEKONTAMINACE ZEMINY

**KAMILA ŠTASTNÁ^{a,b}, MOJMÍR NĚMEC^{a,b},
JAN JOHN^{a,b} a DANIEL KOBLIHA^b**

^a Centrum pro radiochemii a radiační chemii, ^b Katedra jaderné chemie, ^{a,b} ČVUT v Praze - FJFI, Břehová 7, 115 19 Praha 1
kamila.stastna@fffi.cvut.cz

Elektrokinetická dekontaminace využívá působení elektrického pole k odstranění radionuklidů, těžkých kovů, případně některých organických sloučenin z půdy. Vložením elektrického potenciálu na elektrody umístěné v půdě dochází k pohybu iontů kontaminantu směrem k elektrodám opačného náboje. Zároveň dochází k elektrolyze vody a tím změnám pH, které výrazně ovlivňují průběh dekontaminačního procesu. Zatímco vznik vodíkových iontů na anodě a jejich pohyb směrem ke katodě mohou napomáhat uvolnění kontaminantu z půdy, produkce hydroxidových aniontů na katodě a jejich pohyb k anodě mohou způsobit vysrážení kontaminantu v půdě a tím znemožnit jeho odstranění.

Změny pH v půdě a okolí elektrod vlivem elektrického napětí byly sledovány na nekontaminované půdě s použitím acidobazických indikátorů. Účinnost odstraňování kontaminantu byla demonstrována na půdě uměle kontaminované mědi za použití vody nebo roztoku kyseliny octové jako katolytu. Formy mědi deponované na katodě byly charakterizovány RTG difrakční analýzou. Použitelnost metody bude dále testována pro dekontaminaci půdy znečištěné radioaktivním cesiem.

Tato práce vznikla za podpory grantu MPO FI-IM4/176.

LITERATURA

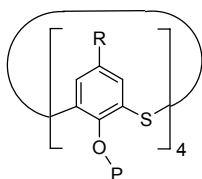
1. Acar Y. B., Gale R. J., Alshawabkeh A. N., Marks R. E., Puppala S., Bricka M., Parker R.: J. Hazard. Mater. 40, 117 (1995).
2. Lageman R., Clarke R. L., Pool W.: Eng. Geol. 77, 191 (2005).

3P-33 STUDIUM EXTRAKČNÍCH VLASTNOSTÍ THIACALIX[4]ARENŮ

**IRENA ŠPENDLÍKOVÁ^a, JAN JOHN^{a,b},
JAN KROUPA^c, PAVEL LHOTÁK^c a VÁCLAV ČUBA^{a,b}**

^a Katedra jaderné chemie, ^b Centrum pro radiochemii a radiační chemii, ^{a,b} ČVUT v Praze – FJFI, Břehová 7, 115 19 Praha 1, ^c VŠCHT Praha, Ústav organické chemie, Technická 5, 166 28 Praha 6
spendire@fffi.cvut.cz

Jedním z hlavních současných cílů výzkumů zaměřených na přepracování vyhořelého jaderného paliva popř. vysokoaktivního odpadu je vývoj optimálního činidla pro extrakci aktinoidů a lanthanoidů z kyselých nitrátových roztoků a pro jejich vzájemnou separaci. Mezi studovaná extrakční činidla patří i thiocalixareny¹. Cílem této práce bylo prostudovat ex-



Obr. 1. Struktura thiacalix[n]arenu

trakční vlastnosti sady derivátů základního thiacalix[4]arenu (obr. 1) obsahující konformery látek s $R = -C(CH_3)_3$ nebo $-CH_2SCOCH_3$ a $P = -H, -CH_2COOEt, -CH_2COOH, -(CH_2)_3PO(OEt)_2$ nebo $-(CH_2)_2CH_3$, v některých případech byla skupina $=S$ oxidována na $=SO$, případně až $=SO_2$.

Pro testování extrakčních vlastností byly prováděny kapalinové extrakce, případně kapalinová extrakční chromatografie. Bylo studováno rozdělení Eu a Am mezi roztoky samotných thiacalixarenů, případně jejich synergických směsí s cosany a chloro-, resp. bromocosany, v nitrobenzenu a vodnou fází v rozsahu od pH 6 až do 3 M HNO_3 . Kromě hodnot rozdělovacích poměrů D , resp. hmotnostních rozdělovacích koeficientů D_g , pro europium a americium byly sledovány také hodnoty jejich vzájemného separačního faktoru.

Získané výsledky ukázaly, že samotné thiacalixareny neposkytují příliš vysoké hodnoty D , resp. D_g . Perspektivnějšími se ukázaly studované synergické směsi.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 104-07-1242.

LITERATURA

1. Lhoták P.: Eur. J. Org. Chem. 8, 1675 (2004).

3P-34

ÚLOHA BIOMEMBRÁN V PŘÍJMU TĚŽKÝCH KOVŮ ROSTLINAMI

TOMÁŠ NAVRÁTIL^{a,*}, JANA JAKLOVÁ DYTRTOVÁ^b, MICHAL JAKL^b a IVANA ŠESTÁKOVÁ^a

^a Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AVČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, ^b Katedra agroenvironmentální chemie a výživy rostlin, Fakulta agrobiologie, potravinových a přírodních zdrojů, Česká zemědělská univerzita v Praze, Kamýcká 129, 165 21 Praha 6
Tomas.Navratil@jh-inst.cas.cz

Biomembrány jsou vytvořeny podle principu lehce rozpustných tekutých krystalů a struktura těchto membrán je často vysvětlována jako fluidní mozaikový model, složený z lipidů a proteinů¹. Lipidy jsou uspořádány do dvojvrstvy a bílkoviny jsou do této dvojvrstvy inkorporovány.

Studiu biomembrán předchází studium lipidových monovrstev (např.²⁻⁴) a následně umělé vytváření fosfolipidových dvojvrstev na špičkách mikropipety⁵.

Znalost mechanismů transportu živin, exudátů ale

i toxických látek přes biomembrány je zásadní v pochopení mechanismů příjmu a uvolňování těchto látek do životního prostředí. Zejména studium mechanismů příjmu těžkých kovů přes rostlinné membrány je zásadní v posouzení vlivu kontaminace životního prostředí na jednotlivé organismy.

Je známo, že rostliny do svého bezprostředního okolí (rhizosféry) uvolňují látky, které svou povahou buď blokují příjem těžkých kovů⁶, nebo naopak (u hyperakumulujících rostlin⁷) těžké kovy rostlinám zpřístupňují.

Ionty mohou být přes biomembránu transportovány především iontovými kanály na základě změny potenciálu membrány v daném místě⁸ nebo pravděpodobně ve formě komplexu. Přenos komplexů těžkých kovů přes biomembránu dosud nebyl prokázán, ale některé studie jej nevyklučují⁹.

Autoři děkují za finanční podporu grantů GA AV (č. IAA 400400806) a GA ČR (č. 521/06/0496, č. 203/07/1195).

LITERATURA

1. Murray R. K., Granner K. D., Mayes P. A., Rodwell J. W.: Harperova Biochemie. 23 ed., H&H, Jirčany 2002.
2. Marecek V., Janchenova H., Brezina M., Betti M.: Anal. Chim. Acta 244, 15 (1991).
3. Janchenova H., Stulik K., Marecek V.: J. Electroanal. Chem. 604, 109 (2007).
4. Janchenova H., Stulik K., Marecek V.: J. Electroanal. Chem. 591, 41 (2006).
5. <http://alma.karlov.mff.cuni.cz/bcm094/Biomembrany-amembr-transport.pdf>, staženo 14.4.2008.
6. Jones D. L., Dennis P. G., Owen A. G., van Hees P. A. W.: Plant Soil 248, 31 (2003).
7. Pollard A. J., Powell K. D., Harper F. A., Smith J. A. C.: Crit. Rev. Plant Sci. 21, 539 (2002).
8. Dunlop J.: J. Exp. Bot. 25, 1 (1974).
9. Jaklova Dytrtova J.: Ph.D. Thesis, Czech University of Life Sciences Prague, Prague, 2008.

3P-35

STANOVENIE GLYKOVANÉHO HEMOGLOBÍNU – VÝBER VHODNEJ ANALYTICKEJ METÓDY

VIERA MRÁZOVÁ^a, JÁN MOCÁK^a, PAVEL BLAŽÍČEK^b a IVETA JAKUBCOVÁ^a

^a Katedra chémie, Fakulta prírodných vied UCM, Nám. J. Herdu 2, 917 01 Trnava, ^b Oddelenie klinických laboratórií, Nemocnica Ministerstva obrany, Cesta na Červený most 1, 833 31 Bratislava, SR
viera.mrazova@ucm.sk

Cieľom tejto práce je správne štatistické porovnanie laboratórných metód pomocou regresie, čo sa využilo na stanovenie glykovaného hemoglobínu. V klinických laboratóriách sa na jeho stanovenie používa imunoturbidimetrická metóda (IT), ako aj novšia metóda nízkotlakovej kvapalinovej chromatografie (TPLC). Obidve metódy sa v klinickej praxi vykonávajú automatickými analyzátormi. Pre kompatibilitu výsledkov obidvoch metód je dôležité zistiť, či sú štatisticky zhodné alebo rozdielne. Použitie obvyklého spôsobu regresnej

analýzy principiálne nie je vhodné, pretože v tomto prípade obidve regresné premenné sú zaťažené náhodnými chybami.

Glykovaný hemoglobín (HbA_{1c}) je frekventovane využívaným dlhodobým ukazovateľom koncentrácie glukózy v organizme, keďže jeho hodnoty vyjadrujú stav za obdobie 6–8 týždňov. Jeho stanovenie je dôležité pri diagnostike trvalej hyperglykémie, pri priebežnej kontrole liečby diabetes mellitus (cukrovky) a porovnávaní rôznych liečebných postupov¹. Pre svoju dôležitosť v diabetologickej praxi sa analýza HbA_{1c} vykonáva viacerými metódami, ktoré stanovujú rôzne subtypy HbA_{1c} (cit.^{2,3}).

Vykonané podrobné štúdium porovnania dvoch laboratórných metód stanovenia glykovaného hemoglobínu svedčí o tom, že laboratórna metóda TPLC je jednoznačne výhodnejšia, než metóda IT, pretože poskytuje signifikantne presnejšie výsledky, o čom svedčia výsledky F-testu. Aj zhodnosť výsledkov porovnania metódy TPLC s referenčným materiálom je výrazne lepšia, než v prípade laboratórnej metódy IT. Pri skúmaní výsledkov laboratórných metód IT a TPLC pomocou pokročilých regresných techník sa zistil ich nesúhlas pre nulovú hodnotu priesečníka regresnej čiary so zvislou osou. Jednoznačné potvrdenie uvedenej chyby úseku poskytuje aj graf odchýlok (diagram Blanda-Altmana).

LITERATÚRA

1. Roszyk L., Faye B., Sapin V., Somda F., Tauveron I.: *Ann. Endocrinol.* 68, 357 (2007).
2. Fleming J. K.: *Clin. Biochem.* 40, 822 (2007).
3. Schnedl W. J., Lahousen T., Wallner S. J., Krause R., Lipp R. W.: *Clin. Biochem.* 38, 88 (2005).

3P-36

UPLC-MS/MS METODA PRO ANALÝZU FENOLICKÝCH KYSELIN

JIŘÍ GRUZ, ONDŘEJ NOVÁK a MIROSLAV STRNAD

*Laboratoř růstových regulátorů, ÚEB AVČR & UP Olomouc, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc
jiri_gruz@centrum.cz*

Fenolické kyseliny (FK) jsou sekundární metabolity rostlin, strukturně odvozené od kyselin benzoové a skořicové. Běžně se vyskytují ve formě esterů, glykosidů a vázané v buněčné stěně. Často nejsou konečným produktem sekundárního metabolismu, ale meziprodukty ze kterých jsou dále syntetizovány složitější metabolity jako flavonoidy, kumariny, lignany a taniny. Velký zájem o studium FK je spojen převážně s jejich profylaktickým a chemoprotektivním působením na lidský organismus.

Nezbytnou podmínkou pro studium FK je jejich správná a rychlá kvantifikace. Konvenční přístupy využívají spojení vysokoúčinné kapalinové chromatografie s UV nebo hmotnostní detekcí. Tyto postupy však vyžadují složitou prekoncentraci vzorku, která vede k částečné nebo úplné degradaci analytů. FK a jejich deriváty jsou totiž snadno oxidovány enzymatickou i neenzymatickou cestou. Této oxidaci lze sice zabránit přidávkou vhodných antioxidantů, ale důsledkem jsou nežádoucí interference, redukce oxidovaných forem a nadhodnocení množství fenolických látek ve vzorku.

Proto byla vyvinuta validovaná UPLC-MS/MS metoda, která umožňuje analýzu surových extraktů a eliminuje tak většinu prekoncentračních kroků, které jsou hlavním zdrojem degradačních reakcí. Tato metoda umožňuje současnou kvantifikaci sedmnácti FK pomocí interních izotopově značených standardů kyselin [2,3,5,6-²H₄] *p*-hydroxybenzoové a [3,4,5,6-²H₄] salicylové. Identifikace i kvantifikace využívá vysoce selektivního MRM (Multiple Reaction Monitoring) módu. Doba jedné analýzy je oproti konvenční kapalinové chromatografii cca šestinásobně kratší. UPLC-MS/MS metoda byla aplikována při analýze zeleného čaje, grepového džusu a bílého vína. V analyzovaných nápojích bylo stanoven celkem dvanáct FK v koncentracích od 40,8 do 9046 μg L⁻¹.

Tato práce vznikla za podpory grantu KAN 200380801 a MŠM 6198959216.

3P-37

POROVNANIE ELEKTROD POUŽITÝCH NA STANOVENIE DUSIČNANOV VO VODÁCH METÓDOU TENKOVRSSTVOVEJ COULOMETRICKEJ TITRÁCIE

STANISLAVA HLÚBIKOVÁ, ZUZANA HANKOVÁ a ERNEST BEINROHR

*Ústav analytickej chémie, Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, SR
stanislava.hlubikova@stuba.sk*

Metóda tenkovrstvovej coulometrickej titrácie sa ukázala ako vhodná metóda na stanovenie dusičnanov vo vodách. Princíp metódy spočíva v elektrochemickej redukcii dusičnanov na amóniové ióny na povrchu elektrochemicky upravenej medenej elektródy. Výhodou metódy je rýchlosť, jednoduchá úprava vzoriek a možnosť priamo analyzovať zafarbené a zakalené roztoky. Na stanovenie sme použili pracovné elektródy s označením E-CA/Cu (zapuzdrená elektróda s tenkou vrstvou roztoku) a E 53/Cu (mikropórovitá elektróda). Hlavné validačné parametre pre pracovnú elektródu E-CA/Cu sú nasledovné: detekčný limit 0,7 mg dm⁻³, medza stanoviteľnosti 2,09 mg dm⁻³, opakovateľnosť 1,66 %, reprodukovateľnosť 6,47 %, lineárny rozsah 2,09 až 50 mg dm⁻³. validačné parametre pre elektródu E 53/Cu sú: detekčný limit 0,04 μg dm⁻³, medza stanoviteľnosti 0,13 μg dm⁻³, opakovateľnosť 2,4 %, reprodukovateľnosť 2,5 %, lineárny rozsah 0,13 až 200 mg dm⁻³. Ako rušivé látky sa prejavili hlavne ióny chloridov, humínové látky, z povrchovo aktívnych látok to bol hyamín. Správnosť výsledkov sa potvrdila analýzou reálnych vzoriek a porovnaním výsledkov s hodnotami získanými fotometrickým stanovením.

Práca bola financovaná grantovou agentúrou VEGA (projekt č. 1/0500/08) a APVV(č. projektu APVV-0057-06).

4P-01

ANTIOXIDAČNÉ VLASTNOSTI NIEKTORÝCH ANA-
LÓGOV RESVERATROLUFRANTIŠEK ŠERŠEŇ^a, MARTIN WALKO^b a DUŠAN
LOOS^c^a Chemický ústav, ^c Katedra organickej chémie, Prírodovedec-
ká fakulta, Univerzita Komenského, 842 15 Bratislava,^b Katedra organickej chémie, Ústav chemických vied, Príro-
dovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, 041 54
Košice, SR
sersen@fns.unba.sk

Resveratrol (*trans*-3,5,4'-trihydroxystilben), (**I**) je fy-
toalexin, ktorý produkujú viaceré rastliny (napr. hrozno, euka-
liptus, smrek, Falia, moruša, arašidy a pod.). Najväčší obsah
resveratrolu sa našiel v šupkách červeného vína. Je známe, že
resveratrol má antikancerogénne, antivirálné, antioxidantné
vlastnosti, predlžuje život, má priaznivý vplyv na pečeň
a srdcovo-cievny systém^{1,2}. Preto je zaujímavé a možno aj
užitočné, syntetizovať analógy resveratrolu a skúmať ich
fyzikálno-chemické a biologické vlastnosti. Cieľom tejto
práce je zistiť antioxidantnú aktivitu diimínov: (4,4'-bis(2-
hydroxybenzylidenamino)difenylmetan (**II**), 4,4'-bis(2,4-
dihydroxybenzylidenamino)difenylmetan (**III**), 4,4'-bis(2,5-
dihydroxybenzylidenamino)difenylmetan (**IV**), 4,4'-bis(2,4-
dihydroxybenzylidenamino)difenyleter (**V**) a 4,4'-bis(2,5-
dihydroxybenzylidenamino)difenyleter (**VI**)), ktorých štruk-
túra je podobná štruktúre resveratrolu.

Látky boli pripravené podľa práce³. Antioxidantná aktivi-
ta bola otestovaná schopnosťou pripravených látok vychytávať
DPPH radikály. Test sa robil v metanolovom roztoku
DPPH (10⁻⁴ mol dm⁻³) meraním absorpcie pri 517 nm.
Antioxidantná účinnosť bola vyhodnotená pomocou hodnôt
SC₅₀, t.j. koncentrácie študovanej látky, ktorá spôsobí 50 %
pokles absorpcie pri 517 nm. Účinnosť vychytávania DPPH
radikálov študovanými látkami je prezentovaná v tabuľke I.

Tabuľka I

SC₅₀ hodnoty vychytávania DPPH radikálov

Látka	I	II	III
SC ₅₀ [μmol dm ⁻³]	26,37	neúčinná	neúčinná.
Látka	IV	V	VI
SC ₅₀ [μmol dm ⁻³]	4,11	neúčinná	1,43

Z tabuľky je zrejmé, že deriváty s hydroxy skupinami
v polohách 2 a 5 vychytávajú DPPH radikály 6 až 18-krát
účinnejšie ako resveratrol. Na druhej strane deriváty
s hydroxy skupinami v polohách 2 a 4 vôbec nevychytávajú
DPPH radikály.

Práca bola podporovaná grantom MŠ SR VEGA č. 1/3411/06.

LITERATÚRA

1. Celotti, E. Ferrarini R., Zironib R., Lanfranco S., Conteb
L. S.: J. Chromatog., A 730, 47 (1996).
2. Soleas G. J., Diamandis E. P., Goldberg D. M.: Clinic.

Biochem. 30, 91 (1997).

3. Walko M., Víglašký V.: ChemZi 3/1, 213 (2007).

4P-02

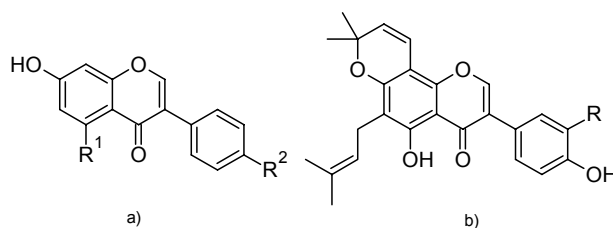
STANOVENÍ ISOFLAVONOIDŮ IMUNOAFINITNÍ
CHROMATOGRÁFÍ A HPLC-MS V ROSTLINNÉM
MATERIÁLU

ELENA A. PROKUDINA a OLDŘICH LAPČÍK

Fakulta potravinářské a biochemické technologie, VŠCHT
Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
elena.prokudina@vscht.cz

Isoflavonoidy jsou sekundární metabolity rostlin zajima-
vé z hlediska svých biologických účinků. Nejvýznamnějším
zdrojem isoflavonoidů jsou bobovité rostliny (Leguminosae),
ale jejich přítomnost byla zjištěna v řadě dalších taxonů^{1,2}.
Mimo čeledi Leguminosae jsou zastoupeny v nižších koncent-
racích, což klade vyšší nároky na analytické metody použité
při jejich detekci a identifikaci. Pro zakonzentrování
a přečištění rostlinných extraktů před analýzou pomocí
HPLC-MS navrženo použití imunoafinitní chromatografie
(IAC).

Imunosorbenty byly připraveny imobilizací Ig frakci
polyklonálních králíčích protilátek proti vybraným isoflavo-
noidům (biochanin A, genistein, daidzein) na nosič Affi-Gel
10 (Bio-Rad laboratories)³. Byly stanoveny charakteristiky
imunosorbentů: kapacita (od 0,01 do 0,2 mg analytu na ml
sorbentu), výtěžek (recovery) a zjištěny optimální podmínky
eluce a vyvinut postup IAC. Vzorky přečištěné IAC byly
analyzovány pomocí HPLC-MS (Agilent Technologies) nebo
HPLC-DAD (Shimadzu). Jako modelová rostlina byla použita
pomerančovka jablkokvětá (*Maclura pomifera*, Moraceae),
známá obsahem prenylovaných derivátů genisteinu, jako jsou
pomiferin a osajin (obr. 1).

Obr. 1. a) R¹=OH, R²= OH genistein; R¹=H, R²=OH daidzein;
R¹=OH, R²=OCH₃ biochanin A; b) R=H osajin; R=OH pomiferin

Metoda byla dále použita ke stanovení isoflavonoidů ve
vybraných rostlinách čeledi Cannabaceae (*Cannabis sativa*
a *Humulus lupulus*) a Lamiaceae (*Scutellaria baicalensis*).

Práce vznikla za podpory projektů 525/06/0864 GA ČR
a MSM 6046137305.

LITERATURA

1. Macková Z., Koblovská R., Lapčík: Phytochemistry 67,
849 (2006).

2. Reynaud J., Guilet D., Terreux R., Lussignol M., Walchshofer N.: *Nat. Prod. Rep.* 67, 849 (2005).
3. Vanková R., Gaudinová A., Sussenbeková H., Dobrev P., Strnad M., Holík J., Lenfeld J.: *J. Chromatogr., A* 811, 77 (1998).

4P-03**VYHLEDÁVÁNÍ NOVÝCH LÁTEK S POTENCIÁLNÍM TERAPEUTICKÝM ÚČINKEM PRODUKOVANÝCH STREPTOMYCETAMI****MICHAL JÁGR^a, MIROSLAV PETŘÍČEK^a a VÁCLAV KRIŠTŮFEK^b**

^a *Mikrobiologický ústav AV ČR v. v. i., Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4,* ^b *Ústav půdní biologie AV ČR v. v. i., Na Sádkách 7, 370 05 České Budějovice*
 michaljagr@centrum.cz

Mikroorganismy rodu *Streptomyces* patří mezi volně žijící grampozitivní heterotrofní bakterie, které jsou významné z lékařského hlediska právě produkcí sekundárních metabolitů – antibiotik¹. Tyto organismy produkují až přes 60 % známých antibiotik. U dalších látek byly popsány insekticidní, herbicidní či antimykotické účinky². Vzhledem k vzrůstajícímu množství rezistentních patologických organismů je studium antimikrobiálních látek zaměřeno na získávání nových a účinnějších derivátů. Do intenzivně studované skupiny látek patří manumycinová antibiotika, na které byla v poslední době zaměřena pozornost díky zjištění jejich protizánětlivých a protirakovinných účinků^{3,4}.

V tomto projektu byly z vhodných půdních lokalit izolovány tři dosud neznámé kmeny streptomycet, které byly otestovány na přítomnost genového shluku nezbytného pro produkci manumycinů. Tyto kmeny (*Streptomyces* sp. 12/5, 12/13 a SOK 69) byly kultivovány v GYM médiu při 28 °C. Po 72 hodinách bylo mycelium odděleno centrifugací a supernatant byl nasycen NaCl a extrahován ethylacetátem. Mycelium bylo extrahováno acetonem. Oba dva extrakty byly vysušeny a analyzovány metodou TLC. Jednotlivé látky mající antimikrobiální účinky byly detegovány pod UV světlem a pomocí bioautografie na mikroorganismu *Bacillus subtilis*. Kmen *Streptomyces* sp. 12/5 produkoval dvě majoritní látky mající antimikrobiální účinky. V extraktech kmenů *Streptomyces* sp. 12/13 a SOK 69 bylo pokaždé zjištěno minimálně pět látek s biologickou aktivitou. Některé z těchto látek byly ze směsi izolovány pomocí flash chromatografie s normální i reverzní stacionární fází. Struktura získaných látek byla zkoumána pomocí metody HR-MS. Pro definitivní určení struktury jednotlivých látek budou provedena měření na NMR spektrometru.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA AV ČR A600660607 a projektu MŠMT ČR 2B06154.

LITERATURA

1. Demain A. L.: *Appl. Microbiol. Biotechnol.* 52, 455 (1999).
2. Suzuki H., Furusho Y., Higashi T., Ohnishi Y., Horinouchi S.: *J. Biol. Chem.* 281, 824 (2006).

3. Sattler I., Thiericke R., Zeeck A.: *Nat. Prod. Rep.* 1998, 221.
4. Subramanian S., Handa R.: *J. Postgrad. Med.* 50, 293 (2004).

4P-04**VLIV ANTIOXIDANTŮ NA POŠKOZENÍ DNA BUNĚČNÉ LINIE HL-60 CHELERYTHRINEM****MILENA MATEJOVIČOVÁ^a, MIROSLAV DVOŘÁK^a, IVA SLANINOVÁ^b, ZDENKA SLUNSKÁ^b a EVA TÁBORSKÁ^a**

^a *Biochemický ústav,* ^b *Biologický ústav, Lékařská fakulta Masarykovy univerzity, Kamenice 3, 660 25 Brno*
 matejovic@med.muni.cz

Chelerythrin (CHE) a sanguinarin (SA) jsou hlavní zástupci kvarterních benzo[c]phenanthridinových rostlinných alkaloidů. CHE a SA způsobují poškození DNA v buněčné kultuře HL-60¹, mechanismy jejich genotoxického působení však mohou být odlišné. Molekula SA, na rozdíl od CHE, interkaluje do struktury DNA, jak bylo prokázáno na různých buněčných liniích². Nejnovější data také potvrzují oxidativní poškození DNA pod vlivem SA³.

Cílem práce bylo zjistit, zda jedním z mechanismů genotoxicity CHE může být také oxidativní stres. Buňky HL-60 o hustotě 10⁶/ml byly inkubovány s CHE (3 μg ml⁻¹) po dobu 60 min v kultivačním médiu. Při sledování vlivu antioxidantů předcházela 30 min inkubace se zkoumanou látkou. Flavonoid baicalin, kyselina kávová a Trolox měly v kultuře HL-60 protektivní účinek na poškození DNA peroxidem vodíku, které jsme sledovali metodou analýzy komet. Po ukončení kultivace se zkoumanými látkami byly buňky resuspendovány ve fosfátovém pufru s 10 mM EDTA, pH 7,4 a přidány do roztoku agarózy s nízkou teplotou tání. Alikvóty suspenze byly aplikovány na podložní mikroskopická skla. Po ztuhnutí gelu byly imobilizované buňky lyzovány a podrobeny denaturaci v alkalickém roztoku. Po neutralizaci jsme provedli elektroforézu denaturované DNA imobilizovaných buněk v Tris-borátovém pufru, pH 8,4 (15 min za konstantního napětí 1 V cm⁻¹). Po obarvení dusičnanem stříbrným jsme sledovali podíl DNA v ohonu komet, odpovídající poškození s dvouřetězcovými zlomy.

Poškození DNA způsobené CHE odpovídalo 63% DNA v ohonu komet. Všechny aplikované antioxidanty snižovaly poškození DNA (Trolox 50 %, baicalin 40 %, kyselina kávová 54 % DNA v ohonu). Na základě těchto údajů je možné předpokládat, že oxidativní stres je jedním z mechanismů, kterým CHE způsobuje poškození DNA v buněčné kultuře HL-60.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 525/08/0819.

LITERATURA

1. Dvořák M., Matejovičová M., Slaninová I., Slunská Z., Tábořská E.: *VI International Comet Assay Workshop, Warszawa, Poland, September 22-24 2005*, Abstract.
2. Slaninová I., Slanina J., Tábořská E.: *Cytometry* 71A, 700 (2007).

3. Matkar S.S., Wrischnik L.A., Hellmann-Blumberg U.: *Chemico-Biological Interactions* 172, 63 (2008).

4P-05**ANTIOXIDATIVE ACTIVITY OF *Nigella sativa* SEED QUINONES**

HANA TESAŘOVÁ^a, KATEŘINA HALAMOVÁ^a, PETR MARŠÍK^b, PŘEMYSL LANDA^b, MARIE PŘIBYLOVÁ^b, BLANKA SVOBODOVÁ^a, and LADISLAV KOKOŠKA^a

^aDepartment of Crop Sciences and Agroforestry, Institute of Tropics and Subtropics, Czech University of Life Sciences Prague, Kamýcká 129, 165 21 Prague 6 - Suchbát, Czech Republic, ^bLaboratory of Plant Biotechnologies, Joint Laboratory of Institute of Experimental Botany AS CR, v.v.i. and Research Institute of Crop Production, v.v.i., Rozvojova 263, 165 02 Prague 6 - Lysolaje, Czech Republic
kokoska@its.czu.cz

Dithymoquinone (DTQ), thymohydroquinone (THQ) and thymoquinone (TQ) have previously been identified as main quinone constituents of *Nigella sativa* L. seeds, whereas TQ is considered to be main quinone constituent responsible for biological activities of the plant¹. In our study, we aimed to compare antioxidative effects of TQ, THQ and DTQ.

TQ was purchased from Sigma-Aldrich (CZ). DTQ and THQ were synthesized from TQ according to the previously described methods^{2,3}. Antioxidative activity of all compounds was evaluated *in vitro* using 2,2-diphenyl-1-picrylhydrazil (DPPH) free radical scavenging method⁴. The structures of DTQ (**I**), THQ (**II**) and TQ (**III**) are shown in Fig. 1.

The results of antioxidative assay showed that the best DPPH scavenging activity was produced by THQ (IC₅₀=2.4 µg ml⁻¹), which exhibited stronger antioxidative action than the inhibitory effect achieved by both reference compounds trolox (IC₅₀=3.7 µg ml⁻¹) and ascorbic acid (IC₅₀=2.6 µg ml⁻¹), suggesting highly potent antioxidative properties of this compound. In contrast, TQ (IC₅₀= 170 µg ml⁻¹) possessed only weak antioxidative effect and DTQ showed no antioxidative activity in range of inhibitory concentrations tested.

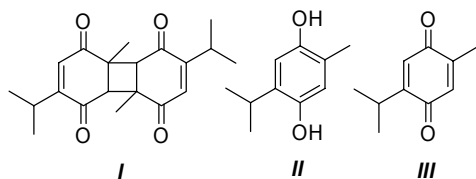


Fig. 1. Chemical structures of main quinones of *N. sativa* seeds

This research was supported by Czech Science Foundation (Project No. 525/08/1179).

REFERENCES

1. Ali B. H., Blunden G.: *Phytother. Res.* 17, 299 (2003).
2. Smith L. I., Tess R. W. H.: *J. Am. Chem. Soc.* 66, 1323 (1944).

3. El-Dakhakhny M.: *Planta Med.* 11, 465 (1963).
4. Brand-Williams W., Cuvelier M. E., Berset C.: *LWT-Food Sci. Technol.* 28, 25 (1994).

4P-06**INDUKOVANÁ FYTOEXTRAKCIA KADMIA Z KONTAMINOVANEJ PŮDY**

JANA ŠVIKRUHOVÁ, ALŽBETA HEGEDŮSOVÁ, PETER BOLEČEK a ONDREJ HEGEDŮS

Katedra chémie FPV UKF v Nitre, Tr. A. Hlinku 1, 949 74 Nitra, SR
jsvikruhova@ukf.sk

Oblasť južného Slovenska je najvýraznejším producentom zeleniny v rámci územia SR. Hlavným zdrojom prívodu kadmia v strave sú obilniny, zelená listová zelenina a zemiaky¹. Kadmium je prevažne sorbované na povrchu agregátov v ľahko rozpustných formách, čím sa zvyšuje riziko prieniku kadmia do agroekosystému. Fytoremediácia využíva rastliny na úpravu environmentálnych problémov spôsobených človekom. Fytoextrakcia ako jedna z fytoremediálnych techník využíva rastliny (hyperakumulátory) na odstránenie kontaminantov z pôd, sedimentov alebo vody v rastlinnej biomase. Tento proces sa častejšie využíva na odstraňovanie ťažkých kovov. Je to proces efektívnejší, finančne menej nákladný ako procesy založené na odstraňovaní pôdy ťažkou technikou².

V našej práci sme sa zamerali na elimináciu kadmia z kontaminovanej pôdy práve technikou indukovanej fytoextrakcie, ktorá využíva cheláty alebo iné reagenty na zvýšenie mobilizácie kovov. Ako chelatačnú látku sme použili EGTA – kyselinu etylén-bis(oxy-etylén-nitrilo)-tetraoctovú. Kadmium bolo pridané do pôdy v dvoch rôznych koncentráciách 5 a 15 mg kg⁻¹. Stanovenie obsahu kadmia v pôde a rastline kukurice sa vykonalo na atómovom absorpčnom spektrofotometri. Potvrdil sa štatisticky významný rozdiel v obsahu Cd v nadzemnej časti rastliny po prídavku 5 mg Cd kg⁻¹ a prídavku chelatačného činidla 6 a 12 mmol EGTA kg⁻¹ oproti kontrolnému variantu.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA č. 1/4370/07.

LITERATÚRA

1. Hegedúsová A., Jomová K., Vollmannová A., Tóth T.: *Phytopedon* 2003, 2.
2. Turan M., Esringu A.: *Plant Soil Environmental*. 53, 7 (2007).

4P-07

**OBSAH ISOCHINOLÍNOVÝCH ALKALOIDŮ
V *Stylophorum lasiocarpum* BĚHEM VEGETAČNÍHO
OBDOBÍ****KRISTÝNA PĚNČÍKOVÁ, JANA SUCHOMELOVÁ
a EVA TÁBORSKÁ***Biochemický ústav, Lékařská fakulta, Masarykova Univerzita,
Kamenice 5, 638 00 Brno
taborska@med.muni.cz*

Stylophorum lasiocarpum (Oliv.) Fedde je víceletá bylina z čeledi *Papaveraceae* pocházející z centrální a jižní Číny, kde je po staletí využívána v lidové medicíně. Kořeny rostliny jsou jedním z mála rostlinných zdrojů makarpinu, který je pokládán za potenciálně velmi perspektivní fluorescenční sondu v průtokové cytometrii^{1,2}. Jsou v nich obsaženy i další minoritní benzo[c]fenanthridinové alkaloidy (KBA), jež jsou v poslední době předmětem výzkumu. V dalším studiu jsme se proto zaměřili na zjištění obsahu alkaloidů v nadzemní části a plodech. Současně jsme sledovali změny obsahu alkaloidů v nadzemních i podzemních částech v měsíčních intervalech v průběhu vegetace.

V nadzemní části je hlavním alkaloidem koptisin (0,23 až 0,39 %). Obsah KBA sanguinarinu, chelerythrinu a chelirubinu je ve srovnání s koptisinem velmi nízký (0,001 až 0,07 %). Další minoritní KBA nebyly v nati prokázány. Zastoupení alkaloidů v průběhu vegetace se měnilo. Obsah koptisinu u jednoletých rostlin byl nejvyšší v červenci (0,39 %) a v průběhu další vegetace klesal. Naproti tomu nejvyšší koncentrace KBA byly nalezeny ve vzorcích sbíraných ke konci vegetace. Obsah sanguinarinu se v průběhu vegetace zvýšil více než 100krát. Rovněž v plodech je nejvíce zastoupeným alkaloidem koptisin (1,69 %). Je provázen sanguinarinem a stylopinem.

Obsah alkaloidů v kořenech je podstatně vyšší než v nadzemní části. Hlavním alkaloidem je opět koptisin (0,86 až 0,95 %), z benzofenanthridinových alkaloidů jsou nejvíce zastoupeny sanguinarin a makarpin. Ve srovnání s nati je zastoupení alkaloidů v kořeni v průběhu vegetace poměrně stabilní.

Závěr: hlavním alkaloidem všech částí rostliny je koptisin. Obsah kvartérních benzo[c]nathridinových alkaloidů v nadzemní části i v plodech je nízký. Tyto části rostliny nejsou tedy pro izolaci KBA perspektivní. V kořenech byla potvrzena relativně vysoká koncentrace makarpinu v průběhu celého vegetačního období, přestože hlavním alkaloidem kořene je koptisin. Kořeny *S. lasiocarpum* lze tedy pokládat za jeden z možných rostlinných zdrojů pro izolaci alkaloidu makarpinu.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR č. 525/08/0819.

LITERATURA

1. Suchomelová J., Bochořáková H., Paulová H., Musil P., Táborská E.: *J. Pharm. Biomed. Anal.* 44, 1 (2007).
2. Slaninová I., Slanina J., Táborská E.: *Cytom., Part A.* 71A, 9 (2007).

4P-08

FYTOCHEMICKÉ STUDIUM *Macleaya cordata***PAVEL KOSINA^a, EVA VRUBLOVÁ^a, JANA
SUCHOMELOVÁ^b, JIŘÍ GRUZ^c, MILAN KOLÁŘ^d,
KATHRIN TSCHIRNER^e, JITKA VOSTÁLOVÁ^a,
JITKA ULRICHOVÁ^a a VILÍM ŠIMÁNEK^a**

^a Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc, ^b Biochemický ústav, Lékařská fakulta, Masarykova Univerzita, Komenského náměstí 2, 662 43 Brno, ^c Laboratoř růstových regulátorů UP a AV ČR, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, ^d Ústav mikrobiologie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc, ^e *Phytobiotics Futterzusatzstoffe GmbH, Rosengasse 9, 65343 Eltville, Německo*
kosina@tunw.upol.cz

Macleaya cordata (*Papaveraceae*) je známa z tradiční čínské medicíny pro své protizánětlivé a antimikrobiální účinky. Je pěstována jako zdroj kvarterních benzo[c]fenanthridinových alkaloidů (KBA) sanguinarinu (SG) a chelerythrinu (CH) (*Macleaya cordata* extract, CAS 112025-60-2) (cit.¹). Fytochemické studie *M. cordata* se soustředily výhradně na alkaloidovou frakci nadzemní části rostliny. Cílem práce bylo stanovení alkaloidů a fenolových látek v nadzemní části *M. cordata* pěstované v Číně a Německu, květech a semenech čínské provenience. Komplexní extrakty byly testovány na antimikrobiální aktivitu ve srovnání s SG, CH a jejich dihydroderiváty. Alkaloidy byly stanoveny metodou HPLC s UV detekcí², fenolové kyseliny metodou HPLC-MS (cit.³) umožňující stanovení volných a esterově vázaných forem. Hlavními alkaloidy byly SG, CH, allokryptopin a protopin, z fenolů kyselina *p*-hydroxybenzoová a ferulová. U komplexních extraktů korelovala jejich antimikrobiální aktivita s obsahem KBA.

Tato práce vznikla za podpory grantů MSM 6198959216, GA ČR 525/07/0871 a GA ČR 525/08/0819.

LITERATURA

1. Dvořák Z., Kubáň V., Klejdus B., Hlaváč J., Vičar J., Ulrichová J., Šimánek V.: *Heterocycles* 68, 2403 (2006).
2. Suchomelová J., Bochořáková H., Paulová H., Musil P., Táborská E.: *J. Pharm. Biomed. Anal.* 44, 283 (2007).
3. Ayaz F.A., Hayirlioglu-Ayaz S., Gruz J., Novak O., Strnad M.: *J. Agric. Food Chem.* 53, 8116 (2005).

4P-09

STABILITA EXTRAKTU *Scutellaria baicalensis* IN VITRO**HANA PAULOVÁ^a, HANA BOCHOŘÁKOVÁ^a, MARIE NOVÁKOVÁ^b a EVA TÁBORSKÁ^a**^a *Biochemický ústav Lékařské fakulty MU, Univerzitní kampus, 625 00 Brno*, ^b *Fyziologický ústav Lékařské fakulty MU, Komenského nám. 2, 662 43 Brno*
hpaulova@med.muni.cz

Scutellaria baicalensis Georgi (šišák bajkalský) je rostlina pocházející z Východní Asie. Patří k nejvýznamnějším léčivým rostlinám používaným v přírodní medicíně ve východoasijské populaci. Nejčastěji se k léčebným účelům užívá sušený kořen nebo se aplikují extrakty připravené z kořene. V tradiční čínské medicíně se *Scutellaria baicalensis* používá při léčení alergií, hypertenze, bakteriálních a virových infekcí, hepatopatií, aterosklerozy. Terapeutická aktivita kořene je spojována s přítomností flavonoidů, přičemž hlavní obsahovou látkou je baicalin vykazující výraznou biologickou aktivitu¹⁻³. V současné době se zabýváme studiem protektivních účinků flavonoidů *Scutellaria baicalensis* při ischemicko-reperfučním poškození myokardu potkana.

V naší práci jsme se zaměřili na posouzení stability extraktu *Scutellaria baicalensis* v pufrovaných vodných roztocích v rozsahu pH 3–9 (včetně pH 7,4) při dlouhodobém skladování. Porovnány byly i jiné podmínky skladování (–80 °C a –20 °C). Složení extraktu bylo sledováno pomocí HPLC s elektrochemickou detekcí, hodnocen byl obsah hlavního flavonoidu baicalinu. U standardu baicalinu byla sledována také jeho stabilita při inkubačních teplotách 25 °C a 37 °C. Hodnocení bylo provedeno v různých pH podobně jako u extraktu. Byla potvrzena degradace baicalinu, která je závislá na pH a teplotě, a na základě výsledků jsou diskutovány možnosti dlouhodobého uchovávání vzorků před vlastní analýzou.

Tato práce byla řešena jako součást výzkumného záměru VVZ MŠMT 0021622402

LITERATURA

1. Zhao Y., Li H., Gao Z., Gong Y., Xu H.: *Eur. J. Pharmacol.* 536, 192 (2006).
2. Chan F. L., Choi H. L., Chen Z. Y., Chen, Chan P. S. F., Juany Y.: *Cancer Lett.* 160, 219 (2000).
3. Bochořáková H., Paulová H., Slanina J., Musil P., Tábořská E.: *Phytother. Res.* 17, 640 (2003).

4P-10

ALGINATE HYDROGEL MATRICES FOR IMMOBILIZATION OF THE PROTEINS AND CELLS IN THE DESIGN OF IMPLANTABLE GLUCOSE BIOSENSOR**ZUZANA KRONEKOVÁ^a, MARTIN DANKO^a, DUŠAN CHORVÁT, JR.^{a,b}, IGOR KRUPA^a, BENNY MOTRO^c, SHULAMIT MICHAELI^c, TASSOS ECONOMOU^d, and IGOR LACÍK^{a*}**^a *Polymer Institute of the Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovakia*, ^b *Polymer Institute of the Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovakia*, ^c *Bar-Ilan University, Ramat Gan, Israel*, ^d *Institute of Molecular Biology and Biotechnology, Iraklio-Crete, Greece*
igor.lacik@savba.sk, zuzana.kronekova@savba.sk

Alginates belong to the group of polysaccharides that are natural products of marine brown algae. Alginate hydrogel is formed by action of divalent cations (most frequently calcium and barium) under the physiological conditions, which promotes utilization of alginate gels in immobilization of living cells and enzymes¹.

Alginate gels are also utilized for immobilization of the glucose binding protein (GBP) either in a free form or produced in living mammalian cells inside the glucose sensing chamber, which is one of the main tasks in the implantable glucose biosensor design within the IP 6EU P. Cézanne project. This contribution reports on strategies used in terms of selection of the gelling conditions used for the alginate hydrogel formation and covalent and physical entrapment of the GBP. The mechanical and chemical stability of formed hydrogels under physiological conditions, diffusion and optical properties were analyzed. These properties seem to be suitable to meet the requirements for protein and cell immobilization as well as for the overall biosensor design.

This work was supported by the Sixth Framework Program of the EU, IP-031867, P. Cézanne and by the Slovak Research and Development Agency under the contract No APVV- 51-033205.

REFERENCES

1. Zimmermann H., Zimmermann D., Reuss R., Feilen P. J., Manz B., Katsen A., Weber M., Ihmig F. R., Ehrhart F., Gessner P., Behringer M., Steinbach A., Wegner L. H., Sukhorukov V. L., Vásquez J. A., Schneider S., Weber M. M., Volke F., Wolf R., Zimmermann U.: *J. Mater. Sci. Mater. Med.* 16, 491 (2005).
2. Kuneš J., Hrabálek A., Pour M., Pilař M., Waisser K., Odlerová Ž.: *Zh. Org. Chim. (J. Org. Chem. Russ.)* 34, 786 (1998).

4P-11

RECIPROCAL EFFECT OF Se AND Cd ON *Sinapis alba* SEEDLINGS**MARIANNA MOLNÁROVÁ and AGÁTA FARGAŠOVÁ***Department of Ecosozology and Physiotactics, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Mlynská dolina B2, 842 15 Bratislava, Slovak Republic*
molnarova@fns.uniba.sk; fargasova@fns.uniba.sk

Many heavy metals are essential for living organisms. These microelements can be toxic in higher concentrations. Researchers focused to study of individual metal toxicity, but metals in environment interact among themselves, too. Essentiality of selenium and its physiological role in plants remains

controversial yet¹. Terrestrial plants prefer selenium in the form of selenate as a source of selenium. Cd is not essential element for plants; however it is effectively absorbed by roots as well as by leaves. Moreover, chlorophyll content is indicator of critical level of Cd in plants².

The aim of our study was assessment of two heavy metals interaction: Se and Cd. From our previous experiments we chose three concentrations of each element, at which inhibition of root growth was approximately 25 %, 50 % and 75 %; and we combined Se and Cd each other. Tested metals were used Na₂SeO₄ and CdCl₂ · 2.5 H₂O, compounds in concentrations reflected following metal content (mg l⁻¹): Se 10.4, 20.1 and 31.3; Cd 71.4, 142.8 and 219.1. Comparison was done between effects of individual metals and their pair combinations and interactions were expressed as additivity, synergism, resp. antagonism³. When metal reciprocal effect is higher than 100 % antagonism occurred and this interaction type was prevailing for root growth in all Se combinations with Cd concentration 142.8 and 219.1 mg l⁻¹. The strongest antagonistic effect on root growth (137.7 %) indicated combination Cd(142.8) + Se(31.3). Se also reduced Cd effect on photosynthetic pigments production and for combination Cd(219.1) + Se(10.4) reached calculated A value³ 226 % for chlorophyll *a*, 195 % for chlorophyll *b*, and 226 % for total carotenoids.

The project was supported by the Scientific Grant Agency of Slovak Republic, VEGA Grant No. 1/4361/07.

REFERENCES

1. Kabata-Pendias A., Pendias H., in the book: *Trace Elements in Soils and Plants*, pp.365. CRC Press, Boca Raton 1992.
2. Burton K. W., King J. B., Morgan E.: *Water Air Soil Pollut.* 27, 147 (1986).
3. Wang J., Zhang M., Xu J., Wang Y.: *Wat. Res.* 29, 209 (1995).

4P-12

IMUNOCHEMICKÉ METODY PRO STANOVENÍ EQUOLU

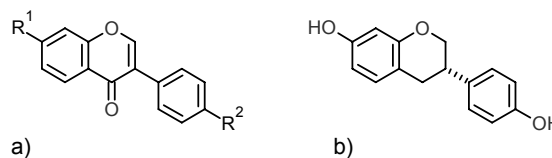
PETRA LANKOVÁ, LUCIE BUKÁČKOVÁ, ELENA A. PROKUDINA a OLDŘICH LAPČÍK

Fakulta potravinářské a biochemické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
petra.lankova@vscht.cz

Equol je fyziologicky významný metabolit vznikající působením dosud neidentifikovaných střevních bakterií na daidzein a formononetin – isoflavony vyskytující se v soje a dalších bobovitých rostlinách. Vykazuje estrogenní aktivitu, která je dokonce silnější než u jeho prekurzorů. Přeměna daidzeinu na equol probíhá pouze u 30–50 % lidské populace.

V této studii jsme vyvinuli metody nepřímé kompetitivní ELISA pro stanovení equolu v biologickém materiálu (krev, moč). Jako imunogeny byly použity konjugáty equolu s hovězím sérovým albuminem vázané na nosič prostřednictvím karboxymethyletherových můstek v polohách C7 a C4'. Konjugáty stejných haptenu s ovalbuminem byly použity k imobi-

lizaci. Jednotlivé ELISA metody byly optimalizovány testováním různých koncentrací protilátek a potahovacích antigenů, upřesněním reakčního času a využitím blokovacích činidel. Křížové reakce jednotlivých imunoanalytických metod s dalšími isoflavony jsou v přijatelném rozmezí (do 0,6 %) a ovlivnění molekulami s jinou strukturou je zanedbatelné.



Obr. 1. a) R¹=OH, R²= OH daidzein; R¹=OH, R²=OCH₃ formononetin, b) equol

Práce vznikla s podporou projektů GA ČR 303/08/0958 a MSM 60460137305.

4P-13

TESTOVÁNÍ BIOLOGICKÉ AKTIVITY HUMINOVÝCH LÁTEK Z RŮZNÝCH ZDROJŮ NA VYŠŠÍCH ROSTLINÁCH

BARBORA ANTOŠOVÁ, JAROMÍR NOVÁK, JOSEF KOZLER a JAROSLAV KUBÍČEK

Výzkumný ústav anorganické chemie, a.s., Revoluční 1521/84, 400 01 Ústí nad Labem
barbora.antosova@vuanch.cz

Huminové látky (HS) se uplatňují v zemědělství jako nespecifické rostlinné stimulatory ke zvýšení výnosů a zlepšení kvality produkce¹. Příznivě ovlivňují fotosyntézu, dýchání, enzymatickou činnost, příjem vody a živin. HS lze aplikovat do půdy i formou postřiků na list.

Stimulační aktivita HS u vyšších rostlin je závislá na vlastnostech HS, které se mohou výrazně lišit podle jejich zdrojů a zůsoby izolace. Pro testování biologické aktivity (BA) HS byly použity roztoky humátu draselného (HK). Roztoky HK byly ze surovin připraveny alkalickou extrakcí

Tabulka I

Relativní přírůstky zárodečných kořenů kukuřice při působení HS různého původu v časových intervalech. Kontrola – 100 %.

Výchozí surovina	Časové intervaly [h]		
	0-48	0-72	0-96
Oxyhumolit, Vršany	127	139	146
Oxyhumolit, lom Jiří, Sokolov	128	170	170
Uhlí, lom Družba, Sokolov	236	238	240
Oxyhumolit, lom Václav u Duchcova	148	148	145
Rašelina, Světlík	145	132	136
Lignit, Mikulčice	228	271	244
Černozem, Radovesice	146	140	136

a čištěny sedimentací a odstředěním. BA byla testována na klíčících semenech kukuřice. Kořeny o délce cca 2 cm byly ponořeny do živného roztoku obohaceného o HS o koncentraci 100 mg l⁻¹ (cit.²).

Laboratorní metoda testování BA HS pomocí klíčících rostlin umožňuje v relativně krátké době stanovit stimulační účinnost připravených preparátů.

Řešeno s podporou Ministerstva průmyslu a obchodu ČR, evidenční číslo projektu: FT-TA/038.

LITERATURA

- MacCarthy P., Rice J. A., v knize: *Humic Substances in the Global Environment and Implications on Human Health*, (Senesi N., Miano T. M., ed.), s. 1209–1223. Elsevier, Amsterdam 1994.
- Antošová B., Novák J., Kozler J., Kubíček J., Kimmerová I., v knize: *Reactive and Functional Polymers Research Advances*, (Matheus I. Barroso, ed.), s. 191–203. Nova Science Publishers 2007.

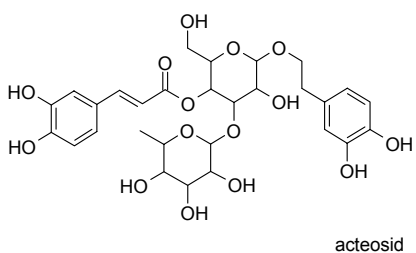
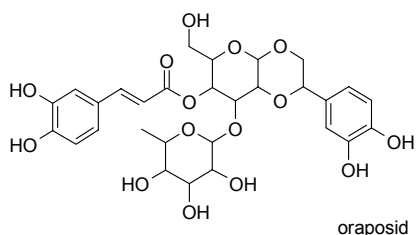
4P-14

IDENTIFIKACE NOVÝCH PŘÍRODNÍCH LÁTEK V *Orobancha flava* POMOCÍ 1D a 2D NMR SPEKTROSKOPIE

ALEXANDER POPA^a a IGOR POPA^b

^a Slovanské gymnázium Olomouc, tř. Jiřího z Poděbrad 13, 771 11 Olomouc, ^bLaboratoř růstových regulátorů, Univerzita Palackého v Olomouci a Ústav experimentální botaniky AV ČR, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc

Identifikace nových přírodních látek v rostlinách je jedním ze základních úkolů fytochemie. Některé druhy *Orobanchaceae* využívá tradiční lidová medicína pro jejich antimikrobiální, protizánětlivé a laxativní účinky, spojované mimo jiné s přítomností fenylypropanoidních glykosidů s antioxidační aktivitou. Závažná devětsilová *Orobancha flava* však doposud nebyla podrobena fytochemické analýze. Podávalo se nám nově izolovat a identifikovat struktury dvou fenyly-



propanoidních glykosidů (oraposid, acteosid) v methanolicém extraktu lodyhy a podzemních částí záruzy devětsilové. Látky byly separovány pomocí HPLC-MS a identifikovány na základě NMR studia: 1D (¹H, ¹³C, APT), 2D (COSY, HMQC, HMBC exp.) s přiřazením ¹H a ¹³C signálů.

Výzkum byl proveden za podpory Grantu MŠMT č. 2E06029 „STM Morava“ v rámci národního programu, výzkumu II-Lidské zdroje.

4P-15

SEZÓNÍ DYNAMIKA AKTIVITY ENZYMU RUBISCO A PIGMENTŮ XANTOFYLOVÉHO CYKLU SMRKU A BUKU POD VLIVEM ZVÝŠENÉ KONCENTRACE CO₂

JIŘÍ KALINA^a, MARIE DUCIUCOVÁ^a, MARTINA KOŠVANCOVÁ^b a OTMAR URBAN^b

^a KF, PřF, Ostravská univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava 1, ^b LEFR, ÚSBE AV ČR, Poříčí 3b, 603 00 Brno

jiri.kalina@osu.cz

K hlavním faktorům prostředí, které významně ovlivňují růst a vývoj rostlin, je ozářenost a koncentrace CO₂ ([CO₂]) v atmosféře, o které se v poslední době hovoří hlavně v souvislosti se změnami globálních klimatických podmínek.

Kultivace studovaných dřevin – buk (*Fagus sylvatica* L.) a smrk (*Picea abies* [L.] Karst.) (věk 8 let) – byla prováděna v lamelových kultivačních sférách na EEP AVČR Bílý Kříž v atmosféře s přirozenou [CO₂] (375 μmol(CO₂) mol⁻¹) a dvojnásobnou [CO₂] (700 μmol(CO₂) mol⁻¹). Cílem experimentu bylo stanovit změny aktivity a množství enzymu Rubisco a změny pigmentů xantofylového cyklu (antheraxantin – A, violaxantin – V, zeaxantin – Z).

V průběhu roku 2007 byly provedeny tři odběry (květen, červenec a září) rostlinného materiálu. Maximální rychlost karboxylace *in vivo* – V_{Cmax} byla stanovena pomocí otevřeného gazometrického systému Li-6400 (LiCor, USA). Pro stanovení aktivity, resp. množství enzymu Rubisco *in vitro* byla využita spektrofotometrická metoda (UV-VIS, Unicam, Anglie). Stanovení deepoxidačního poměru (DEPS = (Z+A)/(V+A+Z)) a poměrů pigmentů xantofylového cyklu (V/VAZ, A/VAZ a Z/VAZ) bylo provedeno pomocí HPLC systému (TSP Analytical, USA).

Změny maximální rychlosti karboxylace *in vivo* (V_{Cmax}) v průběhu vegetační sezóny byly zjištěny následovně. Zatímco listnatý buk lesní dosahuje maximálních hodnot V_{Cmax} v průběhu léta, u jehličnatého smrku ztepilého (1 rok staré jehlice) dochází v průběhu vegetační sezóny k postupnému poklesu hodnot V_{Cmax}. Tento postupný pokles souvisí zejména s translokací dusíku do mladých listových pletiv.

Pomocí spektrofotometrického stanovení bylo zjištěno, že množství enzymu Rubisco v průběhu sezóny narůstá, přičemž obsah enzymu Rubisco v jehlicích smrku je přibližně dvojnásobný oproti listům buku. Aktivita enzymu Rubisco je u smrků vystavených zvýšené [CO₂] na začátku sezóny větší, v červenci stejná a na konci sezóny menší oproti rostlinám

kultivovaných v přirozené [CO₂]. Naproti tomu aktivita enzymu Rubisco buků vystavených zvýšené [CO₂] je potlačena již v letních měsících.

Rostliny vystavené zvýšené [CO₂] mají DEPS mírně vyšší oproti rostlinám kultivovaných v přirozené [CO₂] již od letních měsíců, zatímco na začátku sezóny byly hodnoty DEPS téměř stejné. Byla zaznamenána rozdílná odezva množství A v průběhu sezóny u buku a smrku na vysokou ozářenost.

Tato práce byla vypracována v rámci projektu GA ČR r. č. 522/06/0930 „Změny aktivity a obsahu enzymu Rubisco při působení zvýšené koncentrace CO₂“.

4P-16

STUDIUM AUXINŮ POMOCÍ IMUNOAFINITNÍ EXTRAKCE A UPLC-MS/MS

**ALEŠ PĚNČÍK, JAKUB ROLČÍK a MIROSLAV
STRNAD**

*Laboratoř růstových regulátorů, Univerzita Palackého &
Ústav experimentální botaniky AV ČR, Šlechtitelů 11, 783 71
Olomouc
alespencik@seznam.cz*

Nejdůležitějším zástupcem auxinů – skupiny rostlinných hormonů ovlivňujících dlouhivý růst buněk, větvení kořenů či ohyb rostlin za světlem (fototropismus) je kyselina 3-indolyloctová (IAA). Třebaže jsou její biosyntéza a metabolismus již dlouho usilovně studovány, mnohé otázky zůstávají nezodpovězeny. Na vině je složitost rostlinného materiálu, snadná degradovatelnost analytu a jeho velmi nízká koncentrace pohybující se často na úrovni desítek fmol v 1 g čerstvé hmoty.

Pro analýzu IAA a jejích derivátů jsme proto vyvinuli komplexní analytický protokol, který zahrnuje nejenom moderní instrumentální analytickou koncepci (HPLC nebo UPLC s navazující tandemovou hmotnostní detekcí), ale též polyspecifickou imunoafinitní purifikaci. Vzorek, jehož hmotnost se pohybuje mezi 10 až 50 mg, je v prvním kroku extrahován fosfátovým pufrem a přečištěn pomocí SPE. Po methylovaní je vzorek purifikován imunoafinitní extrakcí, za níž následuje finální analýza. Široká specifita použitých polyklonálních protilátek umožňuje kvantifikovat celou řadu derivátů indolu se substitucí v poloze 3: 3-indolylacetonitril, 3-indolylacetamid, 3-indolylethanol a tzv. konjugáty IAA s těmito aminokyselinami: Ala, Asp, Gly, Glu, Leu, Phe, Trp a Val. Limit detekce se pohybuje od 0,2 fmol do 10 fmol.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT České republiky MSM 6198959216.

5P-01**50 LET OD ÚMRTÍ PROF. OTAKARA VIKTORINA****MARTINA KLUČÁKOVÁ a MILOSLAV PEKAŘ***

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

Významný, bohužel dnes již pozapomenutý český fyzikální chemik Prof. RNDr. Otakar Viktorin se narodil 23. května 1903 v Černé Hoře poblíž Brna. Po absolvování státní reálky v Brně vystudoval přírodovědecký odbor Masarykovy univerzity v Brně. Zde získal v roce 1929 vysvědčení o učitelské způsobilosti chemie a o rok později byl promován na doktora přírodních věd. Od 1. října 1930 nastupuje jako asistent na Ústav teoretické a fyzikální chemie České vysoké školy technické v Brně. Ústav v té době řídí profesor Jiří Baborovský, jeden ze zakladatelů naší fyzikální chemie a autor její první české učebnice.

Celoživotním zájmem profesora Baborovského, a tím i hlavní náplní vědecké činnosti jeho ústavu, byla problematika hydratace iontů, studovaná metodou elektrolytického převodu vody. V této oblasti také začíná vědecká dráha O. Viktorina. Brzy se však začíná orientovat na jinou, moderní a rychle se rozvíjející tematiku – řečeno slovy jednoho jeho přehledného článku – nukleární fyziku, zejména na její aplikace v oblasti chemie. Způsobily to zřejmě jeho zahraniční pobyty vykonané ve 30. letech nejprve na École des Hautes Études v Paříži a později ve známé Cavendishově laboratoři v Cambridge. Význam jeho pařížských prací vedl k udělení venia legendi pro obor fyzikální chemie počátkem roku 1938. Nedlouho po jeho návratu z Anglie byly české vysoké školy uzavřeny a doc. Viktorin během okupace působí na Výzkumném ústavu pro průmysl koželužský, založený již v roce 1922 při chemickém odboru české brněnské techniky. Po osvobození se vrací na mateřský ústav a po náhlé smrti Prof. Baborovského v říjnu 1946 přebírá jeho vedení. S účinností od 1. dubna 1947 je jmenován mimořádným profesorem pro obor fyzikální chemie. Dlouhá nemoc mu však nakonec od února 1951 znemožnila docházet na pracoviště a donutila fakticky ukončit jeho pedagogické i vědecké působení. Je snad zvláštním osudem, že o několik měsíců později je brněnská technika zrušena.

Prof. Viktorin bezesporu patřil k průkopníkům nukleárních věd v bývalém Československu. Napsal první české odborné knižní pojednání o novém odvětví jaderné chemie a fyziky [25]. Pod hlavičkou chemické technologie VII zajišťoval od roku 1948 výuku nových předmětů z oblasti vztahu mezi chemickou konstitucí a vlastnostmi látek, včetně „Atomové fyziky“. Zasloužil se rovněž o doplnění a znovuvydání předválečné Baborovského příručky pro fyzikálně chemická praktika. Bohužel, třetí vydání Baborovského učebnice fyzikální chemie, které připravoval původně s kolegou Velíškem, již dokončit nestihl. Prof. Viktorin umírá 25. dubna 1958.

5P-02**TEÓRIA A PRAX PROJEKTOVÉHO VYUČOVANIA K TÉME TRVALO UDRŽATEĽNÝ ROZVOJ****MÁRIA GANAJOVÁ a JÚLIA KALAFUTOVÁ**

*Oddelenie didaktiky chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovenská republika
julia.kalafutova@upjs.sk*

Cieľom príspevku je informovať učiteľskú verejnosť chémie o didaktickom materiáli Projektové vyučovanie k téme Trvalo udržateľný rozvoj, ktorý bol vytvorený v rámci projektu KEGA č.3/6301/08 (cit.¹). Jeho cieľom je sprístupniť poznatky o projektovom vyučovaní na Slovensku a v zahraničí ako i empirické skúsenosti, ktoré vyplynuli z riešenia predchádzajúcich projektov KEGA^{2,3}.

Prvé kapitoly didaktického materiálu informujú o kladných, ale i záporných stránkach projektovej metódy, aktuálnych teleprojektoch i úskaliach, ktoré vyplývajú z výučby chémie ako vedy. Najužitočnejšou časťou pre učiteľov je kapitola sprístupňujúca metodiku tvorby projektov, označená ako „4 – úroveň plán“ tvorby projektu, aplikovaná na tému Minerálne vody v okolí Košíc⁴. Táto časť je návodom pre tvorbu projektov na ľubovoľnú tému a zároveň poskytuje množstvo poznatkov o aplikácii prvkov mobilnej analytickej inštrumentácie do konkrétneho učiva chémie. Záverečné kapitoly poskytujú základné poznatky a požiadavky trvalo udržateľného rozvoja a prezentujú najúspešnejšie projektové práce z chémie v poslednom období na Slovensku i v zahraničí.

Didaktický materiál je určený predovšetkým učiteľom, ktorí budú v školskom roku 2008/2009 zapojení do hore uvedeného projektu KEGA. V rámci neho budú vzdelávaní v témach: chémia potravín, ich bezpečnosť a zdravie, cyklické procesy a recyklácia, nové a obnoviteľné zdroje energie, ktoré povedie k realizácii projektových tímových prác žiakov na vybranú tému trvalo udržateľného rozvoja.

Uvedený didaktický materiál nájde svoje miesto aj v ďalšom vzdelávaní učiteľov chémie v rámci akreditovaných kurzov Klub učiteľov chémie, Chémia bežného života, ktoré budú realizované v rámci kariérneho postupu učiteľov chémie na Prírodovedeckej fakulte UPJŠ v Košiciach.

Táto práca vznikla za podpory grantu KEGA č.3/6301/08 MŠ SR.

LITERATÚRA

1. Ganajová M., Kalafutová J., Mitrová M., Kozurková M.: *Projektové vyučovanie k téme Trvalo udržateľný rozvoj*, v tlači.
2. Ganajová M., Lichvárová M., Kukľová L.: *Dištančné vzdelávanie učiteľov*. Fakulta prírodných vied UMB, Banská Bystrica 2006.
3. Ganajová M., Kukľová L., Kozurková M.: *ChemZi 3/1*, 153 (2007).
4. Pfeifer P., Lutz B., Bader H. J.: *Konkrete Fachdidaktik Chemie*, str. 216–223. Oldenbourg Schulbuchverlag, München 2002.

5P-03**PROJEKT BADATEL – PODPORA
TALENTOVANÝCH STŘEDOŠKOLÁKŮ****MARTIN KUBALA**

*Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci,
tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc
mkubala@prfw.upol.cz*

Na Přírodovědecké fakultě Univerzity Palackého v Olomouci se v polovině roku 2006 rozběhl projekt Badatel, který otevírá středoškolským studentům dveře univerzitních laboratoří a umožňuje jim vyzkoušet si, jak se dělá skutečná věda. Projekt se mezi studenty setkal s překvapivě velkým ohlasem a v již se do něj zapojilo více než 100 studentů.

Klíčovým prvkem je internetová databáze (www.badatel.upol.cz), kam pracovníci naší fakulty vypisují pro studenty témata a studenti se na ně podle svých zájmů přihlašují. V rámci našich možností se snažíme také podporovat studenty, kteří přijdou s vlastním zajímavým tématem. Ukazuje se, že středoškoláci jsou schopni ovládnout metodiky používané ve špičkovém výzkumu a díky své aktivitě a nadšení jsou schopni dosahovat výborných výsledků. Svědčí o tom nejen úspěchy studentů v různých vědeckých soutěžích, ale i publikace v impaktovaných časopisech.

Studenti mají možnost prezentovat svou práci také na malé konferenci, kterou pro ně každoročně pořádáme. Prezentované příspěvky mají velmi vysokou úroveň a dá se říci, že téměř všechny jsou srovnatelné s tím, co vidáme u obhajob bakalářských prací, ty nejlepší dokonce přesahovaly výkony většiny diplomantů.

Na základě dosavadních zkušeností se domníváme, že projekt je přínosný jak pro studenty, tak pro univerzitu a věříme, že se bude dále úspěšně rozvíjet.

Chtěl bych poděkovat všem, kteří svým úsilím umožnili chod projektu Badatel, jakož i těm, kdo projekt propagují. Projekt je také podporován grantem MŠMT č. 2E06029 „STM-Morava“.

5P-04**TVORBA NOVÝCH ÚLOH DO PŘEDMĚTU
MOLEKULÁRNÍ MODELOVÁNÍ****TOMÁŠ ZELENÝ, PETR SKLENOVSKÝ a MICHAL
OTYEPKA**

*Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita
Palackého v Olomouci, tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc
tomas.zeleny@upol.cz*

Předmět „Molekulární modelování“ (KFC/MOMO) vyučovaný na Přírodovědecké fakultě Univerzity Palackého v Olomouci je zaměřen na získání základních znalostí z oblasti výpočetní chemie. Vzhledem ke skutečnosti, že je molekulární modelování dynamicky se rozvíjející vědní disciplínou, je nezbytné neustálé sledování aktuálních trendů a jejich včasné začlenění do výuky. Prioritou projektu je zařazení nových úloh do kurzu molekulárního modelování, které

reflektují aktuální stav ve výpočetní chemii se zaměřením na výpočet termodynamických veličin aparátem kvantové mechaniky a statistické termodynamiky, strukturní databáze biomolekul (www.pdb.org¹), vizualizační software, základní principy molekulové mechaniky a dynamiky. Úlohy byly voleny tak, aby studentům byly nápomocny pro hlubší pochopení probírané problematiky a jejího významu v aplikacích. Studenti se samostatně zapojili do vyhledání potřebných informací nezbytných pro úspěšné řešení práce, vybudovali si strategii pro řešení problému za odborné pomoci lektora. Zadáni a výsledky úloh jsou veřejně a zdarma zpřístupněny na univerzitní síti, konkrétně na webových stránkách Katedry fyzikální chemie (fch.upol.cz).

Tato práce vznikla za podpory grantu FRVŠ 2261/2008.

LITERATURA

1. Berman H. M., Westbrook J., Feng Z., Gilliland G., Bhat T. N., Weissig H., Shindyalov I. N., Bourne P. E.: *Nucleic Acids Res.* 28, 235 (2000).

5P-05**MULTIMEDIÁLNÍ PODPORA PŘEDNÁŠEK,
SEMINÁŘŮ A LABORATOŘÍ Z ANORGANICKÉ
CHEMIE****JAROMÍR VINKLÁREK a MILAN ERBEN**

*Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-
technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10
Pardubice
jaromir.vinklarek@upce.cz*

V roce 2003 byly na Univerzitě Pardubice akreditovány bakalářské studijní programy Chemie a technická chemie a Chemie a technologie potravin pro studenty prezenční i kombinované formy výuky. Schválený modul v sobě zahrnuje povinný předmět Obecná a anorganická chemie II, který se skládá z přednášek a seminářů, a předmětu Laboratoře Obecné a anorganické chemie II. Především z bezpečnostních a ekologických důvodů (práce studentů s vysoce toxickými sloučeninami, nebezpečné odpady – těžké kovy, chromany, dichromany, ...) bylo v laboratořích zrušeno teoretické i praktické provedení tzv. zkumavkových reakcí anorganických iontů podle klasického sirovodíkového postupu. To se však bohužel zpětně negativně odrazilo i na teoretických znalostech studentů v oblasti anorganické chemie. Laboratorní úlohy totiž plnily dvě funkce.

V oblasti preparace byly základem pro sledování kvalitativního složení výchozích látek, reakčních směsí, vyloučených produktů a stupně dokonalosti průběhu některých operací.

V oblasti zvládnání učiva v předmětu anorganická chemie umožňovaly systematicky se orientovat v rozsáhlém množství jinak obtížně zapamatovatelných informací o chemických reakcích anorganických sloučenin.

Vytvořený interaktivní studijní materiál bude obsahovat přehled významných reakcí vybraných anorganických iontů s popisem jejich případných vizuálních změn (vznik nebo rozpouštění sraženiny, její barva, změna zbarvení roztoku, vývin plynu a pod.). U vybraných reakcí bude přiložena krát-

ká videosekvence dokumentující reálně změny při vlastní reakci. Vizuální vjem může napomoci studentovi lépe si zapamatovat předkládané informace o chemické reakci. V závěru předkládaného studijního materiálu budou studentovi nabídnuty testové bloky s obtížností obvyklou v ročníkových a zkuškových písemných pracích. Výsledky těchto testů umožní studentovi okamžitou sebekontrolu, zda studovanou problematiku dostatečně zvládnul.

Pro tvorbu strukturovaného multimediálního výukového modulu bude použit program Macromedia Authorware 7.0. Macromedia Authorware je nástroj pro tvorbu a vývoj multimediálních programů, který umožňuje kromě jiného i tvorbu interaktivních vzdělávacích kurzů. Vzhledem k použité technologii (Shockwave) lze vytvořenou aplikaci snadno přenést na internet a spouštět ji v běžných webových prohlížečích a to se zachováním interaktivity.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR FR VŠ/1496/2008/F1d.

5P-06

L@BYRINT – KORESPONDENČNĚ INTERNETOVÁ PŘÍRODOVĚDNÁ SOUTĚŽ

MARTA KLEČKOVÁ, MAREK PAVLÍČEK, LUKÁŠ RICHTEREK, MARTINA VAŠÍČKOVÁ a LIBOR KVÍTEK

*Přírodovědecká fakulta Univerzita Palackého, tř. Svobody 8, 771 46 Olomouc
marta.kleckova@upol.cz*

Internetové soutěže řadíme do neformálního vzdělávání¹, jsou založené na bázi dobrovolnosti, na vlastním zájmu vzdělávat se, uplatňuje se při nich vnitřní motivace a aktivní prožitky, rozvíjí znalosti, schopnosti, dovednosti, kompetence. Dnes jsou díky rozšíření internetu ve školách i v domácnostech ČR přístupné téměř každému (v ideálním případě).

Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého Olomouc již druhým rokem připravuje internetovou soutěž L@byrint (internetová laboratoř, odkaz <http://isouteze.upol.cz>). Soutěžní úlohy jsou ve dvou stupních náročnosti, z nichž jeden je určen pro žáky ZŠ a studenty ekvivalentních ročníků víceletých gymnázií, druhý pro studenty SŠ. Při řešení zajímavých úloh z chemie, fyziky a matematiky, které jsou zpracované atraktivní spíše zábavnou formou – „hry s vědou“ (kvízy, rébusy, interaktivní tabulky apod.), soutěžící procvičují a rozšiřují nejen své vědomosti, dovednosti z přírodovědných oborů, ale řeší také problémové úlohy související s každodenním životem^{2,3}. Soutěž L@byrint má vždy dvě domácí či školní kola, třetí kolo probíhá na Univerzitě Palackého v Olomouci. V jednotlivých kolech není nutné řešit všechny úlohy, body se celkově sčítají. Vyřešené úlohy domácích či školních kol lze poslat poštou nebo elektronicky. Nejúspěšnější řešitelé, podle dosaženého celkového počtu bodů, jsou pozváni do finále – univerzitní kolo, které probíhá buďto v rámci konference Mladých přírodovědců (L@byrint chemie) nebo na závěrečném semináři (L@byrint fyziky a matematiky). Na finalisty čekají on-line úlohy, které jsou vyhodnoceny tentýž den

a slavnostně jsou oceněni ti nejlepší. Pro soutěžící je na odpoledne připraven sportovně-kulturní program. Z dosavadních zkušeností provozování internetových přírodovědných soutěží se ukazuje jako nezbytné být v kontaktu s učiteli ze školské praxe, kteří jednak informují žáky o soutěži a alespoň občas je vyzvou k odeslání řešení. Také se ihned v průběhu prvního kola 1. ročníku L@byrintu ukázalo výhodnější nabídnout soutěžícím zasílat řešení úkolů i poštou, ne pouze elektronicky, až 50 % účastníků soutěže využívá klasickou poštu.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR NPV II 2E06029.

LITERATURA

1. *Rámcový vzdělávací program pro základní vzdělávání*. VÚP, Praha 2005.
2. Macek M., v knize: *Metodika pro podporu ŠVP ve školských zařízeních pro zájmové vzdělávání*, NIDM, Praha 2007.
3. Šulcová R., Pisková D.: Chem. Listy 100, 686 (2006).

5P-07

CHEMICKÉ VZDELÁVANIE S PODPOROU E-LEARNINGU

MELÁNIA FESZTEROVÁ

*Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita Konštantína Filozofa, Tr. A. Hlinku 1, 949 74 Nitra, SR
mfeszterova@ukf.sk*

Vývoj v oblasti vedy a techniky ovplyvnil záujem o prvky edukačných inovácií. Aplikácia informačných technológií je spojená s ich dynamickým nástupom nielen do praktického života, ale aj do oblasti vzdelávania. Mnohé predmety z oblasti chémie sú dnes vyučované s pomocou informačných a komunikačných technológií (IKT)¹. Možnosti využitia IKT v chemickom vzdelávaní sú špecifické. Využitie počítača optimalizuje a zefektívňuje jednotlivé fázy vyučovania, umožňuje rešpektovať individuálne pracovné tempo žiakov. Dovoľuje prispôbiť sa jednotlivým typom didaktických úloh variabilitou odovzďávaných vedomostí v konkrétnych situáciách, nájsť vhodné formy vyjadrenia týchto znalostí a následnej kontroly.

Odborné zameranie chémie je založené nielen na profesionálnom osvojení si teoretických zákonitostí a princípov, ale predovšetkým na ich využití v praxi. E-learning dovoľuje neustále inovovanie vedomostí, či už v rámci vysokoškolského vzdelávania, prípravy pre profesijné zaradenie alebo v ďalšom vzdelávaní, umožňuje dopĺňovanie poznatkov a rozširovanie vedomostí². Jeho cieľom je skvalitniť výučbu chemických predmetov a súčasne začleniť nové vývojové trendy do chemického vzdelávania.

Príspevok vznikol s podporou grantu CGA VI/2/2007.

LITERATÚRA

1. Urbanová K., Čtrnáctová H., v knize: *Soudobé trendy v chemickém vzdelávaní*, s. 101. Gaudeamus, H. Králové 2006.

2. Hilbert H., Kašiarová S.: Úloha informačných systémov v implementácii environmentálneho zdravia do edukačného systému. V: *Využitie IKT v prírodovednom vzdelávaní*. Prírodovedec č. 217, Nitra 2006.

5P-08**TVORBA VÝUKOVÉHO SIMULAČNÍHO PROGRAMU PRO KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZU**

JAN PETR^a, VÍTĚZSLAV MAIER^a, JOANNA ZNALEZIONA^a, RADIM KNOB^a, PETRA VYSKOČILOVÁ^b, PETR BEDNÁŘ^a a JURAJ ŠEVČÍK^a

^a *Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Třída Svobody 8, 771 46 Olomouc,*
^b *Laboratoř dědičných metabolických poruch, OKBL, Fakultní nemocnice Olomouc, I. P. Pavlova 6, 775 20 Olomouc*
 petrjan1@gmail.com

Kapilární elektroforéza (CE) patří mezi moderní separační metody, umožňuje separovat jak malé anorganické ionty, tak velké částice jako fragmenty nukleových kyselin, proteiny, viry či mikroorganismy. Její praktické použití se odvíjí od pochopení teoretických i praktických aspektů této techniky. Za účelem zlepšení procesu výuky této techniky byl vytvořen simulační program pro kapilární elektroforézu na bázi uživatelského rozhraní, který používá komerční přístroj Agilent HP ^{3D}CE (Agilent Technologies, Německo). Tento program obsahuje nastavení základních parametrů analýzy pro zatím omezený počet analytů a elektrolytů. Na základě tohoto nastavení simuluje analýzu na bázi numerického řešení rovnic kontinuity jako odezvu detektoru v daném místě kapiláry.

Autoři děkují za finanční podporu Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (projekty č. MSM 6198959216 a FRVŠ 2404/2008/G6).

5P-09**EXPERIMENTY Z ELEKTROCHÉMIE**

ZUZANA MELICHOVÁ, IVETA NAGYOVÁ a LENKA HARVANOVÁ

^a *Katedra chemie, Fakulta přírodních věd, Univerzita Mateja Bela, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica,* ^b *ZŠ Beňovského 1, 841 01 Bratislava, SR*
 melichov@fpv.umb.sk

Elektrochémia sa zaoberá rovnováhami v sústavách elektrolytov, štúdiom elektrochemických dejov, prebiehajúcich na elektródach pri prenose elektrického náboja cez fázové rozhranie ako aj vzájomnými premenami chemickej a elektrickej energie, ktoré sa uskutočňujú v elektrochemických sústavách. Je jednou z oblastí chémie, ktorá nie je obľúbenou ani medzi študentmi ani medzi učiteľmi chémie. Pravdepodobne je to spôsobené nedostatkom odbornej literatúry, ktorá by vhodným spôsobom vysvetľovala problematiku elektrochémie. Na slovenskom knižnom trhu chýba takýto druh literatúry, čo sa prejavuje aj v praxi.

V rámci projektu KEGA „Elektrochemické úlohy a experimenty vo vzdelávaní“, ktorého cieľom bolo vytvoriť učebný materiál k uvedenej problematike. Publikácia obsahuje základné poznatky z elektrochémie, príklady ako aj teoretické a experimentálne úlohy. Je určená pre všetkých záujemcov o experimenty z elektrochémie, hlavne pre žiakov, študentov a učiteľov chémie.

V materiáli sú zahrnuté jednoduché experimenty zamerané na sledovanie vlastností kovov, elektrolyzu, galvanické články a koróziu. Uvádzame tiež experimenty náročnejšie na prístrojové vybavenie, ktoré sú určené pre talentovaných žiakov a študentov všetkých typov škôl. Vytvorený učebný materiál je možné využívať aj v rámci prípravy učiteľov prírodovedných predmetov, ako aj pri ďalšom vzdelávaní učiteľov z praxe. Didaktická účinnosť vytvoreného materiálu bola overovaná na skupinách žiakov a študentov vybraných slovenských škôl.

Táto práca vznikla za podpory grantu KEGA č. 3/4202/06.

5P-10**VYUŽITIE METODIKY BISEL PRI MONITORINGU KVALITY POVRCHOVÝCH VÔD V EDUKAČNOM PROCESE**

IMRICH JAKAB* a VIERA VANKOVÁ

Katedra ekologie a environmentalistiky, Fakulta prírodných vied, Univerzita Konstantína Filozofa v Nitre, Tr. A. Hlinku 1, 949 74 Nitra, SR
 ijakab@ukf.sk

Katedra ekológie a environmentalistiky, FPV UKF v Nitre využíva metódu BISEL¹ v edukačnom procese pregraduálnej prípravy učiteľov ako nástroj pre experimentálne určenie kvality povrchových vôd.

Pred realizáciou samotného biomonitoringu je potrebné poukázať na súvislosti medzi obsahom vo vode rozpustného kyslíka, saprobitou a výskytom vodných bezstavovcov. Študenti sú oboznámení so základnými princípmi biomonitoringu, s bioindikačnými druhmi vodných bezstavovcov a s metódou BISEL. Práca v teréne začína stanovením vhodného odberového miesta vybraného vodného toku, jeho presnou lokalizáciou a potrobným opisom vodného toku, jeho brehu, dna a okolitej krajiny. Všetky údaje sa zapisujú do formuláru metódy BISEL.

Odchyt vodných bezstavovcov sa realizuje sieťkou z tečúcej vody a bahna prípadne ručným odberom zo spodnej časti ponorených kameňov. Jednotlivé rozlíšené taxóny, významné pre indikáciu čistoty vody, zaznamenávame do formulára, ktorý nám na základe citlivosti nájdených druhov živočíchov na kyslík rozpustený vo vode umožní určiť rozhodujúcu triedu. Na základe celkového počtu nájdených taxónov a rozhodujúcej triedy stanovíme triedu čistoty vody vodného toku pre biologické ukazovatele a kyslíkový režim.

Výstupom práce v teréne a monitoringu sú vyplnené formuláre, ktoré jednotlivé skupiny interpretujú a audiovizuálne, prípadne posterom, prezentujú.

Počas terénnych prác študentov 4. ročníka bola v roku 2007 v sledovanom úseku vodného toku Devenica

(Kostoľany pod Trábečom) stanovená II. trieda kvality čistoty vody pre biologické ukazovatele a kyslíkový režim.

Táto práca vznikla za podpory grantu CGA VI/8/2007.

LITERATÚRA

1. Borián G., Borsos S.: *Vízbiológiai praktikum*. 62 s. Green Pannónia Alapítvány, Budapest 2001.
2. STN 75 7221 *Kvalita vody*. Klasifikácia kvality povrchových vôd.

5P-11

VYUŽITIE KOLORIMETRICKÝCH RÝCHLOTESTOV PRI MONITORINGU KVALITY POVRCHOVÝCH VÔD V EDUKAČNOM PROCESE

VIERA VANKOVÁ* a IMRICH JAKAB

*Katedra ekológie a environmentalistiky, Fakulta prírodných vied, Univerzita Konstantína Filozofa v Nitre, Tr. A. Hlinku 1, 949 74 Nitra, SR
vvankova@ukf.sk*

Pri monitoringu kvality povrchových vôd sa využívajú v edukačnom procese pri realizácii terénnych prác na Katedre ekológie a environmentalistiky, FPV UKF v Nitre kolorimetrické rýchlotesty. Slúžia na určenie základných fyzikálno-chemických ukazovateľov kvality vody. Kolorimetricky stanovujeme pH a obsah amoniaku, dusitanov, dusičnanov a fosforečnanov. Titrčne stanovujeme celkovú tvrdosť vody a obsah rozpusteného kyslíka vo vode. Na stanovenie jednotlivých ukazovateľov sa využíva Kompaktné laboratórium Aquamerck® 11151 pre analýzu vody od MERCK spol. s r.o. Obsahuje testy pre všetky dôležité parametre kvality vôd, ktoré je možné realizovať priamo v teréne. Pred realizáciou monitoringu je potrebné oboznámiť študentov s vplyvom vybraných chemických zlúčenín na vodný ekosystém, na zdravie človeka¹. Študenti si zopakujú princípy analýz s využitím kolorimetrických rýchlotestov určených na stanovenie vybraných chemických ukazovateľov, oboznámia sa s obsahom kufriku, metódami a rozsahmi merania, spôsobom odoberania vzoriek a postupmi práce pri kolorimetrickom a titračnom procese. Práca v teréne začína stanovením vhodného odberového miesta vybraného vodného toku. Následne sa odoberie vzorka vody, ktorá sa podrobí analýze. Postupne sa vykonávajú analýzy uvedených ukazovateľov podľa stanovených postupov. Výsledky stanovenia môžeme porovnať a klasifikovať na základe limitných hodnôt ukazovateľov uvedených v STN 75 7221 (cit.²). Z fyzikálnych ukazovateľov sa na mieste odberu stanoví teplota, farba a priehľadnosť. Všetky zistené údaje sa zapisujú do formuláru metodiky BISEL (cit.³), ktorej súčasťou je aj stanovenie fyzikálno-chemických ukazovateľov kvality vody. Výsledky monitorovania vodného toku Devenica študentmi 4. ročníka namerané v roku 2007: pH 7, NH_4^+ 0,2 mg dm⁻³, NO_2^- 0,05 mg dm⁻³, NO_3^- 25 mg dm⁻³, PO_4^{3-} 0,5 mg dm⁻³. Celková tvrdosť vody 200 mg dm⁻³ a obsah rozpusteného kyslíka vo vode 7 mg dm⁻³. Výsledkom monitoringu vody pre základné fyzikálno-chemické ukazovatele je III. trieda kvality vody.

Táto práca vznikla za podpory grantu MŠ SR KEGA 3/4282/06.

LITERATÚRA

1. Hronec O., Tóth J., Tomáš J.: *Cudzorodé látky a ich riziká*. s. 198 (2002).
2. STN 75 7221 *Kvalita vody*. Klasifikácia kvality povrchových vôd.
3. Borián G., Borsos S.: *Vízbiológiai praktikum*. 62 s. Green Pannónia Alapítvány, Budapest 2001.

5P-12

VYUŽITIE CHEMICKÝCH FAKTOROV V KRAJINOEKOLOGICKOM HODNOTENÍ POMOCOU GIS VÝSTUPOV

HUBERT HILBERT

*FSEV, Univerzita Alexandra Dubčeka, Študentská 2, 911 50 Trenčín, SR
hilbert@slovanet.sk*

Pre vytýčenie lokálnych environmentálnych problémov v danom regióne je potrebná podrobná analýza prírodného prostredia ako aj vplyv antropogénnej činnosti človeka¹.

Časť údajov je možné získať excerpciou literatúry, terénnym prieskumom, fyzikálno-chemickou analýzou vybraných ukazovateľov znečistenia, identifikáciou bioindikátorov a ďalších parametrov². Údaje boli spracované po identifikácii krajinného systému metódou systémovej analýzy s využitím grafického editora Corel Draw a nástrojov GIS (Geomédia) Intergraph^{3,4}.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/3276/06.

LITERATÚRA

1. Kašiarová S.: Aspekt environmentálneho zdravia v TUR I. Trenčín : FSEV, 2008, 239 s., v tlači.
2. Feszterová M.: Kontaminácia ovzdušia a jej dopad na životné prostredie v dôsledku prevádzky závodu Duslo, a. s. Šafa. s. 48–50. UKF, Prírodovedec č. 216, Nitra 2006.
3. Hilbert H., Kašiarová S.: *Medzinárodná vedecká konferencia „Regióny – vidiek – životné prostredie, 11.–12. novembra 2004, Nitra*, s. 96–98. Zborník abstraktov. SPU, Nitra 2004.
4. Kasanická K., Viliňová K., V: *Inovačné trendy v prírodovednom vzdelávaní*, s. 89–91. PF TU, Trnava 2007.

5P-13

KOSTOLÍK SV. MARGITY ANTIOCHISKEJ OČAMI HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRIE**MICHAL PROCHÁZKA^a, MONIKA STUPAVSKÁ^a,
MONIKA ARANYOSIOVÁ^{a,b} a DUŠAN VELIČ^{a,b}**

^a Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, ^b Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, SR
m_prochazka@zoznam.sk

Kostolík sv. Margity Antiochijskej, nachádzajúci sa v obci Kopčany (okres Skalica, 15 km od Kútov), je považovaný za najstaršiu stojacu cirkevnú stavbu v strednej Európe. Vzorky dreva z kostolíka sme podrobili analýze metódou hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov, SIMS (Secondary Ion Mass Spectrometry).

Vek kostolíka nie je doposiaľ presne určený, publikované názory na jeho datovanie mali pomerne búrlivý vývoj. V dnešnej dobe sa spája s vybudovaním neďalekého veľkomoravského hradiska Valy z 9. stor. Vek organických zvyškov možno určiť na základe rozpadu rádioaktívneho izotopu uhlíka ¹⁴C (doba polpremeny je 5568 rokov). Pomer izotopov uhlíka ¹²C, ¹⁴C je v živom organizme rovnaký a konštantný, avšak po smrti dochádza k pozvoľnému ubúdaniu uhlíka ¹⁴C. Možnosť použitia SIMS v tejto problematike je diskutovaná v tomto príspevku. Základným princípom SIMS techniky je bombardovanie povrchu vzorky primárnymi iónmi s vysokou energiou. Pri prechode vzorkou ióny odovzdávajú časť svojej kinetickej energie na častice vo vzorke a tým generujú kolíznu kaskádu, ktorej výsledkom je emisia atómov a molekúl z povrchu. Tie sú následne ionizované, extrahované do kolóny „doby letu“ (TOF), kde sú na základe rozdielnej hmotnosti separované a analyzované.

Touto metódou sme analyzovali vzorky dreva z kostolíka a porovnávali sme získané spektrá z „historického“ (z pôvodného trámu) a „referenčného“ (zo súčasného obloženia) dreva. Snažili sme sa nájsť pomery izotopov uhlíka ¹²C, ¹⁴C, ale keďže hmotnosti ¹⁴C a organického zvyšku CH₂ sa líšia až na deviatom desiatinnom mieste, čo presahuje možnosti SIMS, píky sa prekrývajú a nie je možné určiť množstvo ¹⁴C vo vzorke. V spektrách sme zistili rozdiely v pomeroch zastúpenia ¹⁴C a CH₂, v „referenčnom“ asi 1:3 a v „historickom“ asi 1:0,8. V spektrách sme pri vyšších hmotnostiach (550–650 m/z a 1050–1250 m/z) pozorovali „fragmentačné rady“ tj. rovnaký úbytok hmotnosti organickej makromolekuly, len pri „referenčnom dreve“. V spektrách „historického dreva“ sa tieto rady nenachádzali. Tieto fakty vysvetľujeme časovou degradáciou dreva, premenou organického materiálu na anorganický, istú formu skamenenia.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/2447/05, APVT-20-029804 a APVV-0491-07.

LITERATÚRA

1. Briggs D.: *Surface Analysis of Polymers by XPS and Static SIMS*. Cambridge University Press, Cambridge 1998.

5P-14

MOLEKULÁRNY PÔVOD VEŠTIARNE V DELFÁCH**JÁN ŠKOVIERA^a, MONIKA ARANYOSIOVÁ^{a,b}
a DUŠAN VELIČ^{a,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, SR
rossum26@gmail.com

Delfy sú významným antickým mestom známe tým, že tu bola veštiareň zasvätená Apollónovi. Vo veštiarni sedávala veštica, ktorá sa pred veštením okúpala a napila sa z miestnych prameňov. Potom bola usadená na trojnožku nad puklinou, z ktorej vychádzal omamný plyn, a pod vplyvom tohto plynu veštila.

V dôsledku tektonickej činnosti vznikli pod Delfami pukliny, z ktorých unikal zemný plyn. Ten mohol byť spolu s miestnymi prameňmi zdrojom intoxikácie veštice (pýtie). Uvedený plyn sa adsorboval na tuhom fázovom rozhraní puklín.

Hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov je dostatočne citlivá metóda analýzy povrchu na kvalitatívnu identifikáciu uvedeného plynu. Princípom metódy je bombardovanie povrchu lúčmi vysokoenergetických častíc (primárnych iónov), ktoré prenikajú do vzorky, pričom dochádza k odovzdaniu časti energie primárnych iónov molekulám vzorky podľa zákonov pružnej zrážky. Ak je energia dostatočne vysoká na pretrhnutie väzby alebo odtrhnutie elektrónu, vznikajú sekundárne ióny (asi 1 % prípadov), ktoré sú elektrickým poľom extrahované do kolóny doby letu (Time of Flight, ToF) a následne dopadajú na detektor. Pri bombardovaní vzorky primárnymi iónmi dochádza k rozpadu molekúl na fragmenty, ako aj k vzniku iónových radikálov, ktoré odtrhnutím elektrónov alebo naopak ich prijatím nadobúdajú prevažne jednotkový náboj. Meranie hmotnosti sekundárnych iónov je založené na rozdielnom čase doby dopadu iónov na detektor.

Po analýze hmotnostného spektra sme zistili zvýšenú koncentráciu etylénu vo vzorke z pukliny v Apollónovom chráme v Delfách. Na danej vzorke sme nepozorovali žiadne iné omamné alebo toxické zlúčeniny v zvýšenej koncentrácii. Vzorku sme porovnávali so vzorkami kameňov z okolia veštiarne.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/2447/05, APVT-20-029804 a APVV-0491-07.

LITERATÚRA

1. Frank L., Král J., v knihe: *Metody analýzy povrchů, Iontové, sondové a speciální metody*, kap. 5, Academia, nakladatelství Akademie věd České republiky, Praha 2002.
2. Briggs D.: *Surface Analysis of Polymers by XPS and Static SIMS*. Cambridge University Press, Cambridge 1998.

5P-15**MULTIMEDIÁLNÍ UČEBNICE VÝPOČTŮ
Z ELEKTROANALYTICKÝCH METOD****JANA SKOPALOVÁ, PAVEL ADAMOVSKÝ a MILAN
KOTOUČEK**

*Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, tř.
Svobody 8, 771 46 Olomouc
jana.skopalova@post.cz*

Samostudium a domácí příprava jsou nedílnou součástí vysokoškolského studia. Klíčovou podmínkou úspěchu těchto výukových forem je snadno dostupná kvalitní studijní literatura.

Na Přírodovědecké fakultě Univerzity Palackého v Olomouci jsme v minulých letech vytvořili multimediální učebnici příkladů z analytické chemie¹, kterou využívají studenti všech chemických studijních oborů při samostudiu k procvičování úloh řešených v seminářích z analytické chemie. V současnosti připravujeme další multimediální učebnici zaměřenou na problematiku výpočtů v elektroanalytické chemii. Učebnice shrnuje stručné teoretické základy nejběžnějších elektroanalytických metod a uvádí praktické příklady včetně vzorových řešení a návodů na řešení, jejichž zobrazení si může uživatel volit. Je dělena do několika samostatných modulů: základní elektrické veličiny a jejich měření, elektrochemické články, potenciometrie, coulometrie a elektrogravimetrie, voltametrie a vodivostní měření. Příklady jsou vybrány tak, aby studentům usnadnily jejich domácí přípravu na laboratorní cvičení a zpracování naměřených dat, a také přípravu na semináře z instrumentálních analytických metod.

Vytvářená učebnice má hypertextovou strukturu. Kromě výhody křížových a hypertextových odkazů, které umožňují rychlé získání potřebných informací, je další obrovskou předností elektronického textu možnost jeho průběžného doplňování, modifikování, rozšiřování a aktualizace. Prostřednictvím Internetu bude učebnice veřejně přístupná i pro studenty jiných škol a nejširší veřejnosti, a to na internetových stránkách Katedry analytické chemie PřF UP (<http://ach.upol.cz>).

Tato práce vznikla za podpory projektu FRVŠ 1313/2008.

LITERATURA

1. Kotouček M., Skopalová J., Adamovský P.: *Příklady z analytické chemie*. <http://ach.upol.cz/ucebnice>.

6P-01**SORPCE KOVŮ NA OXYHUMOLITY, UHLÍ A LIGNIT Z LOŽISEK V ČESKÉ REPUBLICE****JAROMÍR NOVÁK, BARBORA ANTOŠOVÁ a JOSEF KOZLER***Technická univerzita v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec 1
jaromir.novak@vuanch.cz*

Huminové látky (HS) mají schopnost vázat vícemocné kationty. Pro praktické využití této jejich vlastnosti ve větším rozsahu budou vhodné takové materiály, které po natěžení budou vyžadovat jen málo nákladné úpravy.

V této práci byly zkoumány vazebné schopnosti přírodních oxyhumolitů, uhlí a lignitu, dále těchto „aktivovaných“ surovin v kyselině dusičné a některých surovin oxidovaných kyselinou dusičnou pro dvoumocné ionty.

Měřena byla vazba Pb^{2+} , Cu^{2+} a Zn^{2+} při koncentracích $0,8 \cdot 10^{-3}$ a $2,8 \cdot 10^{-3}$ mol l^{-1} při dávce 1 g HS ve 400 ml suspenze. Pro měření bylo zvoleno vsádkové uspořádání, rovnovážné pH v rozmezí 5 až 6, při kterém se na HS váže největší množství HS (cit.¹). Stanovován byl zbytek volných iontů v roztoku.

Největší účinnosti odstranění, a to téměř 99 %, došlo při nižší koncentraci Pb^{2+} a to u všech zkoumaných surovin. U všech sledovaných iontů a při obou koncentracích bylo jejich vysoké odstranění z roztoků naměřeno u oxyhumolitů, aktivovaných oxyhumolitů, oxidovaných uhlí a oxidovaného lignitu. Neoxidované uhlí a lignit vázaly při vyšší koncentraci průměrně 70 % Pb^{2+} , 70 % Cu^{2+} resp. 30 % Zn^{2+} . Při nižší koncentraci byly průměrné hodnoty vázaných iontů pro neoxidované suroviny u Cu^{2+} 91 % a Zn^{2+} 66 %.

Výsledky měření prokázaly, že uhelné suroviny mohou sloužit jako levné sorbenty pro těžké kovy.

Tato práce vznikla v rámci řešení projektu IM4684788502 s podporou MŠMT ČR spadajícího do programu výzkumu a vývoje PPZ-DP01.

LITERATURA

1. Čezíková J., Kozler J., Madronová L., Novák J., Janoš P.: *React. Funct. Polym.* 47, 111 (2001).

6P-02**IMOBILIZACE IONTŮ TĚŽKÝCH KOVŮ Z REÁLNÉ ODPADNÍ VODY NA PŘÍRODNÍM UHLÍ****LUCIE RUPPENTHALOVÁ a LUCIE KUZNĚCOVOVÁ***Ostravská Univerzita v Ostravě, 30. Dubna 22, 701 03 Ostrava
lucie_ruppenthalova@centrum.cz*

V rámci studia byla zkoumána sorpce iontů těžkých kovů (TK) z reálné odpadní vody na přírodním uhlí. K této práci byla použita kyselá průmyslová odpadní voda (pH 2) jihočeské strojírenské firmy. Zkoumané TK byly v odpadní vodě obsaženy v malých koncentracích. Jako sorbenty byly použity alterované a hnědé uhlí se zrnitostí 0,25–0,8 mm.

Experiment byl proveden vsádkovým uspořádáním

Tabulka I

Změny koncentrace TK po sorpci na uhlí (3g/50 ml)

Iont	Pův. konc. [mmol l^{-1}]	Koncentrace po sorpci [mmol l^{-1}]	
		alterované uhlí	hnědé uhlí
Cd^{2+}	0,00107	0,00062	0,00098
Cu^{2+}	0,04201	0,01598	0,03304
Ni^{2+}	0,00579	0,00367	x
Zn^{2+}	0,40679	0,24546	0,33950

(batch). K 50 ml vzorku odpadní vody bylo postupně přidáno 0,1–3 g sorbentu (kontaktní doba 24 hodin). Některé výsledky shrnuje tabulka I.

Přídavek uhlí způsobil snížení obsahu TK vlivem zachycení na přírodním uhlí. Při srovnání použitých sorbentů vyplývá, že k větší sorpci TK docházelo u alterovaného uhlí, které má rozvinutější mikroporézní strukturu (objem mikropórů $235 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ proti $152 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ u hnědého uhlí). Ta zřejmě umožňuje lepší přístup iontů kovů k aktivním místům na povrchu uhlí.

Ze sledovaných TK se nejlépe vázaly zinečnaté a měďnaté ionty, jejichž koncentrace v odpadní vodě byla řádově vyšší, než u iontů nikelnatých a kadmátých. Sorpci Ni^{2+} na hnědém uhlí nebylo možno vyhodnotit (malá reprodukovatelnost výsledků).

V odpadní vodě byly přítomny také ionty Pb^{2+} , jejichž obsah po přidání uhlí vzrostl. Pravděpodobně to bylo způsobeno snadnějším vyluhováním olova z uhelného skeletu v porovnání s ostatními kovy.

Potvrdilo se, že na sorpci TK mají vliv jejich vlastnosti, strukturální parametry uhlí a pH odpadní vody, které by mohlo způsobit zpětné vymývání TK z uhelného sorbentu. Přesto se ukázalo, že v některých případech lze přírodní uhlí jako sorbent TK použít i pro silně kyselou odpadní vodu.

Tato práce vznikla za podpory grantu MPO č. 2A-1TP1/083 a GA ČR č. 105/07/P041.

6P-03**VPLYV Se NA AKUMULÁCIU A TRANSLOKÁCIU TOXICKÝCH (Cd, Pb) A ESENCIÁLNÝCH (Cu, Zn) KOVŮ V SEMENÁČIKOCH *Sinapis alba* L.****AGÁTA FARGAŠOVÁ***Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovensko
fargasova@fns.uniba.sk*

Se nie je pre rastliny esenciálnym prvkom a jeho nadbytok oslabuje klíčivosť semien, rast rastlín a vyvoláva chlorózu². Nízke koncentrácie Se inhibujú peroxidáciu lipidov, čo podporuje rast, vyššie koncentrácie pôsobia ako prooxidanty a výrazne znižujú rastlinnú produkciu. Kým Se vystupuje ako antagonista mnohých toxických kovov (Hg, Cd, As, Ag, Pb, Cu), naopak ako jeho antagonista sa uvádza Zn (cit.¹).

V testoch sa používali 8 dňové semenáčky *Sinapis alba* L., ktoré rástli v kontrolnom alebo kovy obsahujúcom hydroponickom roztoku². Kovy sa aplikovali jednotlivo ($\text{CdCl}_2 \cdot 2,5 \text{H}_2\text{O}$; $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$; $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$; $\text{ZnSO}_4 \cdot 7 \text{H}_2\text{O}$; SeO_2) aj v kombináciách (Se+Cd; Se+Zn; Se+Cu; Se+Pb) v koncentráciách (mg l^{-1}): Se – 3; Cu – 3; Cd – 6; Zn – 15; Pb – 100) a ich obsah sa v koreňoch a výhonkoch stanovoval AAS analýzou s plameňovou a elektrotermickou atomizáciou (AAS 3, Carl Zeis 1)². Experimenty sa robili v troch opakovaníach.

Všetky testované kovy zvyšovali v *S. alba* akumuláciu Se, ktorého obsah sa, v porovnaní s obsahom naakumulovaného Se z roztoku len so Se, zvýšil v obidvoch častiach rastlín o 4 (Se+Cu) až 68 % (Se+Cd). Výnimkou bola len kombinácia Se+Cu, pri ktorej konc. Se vo výhonku dosiahla len 33 % jeho obsahu naakumulovaného z roztoku obsahujúceho len Se. V najväčšom množstve sa v obidvoch častiach rastlín akumuloval Se z kombinácie Se+Cd. Opačne, Se znižoval akumuláciu testovaných kovov v obidvoch častiach rastlín s výnimkou kombinácií Se+Cd a Se+Cu, kedy Se zvyšoval akumuláciu Cd a Cu v koreňoch o 24 a 9 %, ale takmer úplne redukoval akumuláciu Cu vo výhonkoch. Se veľmi výrazne redukoval aj akumuláciu Pb v koreni (o 43 %) aj vo výhonkoch (o 72 %). Ako jednotlivé kovy tak aj kovy z kombinácií sa viac akumulovali v koreňoch ako vo výhonkoch.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/4361/07.

LITERATÚRA

1. Sugawara N., Sugawara C.: Trace Subst. Environ Health 21, 440 (1987).
2. Fargašová A., Pastierová J., Svetková K.: Plant Soil Environ. 52, 8 (2006).

6P-04

MOŽNOSTI PŘEPRACOVÁNÍ NEBEZPEČNÝCH CHEMICKÝCH LÁTEK A ODPADŮ

JURAJ KIZLINK

Fakulta chemická VUT, Purkyňova 118., 612 00 Brno
kizlink@fch.vutbr.cz

V praxi se často setkáváme s nebezpečnými chemickými látkami, a to jak už z provozu vyřazenými, tak i jejich odpadem. Obvykle se jejich odstranění resp. zneškodňování řeší jejich chemickou destrukcí^{1–6}, nebo také odevzdáním do spalovny nebezpečných odpadů s finanční úhradou za tuto činnost. Jsou zde ale možnosti jejich chemického přepracování na hodnotné a v praxi využitelné látky, nebo různé meziprodukty výrobků^{7–10}.

U aromatických aminů bylo využito diazotace a rozkladem diazoniových solí v methanolu na přípravu methoxyderivátů. Také je zde i možnost hydrolýzou připravit hydroxyderiváty, které jsou meziprodukty pro různé organické syntézy^{7,8}. Hydraziny byly přepracovány reakcí s benzaldehydem na aziny. Alkalické kyanidy reakcí s benzylchloridem zase na benzylkyanid, hydrolýzou a esterifikací na fenylacetan ethylnatý, ze kterého lze redukcí připravit 2-fenylethanol, jako náhradu růžového oleje⁸.

LITERATURA

1. Dawson G. W., Mercer B. W.: *Hazardous Waste Management*, Wiley, New York 1986.
2. Lunn G., Sansone B.: *Destruction of Hazardous Chemicals in the Laboratory*, Wiley, New York 1990.
3. Luxon S. G.: *Hazards in the Chemical Laboratory*, Royal Society of Chemistry, London 1992.
4. Cheremisinoff N. P.: *Handbook of Solid Waste Management and Waste Minimization Technologies*, Elsevier Science, Burlington 2003.
5. Shafer D. A.: *Hazardous Material Characterization*, Wiley, New York 2006.
6. Černý J. V., Černý M., Paleček M., Procházka M.: *Organická syntéza – Organikum*, Academia, Praha 1971.
7. Večeřa M., Panchartek J.: *Laboratorní příručka Organické chemie*, SNTL, Praha 1987.
8. Kizlink J.: *Nakládání s odpady*, Fakulta chemická VUT, Brno 2007.
9. Kuraš M.: *Odpady – jejich využití a zneškodňování*, VŠCHT, Praha 1994.
10. Kuraš M.: *Odpadové hospodářství*, Ekomonitor, Chrudim 2008.

6P-05

PŘÍPRAVA KATALYZÁTORU PRO PALIVOVÉ ČLÁNKY TYPU PEM

JAKUB POLONSKÝ a MARTIN PAIDAR

Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6-Dejvice
jpolonsky@gmail.com

Palivové články získávají pozornost jako perspektivní nástroje pro energetiku budoucnosti, zejména pro automobilový průmysl¹. Jednou z klíčových částí palivového článku typu PEM je katalyzátor, jehož aktivní složka je tvořena zcela nebo zčásti platinou. Jako nosič se používá uhlík ve formě sazí. Na nosič se platina nanáší nejčastěji chemickou depozicí, tj. redukcí platiny z roztoku v přítomnosti nosiče. Jako redukční činidlo se používá např. formaldehyd.

Cílem práce bylo pomocí metodiky popsané v literatuře² opakovatelně a reprodukovatelně připravit katalyzátor pro palivové články typu PEM.

Katalyzátory byly připraveny redukcí platiny z roztoku kyseliny hexachloroplatičité formaldehydem v přítomnosti sazí Black Pearls 2000. Postup přípravy byl modifikován ve smyslu délky reakční doby, stáří roztoku platiny a typu míchání. Aktivita na redukcí vodíku a specifický povrch připravených katalyzátorů byly měřeny na rotační diskové elektrodě³. Obsah platiny v katalyzátoru byl stanoven pomocí AAS. Velikost a morfologie částic byla zkoumána pomocí SEM a HR-TEM. Katalyzátory byly porovnány s komerčně dostupným katalyzátorem E-Tek HP 30 % Pt.

Aktivita připravených katalyzátorů byla srovnatelná s komerčním katalyzátorem E-Tek, specifický povrch platiny byl ve srovnání s komerčním katalyzátorem přibližně poloviční. Obsah platiny se pohyboval v rozmezí 20–30 hm.%. Připravené katalyzátory vykazovaly přítomnost sluků platiny o velikosti okolo 40 nm, které jsou pro funkci

katalyzátoru nežádoucí. Reprodukovatelnost přípravy je nutné dále ověřit na větším množství vzorků.

Tato práce vznikla za finanční podpory Evropské Unie v rámci řešení projektu "Apollon-B", Contract No.: NMP3-CT2006-033228.

LITERATURA

1. Mathias M. F.: *Interface* 14, 24 (2005).
2. Drillet J.-F., Dittmeyer R., Jüttner K.: *J. Appl. Electrochem.* 37, 1219 (2007).
3. Schmidt T. J., Gasteiger H. A., Stäb G. D., Urban P. M., Kolb D. M., Behm R. J.: *J. Electrochem. Soc.* 145, 2354 (1998).

6P-06

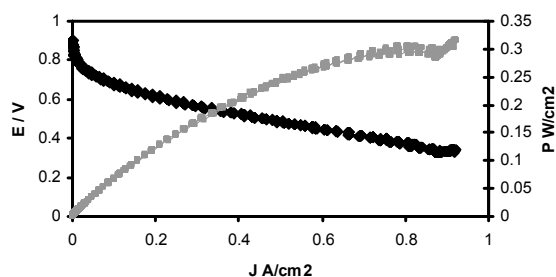
METODIKA TESTOVÁNÍ PROVOZNÍCH PARAMETRŮ PALIVOVÝCH ČLÁNKŮ

JAKUB MALIŠ^a a MARTIN PAIDAR

*Ústav anorganické technologie, Fakulta chemické technologie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
jakub.malis@vscht.cz*

V současné době uvažují přední výrobci automobilů o zavedení membránových palivových článků do sériové výroby jako alternativu ke klasickým zážehovým a vznětovým motorům. Využití palivových článků jako potenciální zdroj energie pro přenosná zařízení zkoumají rovněž výrobci elektroniky.

Pro výkon membránových palivových článků jsou určitými parametry především provozní teplota. Dále pak složení vstupních plynů, jejich průtok a tlak. Vodivost v současné době používaných perfluorovaných membrán je silně závislá na obsahu vody, které jsou v suchém stavu prakticky nevodivé. Z toho důvodu je nutné dávkované plyny rovněž zvlhčovat. Všechny výše zmíněné veličiny ovlivňují provoz palivového článku a proto musí být brány v úvahu při jejich testování. Bohužel pro různé typy článků jsou vhodné často zcela rozdílné podmínky. Vhodnost daného typu článku lze posoudit až



Obr. 1. Voltampérová charakteristika palivového článku s experimentální anodou při teplotě 80 °C; černá křivka – závislost napětí na měrném proudu a šedá křivka – měrný výkon článku

po několik desítek až stovek hodin trvajících testech, k čemuž se využívají tzv. testovací stanice. Optimální testovací stanice musí umožňovat kontrolu všech uvedených veličin.

V rámci této práce byla sestavena testovací stanice, která splňuje požadavky, pro testování různých palivových článků v teplotním rozsahu 40–160 °C.

Elektrický proud generovaný palivovým článkem je přiváděn na elektronickou zátěž. Pro palivové články s testovanými komponenty byly naměřeny volt-ampérové charakteristiky (obr. 1.), na jejichž základě probíhala další optimalizace jak provozních podmínek, tak případné změny přípravy jednotlivých komponent.

Ve druhém kroku byl dlouhodobě sledován výkon článku provozovaném při optimálních podmínkách s cílem ověřit životnost článku.

Tato práce vznikla za finanční podpory Evropské Unie v rámci řešení projektu "Apollon-B", Contract No.: NMP3-CT2006-033228.

6P-07

STUDIUM MOŽNOSTÍ PRŮMYSLOVÉ VÝROBY ETHANDINITRILU

JAN ŠIMBERA^a, KAREL ZELINKA^a, JINDŘICH BĚLUŠA^a a PAVEL PAZDERA^b

*^a Lučební závody Draslovka a.s. Kolín, Havlíčkova 605, 280 99 Kolín, ^b Centrum pro syntézu za udržitelných podmínek a jejich management, Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská, 611 37 Brno
simbera@chemi.muni.cz*

Ethandinitril (dikyan) je důležitou surovinou pro chemický průmysl, kde slouží např. k výrobě oxamidu, diiminosukcinonitrilu a dalších meziproductů pro výrobu léčiv, fytoefektorů a pod. Samotný ethandinitril je důležitým fumigantem a v poslední době nachází uplatnění při výrobě nanomateriálů.

V příspěvku budou diskutovány možnosti jeho průmyslové výroby z hlediska technologické náročnosti, výtěžku, čistoty a vzniku odpadů.

Tato práce vznikla za podpory grantu Ministerstva průmyslu a obchodu České republiky, projekt č. 2A-1TP1/090.

6P-08**AMIDATION OF O-(CARBOXYMETHYL)STARCH WITH PRIMARY AMINES****VIERA MAZÍKOVÁ^a, IVA SROKOVÁ^a, MILAN OLŠOVSKÝ^a a VLASTA SASINKOVÁ^b**

^a Faculty of Industrial Technologies, Trenčín University of A. Dubček, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov, ^b Institute of Chemistry, Center of Glycomics, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 38, Bratislava, Slovak Republic mazikova@fpt.tnuni.sk

Partially amidated O-(carboxymethyl) starch (CMS) derivatives were prepared from CMS (DS=0.3) by treatment with different primary amines (C₆, C₁₀, C₁₂) in methanol¹ or DMSO with DMAP or DCCI as catalyst. The characterisation of reaction product was made by elemental analysis and FTIR spectroscopy. Surface-activity and functional properties related to application in textile finishing and laundry process – washing power and antiredepositional efficiency have been studied. Some of the tested derivatives exhibited excellent detergent performance properties.

This work was financially supported by the Slovak Grant Agency VEGA, grant No. 2/6131/26.

LITERATÚRA

1. Sroková I., Sasinková V., Ebringerová A.: *Fibres&Textiles in Eastern Europe* 15, 120 (2007).

6P-09**ŠTÚDIUM „ŽIVEJ“ RADIKÁLOVEJ POLYMERIZÁCIE STYRENU V PRÍTOMNOSTI ZNAČIEK****EUDMILA HRČKOVÁ, ŠTEFAN CHMELA a MAREK STACH**

Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovenská republika upollud@savba.sk

V poslednom desaťročí sme svedkami rastúceho záujmu o živú radikálovú polymerizáciu, ktorá umožňuje pomerne jednoduchú prípravu polymérov s programovanou výstavbou makromolekúl¹. Ide napr. o regulovanie mólovej hmotnosti, prípravu polymérov s úzkou distribúciou mólovej hmotnosti, o možnosť zavedenia koncových funkčných skupín na polymérnych reťazcoch alebo o jednoduchú prípravu blokovaných kopolymérov.

Princíp metódy riadenej polymerizácie je založený na vratných reakciách stabilných nitroxylových radikálov s rastúcimi makroradikálmi. Prechodne vzniknutý labilný alkoxyamin sa rozkladá na pôvodný nitroxylový radikál a rastový radikál, ktorý počas svojej existencie stačí adovať časť prítomných molekúl monoméru. Opätovné vratné spojenie makroradikálu s nitroxylovými radikálmi takmer úplne eliminuje vzájomné nevratné terminačné reakcie medzi rastúcimi makroradikálmi. Takto pôsobením stabilných radikálov sa zamedzí „odumretiu“ makroradikálov a „živá“ polymerizá-

cia môže pokračovať.

Ideálna živá polymerizácia začína rýchlou iniciáciou, pri ktorej sa vytvorí konečný počet rastúcich makroradikálov. V reálnej živej radikálovej polymerizácii môžu však radikály nielen nevratne zanikať, ale môžu sa aj tvoriť nové radikály spontánnou termickou iniciáciou (najmä v prípade styrénu²). V predkladanej práci sa študoval vplyv viacfunkčných značiek, obsahujúcich okrem radikálového centra chromofór na báze naftalénimidu na priebeh polymerizácie styrénu. Fluorescenčné značky obsahovali radikálové centrum vo forme nitroxylového radikálu –NO^o, resp. alkoxyamínu –NOR. Významný prínos použitia uvedených derivátov je v tom, že získaný polymér obsahuje fluorescenčnú značku na konci reťazca čo umožňuje sledovanie priebehu polymerizácie ako aj analýzu a charakterizáciu výsledného polyméru absorpčnou a emisnou spektroskopiou. Zistilo sa, že rozsah „živosti“ procesu sa so zvyšovaním konverzie znižoval, čo však nemalo výrazný vplyv na polydisperezitu. Výrazné zvýšenie viskozity v priebehu polymerizácie je najpravdepodobnejším dôvodom zachovania nízkej polydisperezity.

Táto práca vznikla s podporou grantu VEGA 2/0082/08.

LITERATÚRA

1. Davis K. A., Matyjaszewski K.: *Adv. Polym. Sci.* 159, 1 (2002).
2. Devonport W., Michalak L., Malmström E., Mate M., Kurdi B., Hawker C. J.: *Macromolecules* 30, 1929 (1997).

6P-10**MOŽNOSTI SLEDOVÁNÍ POLYMERACE STYRENU NA POLYSTYREN METODOU INFRAČERVENÉ SPEKTROSKOPIE****MICHAEL SCHWARZE**

SYNTHOS Kralupy a.s., O. Wichterleho 810, 278 52 Kralupy nad Vltavou michael.schwarze@kaukuk.cz

Hlavným produktovým portfóliem spoločnosti SYNTHOS je výroba butadien-styrenových kaučuků (typu Kralex) a polystyrenů (typu Krasten, Koplén). Laboratoř FTIR-spektroskopie firmy SYNTHOS Kralupy a.s. se zabývá rozbory spekter polymerů, stanovením elastomeru v houževnatém polystyrenu, mikrostruktury polybutadienu, rozbory olejů v provozech (tribodiagnostika), stanovením povrchové úpravy vzorků, identifikaci neznámých látek, kontaminací (ATR-FTIR) atd. Tento příspěvek je věnován možností sledovat přeměnu styrenu na polystyren metodou infračervené spektroskopie. Kinetika polymerace zpěňovatelného polystyrenu se běžně sleduje měřením konverze polymerační násady refraktometricky. Jedná se o měření nenáročného a především rychlého, kdy výsledek je k dispozici již za několik minut po odběru vzorku z reaktoru. Snížení tepelné vodivosti pěnového polystyrenu se dosahuje přidávkou sazí, grafitu nebo hliníkového prášku do polymerační násady, což zjednodušuje přímé měření stupně konverze refraktometricky. Byla prověřena možnost stanovení stupně konverze na základě

měření IR spekter ve střední infračervené oblasti (MID IR). Kalibrace byla provedena na vzorcích odebraných ze čtvrtprovozního polymeračního reaktoru při suspenzní polymeraci styrenu. Po odběru byla reakční směs odstředěna a k měření byla použita organická fáze. Ve střední IR oblasti bylo použito celkem 26 kalibračních standardů. Konverze pro kalibraci byla stanovována refraktometricky pomocí refraktometru Abbe (C. Zeiss, Jena, Německo), vzorky byly odebírány pouze v průběhu nízkoteplotního cyklu (do konverze cca 70–80 %) každých 30 minut. IR spektra ve střední oblasti se měřila ve formě kapilárních filmů mezi dvěma Si okénky (průměr 32 mm, tloušťka 2 mm) ve speciálně zhotoveném držáku. Spektra byla snímána v intervalu 4000–450 cm⁻¹ spektrometrem FTIR Nicolet NEXUS. Spektrální data byla zpracována pomocí programu TQ Analyst¹; kalibrace byla provedena pomocí algoritmu PLS (Partial Least Squares). Ke sledování kinetiky polymerace styrenu bylo využito rozdílů ve spektrech styrenu a polystyrenu. Výrazné rozdíly lze pozorovat v oblasti 2980–2800, 1635 a 1600 cm⁻¹.

Na základě porovnání výsledků hodnot konverzí kalibračních standardů naměřených refraktometricky a vypočítaných metodou PLS je možno konstatovat, že měření ve střední IR oblasti je možno využít ke sledování kinetiky polymerace.

LITERATURA

1. *Spektroskopický software TQ Analyst* (manuál), Nicolet CZ s.r.o. Praha 2006.

6P-11

VLASTNOSTI RECYKLOVANÝCH UHLÍKOVÝCH VLÁKEN

JAN GRÉGR^a, VLADIMÍR KOVAČIČ^b
a JIŘÍ MILITKÝ^c

^a Katedra chemie FP TU v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec, ^b Katedra textilních materiálů, FT TU v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec, ^c Katedra textilních materiálů, FT TU v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec
jan.gregr@tul.cz

Vlákna vysoce výkonných kompozitních materiálů jsou materiálem drahým a těžko dostupným. Při jejich zpracování se provádí velké množství zkoušek a tím vzniká primární odpad, po době životnosti výrobků vzniká problém, co s těmito výrobky. Z tohoto důvodu je velký zájem o recyklaci použitých kompozitních materiálů. Provedli jsme řadu experimentů pro získání uhlíkových vláken recyklací kompozitů s termosetovou maticí.

Primární experimenty pomohly určit optimální podmínky pro úplnou destrukci epoxidových pojiv kompozitů. U recyklovaných vláken byly studovány morfologické změny, změny povrchu, ztráty hmotnosti, změny průměrů a změny mechanických vlastností^{1,2}. Byl proveden rozbor prachových částic uvolňujících se z recykláží a posouzena možná rizika. Kromě laboratorních vzorků byly zkoušeny poloprovozní produkty recyklace provedené na zařízení ve VZLÚ a.s. Praha.

Tato práce vznikla za podpory Výzkumného centra Textil II M 0553 MŠMT ČR.

Tabulka I

Změny průměru a hmotnosti vláken po recyklaci

Proces	Prostředí	Průměr [μm]	Ztráta hmotnosti [%]
Standard	vzduch	4,94	57,3
St. –50 °C	vzduch	6,39	28,6
St. –100 °C	vzduch	7,38	5,5
St. –100 °C	dusík	7,43	4,4
Původní vlákno	–	7,71	–

Tabulka II

Změny mechanických vlastností vláken po recyklaci

Proces	Prostředí	Pevnost v tahu [MPa]	E-modul [GPa]
Standard	vzduch	820	83
St. –50 °C	vzduch	1122	104
St. –100 °C	vzduch	1496	102
St. –100 °C	dusík	1731	105
Původní vlákno	–	1700	105

LITERATURA

1. Valeš M., Štekner B., Cihelník K., Grégr J., Kovačič V.: *Czech Aerospace Proceedings* 3, 27 (2007).
2. Kovačič V., Grégr J., Valeš M., Štekner B., Cihelník K.: *14th International Conference Structure and Structural Mechanics of Textiles, November 2007, Liberec, Proc.*, p. 33–38. Liberec 2007.

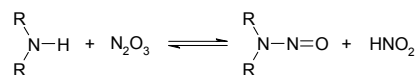
6P-12

PREPARATION AND PROPERTIES OF ECOLOGICALLY MODIFIED RUBBER COMPOUNDS

DARINA ONRUŠOVÁ*, TATIANA BAZYLÁKOVÁ,
MARIANA PAJTÁŠOVÁ, MILAN OLŠOVSKÝ,
SLÁVKA EALÍKOVÁ, and EUGEN JÓNA

Faculty of Industrial Technologies, TnU AD, I. Krasku
491/30, 020 01 Púchov, Slovakia
ondrusova@fpt.tnuni.sk

One of the main priorities in the present rubber industry is production of ecologically friendly rubber compounds in according with high quality of products. Commercially used accelerators, like Dithiocarbamates and Benzothiazoles containing secondary amine fragments, may to form dangerous cancerogenic Nitrosamines according to the reaction¹:



The creation of Nitrosamine-free vulcanization systems is one of the important environmental problems in the car

tyres production. Present work deals with preparation of new ecologically friendly Nitrosamine-free vulcanization system of rubber compound for passenger car tyres. The formation of Nitrosamine-free vulcanization system was provided by the way of substitution of commercially used benzothiazolic accelerator with some new accelerators on the base of Dithiophosphates, that do not form dangerous Nitrosoamines.

The new Nitrosamine-free vulcanization systems were prepared by the substitution of commercially used accelerator Vulkanit DZ with new dithiophosphate accelerators². In all of the prepared systems in the function of plasticizer was used low-aromatic oil (RAE). Vulcanization characteristics and physical properties of new prepared systems were compared with the properties of commercial rubber compound for passenger car tyres.

On the base of evaluated results two optimal synergistic vulcanization systems were selected³.

The authors wish to thank the Slovak Grant Agency VEGA No.1/3161/06 and AV grant No. 4/2014/08 for financial support.

REFERENCES

1. Graf H. J.: *Nitrosamine-free Vulcanization Systems, New Thiophosphate Generation - Advantages in Nitrosamine-free Vulcanization Systems*, IRC '93, Orlando, USA 1993.
2. Issel H. M., Steger L., Bischoff A.: *Application of Dithiophosphates in Silica Reinforced Elastomer Compounds 6th Fall Rubber Colloquium, November 11th, Hannover, Germany 2004.*
3. Ondrušová D., Pajtášová M.: *Research Report No. 5/2006, FPT – Matador, a.s., Púchov, Slovakia 2006.*

6P-13

VLIV PŘÍDAVKU KERATINOVÉHO HYDROLYZÁTU NA OBSAH VOLNÉHO FORMALDEHYDU VE VYTVRZENÉ MOČOVINOFORMALDEHYDOVÉ PRYSKYŘICI

SVATOPLUK SUKOP^a, PAVEL MOKREJŠ^b
a KAREL KOLOMAZNÍK^c

^a Ústav chemie, ^b Ústav inženýrství polymerů, ^c Ústav automatizace a řídicí techniky, Fakulta technologická, Univerzita T. Bati ve Zlíně, nám. TGM 275, 762 72 Zlín
sukop@ft.utb.cz

Při výrobě dřevovláknitých desek, které nalézají hlavní uplatnění při aplikaci v nábytkářském průmyslu, jsou používána fenolformaldehydová a močovinoformaldehydová adheziva. V průběhu vytvrzování, kdy vznikají z rozpustných termoplastických rezolů nerozpustné termosetické rezity, dochází k uvolňování formaldehydu. Rovněž tak při vytvrzování močovinoformaldehydových adheziv, které obsahují (na rozdíl od formaldehydových) vyšší podíl volného formaldehydu, se uvolňuje formaldehyd¹.

Cílem práce bylo sledovat vliv přídatku keratinového hydrolyzátu na obsah volného formaldehydu ve vytvrzené močovinoformaldehydové pryskyřici. Keratinový hydrolyzá

byl připraven modifikovaným redukčním způsobem, spočívajícím ve dvoufázovém rozkladu ovčí vlny². Močovinoformaldehydová pryskyřice byla připravena polykondenzací formaldehydu s močovinou v slabě kyselém roztoku³. Po nanesení močovinoformaldehydové pryskyřice s určitým obsahem keratinového hydrolyzátu na bukovou dýhu bylo provedeno vytvrzování při teplotě 125 °C po dobu v rozmezí od 20 do 80 minut. Volný formaldehyd byl stanoven v modifikované močovinoformaldehydové pryskyřici provozní lahvou metodou⁴.

Výsledky experimentů v laboratorních podmínkách prokázaly příznivý vliv přídatku keratinového hydrolyzátu na redukci volného formaldehydu ve vytvrzené močovinoformaldehydové pryskyřici. Pro provozní ověření ale bude nutno provést další experimenty.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM 7088352102.

LITERATURA

1. Šimek L.I.: *Plasty a kaučuk* 40, 132 (2003).
2. Sukop S.: *ChemZi.* 3, 206 (2007).
3. Šňupárek J., Černý J.: *Animoplasty*, 32, SNTL, Praha 1963.
4. ČSN EN 717-3. *Formaldehyde release by the flask method*, ECS 1997.

6P-14

SPALOVACÍ ZKOUŠKY ENERGETICKÉHO VYUŽITÍ CERTIFIKOVANÉHO PALIVA TPS NOLO 1 NA BÁZI LAGUN OSTRAMO NA ENERGETICKÝCH BLOCÍCH

BOHUMÍR ČECH a JAN MATOUŠEK

^a VŠB-TU Ostrava, Tř. 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava-Poruba
bohumer.cech@vsb.cz

V rámci realizace akce „Opatření vedoucí k nápravě ekologické zátěže skládky odpadů s.p. DIAMO v Ostravě „NÁPRAVNÁ OPATŘENÍ – LAGUNY OSTRAMO“ byly v ČEZ, a.s. Elektrárně Dětmorovice a v ENERGETICE TŘINEC, a.s. provedeny spalovací zkoušky se směsí certifikovaného paliva TPS NOLO 1 vyrobené na bázi lagun s černým uhlím.

Spalovací zkoušky v ČEZ, a.s. Elektrárně Dětmorovice byly provedeny v květnu 2007 na výrobních blocích VB3 a VB4 pracujících do společného odsířovacího zařízení absorberu a v červnu 2007 v ENERGETICE TŘINEC, a.s.. Rozsahy zkoušek a jejich náplně byly vždy určeny jednotlivými „Projekty spalovacích zkoušek“, vypracovaných katedrou energetiky VŠB-TU a schválené“ Rozhodnutím KÚ Moravskoslezského kraje, odboru životního prostředí a zemědělství ve věci změny integrovaného povolení pro jednotlivá zařízení. Pro každou spalovací zkoušku bylo připraveno certifikované palivo na bázi ropných kalů s černým uhlím-TPS-NOLO.

Předložený materiál je věnován problematice spalování TPS-NOLO 1 ve fluidním kotli s cirkulující fluidní vrstvou v Energetice Třinec a.s. Pro vlastní spalovací zkoušku bylo připraveno celkem 1200 t směsi černého uhlí a TPS-NOLO1

v hmotnostním poměru 90 % : 10 %. V průběhu spalovacích zkoušek byly provedeny 3 zkoušky. První byla provedena s čistým uhlím, následují zkoušky se směsí 10 % TPS NOLO 1 s 90 % černého uhlí při různých výkonech kotle.

V průběhu spalovací zkoušky byly odebírány kontinuálně, případně jednorázově měřeny všechny vstupující a vystupující hmoty ze spalovacího procesu CO, NO_x, SO₂, C_xH_y, PAU, PCB, PCDD, PCDF, těžké kovy, TZL. Rovněž byly podrobně sledovány výsledné vedlejší produkty popelů ze spalování.

Způsob spalování ve fluidní vrstvě velkých energetických zdrojů je schopen bezpečně spalovat ropné chemické látky a jejich směsi při dokonalém rozkladu organických sloučenin.

Velké energetické zařízení s fluidní spalovací technologií lze v přiměřeném množství využít pro energetické a ekologické zhodnocení odpadních látek podobně jako cementářské technologie.

6P-15 VPLYV VONKAJŠIEHO PROSTREDIA NA ÚŽITKOVÉ VLASTNOSTI SILIKÁTOVÝCH STREŠNÝCH KRYTÍN

EVA SMRČKOVÁ a JANA KOZÁNKOVÁ

*Ústav anorganickej chémie, FCHPT STU Bratislava, technológia a materiálov, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, SR
eva.smrckova@stuba.sk*

Životnosť kvalitného výrobku je ovplyvnená podmienkami, za ktorých sa používa. V prípade strešnej krytiny je nezanedbateľný vplyv vonkajšieho prostredia. Prejaví sa zmenami mikroštruktúry materiálu, ktorá úzko súvisí s pevnosťou a trvanlivosťou výrobkov. Atmosféra svojím chemickým a fyzikálnym pôsobením znižuje životnosť, spoľahlivosť a odolnosť najmä betónových strešných materiálov. Pri chemickej reakcii betónu so zložkami okolitého prostredia^{1,2} dochádza k nevratnému poškodeniu výrobku, ktoré sa nazýva korózia. Za nebezpečný možno tiež označiť vplyv mikroorganizmov a ich pôsobenie na uvedené materiály. Korózia je v týchto prípadoch vyvolaná splodinami metabolizmu alebo rozkladu. Ako príklad estetickej vady spôsobenej mikroorganizmami možno uviesť rast machov na povrchu strešných krytín. Tento vplyv mikroorganizmov sa neprejavuje jedine u pálenej glazovanej krytiny. Relatívna životnosť krytiny sa pohybuje spravidla v rozmedzí 50–100 rokov. Skutočná životnosť pochopiteľne nemôže byť sama o sebe dlhšia a v dôsledku kumulovaného účinku nežiaducich javov môže byť oveľa kratšia. V tejto práci sa pozornosť sústredila na zmeny mikroštruktúry strešnej krytiny, vyvolané vonkajším prostredím. Vzorky sa vyhodnocovali pomocou ortuťovej porozimetrie a riadkovej elektrónovej mikroskopie (REM) v závislosti od doby vystavenia krytiny poveternostným vplyvom. Na základe získaných výsledkov možno menovať tieto podstatné rozdiely v mikroštruktúre jednotlivých vzoriek: (a) celková pórovitosť novej betónovej krytiny je výrazne nižšia ako keramickej, (b) pôsobením poveternostných vplyvov pórovitosť betónových výrobkov výrazne narastá, (c) korózia keramiky v kyslom respektíve alkalickom prostredí je oveľa

nižšia ako korózia betónovej krytiny a (d) stabilita kvalitného keramickeho črepu je vzhľadom na jeho fázové zloženie oveľa vyššia ako stabilita betónovej matrice. Na predĺženie životnosti betónovej krytiny je nevyhnutné jej povrch ošetriť už vo výrobe náterom odolávajúcim dlhodobu horemenovným vplyvom a zároveň UV žiareniu.

Táto práca vznikla za podpory grantu GA VEGA č. 1/4095/07.

LITERATÚRA

1. Bilčík J.: Klasifikácia chýb a porúch betónu. V zborníku: *Sanácia betónových konštrukcií.*, s. 7. Bratislava 1997.
2. Moskvín M. V., Ivanov M. F., Aleksejev N. S., Guzeeb A. E., v knihe: *Korózia betónu a spôsoby jeho ochrany*, s. 87. Stavebné vydateľstvo, Moskva 1980.

6P-16 POROVNÁNÍ METOD STANOVENÍ OBSAHU NEDOPALU V POPELECH Z FLUIDNÍHO SPALOVÁNÍ UHLÍ S OHLEDEM NA PŘÍDAVEK ODSIŘOVACÍHO ADITIVA

LUCIE BARTOŇOVÁ a ZDENĚK KLIKA

*VSŠB-Technická univerzita Ostrava, Fakulta metalurgie a materiálového inženýrství, Katedra analytické chemie a zkoušení materiálů, Tř. 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava – Poruba
lucie.bartonova@vsb.cz*

V České republice se ročně spaluje pro zajištění elektrické energie v teplárnách a elektrárnách asi 36 milionů tun uhlí¹. Při každém spalování však zůstává v popelech malá část uhlí ve formě nespáleného zbytku – nedopalu (vyjádřeného jako %C). Stanovení obsahu nedopalu v pevných produktech spalování uhlí je klíčová otázka z hlediska efektivity spalovacího procesu, dalšího využití popelů a v poslední době i kvůli dalšímu využití samotného nedopalu, např. jako sorbetu.

Příspěvek je zaměřen na porovnání čtyř metod stanovení obsahu nedopalu v popelcích z fluidního spalování uhlí ve dvou spalovacích jednotkách. Obsahy nedopalu byly stanoveny ve dvou vzorcích úletových popelků odebraných ve dvou elektrárnách s cirkulující fluidní vrstvou – v elektrárně Tisová a v Energetice Frantschach Štětí. Teplota spalování v obou elektrárnách byla 850 a 870 °C. V elektrárně Tisová bylo spalováno hnědé uhlí s vápencem – poměr vstupních hmotnostních toků byl přibližně 91 % uhlí a 9 % vápence. V Energetice Štětí bylo spalováno hnědé uhlí (45%), kůra + dřevní štěpka (25 %), biologické kaly ČOV (25 %), vápence (4 %) a tuhé alternativní palivo (1 %), které obsahovalo 50 % plastu, 30 % odpadního textilu a po 10 % papír a dřevo.

Obsahy nedopalu byly stanoveny za účelem porovnání několika metodami: žiháním vzorku při teplotě 710 °C (stanovena byla ztráta žiháním), metodou přímého žihání vzorku při teplotě 815 °C, metodou loužení popela ve zředěné HCl a následného žihání vysušeného vzorku při 815 °C a metodou loužení vzorku ve zředěné HCl a následného stanovení obsahu uhlíku ve vyloučeném zbytku na přístroji LECO CS-244.

Bylo zjištěno, že nejnižší hodnoty obsahu nedopalu poskytuje metoda loužení popílku v HCl v kombinaci se stanovením uhlíku na přístroji LECO CS-244. Výsledky získané ostatními metodami jsou zatíženy více či méně pozitivní chybou způsobenou tepelnou transformací některých minerálů přítomných ve vzorku. Vzhledem k přidavku odsiřovacího aditiva – vápence v průběhu spalování k největšímu zkreslení výsledků dochází při žihání uhličitánů či portlanditu.

Práce vznikla za podpory GA ČR projektem č. 105/08/0913. Autoři za tuto podporu děkují.

LITERATURA

1. Roubíček, V., Buchtele, J.: Uhlí – zdroje, procesy, užití. Ostrava, Montanex 2002, 173 s.

6P-17

VLIV VÝKONU KOTLE NA OBOHACENÍ PRVKŮ V NEDOPALU Z LOŽOVÉHO POPELA PŘI FLUIDNÍM SPALOVÁNÍ UHLÍ

LUCIE BARTOŇOVÁ a ZDENĚK KLIKA

*^a VŠB-Technická univerzita Ostrava, Fakulta metalurgie a materiálového inženýrství, Katedra analytické chemie a zkoušení materiálů, Tř. 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava – Poruba
lucie.bartonova@vsb.cz*

Príspevek je zaměřen na vliv výkonu kotle na obohacení stopových prvků (As, Ni, Cr, Cu, Zn, Ge, Sn, Sb, W, Co, Br, Se, Cl, V a Pb) v nedopalu z ložového popela (LP) odebraného ve dvou elektrárnách s cirkulující fluidní vrstvou, kde bylo spalováno černé a hnědé uhlí při 40% a 100% výkonu kotle.

Porovnáním přepočtených obsahů prvků v nedopalu a uhlí bylo zjištěno, že chování prvků se s typem spalovaného uhlí výrazněji nemění. V obou elektrárnách bylo pozorováno ochuzení těkavých prvků v nedopalu oproti uhlí. V elektrárně Poříčí byl však zjištěn také značný vliv výkonu kotle na obsahy prvků v nedopalu a uhlí, kde při plném výkonu byly obsahy většiny prvků v obou materiálech srovnatelné, zatímco při 40% výkonu byl nedopal do značné míry ochuzen zvláště o těkavější prvky. Tento jev lze vysvětlit tím, že při 40% výkonu má původní uhelná částice ve fluidní vrstvě pro únik těkavých prvků k dispozici delší časový interval a dochází tedy k jejímu efektivnějšímu vyhoření. V elektrárně Poříčí byla popelnatost nedopalu při 40% a 100% výkonu 72 % a 37 %. V elektrárně Tisová podobné chování pozorováno nebylo, což koresponduje se skutečností, že A^d hodnoty obou nedopálů se vzájemně příliš nelišily – 53 % při 40% výkonu a 62 % při 100% výkonu.

Porovnáme-li přepočtené obsahy prvků v nedopalu a LP, vjma 40% výkonu v elektrárně Poříčí bylo zjištěno poměrně výrazné obohacení prvků v nedopalu. Toto chování však nebylo pozorováno v elektrárně Poříčí při 40% výkonu, kde obsahy většiny prvků jsou v LP a nedopalu srovnatelné, patrně z důvodu zvýšené hodnoty popelnatosti zmíněného nedopalu (72 %), který se v důsledku této skutečnosti svým cha-

rakterem blíží spíše LP než uhlí. Chování podobné uhlí vykazoval naopak nedopal získaný při 100% výkonu v elektrárně Poříčí, jehož popelnatost je 37%.

Autoři děkují Grantové agentuře České republiky za finanční podporu této práce projektem č. 105/08/0913.

7P-01

QSPR METODA PRO URČENÍ BIOLOGICKÉ AKTIVITY REAKTIVÁTORŮ ACETYLCHOLIN-ESTERASY INHIBOVANÉ PESTICIDY

ZDEŇKA KOLSKÁ^a, KAMIL KUČA^{a,b} a DANIEL JUN^b

^aKatedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita J. E. Purkyně, České Mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem, ^bCentrum pokročilých studií, Fakulta vojenského zdravotnictví, Univerzita obrany, Třebešská 1575, 500 03 Hradec Králové
zdenka.kolska@ujep.cz, kucakam@pmfhk.cz, jun@pmfhk.cz

Vlastnosti jakýchkoli chemických látek, tedy i těch, které mohou mít využití jako reaktivátory acetylcholinestasy (dále jen AChE), mohou být určeny experimentálními technikami. V posledních letech se objevují pracoviště, která se snaží vyvinout nové metody pro určení těchto parametrů neexperimentálně^{1,2}. Tzv. odhadové či výpočetní postupy byly vyvinuty již pro odhad řady fyzikálně-chemických parametrů, jak pro čisté látky, tak pro směsi³. Tyto modely jsou vhodné všude tam, kde není možné provádět experimentální stanovení, např. tam, kde přicházíme do kontaktu s nebezpečnými látkami nebo sloučeninami, které se za podmínek měření rozkládají nebo tam, kde množství získané látky není dostatečné pro uskutečnění experimentu.

Neexperimentální postupy je možné rozdělit do dvou skupin. První je označována jako QPPR metody (Quantity-Property-Property-Relationship), kde je hledaná vlastnost dána do vztahu s některou známou veličinou látky.

Druhá skupina odhadových metod je známa jako tzv. QSPR (Quantity-Structure-Property-Relationship). Tyto metody vycházejí pouze ze znalosti chemické struktury látek bez nutné znalosti dalších parametrů a odhadují vlastnost sloučeniny jen na základě chemické struktury. Jedním z těchto postupů jsou tzv. strukturně příspěvkové metody.

Biologická aktivita několika reaktivátorů (o koncentraci $1 \cdot 10^{-3} \text{ mol dm}^{-3}$) AChE inhibovaná různými pesticidy byla odhadnuta navrženými příspěvkovými metodami.

Tato práce vznikla za podpory grantu č. IAA 400720710 Grantové agentury AV ČR.

LITERATURA

1. Dohnal V., Kuča K., Jun D.: J. Appl. Biomed. 3, 139 (2005).
2. Castilho M. S., Guido R. V. C., Andricopulo A. D.: Lett. Drug Des. Disc. 4, 106 (2007).
3. Poling B. E., Prausnitz J. M., O'Connell J. P.: *The Properties of Gases and Liquids*, 5. vyd. McGraw-Hill, New York 2001.

7P-02

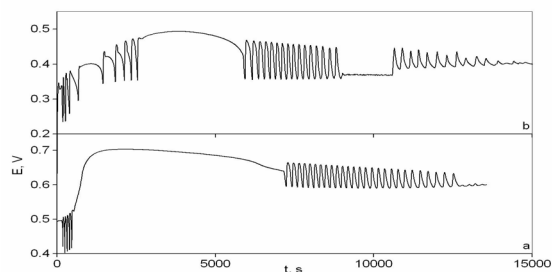
ŠTÚDIUM VPLYVU PERTURBANTOV NA NEKATALYZOVANÚ OSCILAČNÚ REAKCIU FENOLU S BROMIČNANOM V KYSLOM PROSTREDÍ

OEGA GRANČIČOVÁ a ANNA OLEXOVÁ

Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prirodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, Bratislava
grancicova@fns.uniba.sk, olexova@fns.uniba.sk

Zdanlivo jednoduchá reakcia fenolu s bromičnanom v prostredí kyseliny sírovej sa chová v relatívne úzkom intervale koncentrácií reaktantov a kyseliny ako typický nekatalyzovaný bromičnanový oscilátor s prekvapujúco rozmanitým dynamickým chovaním¹ s 2 sériami oscilácií oddelenými neoscilačnou fázou. K objasneniu pôvodu os-cilácií redox potenciálu môže napomôcť štúdium oscilá-tora v prítomnosti rôznych perturbantov:

a/ tetrabutylamónny ión vytvára iónové páry s aniónmi ako aj asociáty s dostatočne hydrofóbnymi neutrálnymi molekulami^{2,3}. Tieto efekty sa odrážajú prostredníctvom zmeny rýchlosti niektorej čiastkovej reakcie v zmene tvaru oscilácií prvej série a doby ich trvania, b/ t-butanol mení relatívnu permitivitu prostredia a pôsobí ako lapač OH radikálov. S rastúcou koncentráciou tohto perturbantu dochádza najprv k zániku druhej série oscilácií a potom k postupnému poklesu počtu oscilácií prvej série.



Obr. 1. Časová závislosť redox potenciálu systému [fenol] = 0,004 mol dm⁻³, [BrO₃⁻] = 0,025 mol dm⁻³, 1,5 mol dm⁻³ H₂SO₄: a – 0, b – 0,005 mol dm⁻³ Bu₄NClO₄

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA MŠ SR 1/3570/06.

LITERATÚRA

1. Adamčíková E., Farbulová Z., Ševčík P.: New J. Chem. 25, 487 (2001).
2. Mbuna J., Takayanagi T., Oshima M., Motomizu S.: J. Chromatogr., A 1022, 191 (2004).
3. Steiner S. A., Watson D. M., Fritz J. S.: J. Chromatogr., A 1085, 170 (2005).

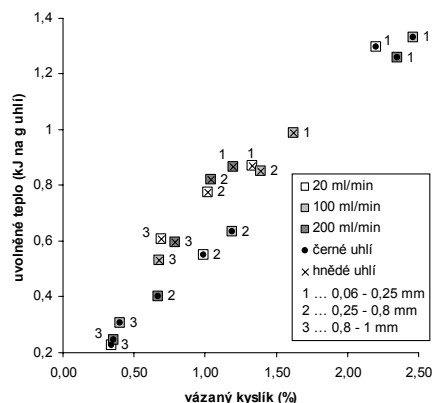
7P-03

VLIV RYCHLOSTI PROUDÍCÍ ATMOSFÉRY
A ZRNITOSTI NA CHEMISORPČNÍ FÁZI OXIDACE
UHLÍ

VÁCLAV SLOVÁK a BOLESLAV TARABA

Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská Univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava
vaclav.slovak@osu.cz, boleslav.taraba@osu.cz

S využitím neizotermní simultánní termogravimetrie a diferenční skenovací kalorimetrie TG/DSC byl studován vliv rychlosti proudícího vzduchu na oxidaci vzorků hnědého a černého uhlí o různé zrnitosti. Sledovaný teplotní interval (150–250 °C u hnědého resp. 150–300 °C u černého uhlí) odpovídá chemisorpční fázi oxidace uhlí projevující se zvyšováním hmotnosti a uvolňováním tepla. Pro oba vzorky uhlí byla provedena série měření při třech rychlostech proudění vzduchu (20, 100 a 200 ml min⁻¹ v peci s objemem 200 ml) a pro tři zrnitostní frakce (0,06–0,25; 0,25–0,8; 0,8–1 mm).



Obr. 1. Závislost tepla uvolněného při oxidaci uhlí na hmotnostním podílu vázaného kyslíku

Byla prokázána korelace mezi hodnotou uvolněného tepla a množstvím vázaného kyslíku (obr. 1), kterou lze aproximovat lineárním průběhem ($R^2 = 0,937$, směrnice = $0,51 \pm 0,07$). Těsný charakter závislosti indikuje, že rychlost proudící atmosféry prakticky nemá vliv na změnu distribuce tepla generovaného při oxidaci vzorku. Vliv rychlosti atmosféry neprokázala ani analýza rozptylu na hladině významnosti 0,05. Naopak je evidentní vliv zrnitosti – s rostoucí velikostí uhelných částic klesá intenzita chemisorpce kyslíku na uhlí a tento vliv je výraznější u méně porézního černého uhlí.

Hodnota směrnice korelační přímky vypovídá, že při chemisorpci 1 molu kyslíku (O) se uvolní (nezávisle na typu uhlí a jeho zrnitosti) 816 ± 112 kJ tepla. Přes značnou experimentální chybu můžeme tuto hodnotu porovnat s energií vazby karbonylové skupiny C=O (732 kJ mol^{-1}). Právě karbonyly tak můžeme označit za pravděpodobné produkty chemisorpčního působení kyslíku na uhlí.

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

7P-04

MATEMATICKÝ MODEL HYDRODYNAMIKY TOKU
V PRAVOÚHLÉM KANÁLKU S VÝPLNÍ VE TVARU
SÍTKYFRANTIŠEK VLASÁK^a, ROMAN KODÝM^a,
DALIMIL ŠNITA^b a KAREL BOUZEK^a^a Ústav anorganické technologie, ^b Ústav chemického inženýrství, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6

roman.kodym@vscht.cz, karel.bouzek@vscht.cz

Problematika hydrodynamiky toku (HT) v kanálu s výplní se dotýká celé řady chemických procesů. Jedná se především o procesy řízené přenosem hmoty, v nichž hraje rovnoměrnost HT klíčovou roli z hlediska výkonu zařízení. Typickým příkladem procesu tohoto typu je elektrodiálýza (ED). Základní jednotku ED tvoří pravoúhlý kanál, jehož protilehlé stěny tvoří iontově selektivní membrány. V místech kanálu se sníženou intenzitou toku zpracovávaného roztoku, a tím sníženou intenzitou přenosu hmoty, dochází k jeho lokálnímu odsolení. To vede v konečném důsledku ke snížení proudové účinnosti děje. Vlivem intenzivního elektrostatického pole může navíc dojít rovněž k poškození membrán. V praxi je v současnosti tento problém řešen použitím výplně kanálu ve formě polymerní sítky. Ta podporuje intenzivní promíchávání kapaliny a společně s distributory rovnoměrnost toku kapaliny v pracovní části kanálu. Síťka současně plní funkci opory zajišťující trvalou průchodnost kanálu. Se stále rostoucí kapacitou ED zařízení se neúměrně zvyšují náklady spojené s experimentální optimalizací HT uvnitř těchto zařízení. Vhodné řešení uvedeného problému nabízí matematické modelování.

Je zřejmé, že exaktní popis HT v uvedeném zařízení představuje trojrozměrnou (3D) úlohu. Řešení tohoto modelu je však na dostupné výpočetní technice realizovatelné pouze ve velmi omezeném objemu kanálu představujícím zlomek procent průmyslového zařízení. Především z tohoto důvodu nebyl doposud obdobný matematický model v literatuře popsán. V rámci této práce byl uvedený model navržen, implementován a validován za použití experimentálních dat získaných na odpovídajícím laboratorním zařízení.

Navržený model řeší uvedený problém prostorovou redukcí problému z 3D na 2D. Tento přístup je umožněn strukturou sítky tvořenou dvěma vrstvami různě orientovaných vláken. Skutečnou modelovou doménu tak lze rozdělit na dvě fiktivní 2D vrstvy. V každé z nich je upřednostňován tok roztoku ve směru dané orientací vláken. Zachování 3D charakteru toku je umožněno výměnou roztoku mezi oběma vrstvami. Model HT vychází z obecné Navierovy-Stokesovy rovnice (N-S). Anisotropie sítky je zohledněna v modifikovaném Darcyho zákoně, který zahrnuje dva empirické hydraulické koeficienty. Právě ty zvyhodňují proudění kapaliny ve směru podél vláken. Modelové rovnice byly řešeny metodou konečných prvků v prostředí COMSOL Multiphysics.

Tato práce vznikla za finanční podpory Akademie věd ČR v rámci grantu číslo 105 050 161.

7P-05

**PRÍPRAVA A ŠTÚDIUM MONOVRSTVIEV
SUBSTITUOVANÝCH CYKLODEXTRÍNOV
HMOTNOSTNOU SPEKTROMETRIOU
SEKUNDÁRNYCH IÓNOV**

**LADISLAV RÁBARA^a, MONIKA ARANYOSIOVÁ^{b,c}
a DUŠAN VELIČ^{b,c}**

^a Univerzita sv. Cyrila a Metoda, Fakulta prírodných vied, nám. J. Herdu 2, 917 01 Trnava, ^b Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, ^c Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovensko
ladislav.rabara@ucm.sk

Tvorba samoposkladaných monomolekulových vrstiev (angl. self-assembled monolayer; SAM) adsorbovaním zlúčenín na rovinné povrchy sú jedným z výrobných postupov nanotechnológií. Vrstvy vznikajú na základe interakcií medzi adsorbovanou látkou a povrchom substrátu, podľa charakteru síl sa rozoznáva fyzikálna, polárna a chemická adsorpcia. SAM možno pripraviť ponorením substrátu pokrytého zlatým filmom do roztoku *n*-alkántiolu. Tioderivát sa chemisorpčne viaže na zlatý film, rovnomerné rozmiestnenie nastáva vďaka samoorganizačnej schopnosti daného systému¹. V menšej miere sa používajú vetvené alebo aromatické alkántioly².

V tomto príspevku sú opísané SAM z cyklohextrínov (CD), ktoré sú použité pre ich komplexačné vlastnosti. CD-SAM sú vytvárané so zámerom inklúzie hosťovských látok vo vytvorenej 2D matici hostiteľských molekúl. Rovnomerne usporiadané cyklohextríny ukotvené na substráte tvoria povrchový čip, ktorý môže slúžiť ako chemický senzor³ alebo pamäťová jednotka. Použité sú: alfa-CD, beta-CD, gama-CD, 6-monodeoxy-6-monotio-beta-cyklohextrín a heptakis(6-*O*-*t*-butyldimetylsilyl)-2,3-di-*O*-acetyl)-beta-cyklohextrín.

Postup prípravy zahŕňa optimalizáciu koncentrácie, času nanášania a spôsobu premývania vytváranej monovrstvy. CD-SAM sú charakterizované hmotnostnou spektrometriou sekundárnych iónov⁴. V hmotnostných spektrách je sledované zastúpenie molekulových iónov daného CD a jeho fragmentov.

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

LITERATÚRA

1. Ulmann A., v knihe: *An Introduction to Ultrathin Organic Films: from Langmuir-Blodgett to Self-Assembly*. Academic Press, Boston 1991.
2. Auditore A., Tuccitto N., Quici S., Marzani G., Puntoriero F., Campagna S., Liciardello A.: *Appl. Surf. Sci.* 231-232, 314 (2004).
3. Yang Y., Yang X., Liu Y. L., Liu Z. M., Yang H. F., Shen G. L., Yu R. Q.: *J. Photoch. Photobio. A* 171, 141 (2004).
4. Vickermann J., Briggs D., v knihe: *ToF-SIMS: Surface Analysis by Mass Spectrometry*. Surface Spectra & IM Publications, Chichester 2001.

7P-06

**INFLUENCE OF MONOMER CONCENTRATION,
TEMPERATURE AND IONIZATION ON THE FREE
RADICAL PROPAGATION RATE COEFFICIENTS OF
METHACRYLIC ACID POLYMERIZED IN AQUEOUS
PHASE**

**LUCIA UČŇOVÁ^a, DUŠAN CHORVÁT JR.^b, MAREK
STACH^a, and IGOR LACÍK^a**

^a Polymer Institute of the Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, ^b International laser centre, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovak Republic
lucia.ucnova@savba.sk, igor.lacik@savba.sk

Industrial polymers are primarily prepared by free radical polymerization. For setting up the required properties of the resulting polymer and for modeling the polymerization process, it is necessary to know the reaction mechanism and to describe the polymerization process with reliable rate coefficients. The advent of pulsed laser initiated techniques in the 1990-ties has helped to understand the free radical polymerization. Improvement of the situation for propagation rate coefficients, k_p , occurred after employing the IUPAC-recommended pulsed-laser polymerization in conjunction with size-exclusion chromatography (PLP-SEC)¹. Recently, the PLP-SEC technique has been applied for measuring the k_p for water-soluble monomers polymerized in aqueous solution. Water is a specific solvent which exhibits various types of interactions which need to be considered in describing the kinetics and mechanism of polymerization in the aqueous phase.

Methacrylic acid (MAA) has been identified as a model monomer for studies into the propagation kinetics in the aqueous phase in both non-ionized and ionized forms². This contribution deals with further studies into k_p dependence on monomer concentration, degree of ionization and temperature. Polymerizations were carried out in the temperature range from 6 to 80 °C, MAA concentration range from 5 to 40 °C and degree of MAA ionization from 0 to 1 using various neutralization agents. A general observation was that k_p strongly depends on both degree of ionization and MAA concentration. The obtained data are discussed in view of the internal friction in the transition state structure for the propagation step, which reflects the barriers to the internal motions resulting from the electrostatic and hydrogen bonded interactions of growing radical chain-end with the transition state environment, which is expressed in the pre-exponential Arrhenius parameter. Some effects on the activation energy cannot be excluded.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-51-03790.

REFERENCES

1. Olaj O. F., Schnöll-Bitai I., Hinkelmann F.: *Makromol. Chem.* 188, 1689 (1987).
2. Beuermann S., Buback M., Hesse P., Kukuckova S., Lacik I.: *Macromol. Symp.* 248, 41 (2007).

7P-07

A STOCHASTIC MODEL OF CALCIUM-INDUCED CALCIUM RELEASE IN CARDIAC MYOCYTE

PAVOL PETROVIČ^a, ALEXANDRA ZAHRADNÍKOVÁ^b, IVAN ZAHRADNÍK^b, and IVAN VALENT^a

^a Department of Physical and Theoretical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dol. CH1-310, 842 15 Bratislava, ^b Institute of Molecular Physiology and Genetics, Slovak Academy of Sciences, Vlárská 5, 833 34 Bratislava, Slovakia
petrovicp@fns.uniba.sk

The transduction of information from the cell membrane (sarcolemma) to the myofibrils is mediated by Ca^{2+} ions during contraction of heart muscle. After depolarization of the cell membrane in heart myocyte, Ca^{2+} influx through the voltage dependent DHPR channels from the extracellular compartment to the dyadic cleft leads to an increase of Ca^{2+} concentration that induces opening of calcium-dependent ryanodine receptor channels (RyRs) on the juxtaposed membrane of the sarcoplasmic reticulum (SR) in a nonlinear process known as calcium-induced calcium release (CICR). Opening of the RyRs causes massive release of Ca^{2+} from the SR to cytoplasm resulting in cell contraction. In the presented model we numerically simulate the stochastic dynamics of DHPR and RyR gating in the 3D space of the dyadic cleft upon depolarization of the plasma membrane, using the Monte Carlo algorithm¹. RyRs are coupled in a cluster of 1–49 RyRs with a mutual distance of 28 nm between neighboring RyRs. DHPR channels are accidentally distributed on plane at a distance of 12 nm from the SR membrane. Interactions among the channels are due to diffusion of Ca^{2+} , which is described by the set of time-dependent PDEs. For solving this problem we used Vectorizable Local Uniform Grid Refinement (VLUGR3) solver for PDEs in 3D. Each computational run is repeated 10 000×, representing the activity of the ~10 000 Ca release units present in a single cell.

The model showed gained and graded SR release current (I_{SR}) in response to the DHPR trigger (3.9 nA peak/76 pA per cell at 0 mV for 49 RyRs in a cluster and 7 DHPR channels). I_{SR} achieved its peak value in 4.5 ms after membrane depolarization, and then it was significantly reduced to 0.6 nA within 15 ms due to Ca^{2+} dependent inactivation of RyRs. The SR Ca^{2+} release was rapidly terminated (in 2.5 ms) when the depolarizing pulse (20 ms) ended. This simplified representation will be extended to a complex model of excitation-contraction coupling by linking with a reaction-diffusion model of the dyadic cleft².

REFERENCES

1. Fall C. P., Marland E. S., Wagner J. M., Tyson J. J.: *Computational Cell Biology*. Springer 2002.
2. Valent I., Zahradníková A., Pavelková J., Zahradník I.: *Biochim. Biophys. Acta* 1768, 155 (2007).

7P-08

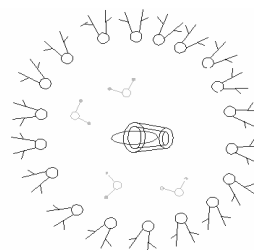
SYSTÉM KUMARÍN / β -CYKLODEXTRÍN / MICELA: FLUORESCENČNÁ SPEKTROSKOPIA

EDUARD JÁNĚ^a, MICHAL ŽITŇAN^a, IGNÁC BUGÁR^b, OĽGA GRANČÍČOVÁ^a a DUŠAN VELIČ^{a,b}

^a Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, ^b Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 842 15 Bratislava, SR
eduardj1@azet.sk

Fluorescenčná spektroskopia sa môže zaradiť medzi najcitlivejšie metódy na detegovanie látok. Rádovo sú merateľné koncentrácie 10^{-8} mol dm^{-3} . Princíp fluorescenčnej spektroskopie je založený na meraní emitovaného žiarenia. Látka absorbuje elektromagnetické žiarenie, ktoré ju vyexcituje, potom časť svojej energie molekula neradiačne odovzdá okoliu (relaxuje). Následne emituje elektromagnetické žiarenie, ktoré je možné merať. Nameraný signál má určitú polohu emisného maxima, ktorá sa vplyvom prostredia mení. Táto skutočnosť umožňuje sledovať zmeny prostredia v okolí molekuly.

Naším cieľom bolo vytvoriť supermolekulový systém zobrazený na obr. 1. Kumarín s cyklodextrínom vytvorí supermolekulový komplex. Okolo neho sa nachádza uzavretá voda v reverznej micelle.



Obr. 1. Supermolekulový komplex kumarín, β -cyklodextrín, micela

Z našich doterajších výsledkov vyplýva, že časť molekúl kumarínu prenikla do heptánu, čo rozpúšťadlo pre reverzné micely, o čom nám svedčí emisné maximum pri 435 nm. Ďalšia časť sa zabudovala medzi nepolárne reťazce uhlíkovodíkov surfaktantu. Tu pozorujeme emisné maximum pri 462 nm. Časť molekúl sa uzavrela v reverznej, ktorej emisné maximum sa nachádza pri 507 nm. Cieľom práce bolo sledovať solvatačný efekt na supermolekulové systémy. Zmenou veľkosti micel môžeme meniť množstvo vody v okolí systému kumarín/ β -cyklodextrín.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA 1/2447/05, APVT-20-029804 a APVV-0491-07.

LITERATÚRA

1. Lakowicz R. J.: *Principles of Fluorescence Spectroscopy*. Kluwer Academic Plenum Publishers, New York 1995.

7P-09
REKONŠTRUKCIA TOPOLOGIE CHROMOZÓMU
METÓDOU CCC S VYUŽITÍM ANALÝZY ŠUMU
VSTUPNÝCH DÁT

EVA SMREKOVÁ a IVAN VALENT

*Prírodovedecká fakulta Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovensko
 smrekova@fns.uniba.sk*

Procesy ako sú génová expresia, DNA reparácia, či časovanie replikácie sú viazané na priestorovú organizáciu chromatinového vlákna chromozómu. Pre objasnenie chromozómovej konformácie bola pripravená metóda umožňujúca určenie priestorovej konformácie chromozómov (Capturing Chromosome Conformation, CCC¹) za predpokladu známej sekvencie báz. Na základe pravdepodobnosti interakcie (cross-linking) dvojíc vybraných bodov sledovaného objektu je vytvorená matica, tzv. distančná tabuľka. Ďalším matematickým spracovaním tejto matice je možné určiť priestorové súradnice daných bodov objektu. Táto metodológia bola aplikovaná na chromozóm III v kvasinkách *Saccharomyces cerevisiae*¹, kde boli potvrdené kvalitatívne vlastnosti organizácie tohto chromozómu, ktorý sa ukázal ako otvorený zakrivený kruh.

Experimentálne dáta sú spravidla zaťažené značnými chybami a úspešná rekonštrukcia priestorovej topológie chromozómu je podmienená efektívnou filtráciou experimentálneho šumu.

Cieľom komplexného projektu je analýza konformácie mitochondriálneho chromozómu kvasiniek v rôznych fázach bunkového cyklu. V predkladanej práci sme sa zaoberali analýzou čiastkového problému – zostrojením 3D modelu objektu. Hlavným cieľom bolo overiť spoľahlivosť navrhnutých matematických metód¹ a preskúmať ďalšie možnosti filtrácie šumu metódami lineárnej algebry. Nami pripravený počítačový program využíva generovanie šumu pre simulovanie experimentálnych dát, a to generovaním náhodných čísel s normálnym rozdelením². Analýza sa zameriava na vplyv použitia generátora bieleho, šedého a iných šumov, ktoré sa líšia rozložením spektrálnej hustoty³. Ďalej sa zaoberá vplyvom odstránenia šumu pomocou choleskeho dekompozície a dekompozície na singulárne hodnoty.

Z tejto analýzy je možné získať informácie o najvhodnejšom usporiadaní konkrétneho praktického experimentu, ktorý nám poskytne dáta pre prípravu 3D modelu skúmaného objektu a jeho 3D zobrazenia pomocou anaglyfickej snímky.

LITERATÚRA

1. Dekker J., Rippe K., Dekker M., Kleckner N.: *Science* 295, 1306 (2002).
2. Criado C.: *Phys. Rev. E* 60, 3361 (1999).
3. <http://socrates.berkeley.edu/~phylabs/bsc/Supplementary/NoiseGenerator.html>.

7P-10
VLIV ZÁŘENÍ NA KOVOVÉ SLOUČENINY
VE VODNÝCH ROZTOCÍCH

JAN BÁRTA, MILAN POSPÍŠIL a VÁCLAV ČUBA

*ČVUT v Praze – FJFI, Břehová 7, 115 19 Praha 1
 bartaja4@fjfi.cvut.cz*

V posledním desetiletí bylo intenzivně zkoumáno chování částic o velikosti menší než 1 μm , jejichž vlastnosti jsou dosti odlišné od vlastností velkých částic příslušných prvků nebo sloučenin a velmi silně závisí na velikosti a tvaru. Příkladem může být zvýšená katalytická aktivita¹, tepelná vodivost^{2,3}, snížená teplota tání⁴ apod. Jedním ze způsobů přípravy kovových nanočástic je radiační redukce roztoků solí tohoto kovu, kdy oxidující produkty radiolýzy vody (např. OH \cdot) jsou vychytávány vhodnými scavengery a redukující meziproducty jako H \cdot , e $^-_{aq}$ reagují s kovovými ionty. Aby nedošlo ke koagulaci částic do příliš velkých shluků, přidává se do roztoku povrchově aktivní látka – stabilizátor.

Byly studovány účinky záření gama, urychlených elektronů i UV záření na odvdzdušněné vodné roztoky CuSO₄ o koncentraci 10⁻³ mol dm⁻³ v 1,28 mol dm⁻³ 2-propanolu (scavenger) a/nebo 10⁻⁵ mol dm⁻³ PVA (stabilizátor). Jako stabilizační činidlo byla vedle polyvinylalkoholu vyzkoušena také EDTA. Tvorba nanočástic mědi byla sledována spektrofotometricky, čistota a složení vyredukované mědi byly určeny rentgenovou difrakční analýzou.

Při ozáření urychlenými elektrony i gama zářením byl z roztoku obsahujícího zároveň scavenger a stabilizátor připraven fialový koloidní roztok mědi absorbující při vlnové délce 570 nm. Za přístupu kyslíku došlo k velmi rychlému rozpouštění koloidní mědi. Urychlené elektrony díky své vysoké energii způsobily vytvoření malého množství koloidní mědi i v roztoku, který neobsahoval 2-propanol – funkci scavengeru zřejmě za těchto podmínek částečně převzal PVA. Ve filtrátu z ozářených roztoků byla rentgenovou difrakcí potvrzena kovová měď znečištěná oxidy mědi.

LITERATURA

1. Rostovshchikova T. N., Smirnov V. V., Kozhevnikov V. M., Yavsin D. A., Zabelin M. A., Yassievich I. N., Gurevich S. A.: *Appl. Catal., A* 296, 70 (2005).
2. Eastman J. A., Choi S. U. S., Li S., Yu W., Thompson L. J.: *Appl. Phys. Lett.* 78, 718 (2001).
3. Xuan Y., Li O.: *Int. J. Heat Fluid Flow* 21, 58 (2000).
4. Dick K., Dhanasekaran T., Zhang Z., Meisel D.: *J. Am. Chem. Soc.* 124, 2312 (2002).

7P-11
2D PHOTON-ECHO SIGNAL CALCULATIONS
OF PARTIALLY CHARGE-TRANSFER DIMERS

VOJTECH SZÖCS^a and TIBOR PÁLSZEGI^b

^a*Institute of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina CH2, 842 15, Bratislava,*
^b*International Laser Center, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, Slovakia*
 szocs@fns.uniba.sk

The comparison of Frenkel and charge-transfer exciton contributions to the heterodyne-detected electronic 2D two-pulse photon-echo (2D-2P-PE) signal of coupled dimers has been approached numerically.

Our present study is an enlargement of our recent analytical results¹, where 2D-2P-PE heterodyne-detected signals of symmetric coupled dimers (SD) have been analyzed. In [1], the one- and two-exciton states of SD are described by local one-excited monomeric MOs based VB configurations ("Frenkel excitons").

For more strongly interacting monomers, also the charge-transfer MO-VB configurations have to be taken into account (see e.g. [2]). As a starting point of our 2D-2P-PE numeric calculations, we have chosen a special case of PTCDA dimer, where the projections of one-exciton MO states into VB contributions are well described².

The VB configurations to the two-exciton states have been chosen as simple as possible: (i) the one-excited local and charge transfer states and (ii) two-excited local contributions. These configurations are dominant in PTCDA-like molecules. For exactness, the problem of the VB description of two-exciton states is based on the exact projection of MO states into VB configurations (see e.g. in ref³).

The work was supported by the the Slovak Ministry of Education (Vega project No. 1/0046/08).

REFERENCES

1. Szöcs V., Pálszegi T., Lukeš V., Sperling J., Milota F., Jakubetz W., Kauffmann H. F.: *J. Chem. Phys.* 124, 124511 (2006).
2. Hoffmann M.: *Frenkel and Charge-Transfer Excitons in Quasi-One-Dimensional Molecular Crystals with Strong Intermolecular Orbital Overlap*, PhD Thesis, Dresden, (2000).
3. Shaik S.: *J. Am. Chem. Soc.* 103, 3692 (1981).

7P-12
ZPŮSOB STUDIA VLIVU IONIZUJÍCÍHO ZÁŘENÍ
NA AKTIVITU ENZYMŮ

TEREZA PAVELKOVÁ, VÁCLAV ČUBA a VILIAM MÚČKA

ČVUT v Praze, FJFI, Břehová 7, 115 19 Praha 1
 pavelier@fjfi.cvut.cz

Vzhledem k rozšiřujícím se aplikacím radioterapeutických metod nabývá studium vlivu záření na látky přítomné v organismu stále větší význam. V této práci byla studována enzymatická aktivita katalázy a peroxidasy (HRP) po jejich ozáření ionizujícím zářením. Ozáření se provádělo radionuklidovým zdrojem ⁶⁰Co Gammacell 220 s dávkovým příkonem 8 Gy/h.

Enzymatická aktivita katalázy byla měřena katalytickým rozkladem peroxidu vodíku za konstantní teploty a tlaku. Tato metoda je již řadu let využívána při studiu vlastností tuhých oxidových, sulfidových a kovových katalyzátorů. Její podstatou je sledování kinetiky rozkladné reakce měřením objemu kyslíku uvolňujícího se během reakce¹. Měření bylo provedeno tak, že byl do roztoku katalázy ve fosfátovém pufru temperovaného na 37 °C přidán roztok peroxidu vodíku. Po uzavření aparatury byl měřen čas nutný k uvolnění definovaného objemu kyslíku. Postupně byly nalezeny optimální koncentrace katalázy i peroxidu vodíku tak, aby reprodukovatelnost i opakovatelnost výsledků byla co nejlepší. Studium vlivu ionizujícího záření na roztoky katalázy o různé koncentraci potvrdilo, že s rostoucí dávkou v intervalu 4–956 Gy aktivita enzymu klesá. Dále bylo prokázáno, že s rostoucí koncentrací enzymu vliv záření na degradaci katalázy klesá, což je patrné zejména při malých dávkách záření.

Pro měření aktivity peroxidázy byla zavedena standardní metoda využívající UV-VIS spektrofotometrie². K roztoku peroxidázy ozáření dávkami 12–572 Gy záření gama byl přidán 3,3',5,5'-tetramethyl-benzidin (TMB) v acetátovém pufru, peroxid vodíku a po inkubaci kyselina chlorovodíková. Poté byla měřena absorbance roztoku při vlnové délce 450 nm. I zde bylo prokázáno, že navrženou metodikou lze s dostatečnou přesností, reprodukovatelností a opakovatelností stanovit závislost enzymatické aktivity na aplikované dávce záření.

LITERATURA

1. Múčka V.: *Radiat. Phys. Chem.* 30, 293 (1987).
2. Kachlíková J.: *Bakalářská práce*. MÚ Brno, 2006.

7P-13

EXPLICITNE KORELOVANÉ R12 METÓDY

STANISLAV KEDŽUCH^a, JOZEF NOGA^{a,b},
JÁN ŠIMUNEK^b a SEIICHIRO TEN-NO^c

^a Ústav anorganickej chémie, Slovenská akadémia vied, Bratislava, ^b Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta UK, Bratislava, SR, ^c Graduate School of Information Science, Nagoya University, Japan
uachksta@savba.sk

V kvantovej chémii je veľmi obmedzujúcim problémom principiálna nemožnosť analytického riešenia Schrödingrovej rovnice pre viacelektrónové systémy. Čiastočným riešením tohto problému je zavedenie aproximácie jedoelektrónového modelu, v ktorom sa elektróny pohybujú v priemernom poli ostatných elektrónov (orbitálna predstava). V skutočnosti elektróny dosiahnu energeticky výhodnejší stav, ako im to umožňuje priemerné pole. Rozdiel medzi skutočnou energiou a energiou jedoelektrónového modelu sa nazýva korelačná energia. Korelačné metódy vylepšujú popis jedoelektrónového modelu zahrnutím Slaterových determinantov zodpovedajúcim excitovaným stavom do rozvoja vlnovej funkcie. Takýto prístup však nedostatočne popisuje interakcie elektrónov pri malých vzdialenostiach (elektrónový hrot¹), čoho dôsledkom je veľmi pomalá konvergencia konvenčných korelačných metód k presnej hodnote. Už od začiatkov kvantovej chémie je známe, že na korektný popis elektrónového hrotu je potrebné do rozvoja vlnovej funkcie explicitne zahrnúť člen medzielektrónovej vzdialenosti $-r_{12}$ (cit.²). Zahrnutie r_{12} člena do vlnovej funkcie je metodologicky a výpočtovo náročné najmä kvôli výskytu mnohoelektrónových integrálov, ktorých použitie v reálnych výpočtoch je prakticky nerealizovateľné. Prvá z prakticky použiteľných metód je založená na tzv. R12 prístupe³. Tento prístup umožnil implementáciu veľmi presných metód, ktoré sú porovnateľne výpočtovo náročné ako konvenčné korelačné metódy.

V prezentovanej práci rozširujeme R12 prístup o nový variant „C“ (cit.⁴), ktorý nevyžaduje použitie integrálov obsahujúcich komutátor medzi operátorom kinetickej energie a korelačným faktorom. Tieto integrály boli veľmi aproximatívny a súčasne výpočtovo najnáročnejší krok, čo limitovalo použiteľnosť R12 prístupu len na malé systémy. Preto nová R12/C metóda poskytuje presnejšie výsledky, je výpočtovo menej náročná a umožňuje aplikáciu R12 prístupu aj smerom k väčším systémom. V práci sme sa tiež venovali zavedeniu korelačného faktora v exponenciálnom tvare (Slaterov geminál) namiesto doteraz používaného lineárneho faktora, ktorý obsahuje aj vyššie ako len lineárne r_{12} členy.

LITERATÚRA

1. Kato T.: Commun. Pure Appl. Math. 10, 151 (1957).
2. Hylleraas E. A.: Z. Phys. 54, 347 (1929).
3. Kutzelnigg W.: Theor. Chim. Acta 68, 445 (1985).
4. Kedžuch S., Milko M., Noga J.: Int. J. Quantum Chem. 105, 929 (2005).

7P-14

MODELOVANIE OPTICKÝCH VLASTNOSTÍ STRIEBORNÝCH NANOČASTÍC

TIBOR PÁLSZEGI^a, ATTILA GAÁL^b, IGNÁC BUGÁR^a, VOJTECH SZÖCS^c, LENKA FIALOVÁ^d,
IGNÁC CAPEK^d, MIROSLAV MICHALKA^a
a FRANTIŠEK UHEREK^a

^a International Laser Centre, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, ^b Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, Comenius University, Mlynská dolina, 842 48 Bratislava, ^c Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava 4, ^d Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovakia
tiborbask@gmail.com

Cieľom našich výpočtov elektrónových procesov vo sférických kovových nanočasticiach striebra je modelovanie dynamiky ich optických vlastností, získateľných pomocou ultrakrátkočasovej pump-probe laserovej optickej spektroskopie^{1,2}. Sféricke kovové nanočastice sú obalené surfaktantom, ktoré sa nachádzajú v koloidnom roztoku organického rozpúšťadla. Vo výpočtoch sa uvažuje aj elektrón-elektrónový rozptyl, ale keďže časové rozlíšenie experimentálnej aparatury je 100 fs, sústredíme sa hlavne na elektrón-fonónový rozptyl a na prevod tepla do okolia. Modelovanie časovej zmeny nelineárnej absorpcie bolo uskutočnené pre nanočastice priemerom od 5 do 15 nm, pre rôzne energie laserového pulzu. Počiatočná teplota elektrónov závisí od veľkosti nanočastice, ako aj od priemeru excitujúceho laserového zväzku a má vplyv na tepelnú relaxáciu, teda na procesy s tým spojené. Experimentálne sa získava časová závislosť parametra $\Delta\tau/\tau$, kde τ reprezentuje transmitanciu, a môže byť vyjadrená pomocou účinného prierezu absorpcie $\sigma(\omega, T)$ pomocou vzťahu^{1,2}

$$\frac{\Delta\tau}{\tau} = -\frac{3}{2\pi a^2} [\sigma(\omega, T) - \sigma(\omega, T_0)]$$

kde a je priemer častice, ω je frekvencia a T je teplota. Teplotná a frekvenčná závislosť absorbného prierezu je vyjadrená vzťahom

$$\sigma(\omega, T) = s(a) \frac{\gamma(T)/2}{[\omega - \omega_{sp}(T)]^2 + [\gamma(T)/2]^2}$$

kde $s(a)$ je normalizačný prefaktor závislý od priemeru častice, ω je frekvencia, ω_{sp} je frekvencia povrchového plazmónu a γ je šírka rezonancie. Teoretické modelovania optických vlastností sférických kovových nanočastíc majú prispieť k porozumeniu dynamike elektrónov v mezoskopických objektoch³.

LITERATÚRA

1. Voisin C., Del Fatti N., Christofilos D., Vallee F.: J. Phys. Chem., B 105, 2264 (2001).
2. Hervieux P. A., Benabbas A., Halte V., Bigot J. Y.: Eur. Phys. J. D 24, 185 (2003).
3. Kreibig U., Vollmer M.: *Optical Properties of Metal clusters*. Springer-Verlag, Berlin 1995.

7P-15

STANOVENIE ASOCIAČNÝCH KONŠTÁNT
SUPRAMOLEKULOVÝCH KOMPLEXOV NA BÁZE
FLUORESCENČNÝCH FARBÍVMARIÁN MATEJDES^a a MARIÁN JANEK^{a,b}

^a Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina CH1, 842 15 Bratislava, ^b Technologický inštitút, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 13 Bratislava, Slovenská republika
matejdes@pobox.sk, marian.janek@savba.sk

Táto práca je venovaná štúdiu podmienok tvorby inkluzívneho komplexu medzi vybranými hosťovskými molekulami ako α -, β - a γ -cyklodextríny (CD) a stanoveniu rovnovážnych konštánt komplexácie s fluorescenčnými farbivami (napr. kumarín C522) vo vodnom prostredí. Takéto komplexy predstavujú stéricky ohraničené – „confined“ (host/guest) systémy s požadovanými spektrálnymi a fluorescenčnými vlastnosťami^{1,2}. V ďalšom kroku sa pripravené komplexy použijú na modifikáciu povrchov vrstevnatých silikátov napr. montmorillonitu, za účelom prípravy funkcionalizovaných nanokompozitných tenkých vrstiev s fluorescenčnými vlastnosťami. Pripravené host/guest komplexy sú študované pomocou fluorescenčnej spektrometrie a tenké vrstvy sa charakterizujú pomocou infračervenej (IČ) a ďalej IČ („terahertzovej“) spektroskopie tak, aby umožnili sledovanie zmien spektier na základe podmienok ich prípravy.

V súlade s literatúrnymi údajmi³, zvyšovanie koncentrácie β -cyklodextrínu spôsobilo zvýšenie intenzity fluorescencie kumarínu. Takéto správanie fluorescenčných molekúl je spôsobené tým, že po vzniku inkluzívneho komplexu dochádza z časti, alebo úplne desolvatácii týchto molekúl. Stratou hydratačného obalu sa znižuje miera nežiarivej relaxácie, čím dochádza k zvýšeniu populácie elektrónovo excitovaných stavov, a tým aj k zvýšeniu intenzity fluorescencie. Namerané hodnoty intenzity fluorescencie v závislosti od koncentrácie β -cyklodextrínu sa vyhodnotili pomocou Benesi-Hildebrandovho vzťahu. Pre merania fluorescenčných spektier kumarínu C522 bolo použité excitačné žiarenie o vlnovej dĺžke $\lambda_{\text{ex}} = 415$ nm. Lineárnou regresiou získaná asociačná konštanta pre inkluzívny komplex kumarín C522 s β -cyklodextrínom vo vodnom prostredí pri laboratórnej teplote 20 °C je $K_{\text{C522} \cdot \beta\text{-CD}}^{20^\circ\text{C}} = 701,7 \pm 16,8 \text{ dm}^3 \text{ mol}^{-1}$.

Táto práca je podporovaná vedeckou grantovou agentúrou VEGA číslo 1/4457/07.

LITERATÚRA

1. Angelova A., Ringard-Lefebvre D., Baszkin, A.: J. Colloid Interface Sci. 212, 275 (1999).
2. Martin Del Valle E. M.: Process Biochem. 39, 1033 (2004).
3. Sen P., Roy D., Mondal S. K., Sahu K., Ghosh S., Bhattacharyya K.: J. Phys. Chem., A. 109, 9716 (2005).

7P-16

ŠTÚDIUM PRÍPRAVY NANOKOMPOZITOV
Z „HOST - GUEST“ INTERKALÁTOV KAOLINITU
A HALLOYZITUTOMÁŠ ZACHER^a a MARIÁN JANEK^{a,b}

^a Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina CH1, 842 15 Bratislava, ^b Technologický inštitút, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 13 Bratislava, Slovenská republika
zachy7@gmail.com, marian.janek@savba.sk

Hľadanie nových aplikácií minerálov s neexpandujúcou štruktúrou napríklad kaolinitu a halloyzitu ako prekurzorov pre ekonomicky rentabilné organicko-anorganické nanomateriály vyžaduje ich cieľnú chemickú modifikáciu ktorá by významne vylepšila funkčnosť týchto materiálov. V tejto štúdiu je pojednávané o príprave nového organicko – anorganického hybridného nanomateriálu na báze kaolinitu pripraveného interkaláciou Kumarínu C522 prostredníctvom guest – displacement reakcie použitím host – guest interkalátu s dimetylsulfoxidom (DMSO)¹. Pripravený materiál bol charakterizovaný metódami ako röntgenová difrakcia (XRD), infračervená spektroskopía s Fourierovou transformáciou (FTIR) a termálnou analýzou (TA)². Morfológia častíc bola pozorovaná rastrovacím elektrónovým mikroskopom (SEM).

Z porovnania IČ spektier jednotlivých interkalátov vidno, že v dôsledku host-guest a guest-displacement reakcií došlo v kaolinite k zmene intenzít a polôh AlAlOH valenčných vibračných pásov najmä v oblasti 3700-3600 cm^{-1} , čo tiež indikuje interakciu Kumarínu C522 s povrchovými OH skupinami kaolinitu. Detekcia absorbných pásov síce potvrdzuje prítomnosť organických molekúl na povrchu anorganickej tuhej fázy avšak jej prítomnosť v medzivrství jednoznačne potvrdzujú len röntgenové difrakčné záznamy z ktorých vyplýva, že došlo k zmene pozície prvého bazálneho reflexu kaolinitu na základe interkalácie s DMSO a následne s Kumarínom C522. Vzdialenosť bazálnych rovín štartovacieho kaolinitu vzrástla interkaláciou DMSO z 0,72 nm na 1,12 nm, čím je jednoznačne potvrdený stup molekúl DMSO do medzivrstvia. Difrakčné záznamy ukazujú, že sa dosiahla približne 100% interkalácia kaolinitu s DMSO. Rovnako sa potvrdila interkalovateľnosť kumarínu C522 pričom hodnota bazálnej vzdialenosti 0,84 nm indikuje pravdepodobne planárne usporiadanie molekúl v medzivrství kaolinitu.

Táto práca je podporovaná vedeckou grantovou agentúrou VEGA číslo 1/4457/07.

LITERATÚRA

1. Letaief S., Detellier C.: Canadian J. Chem.-revue Canadienne de Chimie 86, 1 (2008).
2. Janek M., Emmerich K., Heissler S. and Nüesch R.: Chem. Mater. 19, 684 (2007).

7P-17

INFLUENCING OF PROPERTIES OF MIXED OXIDE CATALYSTS USING HYDROGEN REDUCTION**DANIEL KOBLIHA, MILAN POSPÍŠIL, VÁCLAV ČUBA, and VILIAM MÚČKA***CTU in Prague, Faculty of Nuclear Science and Physical Engineering, Břehová 7, 115 19 Prague 1
kobliha@fffi.cvut.cz*

The catalytic activity and selected physico-chemical properties of mixed oxide catalysts were studied. Hydrogen reduction was used as topochemical reaction to study chemical properties and reactivity of individual samples.

Set of NiO-TiO₂ catalysts containing variable amount of both components were prepared; the alcoholic solution of tetra-*N*-butyl orthotitanate was hydrolyzed by aqueous solution of ammonium nitrate. Precipitated titanium nitrate was carefully rinsed and dried. Subsequently, the precipitate was mixed with HNO₃ solution containing various amounts of nickel nitrate and aqueous solution of potassium hydroxide was slowly added into the mixture. Precipitate consisting of both nickel hydroxide and titanium hydroxide was formed. The solid mixture of hydroxides was washed, dried, carefully homogenized by grinding in agate mortar and calcinated for 5 hours at temperature 500 °C.

RTG diffraction measurements revealed crystalline structure of both oxides in the samples with different composition. Obtained data suggest, that used preparative method does not lead to formation of solid solution. Dependence of specific surface areas on sample composition is strongly non-monotonous and non-additive. This evidence suggests that prepared set of mixed catalysts has different properties than their simple mechanical mixture.

The non-monotonous dependence of the maximum reduction degree on the composition of the samples provides evidence that TiO₂ oxide significantly affects the reduction rate of the nickel oxide.

REFERENCES

1. Pospíšil M., Cabicar J.: Collect. Czech. Chem. Commun. 39, 3056 (1974).
2. Pospíšil M., Čuba V., Poláková D.: J. Therm. Anal. Cal. 75, 35 (2004).
3. Pospíšil M., Hošek R., Silber R.: J. Therm. Anal. Cal. 66, 449 (2001).

7P-18

SYNTEZA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA NANOČÁSTIC STŘÍBRA**DANA HŘÍVOVÁ***RG a ZŠ města Prostějova, Studentská 2, 796 40 Prostějov
Astica.d.h@seznam.cz*

Z důvodu tvorby rezistence bakterií vůči antibiotikům v posledních několika letech opětovně narůstá zájem

o antibakteriální účinky stříbra především v oblasti lékařství. V současné době se však stříbro spíše než v iontové formě užívá ve formě nanočástic stříbra. Přestože je antibakteriální aktivita nanočástic stříbra prostudovaná poměrně široce, doposud nebyla jednoznačně zodpovězena otázka toxicity stříbrných nanočástic vůči složitějším eukaryotickým organismům.

Jedním z modelových eukaryotických organismů často používaných k testování toxicity je treпка velká (*Paramecium cadatum*) z důvodu nenáročného chovu a zároveň slouží jako bioindikátor znečištění vod. Proto byl pro určení míry toxicity nanočástic stříbra vybrán právě tento organismus.

Toxicita nanočástic stříbra byla testována na základní disperzi stříbra s pH 11,5. Následně pak byla testována upravená disperze stříbra s pH 8,1. Nakonec byl posuzován vliv toxických účinků stabilizovaných částic stříbra bílkovinou kaseinem. Z provedených experimentů byla určena toxická koncentrace nanočástic stříbra 3 mg L⁻¹ pro všechny typy testovaných disperzí stříbra. Avšak podle doby úhynu 50 % sledovaných organismů vykazovala nejvyšší toxicitu disperze stříbra s pH 11,5. Nanočástice stříbra obsažené v disperzi s pH 8,1 byly v porovnání s původní disperzí méně toxické, jelikož doby úhynu 50 % organismů byly delší. Nejdelší doby úhynu organismů byly zaznamenány pro nanočástice stříbra stabilizované kaseinem.

7P-19

JE MOŽNÉ ZPŘESNIT EMPIRICKÝ POTENCIÁL NAHRAZENÍM MOCNINNÉ FUNKCE PRO REPULZI EXPONENCIÁLOU?**PAVEL POLCR^a a PETR JUREČKA^{a,b}***^a Ústav organické chemie a biochemie, v.v.i. a Centrum biomolekul a komplexních molekulových systémů, Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6, ^b Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc
pavel.polcr@seznam.cz*

Molekulová mechanika je jedním z nejsilnějších nástrojů, které má v současné době výpočetní chemik k dispozici. K molekulárně dynamickým simulacím se dnes používá řada komerčních balíků a jedním z nejoblíbenějších je program AMBER¹. Přes jeho kvalitu se ale ukazuje, že výsledky mohou být někdy negativně ovlivněny tvarem funkce použité pro popis mezimolekulové repulze – Lennard-Jonesovým potenciálem. Právě možností nahrazení Lennard-Jonesova vztahu pro repulzi přesnější exponenciální funkcí jsme se zabývali v této práci. Parametry pro exponenciální repulzi byly získány jednoduchou konverzí z původních van der Waalsových parametrů pole Cornell a spol.². Modifikované pole bylo testováno na vybraných geometriích cytosin dimeru, kde se ukázalo, že s malou úpravou parametrizace lze dosáhnout omezení nadměrně odpuzivých interakcí v příliš blízkých geometriích. Pokusili jsme se také navrhnout vhodné exponenciální parametry pro nejpoužívanější modely vody, TIP3P a SPC/E.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT č. 2E06029 "STM-Morava" a grantu MSM 6198959216.

LITERATURA

1. Case D. A., Darden T. A., Cheatham III. T. E., Simmerling C. L., Wang J., Duke R. E., Luo R., Merz K. M., Pearlman D. A., Crowley M., Walker R. C., Zhang W., Wang B., Hayik S., Roitberg A., Seabra G., Wong K. F., Paesani F., Wu X., Brozell S., Tsui V., Gohlke H., Yang L., Tan C., Mongan J., Hornak V., Cui G., Beroza P., Mathews D. H., Schafmeister C., Ross W. S., Kollman P. A.: *AMBER 9*, University of California, San Francisco 2006.
2. Cornell W. D., Cieplak P., Bayly C. I., Gould I. R., Merz K. M., Jr., Ferguson D. M., Spellmeyer D. C., Fox T., Caldwell J. W., Kollman P. A.: *J. Am. Chem. Soc.* 117, 5197 (1995).

8P-01**SLEDOVANIE VPLYVU PALMOVÉHO TUKU NA KVALITU PEKÁRSKÝCH VÝROBKOV****LUCIA MINAROVIČOVÁ, MICHALA JANCUROVÁ, ALEXANDER DANDÁR a ZUZANA KUŠÍKOVÁ***Oddelenie potravinárskej technológie Fakulty chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika
lucia.minarovicova@stuba.sk*

Palmový olej sa získava z dužiny plodu palmového stromu *Eliaes guineensis*. V panenskom stave má olej svetlú oranžovo-červenú farbu kvôli vysokému obsahu karoténov¹.

Palmový tuk je pri izbovej teplote polotuhý vďaka 50%-nému nasýteniu. Palmový tuk je pomerne rezistentný voči oxidácii a teplu pri dlho pôsobiacich vysokých teplotách, čo robí z palmového oleja veľmi dobré médium pre vyprážacie olejové zmesi¹.

Cieľom našej práce bolo overiť deklarovanú ekonomickú výhodnosť používania palmového tuku v pekárstve namiesto bežného tuku či oleja. Táto ekonomickosť by mala vyplývať z možného znižovania prídavku tuku pri zachovaní kvality výrobkov. Taktiež sme overovali predĺženú trvanlivosť výrobkov s obsahom palmového tuku, ktorá by mala vyplývať z podstaty tohto tuku, a to, že je veľmi nasýtený a teda nevy-sychavý.

Pri našich meraniach sme porovnávali štandardné biele pečivo (3 % tuku – slnečnicový olej – na hmotnosť múky) s pekárskymi výrobkami, v ktorých sa použil palmový tuk, a to v množstvách 3 %, 2,4 %, 1,8 %, 1,5 %, 1,2 %, 0,9 %, 0,6 % na hmotnosť múky. Taktiež sme porovnávali cicerové pečivo štandardné (s bežným stolovým olejom, 2,5 % na múku) s cicerovým pečivom s obsahom palmového tuku (0,6 % na múku) a štandardné cicerovo-celozrnné pečivo s cicerovo-celozrnným pečivom s obsahom palmového tuku (0,6 % na múku). Týmto pekárskym pokusom sme sledovali vplyv palmového tuku, ktorého množstvo sme stanovili v predchádzajúcom pekárskom pokuse, na pečivá iného typu.

Palmový tuk ako možná náhrada bežného margarínu v pekárstve v našich pokusoch obstál. Napriek znižovaniu jeho množstva vo výrobku až o 80 %, kvalita výrobku, ako napr. tvar, klenutosť, pravidelná pórovitosť ostali na rovnakej úrovni. Keďže palmový tuk je bez charakteristickej vône, neboli negatívne ovplyvnené ani chuťové a vonné vlastnosti pečiva. Z hodnotenia senzorickej komisie môžeme usúdiť, že palmový tuk dal výrobkom ľahkosť, nadýchanosť.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA č. 1/0746/08.

LITERATÚRA

1. Malaysian Palm Oil Council (2008), http://www.mpoc.org.my/main_palmoil.asp, staženo 4.4. 2008.

8P-02**VPLYV PÔDNÝCH VLASTNOSTÍ NA OBSAH RUTÍNU A KVERCERTÍNU V ZRNE LÁSKAVCA A PROSA****ALENA VOLLMANNOVÁ^a, SILVIA MELICHÁČOVÁ^a, MÁRIA TIMORACKÁ^a a DANA URMINSKÁ^b***^a Katedra chémie FBP SPU, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra,
^b Katedra biochémie a biotechnológie FBP SPU, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, Slovenská republika
alena.vollmannova@uniag.sk*

V modelových podmienkach sa overovala schopnosť láskavca a prosa kumulovať rizikové kovy z metalicky kontaminovanej pôdy pri zmene niektorých pôdných vlastností vo vzťahu k obsahu rutínu a kvercetínu v zrne uvedených plodín. Pre experiment bola zvolená pôda z alúvia Štiavnického potoka v lokalite Dudince na území Hontu. V tomto regióne dodnes pretrvávajú reziduálna metalická kontaminácia pôd v dôsledku bývalej banskej a hutníckej výroby v jeho severnej časti (Štiavnické vrchy)¹.

Na zmenu pôdných vlastností sa použili rôzne dávky zeolitu, CaCO₃, mletej magnezitovej horniny (MMH) a kaustiku. Obsah kovov v zrne plodín bol stanovený metódou AAS po predchádzajúcej mineralizácii suchou cestou, obsah flavonoidov po extrakcii metanolom metódou HPLC.

V zrne láskavca boli vo všetkých variantoch prekročené limity určené Potravinovým kódexom SR pre obsah Zn (2,6 až 5-násobne), Cu (1,5 až 1,9-násobne) a Cd (18 až 33-násobne), v zrne prosa obsah Zn len v kontrolnom variante a variante s aplikáciou 10 g CaCO₃ (1,3 resp. 1,5-násobne), Cu v 4 variantoch s výnimkou aplikácie zeolitu a jeho kombinácie s MMH (1,1 až 1,8-násobne) a Cd vo všetkých variantoch (9 až 16-násobne).

Obsah rutínu aj kvercetínu v zrne láskavca bol najvyšší v kontrolnom variante (s najvyšším obsahom rizikových kovov), najnižší vo variante s aplikáciou MMH a kaustiku, v ktorom boli súčasne stanovené aj najnižšie obsahy Zn, Cu a Cd.

Obsahy rutínu aj kvercetínu v zrne prosa boli najvyššie vo variante s aplikáciou 10 g CaCO₃, pričom v tomto variante bol zistený aj najvyšší obsah Cu. Obsahy ostatných kovov boli najvyššie v kontrolnom variante.

Úpravou pôdnej reakcie využitím druhotných surovín (MMH a kaustiku) možno eliminovať vstup rizikových kovov do potravinových surovín, avšak nie v dostatočnej miere. Na základe uvedených výsledkov možno vysloviť predpoklad, že v podmienkach metalickej záťaže prišlo k zvýšenej tvorbe rutínu a kvercetínu v zrne láskavca v dôsledku pravdepodobného obranného mechanizmu rastliny voči stresovému faktoru. Tento fakt sa však nepotvrdil v zrne prosa.

Práca vznikla s podporou VEGA 1/3455/06, KEGA 3/5081/07.

LITERATÚRA

1. Tóth T., Tomáš J., Lazor P., Chlpík J., Jomová K., Hegedúsová A.: *ChemZi 1*, 285 (2005).

8P-03
RAFINÁCIA BAVLNÍKOVÉHO OLEJA
ETANOLAMÍNOM

OYBEK ZUFAROV, ŠTEFAN SCHMIDT a STANISLAV
SEKRETÁR

*Oddelenie potravinárskej technológie Fakulty chemickej
 a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37
 Bratislava, Slovenská republika
 oybek.zufarov@stuba.sk*

Bavlníkové semeno obsahuje približne 2 % toxických látok ako sú gossypol a jeho deriváty¹. Kvôli obsahu gossypolu v surovom oleji sa bavlníkový olej ťažko rafinuje. Dnes existuje niekoľko metód odstránenia gossypolu počas jeho chemickej rafinácie. Na základe jeho hydroxilových a aldehydových skupín, gossypol reaguje s rôznymi chemikáliami ako kyselina antranilová, hydroxid sodný, karbamid a iné, s ktorými tvorí v tuku nerozpustné zlúčeniny, ktoré sa odstraňujú z oleja so soapstockom alebo filtráciou. Uvedené chemikálie sa dnes používajú na získavanie rafinovaného oleja pre jedlé účely²⁻⁴.

Bavlníkový olej bol rafinovaný monoetanolamínom, dietanolamínom a trietanolamínom. Na základe výsledkov rafinácie bavlníkového oleja bolo možné vyvodit', že táto metóda rafinácie olejov ma veľa výhod. Hlavná výhoda je v tom, že v jednom procese sa dá znížiť obsah gossypolu od 0.129 % do 0.059 %, obsah fosforu od 724,3 mg kg⁻¹ do 7 mg kg⁻¹, číslo kyslosti od 4,28 mg KOH g⁻¹ na menej ako 0,3 mg KOH g⁻¹. Okrem toho sa zlepšila aj farba oleja. Obsah vápniku, horčíku a železa tak isto klesol po spracovaní oleja etanolamínom.

Celý proces prebieha pri izbovej teplote, čo je ekonomický výhodné, takže sa predpokladá, že sa odstráni aj časť voskov v oleji. Táto metóda spojila v jednom procese odstránenie voľných mastných kyselín, odslizovanie, čiastočnú venterizáciu a odfarbovanie olejov, počas celého procesu nie sú žiadne nároky na teplotu.

*Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0746/08
 a APVV – 0310–06.*

LITERATÚRA

1. Šerbakov V. G.: *Biochemistry of Seeds*, kap. 7, str. 203. Moscow 1995.
2. Serkaev K., Ilasov A., Nazirkulova K., Mirzajev A.: *J. Pretreatment Agric. Prod. Uz.* 12, 148 (2005).
3. Mirzajev A, Nazirkulova K., Ilasov A., Serkaev K.: *J. Fat Oil Indus. Russ.* 4, 31 (2004).
4. Zufarov O., Ilasov A.: *J. TSAU I*, 194 (2003).

8P-04
KOREŇOVÝ PRÍJEM RÔZNYCH FORIEM CHRÓMU

LADISLAV LAHUČKÝ, ALENA VOLLMANNOVÁ,
JOZEF KULICH a ĽUBOŠ HARANGOZO

*SPU, FBP, KCH, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, Slovensko
 ladislav.lahucky@uniag.sk*

Názory na biopristupnosť chrómu sú často rozporné. Zhodujú sa však napr. poriadkovo vyššou fyto toxicitou zlúčenín Cr⁶⁺ v porovnaní s Cr³⁺.

Získané výsledky testu fyto toxicity Cr⁶⁺ dokumentujú, že dávky 2 a 5 mg Cr⁶⁺ na kg pieskového substrátu preukazne znížili hmotnosť biomasy koreňov a nadzemných častí jarného jačmeňa. Napriek tomu, že koreň tvorí významnú bariéru pre transfer chrómu do nadzemných častí rastlín, preukazne sa zvýšil jeho obsah v nadzemných častiach jačmeňa pri dávke 50 mg kg⁻¹ Cr³⁺, 2 a 5 mg kg⁻¹ Cr⁶⁺. Výsledky v pokuse s kukuricou dokumentujú, že k zvýšeniu obsahu mobilných foriem chrómu v použitých pôdach vo výluhu 2M HNO₃ významne prispeli zlúčeniny Cr⁶⁺. Preto je potrebné hodnotiť riziko Cr³⁺ a Cr⁶⁺ v ekosystémoch kontaminovaných rôznymi formami chrómu diferencovane. Rizikový je obsah chrómu v koreňových častiach rastlín po aplikácii relatívne nízkych dávok Cr⁶⁺. V nadzemných častiach sa dávky Cr³⁺ a Cr⁶⁺ neprejavili rozdielnymi obsahmi chrómu. Diferencovanie foriem chrómu potvrdilo zastúpenie oboch foriem chrómu Cr³⁺ a Cr⁶⁺ v koreňoch a vňati zemiakov. Pri aplikácii Cr⁶⁺ bolo zastúpenie chrómu v koreňoch v prospech Cr⁶⁺ (73 %), pri aplikácii Cr³⁺ bolo zastúpenie oboch foriem takmer vyrovnané. Na substrátoch s prachom Istebné prevažovala aniónová forma Cr⁶⁺ (84 %). V substrátoch s prachom Sereď bol obrátený pomer v prospech kationovej formy Cr³⁺ (74 %). V extraktoch nadzemných častí bolo pomerne zastúpenie oboch foriem chrómu vyrovnané. Aplikácia dávok Cr³⁺ a Cr⁶⁺ významne neovplyvnila obsah Cr v hlúzách zemiakov. Tieto obsahovali len stopové množstvá chrómu, preto bola diferenciácia ich foriem nerealizovateľná. Poznatky získané na kukurici a zemiakoch nie je možné zovšeobecňovať. Možno predpokladať, že v pôdach kontaminovaný Cr⁶⁺ (oblasť Istebné) bude zvlášť riziková v záhradkárske podmienkach pestovaná koreňová zelenina s nadlimitnými obsahmi chrómu s prevažným zastúpením formy Cr⁶⁺, čo dokumentujú aj výsledky Chrenekovej a kol., 1992, 1994.

*Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA č. 1/2428/05
 a VEGA č. 1/3455/06.*

8P-05**KULTÚRNE RASTLINY AKO ZDROJE SELÉNU A ICH VPLYV NA ZDRAVOTNÝ STAV OBYVATEĽSTVA****ANDREA VARGOVÁ, SILVIA JAKABOVÁ, ONDREJ HEGEDÚS a ALŽBETA HEGEDÚSOVÁ***Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita Konštantína Filozofa v Nitre, Tr. A. Hlinku 1, 949 74 Nitra, SR avargova@ukf.sk*

Podľa údajov štatistického úradu SR predstavujú kardiovaskulárne ochorenia nadpolovičný a onkologické ochorenia takmer štvrtinový podiel na všetkých úmrtiach, pričom tento trend pretrváva v posledných 30 rokoch. U populácie sa pritom zistil nedostatočný príjem selénu¹, ktorý napomáha znižovať riziko vzniku uvedených ochorení.

Nedostatočné množstvá selénu v potravinách súvisia s jeho obsahom v pôdach. V podmienkach Slovenska sa zistil nízky obsah Se v pôde² a jeho nedostupnosť pre rastliny súvisí s prevahou kyslých pôd, ktoré obsahujú málo prístupné formy Se^{3,4}.

Obohacovanie pôd anorganickým selénom a pestovanie poľnohospodárskych plodín na takýchto pôdach je jednou z ciest, ako zvýšiť príjem selénu v ľudskej výžive. Konzumácia selénovo obohatenej zeleniny suplementuje selén vo forme, ľahko absorbovanej organizmom a napomáha znižovaniu rizika onkologických a kardiovaskulárných ochorení.

Výsledky biofortifikácie kultúrnych rastlín selénom na príklade kapusty hlávkovej a hrachu záhradného naznačujú, že aj pri súčasnom trende spotreby by mohli byť tieto požívateľiny významným zdrojom selénu pre obyvateľstvo. Suplementácia uvedených plodín 1 mg Se kg⁻¹ by mohla zvýšiť príjem selénu v priemere o 114 µg/deň. Nevyužitý selén by sa však mohol v pôde hromadiť, preto je pri fortifikácii pôd nutné kontrolovať jeho obsah. Aplikácia selénanu sodného by bola možná len v prípade, že pôdny obsah selénu je nižší ako 0,1 mg kg⁻¹ a obsah aplikovaného selénu na 1 ha plochy by nepresiahol 100 až 200 g Se, podľa pestovaného rastlinného druhu.

*Príspevok vznikol s podporou projektu VEGA 1/3540/06.***LITERATÚRA**

1. Kadrabová J., Maďarič A., Ginter E.: *Food Chem.* 58, 29 (1997).
2. Čurlík J., Šefčík P.: *Pôdy*. VÚPOP, s. 100. Bratislava 1999.
3. Magálová T.: *Výživa a zdravie* 43, 8 (1998).
4. Sager M.: *Pure Appl. Chem.* 78, 111 (2006).

8P-06**BIOFORTIFIKÁCIA HRACHU ZÁHRADNÉHO SELÉNOM****SILVIA JAKABOVÁ, ONDREJ HEGEDÚS, ALŽBETA HEGEDÚSOVÁ a ANDREA VARGOVÁ***Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita Konštantína Filozofa v Nitre, Tr. A. Hlinku 1, 949 74 Nitra, SR sjakabova@gmail.com*

Príspevok poukazuje na praktickú možnosť ako využiť agronomickú biofortifikáciu na získanie selénovo-obohatenej rastlinnej požívateľiny.

Hrach záhradný sa pestoval vo fytokomore s prídavkom selénanu sodného v množstve 0, 1, 2, 4 a 6 mg kg⁻¹ pôdneho substrátu. Po 50 dňoch sa rastliny zberali, separovali na korene, nadzemnú časť a semená a analyzovali na obsah Se metódou ZET-AAS¹. Zatiaľ čo u variantov s prídavkom Se 1 a 2 mg kg⁻¹ bola najvyššia kumulácia Se v zrne, varianty s prídavkom 4 a 6 mg kg⁻¹ vykazovali najvyššiu kumuláciu Se v koreni.

Priemerný obsah Se v koreni sa zvyšoval v porovnaní s kontrolou 43 až 173-násobne. V nadzemnej časti sa zvyšoval obsah Se 79 až 372-násobne a v zrne predstavovala kumulácia Se 130 až 415 násobok v porovnaní s kontrolným variantom.

Analýzou hrachu sa zistilo, že po fortifikácii pôd rôznymi dávkami selénanom sa úmerne zvýšil aj príjem celkového obsahu selénu vo všetkých častiach hrachu siateho². Obsah Se vo všetkých častiach rastliny silne koreloval s jeho prídavkom do pôdy.

Hodnotenie vplyvu selénanu na tvorbu biomasy sa realizovalo štatisticky porovnaním hmotnosti biomasy medzi jednotlivými variantmi. Signifikantné rozdiely oproti kontrole sa zistili v biomase koreňov aj nadzemnej časti u variantov s prídavkom 4 a 6 mg kg⁻¹, kedy už selén pôsobil fyto toxicky a brzdil rast rastlín, čo sa prejavovalo od vzídenia až po zber rastlín.

*Príspevok vznikol s podporou projektu VEGA č. 1/3540/06.***LITERATÚRA**

1. Hegedús O., Hegedúsová A., Šimková S., Pavlík V., Jomová K.: *J. Biochem. Biophys. Methods*, v tlači.
2. Hegedús O., Hegedúsová A., Šimková S.: *Selén ako biogénny prvok*. UKF Nitra, v tlači (2008).

8P-07**TVORBA BIOMASY A ZMENY OBSAHOV SPERMIDÍNU A ETYLÉNU V JARNOM JAČMENI PO SPOLOČNEJ APLIKÁCIÍ TRIAZÍNÓVÉHO HERBICÍDU S POLYAMÍNMI A S REGULÁTORMI POLYAMÍNOVEJ BIOSYNTÉZY****PAVOL TREBICHALSKÝ, PETER LAZOR, ĽUBOŠ HARANGOZO a ANNA HRUŠKOVIČOVÁ**

*Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovenská poľnohospodárska univerzita, Trieda A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, Slovenská republika
palotre@atlas.sk*

Sledoval sa vplyv triazínového herbicídu (samotného, alebo v kombináciách s prípravkami s morforegulačnými účinkami) na kvantitatívne parametre jačmeňa jarného (odrody Kompakt) v modelových podmienkach nádobových pokusov pod svetelnou rampou.

Cieľom experimentu bolo taktiež stanoviť vplyv týchto komponentov na syntézu niektorých endogénnych organických látok (spermidínu a etylénu) metódou HPLC. V pokusných nádobách (25 ks rastlín) obsahujúcich 1 kg zeminy; 0,5 kg kremičitého piesku sa udržiavala hladina zavlažovania na 60 % PVK. Po 14 dňoch bol pokus (11 variantov po štyri opakovania) foliárne ošetrený. Prvý variant bol kontrolný, v druhom sa aplikoval samotný herbicid ($0,5 \text{ l ha}^{-1}$) a v nasledujúcich sa aplikovali zmesi herbicídu ($0,5 \text{ l ha}^{-1}$) s polyamínmi (putrescín, spermidín a spermin), v ďalších variantoch s ich degradačnými produktami (kyselinou γ -aminomaslovou a propyléndiaminom).

Herbicid redukoval množstvo vyprodukovanej sušiny nadzemnej hmoty, nie však čerstvú nadzemnú hmotu a sušinu koreňov. Aplikované regulátory polyamínovej biosyntézy eliminovali jeho negatívny účinok na tvorbu sušiny nadzemnej hmoty a navyše pôsobili na jej tvorbu stimulačne ako aj na tvorbu čerstvej nadzemnej hmoty. Všetky regulátory v zmesi s herbicídom v týchto podmienkach redukovali množstvo sušiny koreňovej hmoty.

Po aplikácii prípravkov dochádza pomerne rýchlo k zmenám v hladine voľných polyamínov. Po dvoch hodinách začína narastať obsah spermidínu a ako reakcia na jednotlivé látky kulminuje po šiestich hodinách. Následný pokles hladín spermidínu vo všetkých rastlinách sa dosiahol po 48 h. Tento údaj je v inverznom vzťahu k nárastu hladiny etylénu uvoľneného rastlinami. To len potvrdzuje známy antagonistickej vzťah etylénovej a polyamínovej biosyntézy.

8P-08**HYGIENICKÁ KVALITA RASTLINNÝCH PRODUKTOV DOPESTOVANÝCH PO APLIKÁCIÍ BIOKALU****TOMÁŠ TÓTH^a, RICHARD POSPÍŠIL^b, JURAJ CHLPÍK^b, DANIEL BAJČAN^a, JÚLIUS ÁRVAY^a a PAVOL TREBICHALSKÝ^a**

*^aKCH FBP SPU v Nitre, ^bFAPZ SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra, Slovenská republika
tomas.toth@uniag.sk*

Vyhnitý biokal po výrobe bioplynu je nepáchnuci, dobre odvoditeľný a z hygienického hľadiska neškodný. Podporuje tvorbu humusu a upravuje štruktúru pôdy. Frakcie a mobilitu kadmia a olova do pôdy aplikáciu biokalu získaného po kontinuálnej kofermentácii živočíšnych odpadov a energetických plodín sme zisťovali v podmienkach poloprevádzkového pokusu na Výskumnej báze SPU v Koliňanoch. Varianty pokusu : Kontrola : bez aplikácie biokalu; Variant 1: aplikácia biokalu na jeseň – 50 t ha^{-1} ; Variant 2: aplikácia biokalu na jar – 50 t ha^{-1} . V rámci pokusov sa pestovali plodiny : jačmeň jarný, cukrová repa, kukurica na siláž, slnečnica ročná. V záujme posúdenia bioprístupnosti ťažkých kovov sme sledovali distribúciu Cd a Pb v jednotlivých pôdnych typoch metódou selektívnej sekvenčnej extrakcie. Na základe stanovení a analýz možno vyvodit' závery a : analýzou biokalu sme zistili, že obsah Cd aj Pb v aplikovanom substráte je nižší ako je medzná hodnota pre obsah ťažkých kovov stanovená zákonom. Metódou selektívnej sekvenčnej extrakcie sme zistili, že 45–53 % z celkového obsahu Pb sa nachádza v pôde vo formách, ktoré sú pre rastliny v prístupnej forme, podiel prijateľných foriem Cd v pôde tvorí 11–13 % z celkového obsahu. Obsah Cd a Pb vo vzorkách nadzemnej biomasy bol nižší ako je limitná hodnota stanovená legislatívou. Aplikácia kalu na jar a na jeseň nemala výrazný vplyv na príjem Cd a Pb slnečnicou v porovnaní s kontrolným variantom. V porovnaní sa NPM Potravinového kódexu SR možno konštatovať, že obsah Cd v zrne jačmeňa bol vyšší o 44 % ako je NPM. Obsah Pb je nižší ako je NPM. Z hygienického hľadiska dopestovaný jačmeň nie je vhodný na potravinárske a sladovnícke využitie, v buľvách cukrovej repy bol obsah Pb prekročený o 10 % a obsah Cd o 293 %. Na základe obsahov Pb a Cd nie je cukrová repa vhodná pre spracovanie v cukrovarníckom priemysle. Z hľadiska príjmu sledovaných rizikových prvkov je vhodnejšia aplikácia kalu na jeseň ako v jarnom období. Aplikácia biokalu nemala preukazný vplyv na príjem kadmia a olova a ich obsah v nadzemnej biomase bol nižší ako je limitná hodnota stanovená legislatívou.

8P-09**VYUŽITIE ODPADU PRI SPRACOVANÍ MAGNEZITU AKO HOREČNATO-VÁPENATÉHO HNOJIVA****JÁN TOMÁŠ, TOMÁŠ TÓTH, ALENA VOLLMANNOVÁ a JANETTE MUSILOVÁ***Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre, 949 01 Nitra, Slovenská republika
jan.tomas@uniag.sk*

Programované horečnato-vápenaté hnojivo na báze prírodnej mletej horečnatej horniny a kaustiku pri hmotnostných pomeroch 70 : 30 obsahuje minimálne 45 % MgO, z toho približne polovica v uhličitanovej forme a polovica v oxidovej forme. Kaustický MgO má priaznivú rýchlosť hydratácie a rozpúšťania ako i vysokú relatívnu neutralizačnú hodnotu a vysokú alkalizujúcu aktivitu.

Použitie programovaného horečnato-vápenatého hnojivá vo veľkoplošných pokusoch na ľahkej piesočnatej regozemi arenickej na Záhori sa zvýšil obsah prístupného horčička z kategórie veľmi nízkeho obsahu do kategórie nízkeho obsahu. Zároveň na uvedenej pokusnej ploche pri pestovaní Raže siatej (*Secale cereale* L.) sa zvýšila úroda zrna za použitia horečnatých hnojív o 11,0–26,4 %. Pozitívny vplyv aplikovaného horečnatého hnojiva sa prejavil na zvýšenom odbere horčička a vápnika zrnom i slamou pokusnej plodiny.

Aplikácia pokusného hnojivá na stredne ťažkej kambizemi typickej na Strednom Spiši sa obsah horčička zvýšil z kategórie nízkeho obsahu do kategórie stredného obsahu. Uvedené hnojivo na pokusnom pozemku zvýšilo úrodu kukurice silážnej. Aplikované mleté horečnato-vápenaté hnojivo zvyšovalo úrodu kukurici silážnej o 13,6–19,8 %. Zvýšené obsahy prístupného horčička v pôde ako následok aplikovaných hnojív sa odrazili vo zvýšenom obsahu horčička v kukurici silážnej.

Zo stanovení sorpčných vlastností ľahkej piesočnatej pôdy vyplýva, že aplikáciou horečnatých hnojív sa v priebehu troch rokov u uhličitanového typu hnojív a u zmesného horečnato-vápenatého hnojiva v slaboo nasýtenej pôde zvýšila jej nasýtenosť z hodnoty 50–70 % na hodnotu 75 %, čo znamená nasýtenú pôdu.

8P-10**OBSAH Cd A Pb V ZRNE OBILNÍN PESTOVANÝCH V ZAŤAŽENEJ OBLASTI****TOMÁŠ TÓTH, JÁN TOMÁŠ, EUBOŠ HARANGOZO, PETER LAZOR, LADISLAV LAHUČKÝ, JURAJ ČÉRY a JOZEF KULICH***KCH FBP, Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra, Slovenská republika
tomas.toth@uniag.sk*

Vplyv ťažkých kovov na životné prostredie je zvýraznený ich perzistenciou. Výskyt ťažkých kovov v rastlinách súvisí s ich prítomnosťou v pôdach. Hlavnými bariérami blokovaní príjmu alebo transportu ťažkých kovov do nadzemných

častí rastlín sú koreňová čiapočka a endoderma. Obilniny patria medzi strategické plodiny agrosektora na Slovensku. V roku 2004 obilniny tvorili 60,19 % vo využívaní ornej pôdy. Sledovanie rizikových prvkov v pôdach a pestovaných poľnohosp. plodinách sa uskutočnilo na Agrodužstve Staré a RD Voľa v okr. MI. Obsahy ťažkých kovov (Cd a Pb) v pôdnych typoch sme posudzovali z hľadiska rizík, ktoré vyplývajú z ich prieniku do potravinového reťazca. Z výsledkov stanovení Pb, Cd, ich celkových obsahov a obsahov vo výluhu 2M HNO₃ vyplýva, že obsah Pb v pôdach na stanovištiach v regióne Stredného Spiša a v povodí rieky Štiavnica bol vyšší ako je legislatívne stanovená norma pre jeho obsah v pôde. V najbližšom okolí rieky Štiavnica sú prekračované indikačné hodnoty (C) v prípade Pb. Obsah Cd v pôde bol vyšší ako je legislatívou stanovená limitná hodnota na všetkých stanovištiach. Z hodnotenia obsahu Cd v zrne obilnín vo vzťahu k NPM pre požívatinu vyplýva, že NPM pre tento prvok bol prekročený v 27 vzorkách z celkového počtu 38 vzoriek. Slabo kyslé pH sa prejavilo ako blokovací faktor príjmu Cd. Vzhľadom na zistené skutočnosti odporúčame venovať zvýšenú pozornosť obsahu Cd v zrne pšenice a následne i v múke. V prípade dopestovaného jačmeňa vyplývajú podobné závery, ako v prípade pšenice, t.j. v zrne jačmeňa sme zistili prekročenie NPM na všetkých stanovištiach. Zvýšená kumulácia Pb v zrne pšenice sa prejavila na všetkých sledovaných stanovištiach. Prekročenie NPM bolo najvýraznejšie v oblasti Štrba a Štiavnica. Pšenica dopestovaná na 23 stanovištiach z celkového počtu 26 stanovišť nespĺňala kritériá pre jeho maximálny obsah stanovený PK SR. Podobné skutočnosti sme zistili aj v prípade zrna jačmeňa. 10 vzoriek z celkového počtu 11 prekračovalo hodnoty NPM. vzhľadom na zistené skutočnosti treba venovať zvýšenú pozornosť dopestovaným komoditám na týchto stanovištiach z dôvodu možného inputu Cd a Pb do potravinového reťazca človeka.

8P-11**ANTIOXIDANT Q₁₀****TOMÁŠ TÓTH^a, ALENA VOLLMANNOVÁ^a, JUDITA BYSTRICKÁ^a, KLAUDIA JOMOVÁ^b, JANETTE MUSILOVÁ^a a ANNA HRUŠKOVIČOVÁ^a**^a *KCH FBP SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra,*^b *KCH FPV UKF v Nitre Tr. A. Hlinku 1, 949 01 Nitra,**Slovensko**tomas.toth@uniag.sk*

Objav koenzýmu Q₁₀ je považovaný za jeden z najzaujímavejších objavov minulého storočia. Koenzým Q₁₀ bol po prvý krát izolovaný v roku 1957 z hovädzieho srdca, z mitochondrií doktorom Frederickom Crane z Wisconsinu. Jeho chemická štruktúra je 2,3-dimethoxy-5-methyl-6-decaprenylbenzochinón. Koenzým Q₁₀-ubichinón je lipofilný, nebielkovinový provitamin nachádzajúci sa v každej bunke tela a slúži ako pre niekoľko kľúčových enzymatických pochodov, pre tvorbu energie v bunkách a je aj syntetizovaný v mnohých tkanivách. Biosyntéza koenzýmu Q₁₀ je z aminokyseliny – tyrozínu. Svojím zložením je podobný vitamínom E a K, ktoré sa vyskytujú najmä v pečeni, srdci a mozgu. Koenzým Q₁₀ je žltá prírodná živina nevitaminového charakteru, nepostráda

teľná pre ľudský organizmus. V ľudskom tele sa nachádza asi 0,5–1,5 mg koenzýmu Q_{10} . Najväčšie množstvo tejto látky je vo veku okolo 20 roka života. S pribúdajúcim vekom klesá až na nulové hodnoty. Biologický význam: energetická aktivita na úrovni bunkových štruktúr mitochondrií, antioxidačné účinky, používa sa v prevencii a v podpornej liečbe angíny pectoris, porúch rytmu, kardiomyopatií a iných ochoreniach srdca, podporuje činnosť imunitného systému, zlepšuje fagocytózu, znižuje krvný tlak, koenzým Q_{10} má sľubné účinky u Parkinsonovej a Alzheimerovej choroby, pozitívne účinky pri liečbe rakoviny prsníka, stabilizuje hladinu cukru v krvi, priaznivý vplyv na zápalové ochorenia zubov, znižuje tvorbu histamínu, spomaľuje proces starnutia, pomáha redukovať váhu, zvyšuje atletické výkony a potlačuje chronický únavový syndróm. Nedostatok: jeho produkcia s pribúdajúcim vekom klesá, čo sa prejavuje oslabením svalstva a celého organizmu, pri znížení množstva Q_{10} v organizme o 75 % nastáva ukončenie životných aktivít a nakoniec smrť. Viditeľným prejavom nedostatku tejto látky sú vrásky, kruhy pod očami a zdrsnenie pleti. Potreba: Koľko koenzýmu Q_{10} by malo predstavovať denný príjem, nie je presne stanovené, odporúča sa dávka 20–30 mg. Zdroje: najbohatšími zdrojmi koenzýmu Q_{10} sú oleje s dlhými nenasýtenými reťazcami (sójový olej alebo olej v orechoch). Nachádza sa bežne v niektorých potravinách ako napr. hovädzie srdce, bravčové mäso, sardinky, losos, špenát, orechy.

Táto práca vznikla podporou projektu KEGA č. 3/4282/06.

8P-12 FARBIVÁ PRÍRODNÉHO PÔVODU V POTRAVINÁCH

TOMÁŠ TÓTH^a, RADOVAN STANOVIČ^a, LINDA PELTZNEROVÁ^a, ALŽBETA HEGEDUSOVÁ^b, ALICA BOBKOVÁ^a a SILVIA MELICHÁČOVÁ^a

^aFBP SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra, ^bFPV, UKF v Nitre, Tr. A. Hlinku 1, 949 01 Nitra, Slovensko
tomas.toth@uniag.sk

Výroba a aplikácia aditívnych látok je v posledných dvoch desaťročiach najrýchlejšie sa rozvíjajúca oblasť potravinárstva. V súčasnej dobe je v Európskej únii schválených cca 180 potravinárskych aditív a ich skupín. Farbivá majú veľmi dôležitú úlohu pri výrobe priemyselných potravín. Farba potraviny často vytvára prvý dojem spotrebiteľa. Rozdeľujú sa do dvoch skupín na farbivá prírodné vrátane farbív prírodne identických a syntetické. Niektoré štúdie ukázali, že potraviny nechutia tak ako by mali, keď nemajú vhodnú farbu, pretože farba ovplyvňuje vnímavosť spotrebiteľa. Prírodné farbivá sú farebné látky, ktoré živé bunky syntetizujú a akumulujú, alebo ich exkretujú do prostredia. Tieto farbivá sú: prirodzenou súčasťou potravín živočíšneho alebo rastlinného pôvodu danou genetickými dispozíciami daného organizmu, súčasťou iných než potravinárskych materiálov prírodného pôvodu, z ktorých sa získavajú v pôvodnom stave; ako také alebo štruktúrne pozmenené sa používajú na farbenie potravín. Povolené prírodné farbivá: karotenoidy, α , β , γ karotén, annanto, kapsantín, kapsorubín, lykopen, β -apo-8-

-karotenal, etylester kyseliny β -apo-8-karoténovej, xantofyly, kantaxantín, luteín, betanín, antokyány, kurkumín, riboflavin, alkanet, košenila, chlorofyl, Cu-chlorofyl. Farbivá použité v potravinách musia byť vyznačené na obale a to buď názvom látky, alebo číselným kódom E. Preto má každý spotrebiteľ možnosť vybrať si potraviny, ktoré farbivá neobsahujú, alebo obsahujú len farbivá všeobecne považované za bezpečné. Podľa štruktúry sa rozoznávajú nasledujúce základné skupiny farbív: dusikaté heterocyklické zlúčeniny, kyslíkaté heterocyklické zlúčeniny, fenoly a od nich odvodené farbivá, terpenoidy.

Táto práca vznikla podporou projektu KEGA č. 3/4282/06.

8P-13 ÚČINOK METALICKEJ ZÁŤAŽE POĽNO- HOSPODÁRSKEJ PÔDY NA KVALITU PRODUKCIE SUROVÍN NA POTRAVINÁRSKE ÚČELY

JÁN TOMÁŠ, DANIEL BAJČAN, LADISLAV LAHUČKÝ, JÚLIUS ÁRVAY a JUDITA BYSTRICKÁ

Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre, 949 01 Nitra, Slovenská republika
Jan.Tomas@uniag.sk

Znečistenie našich pôd je alokované predovšetkým do oblasti priemyselných centier, do okolí urbanizovaných celkov, ale aj územia s vysokým geochemickým pozadím znečisťujúcich prvkov. Olovom sú kontaminované najmä fluvizeme a kambizeme povodia Štiavničky, kde na všetkých sledovaných stanovištiach (celkove 18 z 24) sme zistili nadlimitný obsah Pb v pôde. Pritom kambizeme (priemerný koeficient prekročenia limitnej hodnoty K_L pre Pb=24,1) sú výrazne viac kontaminované ako fluvizeme (priemerná hodnota K_L pre Pb=14,5). Najviac Cd sú kontaminované fluvizeme a kambizeme. Pritom kambizeme (priemerná hodnota K_L pre Cd=22,1) sú viac kontaminované ako fluvizeme (priemerná hodnota K_L pre Cd=16,9). Nadlimitný obsah Cd sme zistili v semenách slnečnice, pričom obsah Cd bol 0,38–13,1 mg kg⁻¹, čo je 0,8–26,2 násobok NPM. Nadlimitné obsahy Cd v olejninách sme zistili prevažne na fluvizemiach, ktoré boli vysoko kontaminované kadmíom. Obsah Pb v zrne obilovín bol v rozpätí 0,05 až 0,95 mg kg⁻¹, čo predstavuje 0,25–4,8 násobok NPM, pričom NPM pre Pb bolo prekročené vo väčšine vzoriek obilovín. Nadlimitný obsah Pb sme zistili aj u slnečnici, pričom obsah Pb bol v intervale 0,6 až 24,2 mg kg⁻¹, čo je 0,6–24,2 násobok NPM. Tieto výsledky potvrdzujú najmä nevyhnutnosť komplexného prístupu pri hodnotení systému pôda ↔ rastlina.

Tento projekt vznikol podporou projektu VEGA č. 1/0339/08.

LITERATÚRA

- Jomová K., Vollmannová A., Hegedusová A., Toth T.: *Phytopedon*. Bratislava, 2003, roč. 2, s. 146–148.
- Vollmannová A., Lahucky L., Toth T., Hegedusová A., Jomová K.: *Pôda a rastlina : zb.zh konf., GEMINI, Bratislava 2002*, s. 261–263. Bratislava 2002.

8P-14**OBSAH KADMIA VO VODOROZPUSTNÝCH
A NEROZPUSTNÝCH SACHARIDOCH LUŽKA
ZEMIAKOVÉHO****JANETTE MUSILOVÁ, MÁRIA TIMORACKÁ, LINDA
PELTZNEROVÁ a JURAJ ČÉRY***Katedra chémie FBP SPU, Tr. A. Hlinku 2 949 76 Nitra, SR
janette.musilova@uniag.sk*

Chemické zloženie hľuzy ľužka zemiakového sa mení vo veľkej miere v závislosti od pôdno-klimatických podmienok¹, odrody, stupňa zrelosti, dĺžky a podmienok uskladnenia, mení sa aj v hľuzách v jednom trse a v závislosti od ďalších faktorov. Sušina, ktorá tvorí asi 24 % zemiakovej hľuzy, obsahuje škrob (približne 75 %), 5–10 % N-látok (aminokyseliny, bielkoviny, dusičnany), tuky (0,1 %) a ďalší rad látok, ktoré dopĺňajú nutričnú hodnotu zemiakov. K nim patria najmä sacharidy a polysacharidy, vitamíny, minerálne látky, enzýmy, farbivá, organické kyseliny, aromatické látky, fenoly, glykozidy.

Vo forme modelového nádobového pokusu sme zisťovali vplyv kontaminácie pôdy s rôznymi aplikovanými dávkami Cd (0, 3, 5, 10 mg kg⁻¹ pôdy) na jeho kumuláciu v hľuzách 4 odrôd zemiakov (Junior, Livera, Agria, Asterix), tvorbu vodorozpustných sacharidov (VRS), nerozpuštných sacharidov (NRS) a množstvo nimi viazaného Cd. Pôdny obsah Cd v kontrolnom variante prekročoval hygienický limit určený legislatívou o 30 %.

Obsah VRS sa so zvyšujúcimi obsahmi Cd v pôde zvyšoval takmer vo všetkých odrodách. V 1. variante bol najvyšší obsah VRS v odrode Junior (0,13 %), v ďalších v odrode Asterix (2. variant 0,22 %, 3. variant 0,43 %, 4. variant 0,57 %). Obsah NRS bol taktiež najvyšší v odrode Asterix vo všetkých variantoch. Odroda Junior sa vyznačovala najvyššou schopnosťou kumulovať Cd vo frakcii VRS (0,074 až 0,12 mg Cd vo VRS v 1 kg čerstvej hmoty). K podobnému zisteniu sme dospeli aj pri hodnotení Cd vo frakcii NRS (0,147 až 0,193 mg Cd vo NRS v 1 kg čerstvej hmoty) s výnimkou variantu s najvyšším prídavkom Cd, kde sme zaznamenali v tejto odrode najnižší obsah Cd vo frakcii NRS.

*Práca vznikla s finančnou podporou grantu VEGA
1/4428/07.***LITERATÚRA**

1. Zrůst J.: *Bramborářství 11* (2003).

8P-15**RIZIKO KONTAMINÁCIE ZLOŽIEK
POTRAVOVÉHO REŤAZCA KADMIIOM, OLOVOM
A CHRÓMOM V REGIÓNE HONT****DANIEL BAJČAN, JÁN TOMÁŠ, RADOVAN
TANOVIČ a LINDA PELTZNEROVÁ***Katedra chémie, FBP SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 76
Nitra, Slovenská republika
bajcan@gmail.com*

Vplyv cudzorodých látok na životné prostredie je predmetom záujmu mnohých vedcov ako aj širokej verejnosti už niekoľko desaťročí. Jednou z najvýznamnejších skupín cudzorodých látok sú rizikové prvky. Tie patria medzi nedegradovateľné kontaminanty, ktoré sa vyznačujú rozdielnym zdrojom pôvodu, vlastnosťami ako aj pôsobením na živé organizmy¹. Prostredníctvom potravného reťazca prenikajú do rastlín, živočíchov a nakoniec aj do ľudského organizmu. Pre človeka predstavujú ťažké kovy značné nebezpečenstvo, pretože už v malých koncentráciách spôsobujú poškodenie organizmu². Zákernosť ich pôsobenia spočíva v tom, že okrem akútnych intoxikácií, ktoré sú však vzácné, sa tieto látky v tele hromadia, kumulujú a organizmus svojimi účinkami postupne menia. Spôsobujú zdanlivo nebadateľné poruchy, ktoré však môžu vyústiť do vážnych metabolických porúch³. Pre expozíciu obyvateľstva je dôležitý hlavne ich príjem potravou. Keďže hlavným zdrojom potravín je poľnohospodárska výroba, je potrebné hodnotiť najmä negatívne vplyvy rizikových prvkov na kvalitu poľnohospodárskej produkcie. Práca sa zaoberá kontamináciou poľnohospodárskych plodín rizikovými prvkami vo vybranej oblasti Hontianskeho regiónu (v alúviu rieky Štiavnica). Táto oblasť je vysoko kontaminovaná ťažkými kovmi v dôsledku takmer tisícročnej ťažby a spracovania polymetalických rúd v regióne Banskej Štiavnice. Vzorok poľnohospodárskych plodín (celkovo 95) boli odobrané v rokoch 2005–2007 a analyzované metódou AAS. Väčšina vzoriek (71 resp. 53 %) odobraných plodín obsahovala nadlimitné množstvá Cd a Pb, čo súvisí s extrémne vysokým obsahom týchto prvkov v pôdach sledovaného územia. Na druhej strane sme zistili zvýšené obsahy Cr v poľnohospodárskych plodinách (u 26 % vzoriek – najmä krmovinách a olejninách), napriek nízkemu obsahu tohto prvku v sledovaných pôdach.

*Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA č. 1/0339/08
a grantu KEGA č. 3/4282/06.***LITERATÚRA**

1. Toth T., Pospisil R., Parilakova K., Musilova J., Bystricka J.: *ChemZi 1*, 108 (2005).
2. Vollmannova A., Musilova J., Bystricka J.: *Proc. 27th International Symposium „Industrial toxicology’07“*, Bratislava, 30.máj – 1.jún 2007 (STU Bratislava), 2007, pp. 437–441.
3. Vollmannova A., Lahucky L., Lazor P., Hegedusova A.: *Chem. Listy 98*, 532 (2004).

8P-16**ZÁSObNÉ BIELKOVINY AKO MARKERY
TECHNOLOGICKEJ KVALITY ZRNA PŠENICE****KLAUDIA JOMOVÁ^a a EVA MEDVECKÁ***Katedra chémie Fakulty prírodných vied UKF v Nitre, Tr. A.
Hlinku 1, 949 74 Nitra, Slovenská republika
kjomova@ukf.sk*

Zásobné bielkoviny pšenice, gliadíny a gluteníny, sú hlavnými komponentami lepku, ktorý je zodpovedný za reologické vlastnosti a chlebopekársku kvalitu pšeničnej múky¹. Rozmanité kombinácie glutenínových podjednotiek ovplyvňujú technologickú kvalitu odrôd pšenice rôznymi spôsobmi. V práci sme sa zamerali na hodnotenie profilov zásobných bielkovín genotypov pšenice uvedených v Listine registrovaných odrôd, ktoré sú markermi technologickej kvality. Na analýzu sme použili zrno pšenice letnej formy ozimnej. Gliadíny boli extrahované metódou ISTA v kyslom prostredí². Extrakciu glutenínov sme realizovali podľa metódy ISTA³.

Na základe získaných elektroforetických profilov sme zhodnotili líniovosť odrôd. Aleická kompozícia poukazujúca na najvyššiu technologickú kvalitu múky, ktorej zodpovedá hodnota Glu-skóre 10, bola zistená u odrody Axis (2*, 7+8, 5+10) a Eurofit (1, 17+18, 5+10). Majoritný podiel (27 %) genotypov bol zastúpený alelami v kombinácii 0, 7+9, 5+10, ktorá zodpovedá hodnote Glu-skóre 7. Najnižšiu hodnotu Glu-skóre (4) v analyzovanom súbore sme diagnostikovali pri šiestich odrodách, ktorých elektroforetický profil pozostával najmä z alel 0, 6+8, 3+12 alebo 2+12 spájajúcich sa s nízkou chlebopekárskou kvalitou. Prítomnosť nežiadúceho sekalínového bloku Gli 1B3, znižujúceho hodnotu Glu-skóre o dva stupne, bola detegovaná celkovo v 15 % analyzovaných kultivarov.

LITERATÚRA

1. Gregová E., Kraic J., Žák I.: ÚKSUP 11 (1995).
2. Draper S. R., Raper S. R.: Seed Sci. Technol. 15, 431 (1987).
3. Wrigley C. W., v knize: *Seed Analysis* (Linskens H. F., Jackson J. F., ed.). Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg 1992.

8P-17**HODNOTENIE KVALITY POTRAVINÁRSKY
VYUŽÍVANEJ KORENINOVEJ PAPRIKY****ALICA BOBKOVÁ, MÁRIA ANGELOVIČOVÁ
a MAREK BOBKO***SPU, FBP, Tr. A. Hlinku 2, 949 01 Nitra, SR
alica.bobkova@uniag.sk*

Na Slovensku je paprika najviac pestovanou koreninovou rastlinou, a to aj napriek tomu, že pestovateľské plochy v poslednom období poklesli. Dôvodom je aj import tejto koreniny zo zahraničia. Paprika ročná (*Capsicum annuum*) je kultúrna rastlina pestovaná vo všetkých teplejších oblastiach

sveta. Existujú odrody rozmanitých tvarov, farieb a stupňov štiplavosti, ktoré sú v zrelosti červené, drobné, tenkostenné. Spotreba predstavuje cca 150 g mletej papriky na 1 obyv. ročne. Plod koreninovej papriky obsahuje asi 0,04–1,5 % alkaloidov, hlavne kapsaicín a jeho deriváty, ktoré spôsobujú ostrú, pálivú chuť, provitámín A, alfa- a beta-karotén a kryptoxantín, z toho najviac je beta-karoténu. Prítomný je aj vitamín B₁ a B₂ a veľmi významný vitamín C (150–400 mg na 100 g). V plodoch je aj množstvo farbív, hlavne kapsantínu (2,5–11,5 g kg⁻¹), ktorého obsah podmieňuje kvalitu mletej papriky. Popri sledovaní dôležitých chemických znakov sa pri kontrole kvality a pravosti korenín zisťuje obsah vody, množstvo cudzích prímiesí, nečistôt a predovšetkým sa kontrolujú zmyslové znaky, najmä vôňa a chuť. Pri hodnotení senzoričných ukazovateľov sme postupovali podľa súčasne platnej STN 580110. Všetky vzorky vyhovovali požiadavkám, čo potvrdilo, že mletá koreninová paprika bola vyrobená z kvalitnej suroviny. Z fyz.-chem. ukazovateľov sme hodnotili obsah vlhkosti, množstvo celk. popola, množstvo popola nerozpustného v HCl a obsah farby (kapsantínu) mletej koreninovej papriky sladkej a štiplavej. Priemerné hodnoty vlhkosti boli 6,5 hm.% pre sladkú a 7,1 hm.% pre štiplavú papriku. Priemerný obsah celkového popola bol pri sladkej paprike 6,0 hm.% a pri štiplavej paprike 6,3 hm.%. Priemerné hodnoty popola nerozpustného v HCl boli pri paprike sladkej 0,4 hm.% a pri paprike štiplavej 0,5 hm.%. Farbosť mala priemerné hodnoty 3,3 g kg⁻¹ sušiny pri sladkej a 3,1 g kg⁻¹ sušiny pri štiplavej paprike. Z mikrobiologických ukazovateľov sme zaznamenali priemerný PKB vo vzorkách sladkej aj štiplavej mletej papriky <1·10² KTJ g⁻¹. Priemerný počet MVH bol v sladkej aj v štiplavej mletej paprike <1·10³ KTJ g⁻¹ a CPM sa pohyboval v priemere pri mletej paprike sladkej 2·10⁴ KTJ g⁻¹ a pri štiplavej 1,9·10⁴ KTJ g⁻¹. Všetky vzorky koreninovej mletej papriky vyhovovali požiadavkám stanoveným vo Výnose MP SR a MZ SR č. 2089/2005-100, ktorým sa vydáva hlava PK SR upravujúca pochutiny.

*Tato práca vznikla s podporou VEGA 1/0509/08.***8P-18****STRUKTURNÍ A TERMICKÁ ANALÝZA
POLYSACHARIDŮ HUB *Phellinus* sp. A *Inonotus* sp.****GORDON K.GOMBA^a, ANEŽKA VESELÁ^a, ANDRIJ
SYNYTSYA^a, MICHAL TOMŠOVSKÝ^b a JANA
ČOPÍKOVÁ^a***^a Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická
3/5, 166 28 Praha 6, ^b Mendelova zemědělská a lesnická uni-
verzita v Brně, Zemědělská 3, 613 00 Brno
gkgomba@vscht.cz*

Dřevní houby rodu *Phellinus* sp. a *Inonotus* sp. jsou výraznou součástí lesních ekosystémů, protože tato skupina organismů obsahuje lignolytické enzymy. Tyto enzymy jsou nezbytné k rozkladu dřevní hmoty a tím koloběhu uhlíku. Kromě lignolytických enzymů produkují dřevní houby řadu makromolekulárních látek, zejména polysacharidů. Kyselá polysacharidy z těchto hub podporují imunitu, polysacharidy vázané na bílkoviny mají protinádorové účinky a neutrální

polysacharidy mají hypoglykemický efekt a snižují cholesterol a triacylglyceroly^{1,2}. Ve výchozích houbách byl stanoven obsah β -glukanů, ve vodném extraktu³ nebo alkalickém extraktu byl stanoven molární poměr neutrálních cukrů. Izolované frakce jsou charakterizovány pomocí střední a blízké infračervené spektroskopie, diferenční skenovací kalorimetrie a termogravimetrií. Získané výsledky budou sloužit jako podklady k taxonomickému třídění hub rodu *Phellinus* sp. a *Inonotus* sp. z oblasti střední Evropy.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 521/07/J039.

LITERATURA

1. Liu Y., Wang F.: Carbohydr. Polym. 70, 386 (2007).
2. Kim G. Y., Choi G. S., Lee S. H., Park Y. M.: J. Ethnopharmacol. 95, 69 (2004).
3. Kim G. Y.: Biosource Techn. 89, 81 (2003).
4. Zohuriaan M. J., Shokrolahi F.: Polym. Test. 23, 575 (2003).

SEZNAM PLENÁRNÍCH PŘEDNÁŠEK

PL1	<i>J.-M. Lehn</i>	<i>From supramolecular chemistry to constitutional dynamic chemistry</i>
PL2	<i>I. Valterová</i>	Biosyntéza hmyzích feromonů
PL3	<i>L. Fišera</i>	1,3-dipolar cycloadditions of chiral nitrones and their utilization in synthesis
PL4	<i>M. Frumar</i>	<i>Rychlé reverzibilní změny amorfni-kryсталická fáze a nové materiály pro optické a elektrické paměti vysoké hustoty</i>
PL5	<i>K. Lemr</i>	<i>Hmotnostní spektrometrie – od elektrického výboje k zobrazování tkání</i>

SEZNAM PŘEDNÁŠEK PODLE SEKČÍ

Sekce 1 - Anorganická chemie

1L-01	<i>D. Dvořák</i>	Chemie karbenových komplexů chromu a železa
1L-02	<i>B. Kratochvíl</i>	Co nabízí současná rtg strukturní analýza?
1L-03	<i>B. Ringstrand, D. Batman, R. K. Shomaker, Z. Janoušek</i>	Improved synthesis of [<i>closo</i> -1-CB ₉ H ₁₀] [−] anion and new <i>C</i> -substituted derivatives
1L-04	<i>R. Herchel</i>	Využitie symetrie spinového hamiltoniánu na výpočet magnetických vlastností polymérnych koordinačných zlúčenín
1L-05	<i>M. Matíková-Mařarová, V. Pražáková, J. Vančo, Z. Trávníček</i>	Interakcia Ru(III) komplexov obsahujúcich derivát 6-benzylaminopurínu s DNA
1L-06	<i>J. Vinklárek, H. Paláčková, J. Holubová</i>	Studium syntézy, struktury a cytostatické aktivity vanadocenových sloučenin s biogenními aminokyselinami
1L-07	<i>S. Štefániková, I. Ondrejčková, M. Koman, J. Mroziński, T. Lis</i>	Synthesis, spectral, magnetic properties and crystal structures of iron complexes with derivatives of pyridine
1L-08	<i>R. Šípoš, J. Šíma, M. Melník, T. Szabó-Plánka, N. V. Nagy, A. Rockenbauer</i>	Temperature-dependent complexation of ronicol to copper(II) in aqueous media - study by two-dimensional ESR simulation
1L-09	<i>L. Dvořák, I. Popa, Z. Trávníček</i>	Čtvercové Pt(II) komplexy odvozené od karboplatiny s vybranými deriváty 6-(benzylamino)purinu
1L-10	<i>P. Štarha, I. Popa, Z. Trávníček</i>	Pd(II) oxalátokomplexy s 2,6,9-tri-substituovanými deriváty purinu: syntéza, vlastnosti
1L-11	<i>A. Mlčoch</i>	Nanomateriály a fotokatalytické vlastnosti TiO ₂
1L-12	<i>K. Lang</i>	Fotofyzikální vlastnosti interkalovaných vrstevnatých materiálů
1L-13	<i>M. Boča, M. Kucharík, M. Korenko, D. Janičkovič</i>	Extrémne rýchle chladienie roztavených solí a iné pokročilé metódy výskumu – aplikácia na kryolitové taveniny
1L-14	<i>V. Pavlík, E. Jóna</i>	Kryštalizácia a termická stabilita lítokremičitých skiel s prídavkom oxidu titaničitého a zirkoničitého
1L-15	<i>A. Rodová, O. Urban</i>	Sanace organických kontaminantů a kovů metodou stabilizace/solidifikace <i>in situ</i>
1L-16	<i>M. Alberti</i>	Anorganické polymery
1L-17	<i>Ž. Dohnalová, P. Šulcová, M. Trojan</i>	Studium syntézy a vlastností pyrochlorových pigmentů typu Sr-Tb-Sn
1L-18	<i>J. Siegel, P. Slepíčka, A. Macková, V. Švorčík</i>	Studium polyethylenu po interakci s plazmatem

- 1L-19 *M. Drábik, S. Balkovic* “Macro-defect-free” materiály – výzva pre chemiu a technológiu?
 1L-20 *M. M. Zaitz, M. Molenda, M. Drozdek, B. Dudek, L. Chmielarz, R. Dziembaj* Synthesis, characterization and catalytic properties of nanostructured cerias doped copper

Sekce 2 - Organická chemie

- 2L-01 *V. Krchnak* Skeletal diversity for sizable combinatorial libraries of drug-like heterocyclic compounds
 2L-02 *M. Soural, V. Krchňák* Solid phase synthesis of highly diverse bisheterocyclic libraries
 2L-03 *D. Drahoňovský, J.-M. Lehn* Poloacetyly a jejich komplexy s ionty kovů v dynamické kombinatoriální chemii
 2L-04 *P. Pazdera, J. Šimbera, J. Běluša* Sophistic approach as a method of the chemistry for the sustainable development – two different pure products from the very same set of reagents
 2L-05 *I. Novák, G. Elyashevich, I. Chodák, M. Števiar, M. Špírková, A. Kleinová* Povrchové vlastnosti polyetylenových pórovitých filmů
 2L-06 *P. Cankař, V. Kryštof* Syntéza derivátů 3,5-diaminopyrazolů s potencionální biologickou aktivitou na CDK9
 2L-07 *J. Lustoň, J. Kronek* Zlúčeniny obsahujúce 2-oxazolinóvu a nenasýtenú skupinu v molekule
 2L-08 *R. Novotná, I. Popa, Z. Trávníček* Deriváty kinetinu a kinetinribozidu – monokrystalová štruktúrna a multinukleární NMR studie
 2L-09 *P. Hradil* Využití a-halogenketonů pro syntézu heterocyklických sloučenin
 2L-10 *R. Kimmel, J. Košmrlj, S. Kafka* Toward some saccharide functionalized quinolin-2(1H)-ones
 2L-11 *R. Ševčík, P. Pazdera* Syntéza imobilizovaných fosforových ligandů
 2L-12 *M. Bella, V. Milata* Příprava a využitie angulárne anelovaných selenadiazolochinolónov
 2L-13 *Š. Toma* Organokatzátory a iónové kvapaliny – áno, či nie?
 2L-14 *L. Spáčilová, P. Nielsen* Synthesis of 2'-deoxy-uridine analogues by the alkyne-azide „click“ reaction and their influence on the duplex stability
 2L-15 *J. Kronek, J. Lustoň, A. Kowalczyk, A. Dworak* Nové polyfunkčné iniciátory na prípravu poly(2-oxazolinov) s vetvenou štruktúrou
 2L-16 *I. Janigová, D. Mošková, K. Csomorová, F. Lednický* Montmorillonit v kompozitoch na báze polykaprolaktónu

Sekce 3 - Analytická chemie

- 3L-01 *I. Jelínek, J. Dian, J. Jindřich* Optosenzory na bázi porézniho křemíku
 3L-02 *J. Barek, K. Pecková, J. Fischer, V. Vyskočil, A. Daňhel* Možnosti a omezení nových elektrodových materiálů ve voltametrii a amperometrii
 3L-03 *J. Zima* Pokroky ve využití uhlíkových past v organické analýze
 3L-04 *B. Yosypchuk* Rtuťové filmové elektrody na kovových podložkách pro elektrochemická měření
 3L-05 *J. Krupčík, J. Mydlová-Memersheimerová* Two-column, two-dimensional and comprehensive two-dimensional gas chromatography
 3L-06 *E. Tesařová, Z. Bosáková, K. Kalíková, J. Lokajová, M. Vadinská, L. Loukotková, J. Znaleziiona, M. Megová, V. Maier, J. Petr, R. Knob, L. Muller, J. Ševčík* Těž neznamená to_těž, to není to_těž!

- 3L-07 *J. Petr, O. Ryparová, V. Ranc, P. Hinnerová, J. Znaležiona, M. Kowalska, R. Knob, V. Maier, I. Frébort, K. Lemr, J. Ševčík* Analýza mikroorganismů a buněk kapilární elektroforézou
- 3L-08 *J. M. Milczarek, J. Zięba-Palus, M. Piechowicz* Development of computer application for identification and comparison of car paint samples analysed by pyrolysis - gas chromatography - mass spectrometry (PY-GC/MS)
- 3L-09 *Z. Bosáková, E. Tesařová, V. Pacáková* Difúzní znečištění životního prostředí endokrinními disruptory
- 3L-10 *P. Zachař, Č. Novotný* Biodegradace vybraných organo-polutantů dřevokaznými houbami
- 3L-11 *M. Fojta, P. Horáková, K. Cahová, M. Fojtová, S. Hasoň, L. Havran, P. Kostečka, K. Němcová, H. Pivoňková, M. Brázdová* Magnetické mikročástice ve spojení s elektrochemickou analýzou jako mnohostranně využitelné nástroje pro analýzu biomolekulárních interakcí
- 3L-12 *D. Šimková, S. Hlubíková, J. Galandová, E. Beinrohr, J. Labuda* Vývoj DNA senzora pre prietokový systém
- 3L-13 *M. A. Koperska* Animal glues as binders in XIX and XX century oil paintings - maldi-tof analysis
- 3L-14 *M. Aranyosiová, M. Stančíková, D. Velič* Distribúcia stroncia v tkanivách a kostiach potkanov po aplikácii ranelátu stroncia
- 3L-15 *A. Salwiński* Electron paramagnetic resonance spectroscopy (EPR) as potent tool of identification and designation melanines in biological samples
- 3L-16 *D. Bajčan, M. Žemberyová, I. Hagarová* Analýza potravín atómovou absorpčnou spektrometriou s priamym dávkovaním tuhých vzoriek
- 3L-17 *M. Boreková, L. Orságová, J. Hojerová* Implementation of the *in vitro* method for skin penetration of chemicals from everyday life
- 3L-18 *A. Danhel, K. K. Shiu, B. Yosypchuk, V. Vyskocil, K. Peckova, J. Berek* Utilization of silver solid amalgam electrode for amperometric determination of plant growth regulator by HPLC-ED
- 3L-19 *P. Jančová, E. Anzenbacherová, Z. Dvořák, P. Kosina, V. Šimánek* Metabolické přeměny silybinu
- 3L-20 *M. Lísa* HPLC/MS characterization of triacylglycerol samples important in human health and nutrition research
- 3L-21 *L. Loukotková, Z. Bosáková, E. Tesařová* Cyklodextrinové a celulosové chirální stacionární fáze pro enantioseparaci substituovaných binaftylů
- 3L-22 *V. Matoušek, P. Kačer, M. Kuzma, L. Červený* Rapid and facile determination of enantiomeric composition of chiral tetrahydroisoquinolines based on derivatization with menthyl chloroformate and GC resolution of corresponding carbamates
- 3L-23 *V. Novotný, J. Berek* Amperometrické stanovení acifluorfenu, nitrofenu a oxyfluorfenu s použitím stříbrných tuhých amalgamových elektrod
- 3L-24 *D. Ondo* Plynová chromatografie jako nástroj ke stanovení termodynamických veličin pro popis fázových rovnováh
- 3L-25 *M. Ryvolová, O. Peš, R. Fohlerová, J. Hejátko, J. Preiler* Stanovení zeleně fluoreskujícího proteinu pomocí kapilární elektroforézy s laserem indukovanou fluorescenční detekcí
- 3L-26 *H. Žabová, V. Církva* Photocatalytic reactions in a microwave field using an electrodeless discharge lamp

Sekce 4 - Přírodní látky

- 4L-01 *R. Mechoulam* The endocannabinoid system – a personal overview
- 4L-02 *L. Cvak* Přírodní látky ve výrobním programu TEVY opava
- 4L-03 *E. Táborská* Současná role a budoucnost alkaloidů v medicíně
- 4L-04 *O. Lapčík* Fytoestrogeny: typy struktur a jejich taxonomický výskyt
- 4L-05 *J. Vostálová* Nové biologické aktivity silymarinu a jeho obsahových složek
- 4L-06 *P. Jančová, E. Anzenbacherová, Z. Dvořák, P. Kosina, V. Šimánek* Metabolické přeměny silybinu
- 4L-07 *R. Gažák, P. Sedmera, V. Křen* Antiradikálová aktivita flavonolignanů silybinu a 2,3-dehydrosilybinu – studium mechanismu a syntéza nových derivátů
- 4L-08 *P. Trouillas, D. Kosłowski, P. Marsal, C. Calliste, R. Gažák, P. Košinová, A. Svobodová, J. Vostálová, J. Hrbáč, P. Sedmera, D. Walterová, V. Křen, R. Lazzaroni, J.-L. Duroux* A quantum chemical study of the antioxidant properties of natural polyphenols

Sekce 5 - Chemické vzdělávání, historie a popularizace chemie

- 5L-01 *L. Kvítek, L. Zajoncová, J. Molnár, L. Richterek, V. Maier, J. Švrček, B. Novák, R. Holubová, M. Kubala, M. Otyepka, T. Nevěčná, L. Müller, M. Dopita* Jak (ne)popularizovat přírodní vědy?
- 5L-02 *J. Ševčík, M. Smolka, P. Vysloužil* Univerzita dětského věku
- 5L-03 *P. Vysloužil, M. Smolka* Kde je zakopán popularizační pes
- 5L-04 *D. Topinka, M. Smolka, P. Vysloužil* Postoje žáků základních a středních škol k přírodním vědám
- 5L-05 *L. Zajoncová, L. Kvítek, J. Soukupová, P. Tarkowski, V. Vinter, V. Fadrná* Motivace mládeže ke studiu přírodních věd formou soutěží školních kolektivů
- 5L-06 *J. Skopalová, L. Müller, J. Součková, P. Baizová* Kompetitivní workshopy – netradiční forma výuky chemie
- 5L-07 *J. Grégr, M. Slavík, B. Jodas* Rozvoj kreativity budoucích učitelů chemie
- 5L-08 *H. Čtrnáctová, H. J. Bader, P. Drašar, L. Gros, I. Maciejowska, R. G. Wallace, E. Stratilová, J. Zajíček* Evropský projekt Cities – modul výchovy a vzdělávání
- 5L-09 *M. Feszterová* Chémia bežného života a jej úloha v príprave budúcich absolventov študijného programu chémie v špecializácii chémie životného prostredia
- 5L-10 *S. Kašiarová* Implementácia environmentálneho zdravia prostredníctvom vyučovacieho predmetu chémie
- 5L-11 *S. Kašiarová* Historické a súčasné perspektívy vplyvu rizikových faktorov na environmentálne zdravie
- 5L-12 *H. Hilbert* Identifikácia chemických faktorov v environmentálnom zdraví obyvateľov mikroregiónu
- 5L-13 *M. Ganajová, M. Vladimírová* Počítač a multimédiá vo výučbe chémie – súčasnosť a perspektívy

- 5L-14 *M. Slavík, J. Grégr* On-line molekulární vizualizace ve výuce chemie
 5L-15 *J. Součková, L. Müller, J. Skopalová, P. Barták, M. Prášilová, O. Obst* Využití programovaného učení ve výuce elektrochemie
 5L-16 *R. Kodým, K. Bouzek* Využití univerzálního simulačního programu COMSOL Multiphysics ve výuce navrhování chemických aparátů a technologií
 5L-17 *P. Koloros* Měření fyzikálních veličin ve školní chemické laboratoři

Sekce 6 - Průmyslová chemie

- 6L-01 *J. Lederer, G. Šebor* Alternativní suroviny pro chemický průmysl a výrobu paliv
 6L-02 *V. Ducháček* Výroba a užití polymerních materiálů
 6L-03 *V. Macho, M. Olšovský, L. Komora* Novšie a zjednodušené procesy pre chemický priemysel
 6L-04 *L. Hora, V. Fíla* Odstraňování oxidů dusíku absorpčními metodami
 6L-05 *J. Kizlink* Vliv přísady dimethylkarbonátu na kvalitu motorových paliv
 6L-06 *V. Veselý, J. Hanika, B. Čech* Nová metoda chemické recyklace PET lahví
 6L-07 *E. Benčíková, M. Jambrich, J. Balogová, R. Ravas, J. Vnenčáková* Eco-polymer materials from PP, poly(lactic acid) and bamboo fibres
 6L-08 *M. Olšovský, L. Jureček, P. Gásek, V. Macho* Vulkanizačné činidlo na báze kopoly-mérnej síry pre nenasýtené kaučuky
 6L-09 *Š. Florián, I. Novák, O. Žigo, M. Šivová* Netradičné aplikácie tlakovo-citlivých adhezív
 6L-10 *M. Pajtašová, S. Lalíková, D. Ondrušová, T. Bazyláková, E. Jóna, V. Petrášová* Spectral and thermal study of Cu(II) carboxylates and their pyridine adducts
 6L-11 *J. Videnský, I. Sedlářová* Základní laboratorní metody pro studium heterogenních nekatalyzovaných reakcí mezi kapalnou a pevnou fází
 6L-12 *M. Kucharik, F. Šimko* Vanád ako nečistota v elektrolyzéři na výrobu hliníka Hall-Héroultovým procesom

Sekce 7 - Teoretická a fyzikální chemie

- 7L-01 *M. Hof* Fluorescence microscopy of biomolecules on a single molecule level
 7L-02 *M. Žitňan, E. Jáné, V. Szocs, T. Pálszegi, O. Grančičová, I. Bugár, D. Chorvát, D. Velič* Dynamika relaxácie fluorescence kumarínu C522 v confined štruktúrach
 7L-03 *M. Kubala, L. Gryčová, P. Sklenovský, Z. Lánský, M. Otyepka, J. Teisinger* Měření parametrů tryptofanové fluorescence ve spojení s molekulárně-dynamickými výpočty jako nástroj pro sledování dynamiky proteinů
 7L-04 *R. Zbořil* Nanočástice oxidů železa z termicky indukovaných reakcí v pevné fázi – syntéza, vlastnosti a aplikace
 7L-05 *R. Maršálek* Využití zeta potenciálu k postihnutí jevů na fázovém rozhraní
 7L-06 *M. Janek, I. Bugár, D. Lorenc, V. Szöcs, D. Velič, D. Chorvát* Využitie terahertzovej spektroskopie pri charakterizácii dielektrických vlastností vrstevnatých fylosilikátov
 7L-07 *P. Hobza* Přesné stabilizační energie stavebních bloků biomakromolekul: kvantově-chemické výpočty
 7L-08 *P. Sklenovský, K. Kubešová, P. Banáš, M. Otyepka* Stabilita neglobulárního proteinu p18^{INK4c} a jeho fragmentů

- 7L-09 P. Jurečka, J. Černý, P. Hobza, D. R. Salahub Teorie funkcionálu hustoty doplněná empirickým disperzním členem – DFT-D. Rychlý a přesný nástroj pro výpočet mezimolekulových interakcí
- 7L-10 P. Banáš, L. Rulišek, V. Hánošová, D. Svozil, N. G. Walter, J. Šponer, M. Otyepka Mechanismus RNA katalýzy samoštěpící reakce ribozymu viru hepatitidy D

Sekce 8 - Potravinářská chemie

- 8L-01 M. Plocková Funkční vlastnosti bakterií mléčného kvašení
- 8L-02 E. Krajčová, M. Greifová, A. Pagurko, Š. Schmidt Antimikrobiální aktivita *Lactobacillus reuteri* a produkty metabolismu počas fermentácie glycerolu
- 8L-03 J. T. Jimenez, M. Šturdíková, M. A. Moriñigo Characterization of extracellular products of microorganisms isolated from fish microbiota against *Vibrio harvey*
- 8L-04 L. Nedorostová, P. Klouček, L. Kokoška, M. Štolcová Inhibice růstu bakterií *Salmonella enteritidis* a *Escherichia coli* na ledovém salátu silicemi *Satureja montana* a *Thymus vulgaris* – rostlin obsahujících fenolické složky tymol a karvakrol
- 8L-05 Š. Schmidt, M. Toporková, S. Sekretár, O. Zufarov, E. Krajčová Characteristics of the some unusual vegetable oils for edible uses
- 8L-06 S. Sekretár, Š. Schmidt, O. Zufarov Ssome risk factors of microwave cooking
- 8L-07 D. Šmogrovičová, P. Nádaský Changes in chemical composition of aging beer
- 8L-08 O. Zufarov, Š. Schmidt, S. Sekretár Rafinácia repkového, slnečnicového a sójového oleja
- 8L-09 V. Schulzová, J. Hajšlová „Přírodní=zdravý“
- 8L-10 M. Jancurová, L. Minarovičová, A. Dandár, Z. Kušíková Sledovanie vplyvu prídavkov cicerovej zmesi a cicerovej múky na kvalitu pekárskych výrobkov
- 8L-11 E. Harangozo, A. Vollmannová, P. Trebichalský, R. Stanovič Vplyv kadmia na celkovú antioxidačnú aktivitu v olejninách
- 8L-12 L. Peltznerová, J. Musilová, J. Bystrická, L. Harangozo Kadmium ako činiteľ vplývajúci na obsah polyfenolov v ľuľku zemiakovom (*Solanum tuberosum*, L.)
- 8L-13 J. Bystrická, J. Árvay, A. Hruškovičová, J. Čéry Úroveň prechodu ťažkých kovov do jačmeňa jarného dopestovaného na kontaminovanej pôde
- 8L-14 J. Čéry, M. Timoracká, S. Melicháčová, J. Kulich Určenie najmobilnejších podielov frakcií vybraných rizikových prvkov stanovených rôznymi extrakčnými činidlami
- 8L-15 J. Árvay, J. Tomáš, L. Lahučký, D. Bajčan Pôda ako limitujúci faktor pestovania kvalitných potravinárskych surovín
- 8L-16 R. Stanovič, J. Árvay, S. Melicháčová, P. Trebichalský Porovnanie účinku síry a organickej hmoty pri znižovaní fytotoxicity kadmia a arzenu

SEZNAM POSTERŮ PODLE SEKČÍ

Sekce 1 - Anorganická chemie

- 1P-01 *A. Erdélyiová, K. Győryová, R. Gyepes, J. Kovářová, L. Halás* Synthesis and properties of $[\text{Zn}(\text{2-BrC}_6\text{H}_4\text{COO})_2\text{mpc}_2]$
- 1P-02 *B. Cvek, J. Taraba, Z. Dvořák, J. Ulrichová* Toxicita syntetických Ni(II), Cu(II) a Zn(II) dithiokarbamátů v nádorové linii HeLa
- 1P-03 *J. Gálíková, P. Schwendt, Z. Žák* Tartarátokomplexy vanádu(V)
- 1P-04 *L. Klišťincová, E. Rakovský, P. Schwendt* Dekavanadičnan ako mostíkový ligand
- 1P-05 *S. Pacigová, M. Sívák, R. Gyepes* Monoperoxokomplexy vanádu(V) s organickými ligandami s NO a NOO donorovým setom
- 1P-06 *Z. Šindelář, R. Herchel, Z. Trávníček, R. Zbořil* Heterotrijaderné (Fe(III))₂-M(II) salenové komplexy s oxalátovými můstky a jejich magnetické a spektrální vlastnosti
- 1P-07 *M. Vavra, I. Potočňák, M. Dušek, K. Fejfarová* Tetrakyanoplatnatany medi: štyri n(C≡N) pásy – predpoklad zložitej štruktúry
- 1P-08 *K. Kolářová, A. Macková, P. Slepíčka, V. Švorčík* Změna povrchových vlastností u modifikovaného polystyrenu
- 1P-09 *J. Kameníček, R. Pastorek, V. Petříček* Struktura komplexu $[\text{Ni}(\text{Pe}_2\text{dtc})(\text{phen})_2]\text{ClO}_4$
- 1P-10 *A. Klanicová, J. D. Houck, P. Baran, Z. Trávníček* Jednojaderné Cu(II) komplexy s kombinací dvou různých dusíkatých aromatických heterocyklů v koordinační sféře
- 1P-11 *J. Holub, B. Štíbr, P. Štěpnička* Contribution to ferrocenyl substituted carboranes and metallacarboranes
- 1P-12 *M. Bakardžiev, J. Holub, B. Štíbr, D. Hnyk, I. Čísařová* The same compound can be isolated in two different structures absolute tautomerism in the eleven-vertex *nido*-tricarborane series
- 1P-13 *I. Sabová, J. Černák, J. Kuchár, Z. Žák* Príspevok k štúdiu kryštalových štruktúr tartarátu komplexov
- 1P-14 *I. Potočňák, L. Váhovská, P. Herich* Komplexy železa s dvojfunkčnými *n*-donorovými ligandami a pseudohalogenidovými aniónmi
- 1P-15 *T. Šilha, J. Mikulík, Z. Trávníček* Syntéza a studium komplexních sloučenin stříbra s deriváty aromatických cytokininů
- 1P-16 *D. Hnyk, J. Macháček, M. G. S. Londesborough* Computed structures of known and new macropolyhedral clusters
- 1P-17 *J. Vančo, J. Marek, Z. Trávníček* Štruktúra a pro/anti-oxidačná aktivita molekulových Cu(II) komplexov odvodených od *n*-salicylidén-b-alanínu
- 1P-18 *A. Erdélyiová, K. Győryová, R. Gyepes, J. Kovářová, L. Halás* Příprava a charakterizácia $[\text{Zn}_2(\text{2-BrC}_6\text{H}_4\text{COO})_4\text{phen}_2]$
- 1P-19 *M. Čajan, Z. Trávníček* Struktura a spektrální vlastnosti komplexů Fe(II) a Fe(III) s dusíkatými heterocykly
- 1P-20 *Z. Vasková, J. Moncol, M. Korabik, D. Valigura* Význam vodíkových vazeb v štruktúre nitrobenzoátomedňatých komplexov s nikotínamidom
- 1P-21 *J. Kuchár, M. Martonová, J. Černák* Two novel complexes based on tetracyanopalladates of Cu(II)
- 1P-22 *Z. Makajová, N. Kasálková, P. Slepíčka, K. Kolářová, V. Švorčík* Vliv molekulové hmotnosti PEG na povrchové vlastnosti modifikovaného PE
- 1P-23 *N. Kasálková, M. Pařízek, L. Bačáková, P. Rauch, M. Blažková, P. Slepíčka, V. Švorčík* Povrchová modifikace polyethylenu pro tkáňové inženýrství
- 1P-24 *P. Slepíčka, Z. Kolská, J. Náhlík, T. Hubáček, O. Bláhová, V. Švorčík* Au nanovrstvy na polymeru modifikovaném v plazmě

- 1P-25 *A. Chaloupka, T. Hubáček, P. Slepíčka, J. Siegel, V. Švorčík* Modifikace povrchové vrstvy PP a PTFE plazmatem
- 1P-26 *T. Hubáček, A. Chaloupka, P. Sajdl, V. Švorčík* Uhlíkové nanovrstvy na polymerním substrátu
- 1P-27 *O. Kvítek, O. Lyutakov, I. Huttel, V. Švorčík* Elektrické vlastnosti kompozitních vrstev na bázi CNT a polymerů
- 1P-28 *M. Ambrová, V. Danielik, P. Fellner* Korózní odolnost zliatin vo fluoridových taveninách
- 1P-29 *V. Danielik, M. Mrkvořová* Vylučovanie povlakov volfrámu z tavenín
- 1P-30 *V. Š. Fajnor, N. Boháková, J. Hrachová* Interakcia taveniny oktaedecylamínu s kaolinitom
- 1P-31 *J. Gabčová, V. Danielik* Fázové rovnováhy v sústavách s obsahom zlúčenín žiaruvzdorných kovov
- 1P-32 *M. Reháková, V. Tomečková, M. Hlinková* Štúdium modifikovaných foriem prírodného zeolitu typu klinoptilolitu s obsahom farmaceuticky účinných látok
- 1P-33 *V. Š. Fajnor, J. Hrachová* Vplyv vymeniteľných katiónov alkalických kovov na rekryštalizáciu montmorillonitu z lokality „jelšový potok“
- 1P-34 *S. Nagyová, M. Reháková, D. Olčák* Charakterizácia prírodných a syntetických zeolitických materiálov protónovou magnetickou rezonanciou
- 1P-35 *E. Fortunová, S. Nagyová, S. Čuvanová, M. Reháková* Meďnaté formy prírodných a syntetických zeolitov s obsahom pyridínu a jeho derivátov
- 1P-36 *E. Plevová, A. Kožušníková, L. Vaculíková* Komplexní posouzení vlivu fyzikálně-chemických vlastností hornin na jejich tepelnou roztažnost
- 1P-37 *S. Čuvanová, M. Lovás, Š. Jakabský, L. Vaculíková* Characterization of the brown coal after microwave-assisted extraction
- 1P-38 *P. Andráš, I. Nagyová, Z. Melichová* Separácia a identifikácia ílových minerálov z haldových polí ložiska ľubietová pre účely štúdia ich sorpčných vlastností
- 1P-39 *V. Š. Fajnor, N. Boháková, J. Hrachová* Interakcia taveniny kyseliny steárovej s alofánom
- 1P-40 *J. Gutwirth, T. Wágner, P. Bezdička, J. Orava, E. Kotulanová, M. Vlček, M. Frumar* Depozice tenkých vrstev $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ technikou radiofrekvenčního magnetronového naprašování
- 1P-41 *M. Vargová, M. Gorbár, K. Jeseňák, U. Vogt, G. Plesch* Synthesis and photocatalytic activity of TiO_2 thick films deposited on Al_2O_3 ceramic foams
- 1P-42 *T. Uhlířová, P. Barath, J. Reiter* Nanostrukturální nikl pro palivové články
- 1P-43 *L. Vitásková, P. Šulcová* Vliv mineralizátorů na barevnost sloučeniny $\text{Ce}_{0.8}\text{Tb}_{0.05}\text{Y}_{0.15}\text{O}_{1.925}$
- 1P-44 *J. Luxová, P. Šulcová, M. Trojan* Vliv dopujících elementů na barevné vlastnosti pigmentu $\text{M}_{1-x}\text{Pr}_x\text{FeO}_3$
- 1P-45 *T. Uhlířová, J. Reiter, J. R. Owen* Elektrochemické redoxní procesy v lyotropních kapalných krystalech
- 1P-46 *E. Proklešková, P. Šulcová* Barevné vlastnosti sloučenin typu $(\text{Bi}_2\text{O}_3)_{0.6}(\text{Ln}_2\text{O}_3)_{0.4}$
- 1P-47 *V. Slovák, R. Pastorek, P. Slovák* Dithiokarbamáty niklu jako katalyzátory oxidace grafitu
- 1P-48 *P. Kostka, J. Gaury, C. Conseil* Glass formation in the $\text{Bi}_2\text{O}_3 - \text{PbCl}_2 - \text{TeO}_2$ system

Sekce 2 - Organická chemie

- 2P-01 *M. Příbylová, M. Dvořáková, T. Vaněk* Cílené deriváty paclitaxelu
- 2P-02 *S. Kařka, J. Košmrlj, V. Kašpárková* New approach to *N*-(α -ketoacyl)anthranilic acids
- 2P-03 *V. Kleinová, H. Švecová, H. Chaloupková, M. Fišer* Porovnání biodistribuce monoklonální protilátky TU-20 a jejího SCFV fragmentu značených ^{125}I ve zdravých myších a v myších s ALS
- 2P-04 *H. Švecová, F. Melichar* *O*-(2-[^{18}F]fluorethyl)-L-tyrosin: syntéza a preklinická studie

- 2P-05 *R. Buchtík, M. Čajan, Z. Trávníček* Syntéza derivátů indolu v analogii s purinovými CDK-inhibitory
- 2P-06 *B. Andělová, D. Němečková, P. Pazdera* Monosubstituce piperazinu na atomu dusíku
- 2P-07 *K. Palát, E. Emelin, J. Kaustová* Syntéza a antimykobakteriální aktivita 1-[4-(alkylsulfanyl)fenyl]-3,3-dimethylguanidinů
- 2P-08 *J. Kollár, P. Hrdlovič, Š. Chmela* Spectral characteristics of adducts 1,8-naphthaleneimides – sterically hindered amines; monoradicals
- 2P-09 *Z. Nógellová, I. Janigová, S. Podhradská, I. Chodák* Možnosti zvýšení účinnosti siet'ovania biodegradovateľného polyesteru
- 2P-10 *A. Ďuriš, D. Berkeš* b-Hydroxy-g-amino acids. synthesis of the statine congeners
- 2P-11 *D. Moravčíková, A. Koreňová, N. Prónayová, D. Berkeš* Intramolecular michael addition in the synthesis of proline analogues
- 2P-12 *M. Stach, P. Kasák, Z. Kroneková, I. Lacík* Zwitterionic non-biofouling surfaces via electrografting polymerization
- 2P-13 *P. Šafář, J. Žůžiová, Š. Marchalín, N. Prónayová, A. Daich* An expedient synthesis of epimeric (8*aS*,7*S*)-7-ethylindolizidin-8-ols based on a thiophene reductive desulfurization
- 2P-14 *G. Kolláriková, I. Lacík, E. Papajová, D. Chorvát Jr.* Properties study of SA-CS /PMCG micro-capsules used for encapsulation of the bioactive substances
- 2P-15 *J. Podesva, J. Kovářová, L. Prokůpek, M. Bártík, J. Udatný, M. Hrdličková, M. Netopilík, V. Špaček, M. Večeřa* Lineární polyurethany na bázi modifikovaných kapalných kaučuků
- 2P-16 *D. Végh, T. Solcán, P. Tisovský, A. Andicsová* New synthesis and synthetic utilisation of pentafluorobenzaldehyde, tetra-fluoro-terethalic aldehyde and 2,3,5,6-tetrafluorobenzene-1,4-diamine as building blocs for novel opto-electronic materials
- 2P-17 *J. Reháček, L. Fišera, J. Kožíšek* Samarium induced diastereoselective coupling of sugar derived nitrones in the synthesis of chiral pyrrolidinones
- 2P-18 *J. Stýskala, M. Pavlásková, J. Slouka* Syntéza 3-*N*-substituovaných derivátů 6-azalumazinu
- 2P-19 *S. Kováčová, L. Kušnierová, L. Lintnerová, M. Medved', M. Sališová, A. Boháč* Syntéza farmakofórových ligandov pre VEGFR-2 inhibíciu
- 2P-20 *D. Mařák, M. Otmar, M. Dračinský, I. Votruba, A. Holý* Nukleosidy a nukleotidy s 8-aza-7,9-dideazaxanthinem
- 2P-21 *P. Jansa, A. Holý, M. Dračinský* Efektivní syntézy acyklických nukleosid- fosfonátů s jedním otevřeným a jedním nově uzavřeným kruhem
- 2P-22 *M. Česnek, M. Dračinský, A. Holý* Syntéza a vlastnosti substituovaných triazolů – acyklických analog ribavirinu
- 2P-23 *O. Baszczyński, A. Holý, M. Dračinský, B. Klepetářová* Příprava FPMP derivátů *N*⁶-substituovaných adeninů a 2,6-diaminopurinů

Sekce 3 - Analytická chemie

- 3P-01 *K. Kalíková, V. Hruška, B. Gaš, E. Tesařová* Studium systémových poruch v HPLC
- 3P-02 *T. Béres, P. Tarkowski, K. Doležal* Analysis of cytokinin nucleotides by HPLC-MS/MS
- 3P-03 *M. Karády, B. Kulichová, A. Horna, K. Doležal* Analysis of cytokinin-derived Cdk-inhibitors by HPLC/EC/MS
- 3P-04 *A. Janáčková, I. Špáňák* The investigation of volatile organic compounds composition in unifloral honeys with SPME-GC-MS

- 3P-05 *K. Repaská, I. Špánik, J. Krupčík, P. Sandra, D. W. Armstrong* GC separation of alkyl esters of 2-CN carboxylic acid enantiomers on permethylated and 2,6-dimethyl-3-pentyl β - and γ - cyclodextrins stationary phases
- 3P-06 *T. Gondová, J. Petrovaj, P. Kutschy, A. Salayová, D. W. Armstrong, R. Serbin* Enantioselective HPLC separation of indole phytoalexins on a teicoplanin
- 3P-07 *T. Křížek, P. Coufal, Z. Bosáková, E. Tesařová, J. Sobotníková* Kapilární zónová a gelová elektro-foréza jako účinné separační nástroje pro bílkoviny a peptidy v proteomice
- 3P-08 *O. Ryparová, J. Petr, P. Hinnerová, J. Znaleziiona, R. Knob, V. Maier, J. Ševčík* Analýza lidského spermatu kapilární elektroforézou
- 3P-09 *M. Zapadlo, J. Senajová, P. Hekera, L. Čáp, P. Barták* Stanovení polycyklických aromatických uhlovodíků v sedimentech řeky Moravy v oblasti CHKO Litovelské Pomoraví
- 3P-10 *M. Nádherná, F. Opekar, J. Reiter* Iontové kapaliny a polymerní elektrolyty pro chemické senzory plynů
- 3P-11 *L. Novotný* Užití mini- až nanoobjemů elektrod zahrnujících skleněné či plastové (vyměnitelné) ústí, na bázi rtuti, amalgamu, kompozitů (amalgam) či past
- 3P-12 *L. Novotný, P. Polášková* Podstata elektrochemického čištění/obnovování rtuťových a příbuzných elektrod
- 3P-13 *Z. Jemelková, J. Zima, J. Barek* Modifikace uhlíkové pastové elektrody jednovrstvými nanotrubičkami
- 3P-14 *J. Fischer, J. Barek, K. Pecková, J. Zima* Využití netradičních elektrodových materiálů pro stanovení stopových množství herbicidu Dinoseb
- 3P-15 *K. Pecková, L. Vrzalová, V. Bencko, J. Barek* Možnosti využití amalgámových elektrod pro stanovení protinádorových léčiv ze skupiny *N*-nitrosoamocinů
- 3P-16 *V. Vyskočil, P. Polášková, K. Pecková, J. Barek* Voltametrické stanovení stopových množství genotoxického 2-nitro-9-fluorenonu na meniskem modifikované stříbrné pevné amalgamové elektrodě
- 3P-17 *D. Deýlová, J. Barek, K. Pecková, V. Vyskočil* Voltametrické stanovení 5-nitrobenzimidazolu
- 3P-18 *J. Musilová, J. Barek, P. Drašar, K. Pecková* Stanovení nitrofenolů pomocí HPLC s elektrochemickou detekcí na borem dopované diamantové filmové elektrodě
- 3P-19 *S. Štefánová, L. Pikna* Možnosti stanovení těžkých kovů rozličnými voltampérometrickými metodami
- 3P-20 *M. Stupavská, M. Aranyosiová, D. Velič* Matricový efekt fullerenu a uhlíkových nanorůrek v hmotnostní spektrometrii sekundárních ionů
- 3P-21 *E. Homzová, J. Mizerá, A. Vetešník* TRLFS study of uranyl interaction with humic acid
- 3P-22 *J. Krmela, J. Jevíková, K. Čubová, A. Vetešník, K. Štamberg, J. John* Studium speciace europia s kyselinou glykolovou metodou TRLFS
- 3P-23 *V. Šugárková, E. Plevová, L. Vaculíková* Evaluation of mesophase properties by microscopy, thermal analysis and FT-IR spectroscopy
- 3P-24 *V. Sasinková, A. Malovíková, A. Ebringerová, A. Čížová, Z. Hromádková, I. Sroková* FT-IR spectroscopy – a useful tool in structural analysis of polysaccharide derivatives with different functional groups
- 3P-25 *N. Fasurová, T. Mlčoch* Total luminescence spectra of lignite humic acid and sodium humate
- 3P-26 *J. Bazel, T. Kulakova, J. Studenyak, R. Serbin* Method for separation, preconcentration and spectro-photometric determination of platinum
- 3P-27 *A. Medovčíková, J. Hojerová, M. Mikula, M. Boreková* The development of new *in vitro* methods for evaluation of sunscreen's UVA protection and photostability
- 3P-28 *D. Kříž, Š. Klementová* Sledování fotochemických změn fluoroforů v huminových látkách pomocí EEMS
- 3P-29 *T. Ďurčková, J. Mocák, J. Lehotay, J. Čížmárik* Chemometrické štúdium anestetické aktivity esterů alkoxyfenyl-karbámových kyselin a ich molekulových vlastností
- 3P-30 *M. Elcnerová, K. Komárek, M. Šafaříková, I. Šafařík* Extrakce magnetickou tuhou fází
- 3P-31 *L. Vaculíková, Z. Navrátilová, P. Krajancová, V. Šugárková, E. Plevová* Sorpce alkylamoniových kationtů na montmorillonit

- 3P-32 K. Šťastná, M. Němec, J. John, D. Kobliha Elektrokinetická dekontaminace zeminy
- 3P-33 I. Špendlíková, J. John, J. Kroupa, P. Lhoták, V. Čuba Studium extrakčních vlastností thiacalix[4]arenů
- 3P-34 T. Navrátil, J. Jaklová Dyrťová, M. Jakl, I. Šestáková Úloha biomembrán v příjmu těžkých kovů rostlinami
- 3P-35 V. Mrázová, J. Mocák, P. Blažíček, I. Jakubcová Stanovenie glykovaného hemoglobínu – výber vhodnej analytickej metódy
- 3P-36 J. Gríz, O. Novák, M. Strnad UPLC-MS/MS metoda pro analýzu fenolických kyselin
- 3P-37 S. Hlubíková, Z. Hanková, E. Beinrohr Porovnanie elektród použitých na stanovenie dusičnanov vo vodách metódou tenkovrstvovej coulometrickej titrácie

Sekce 4 - Přírodní látky

- 4P-01 F. Šeršeň, M. Walko, D. Loos Antioxidačné vlastnosti niektorých analógov resveratrolu
- 4P-02 E. A. Prokudina, O. Lapčík Stanovení isoflavonoidů imunoafinitní chromatografií a HPLC-MS v rostlinném materiálu
- 4P-03 M. Jágr, M. Petříček, V. Křišťálek Vyhledávání nových látek s potenciálním terapeutickým účinkem produkovaných streptomycetami
- 4P-04 M. Matejovičová, M. Dvořák, I. Slaninová, Z. Slunská, E. Táborská Viv antioxidantů na poškození DNA buněčné linie HL-60 chelerythrinem
- 4P-05 H. Tesařová, K. Halamová, P. Maršík, P. Landa, M. Přibyllová, B. Svobodová, L. Kokoška Antioxidative activity of *Nigella sativa* seed quinones
- 4P-06 J. Švikruhá, A. Hegedúsová, P. Boleček, O. Hegedús Indukovaná fytoextrakcia kadmia z kontaminovanej pôdy
- 4P-07 K. Pěňčíková, J. Suchomelová, E. Táborská Obsah isochinolinových alkaloidů v *Stylophorum lasiocarpum* během vegetačního období
- 4P-08 P. Kosina, E. Vrublová, J. Suchomelová, J. Gruz, M. Kolář, K. Tschirner, J. Vostálová, J. Ulrichová, V. Šimánek Fytochemické studium *Macleaya cordata*
- 4P-09 H. Paulová, H. Bochořáková, M. Nováková, E. Táborská Stabilita extraktu *Scutellaria baicalensis* in vitro
- 4P-10 Z. Kroneková, M. Danko, D. Chorvát, Jr., I. Krupa, B. Motro, S. Michaeli, T. Economou, I. Lacík Alginate hydrogel matrices for immobilization of the proteins and cells in the design of implantable glucose biosensor
- 4P-11 M. Molnárová, A. Fargašová Reciprocal effect of Se and Cd on *Sinapis alba* seedlings
- 4P-12 P. Lanková, L. Bukáčková, E. A. Prokudina, O. Lapčík Imunochemické metody pro stanovení equolu
- 4P-13 B. Antořová, J. Novák, J. Kozler, J. Kubíček Testování biologické aktivity huminových látek z různých zdrojů na vyšších rostlinách
- 4P-14 A. Popa, I. Popa Identifikace nových přírodních látek v *Orobanche flava* pomocí 1D a 2D NMR spektroskopie
- 4P-15 J. Kalina, M. Duciucová, M. Kořvancová, O. Urban Sezónní dynamika aktivity enzymu Rubisco a pigmentů xantofylového cyklu smrku a buku pod vlivem zvýšené koncentrace CO₂
- 4P-16 A. Pěňčík, J. Rolčík, M. Strnad Studium auxinů pomocí imunoafinitní extrakce a UPLC-MS/MS

Sekce 5 - Chemické vzdělávání, historie a popularizace chemie

- 5P-01 *M. Klučáková, M. Pekař* 50 let od úmrtí prof. Otakara Viktorina
- 5P-02 *M. Ganajová, J. Kalafutová* Teória a prax projektového vyučovania k téme trvalo udržateľný rozvoj
- 5P-03 *M. Kubala* Projekt badatel – podpora talentovaných středoškoláků
- 5P-04 *T. Zelený, P. Sklenovský,
M. Otyepka* Tvorba nových úloh do předmětu molekulární modelování
- 5P-05 *J. Vinklárek, M. Erben* Multimediální podpora přednášek, seminářů a laboratoří z anorganické chemie
- 5P-06 *M. Klečková, M. Pavlíček,
L. Richterek, M. Vašíčková,
L. Kvítek* L@byrint – korenspondenčně internetová přírodovědná soutěž
- 5P-07 *M. Feszterová* Chemické vzdelávanie s podporou e-learningu
- 5P-08 *J. Petr, V. Maier, J. Znaleziiona,
R. Knob, P. Vyskočilová,
P. Bednář, J. Ševčík* Tvorba výukového simulačního programu pro kapilární elektroforézu
- 5P-09 *Z. Melichová, I. Nagyová,
L. Harvanová* Experimenty z elektrochemie
- 5P-10 *I. Jakab, V. Vanková* Využitie metodiky bisel pri monitoringu kvality povrchových vôd v edukačnom procese
- 5P-11 *V. Vanková, I. Jakab* Využitie kolorimetrických rýchlostestov pri monitoringu kvality povrchových vôd v edukačnom procese
- 5P-12 *H. Hilbert* Využitie chemických faktorov v krajinoekologickom hodnotení pomocou GIS výstupov
- 5P-13 *M. Procházka, M. Stupavská,
M. Aranyosiová, D. Velič* Kostolík sv. Margity Antiochijskej očami hmotnostnej spektrometrie
- 5P-14 *J. Škovierra, M. Aranyosiová,
D. Velič* Molekulární původ veštíarne v Delfách
- 5P-15 *J. Skopalová, P. Adamovský,
M. Kotouček* Multimediální učebnice výpočtů z elektroanalytických metod

Sekce 6 - Průmyslová chemie

- 6P-01 *J. Novák, B. Antošová, J. Kozler* Sorpce kovů na oxyhumolity, uhlí a lignit z ložisek v České republice
- 6P-02 *L. Ruppenthalová,
L. Kuzněcovová* Imobilizace iontů těžkých kovů z reálné odpadní vody na přírodním uhlí
- 6P-03 *A. Fargašová* Vplyv se na akumuláciu a translokáciu toxických (Cd, Pb) a esenciálnych (Cu, Zn) kovov v semenáčikoch *Sinapis alba* L.
- 6P-04 *J. Kizlink* Možnosti přepracování nebezpečných chemických látek a odpadů
- 6P-05 *J. Polonský, M. Paidar* Příprava katalyzátoru pro palivové články typu PEM
- 6P-06 *J. Mališ, M. Paidar* Metodika testování provozních parametrů palivových článků
- 6P-07 *J. Šimbera, K. Zelinka, J. Běluša,
P. Pazdera* Studium možností průmyslové výroby ethandinitrilu
- 6P-08 *V. Mazíková, I. Sroková,
M. Olšovský, V. Sasinková* Amidation of *O*-(carboxymethyl)starch with primary amines
- 6P-09 *E. Hřčková, Š. Chmela,
M. Stach* Štúdium „živej“ radikálovej polymerizácie styrénu v prítomnosti značiek
- 6P-10 *M. Schwarze* Možnosti sledování polymerace styrenu na polystyren metodou infračervené
- 6P-11 *J. Grégr, V. Kovačič, J. Militký* Vlastnosti recyklovaných uhlíkových vláken
- 6P-12 *D. Onrušová, T. Bazyláková,
M. Pajtášová, M. Olšovský,
S. Laliková, E. Jóna* Preparation and properties of ecologically modified rubber compounds

- 6P-13 *S. Sukop, P. Mokrejš, K. Kolomazník* Vliv přidavku keratinového hydrolyzátu na obsah volného formaldehydu ve vytvrzené močovinoformaldehydové pryskyřici
- 6P-14 *B. Čech, J. Matoušek* Spalovací zkoušky energetického využití certifikovaného paliva TPS NOLO 1 na bázi lagun Ostramo na energetických blocích
- 6P-15 *E. Smrčková, J. Kozánková* Vplyv vonkajšieho prostredia na úžitkové vlastnosti silikátových strešných krytín
- 6P-16 *L. Bartoňová, Z. Klika* Porovnání metod stanovení obsahu nedopalu v popelech z fluidního spalování uhlí s ohledem na přídavek odisřovacího
- 6P-17 *L. Bartoňová, Z. Klika* Vliv výkonu kotle na obohacení prvků v nedopalu z ložového popela při fluidním spalování uhlí

Sekce 7 - Teoretická a fyzikální chemie

- 7P-01 *Z. Kolská, K. Kuča, D. Jun* QSPR metoda pro určení biologické aktivity reaktivátorů acetylcholin-esterasy inhibované pesticidy
- 7P-02 *O. Grančičová, A. Olexová* Štúdium vplyvu perturbantov na nekatalyzovanú oscilačnú reakciu fenolu s bromičnanom v kyslom prostredí
- 7P-03 *V. Slovák, B. Taraba* Vliv rychlosti proudící atmosféry a zrnitosti na chemisorpční fázi oxidace uhlí
- 7P-04 *F. Vlasák, R. Kodým, D. Šnita, K. Bouzek* Matematický model hydrodynamiky toku v pravoúhlém kanálku s výplní ve tvaru síťky
- 7P-05 *L. Rábara, M. Aranyosiová, D. Velič* Příprava a štúdium monovrstiev substituovaných cyklodextrínov hmotnostnou spektrometriou sekundárnych iónov
- 7P-06 *L. Učňová, D. Chorvát, M. Stach, I. Lacík* Influence of monomer concentration, temperature and ionization on the free radical propagation rate coefficients of methacrylic acid polymerized in aqueous phase
- 7P-07 *P. Petrovič, A. Zahradníková, I. Zahradník, I. Valent* A stochastic model of calcium-induced calcium release in cardiac myocyte
- 7P-08 *E. Jáné, M. Žitňan, I. Bugár, O. Grančičová, D. Velič* Systém kumarín/ β -cyklodextrín / micela: fluorescenčná spektroskopia
- 7P-09 *E. Smreková, I. Valent* Rekonštrukcia topológie chromozómu metódou CCC s využitím analýzy šumu vstupných dát
- 7P-10 *J. Bárta, M. Pospíšil, V. Čuba* Vliv záření na kovové sloučeniny ve vodných roztocích
- 7P-11 *V. Szöcs, T. Pálszegi* 2D photon-echo signal calculations of partially charge-transfer dimers
- 7P-12 *T. Pavelková, V. Čuba, V. Múčka* Způsob studia vlivu ionizujícího záření na aktivitu enzymů
- 7P-13 *S. Kedžuch, J. Noga, J. Šimunek, S. Ten-No* Explicitne korelované R12 metódy
- 7P-14 *T. Pálszegi, A. Gaál, I. Bugár, V. Szöcs, L. Fialová, I. Capek, M. Michalka, F. Uherek* Modelovanie optických vlastností strieborných nanočastic
- 7P-15 *M. Matejdes, M. Janek* Stanovenie asociačných konštánt supramolekulových komplexov na báze fluorescenčných farbív
- 7P-16 *T. Zacher, M. Janek* Štúdium prípravy nanokompozitov z „host - guest“ interkalátov kaolinitu a halloyzitu
- 7P-17 *D. Kobliha, M. Pospíšil, V. Čuba, V. Múčka* Influencing of properties of mixed oxide catalysts using hydrogen reduction
- 7P-18 *D. Hřívová* Syntéza a biologická aktivita nanočástic stříbra
- 7P-19 *P. Polcr, P. Jurečka* Je možné zpřesnit empirický potenciál nahrazením mocninné funkce pro repulzi exponenciálou?

Sekce 8 - Potravinářská chemie

- 8P-01 *L. Minarovičová, M. Jancurová, A. Dandár, Z. Kušíková* Sledovanie vplyvu palmového tuku na kvalitu pekárskeho výrobkov
- 8P-02 *A. Vollmannová, S. Melicháčová, M. Timoracká, D. Urmínská* Vplyv pôdnych vlastností na obsah rutínu a kvercetínu v zrne laskavca a prosa
- 8P-03 *O. Zufarov, Š. Schmidt, S. Sekretár* Rafinácia bavlnikového oleja etanolamínom
- 8P-04 *L. Lahučský, A. Vollmannová, J. Kulich, L. Harangozo* Koreňový príjem rôznych foriem chrómu
- 8P-05 *A. Vargová, S. Jakabová, O. Hegedúš, A. Hegedúsová* Kultúrne rastliny ako zdroje selénu a ich vplyv na zdravotný stav obyvateľstva
- 8P-06 *S. Jakabová, O. Hegedúš, A. Hegedúsová, A. Vargová* Biofortifikácia hrachu záhradného selénom
- 8P-07 *P. Trebichalský, P. Lazor, L. Harangozo, A. Hruškovičová* Tvorba biomasy a zmeny obsahov spermidínu a etylénu v jarnom jačmeni po spoločnej aplikácii triazinového herbicidu s polyamínmi a s regulátormi polyamínovej biosyntézy
- 8P-08 *T. Tóth, R. Pospíšil, J. Chlpík, D. Bajčan, J. Árvay, P. Trebichalský* Hygienická kvalita rastlinných produktov dopestovaných po aplikácii biokalu
- 8P-09 *J. Tomáš, T. Tóth, A. Vollmannová, J. Musilová* Využitie odpadu pri spracovaní magnezitu ako horečnato-vápenatého hnojiva
- 8P-10 *T. Tóth, J. Tomáš, L. Harangozo, P. Lazor, L. Lahučský, J. Čéry, J. Kulich* Obsah Cd a Pb v zrne obilnín pestovaných v zaťaženej oblasti
- 8P-11 *T. Tóth, A. Vollmannová, J. Bystrická, K. Jomová, J. Musilová, A. Hruškovičová* Antioxidant Q₁₀
- 8P-12 *T. Tóth, R. Stanovič, L. Peltznerová, A. Hegedusová, A. Bobková, S. Melicháčová* Farbivá prírodného pôvodu v potravinách
- 8P-13 *J. Tomáš, D. Bajčan, L. Lahučský, J. Árvay, J. Bystrická* Účinok metalickej záťaže poľno-hospodárskej pôdy na kvalitu produkcie surovín na potravinárske účely
- 8P-14 *J. Musilová, M. Timoracká, L. Peltznerová, J. Čéry* Obsah kadmia vo vodorozpustných a nerozpustných sacharidoch ľuľka zemiakového
- 8P-15 *D. Bajčan, J. Tomáš, R. Tanovič, L. Peltznerová* Riziko kontaminácie zložiek potravinového reťazca kadmíom, olovom a chrómom v regióne Hont
- 8P-16 *K. Jomová, E. Medvecká* Zásobné bielkoviny ako markery technologickej kvality zrna pšenice
- 8P-17 *A. Bobková, M. Angelovičová, M. Bobko* Hodnotenie kvality potravinársky využívanej koreninovej papriky
- 8P-18 *G. K. Gomba, A. Veselá, A. Šynytsya, M. Tomšovský, J. Čopíková* Strukturná a termická analýza polysacharidů hub *Phellinus* sp. a *Inonotus* sp.

AUTORSKÝ REJSTŘÍK

- Adamovský P. 5P-15
 Alberti M. 1L-16
 Ambrová M. 1P-28
 Andělová B. 2P-06
 Andicsová A. 2P-16
 Andráš P. 1P-38
 Angelovičová M. 8P-17
 Antošová B. 4P-13, 6P-01
 Anzenbacherová E. 3L-19, 4L-06
 Aranyosiová M. 3L-14, 3P-20, 5P-13, 5P-14, 7P-05
 Armstrong D. W. 3P-05, 3P-06
 Árvay J. 8L-13, 8L-15, 8L-16, 8P-08, 8P-13
- Bačáková L. 1P-23
 Bader H. J. 5L-08
 Baizová P. 5L-06
 Bajčan D. 3L-16, 8P-08, 8P-13, 8P-15, 8L-15
 Bakardžiev M. 1P-12
 Balkovic S. 1L-19
 Balogová J. 6L-07
 Banáš P. 7L-08, 7L-10
 Baran P. 1P-10
 Barath P. 1P-42
 Barek J. 3L-02, 3L-18, 3L-23, 3P-13, 3P-14, 3P-15, 3P-16, 3P-17, 3P-18
 Bárta J. 7P-10
 Barták P. 3P-09, 5L-15
 Bártík M. 2P-15
 Bartoňová L. 6P-16, 6P-17
 Baszczyński O. 2P-23
 Batman D. 1L-03
 Bazeľ J. 3P-26
 Bazyláková T. 6L-10, 6P-12
 Bednář P. 5P-08
 Beinrohr E. 3L-12, 3P-37
 Bella M. 2L-12
 Běluša J. 2L-04, Běluša J. 6P-07
 Bencko V. 3P-15
 Benčíková E. 6L-07
 Béres T. 3P-02
 Berkeš D. 2P-10, 2P-11
 Bezdička P. 1P-40
 Bláhová O. 1P-24
 Blažíček P. 3P-35
 Blažková M. 1P-23
 Bobko M. 8P-17
 Bobková A. 8P-12, 8P-17
 Boča M. 1L-13
 Boháč A. 2P-19
 Boháková N. 1P-30, 1P-39
 Bochořáková H. 4P-09
 Boleček P. 4P-06
 Boreková M. 3L-17, 3P-27
- Bosáková Z. 3L-06, 3L-09, 3L-21, 3P-07
 Bouzek K. 5L-16, 7P-04
 Brázdová M. 3L-11
 Bugár I. 7L-02, 7L-06, 7P-08, 7P-14
 Buchčík R. 2P-05
 Bukáčková L. 4P-12
 Bystrická J. 8L-12, 8L-13, 8P-11, 8P-13
- Cahová K. 3L-11
 Calliste C. 4L-08
 Cankař P. 2L-06
 Capek I. 7P-14
 Církvá V. 3L-26
 Císařová I. 1P-12
 Conseil C. 1P-48
 Coufal P. 3P-07
 Csomorová K. 2L-16
 Cvak L. 4L-02
 Cvek B. 1P-02
- Čajan M. 1P-19, 2P-05
 Čáp L. 3P-09
 Čech B. 6P-14, 6L-06
 Černák J. 1P-13, 1P-21
 Černý J. 7L-09
 Červený L. 3L-22
 Čéry J. 8L-13, 8L-14, 8P-10, 8P-14
 Česnek M. 2P-22
 Čižmárik J. 3P-29
 Čížová A. 3P-24
 Čopíková J. 8P-18
 Čtrnáctová H. 5L-08
 Čuba V. 3P-33, 7P-12, 7P-17, 7P-10
 Čubová K. 3P-22
 Čuvanová S. 1P-35, 1P-37
- Daich A. 2P-13
 Dandár A. 8L-10, 8P-01
 Daňhel A. 3L-02, 3L-18
 Danielík V. 1P-28, 1P-29, 1P-31
 Danko M. 4P-10
 Deýlová D. 3P-17
 Dian J. 3L-01
 Dohnalová Ž. 1L-17
 Doležal K. 3P-02, 3P-03
 Dopita M. 5L-01
 Drábik M. 1L-19
 Dračínský M. 2P-20, 2P-21, 2P-22, 2P-23
 Drahoňovský D. 2L-03
 Drašar P. 3P-18, 5L-08
 Drozdek M. 1L-20
 Duciučová M. 4P-15
 Dudek B. 1L-20
- Ducháček V. 6L-02
 Ďurčeková T. 3P-29
 Ďuriš A. 2P-10
 Duroux J.-L. 4L-08
 Dušek M. 1P-07
 Dvořák D. 1L-01
 Dvořák L. 1L-09
 Dvořák M. 4P-04
 Dvořák Z. 1P-02, 3L-19, 4L-06
 Dvořáková M. 2P-01
 Dworak A. 2L-15
 Dziembaj R. 1L-20
- Ebringerová A. 3P-24
 Economou T. 4P-10
 Elcnerová M. 3P-30
 Elyashevich G. 2L-05
 Emelin E. 2P-07
 Erben M. 5P-05
 Erdélyiová A. 1P-01, 1P-18
 Fadrná V. 5L-05
- Fajnor V. Š. 1P-30, 1P-33, 1P-39
 Fargašová A. 4P-11, 6P-03
 Fasurová N. 3P-25
 Fejfarová K. 1P-07
 Fellner P. 1P-28
 Feszterová M. 5L-09, 5P-07
 Fialová L. 7P-14
 Fíla V. 6L-04
 Fischer J. 3L-02, 3P-14
 Fišer M. 2P-03
 Fišera L. 2P-17, PL3
 Florián Š. 6L-09
 Fohlerová R. 3L-25
 Fojta M. 3L-11
 Fojtová M. 3L-11
 Fortunová L. 1P-35
 Frébort I. 3L-07
 Frumar M. 1P-40, PL4
- Gaál A. 7P-14
 Gabčová J. 1P-31
 Galandová J. 3L-12
 Gálíková J. 1P-03
 Ganajová M. 5L-13, 5P-02
 Gásek P. 6L-08
 Gaš B. 3P-01
 Gaury J. 1P-48
 Gažák R. 4L-07, 4L-08
 Gomba G. K. 8P-18
 Gondová T. 3P-06
 Gorbár M. 1P-41
 Grančičová O. 7L-02, 7P-02, 7P-08
 Grégr J. 5L-07, 5L-14, 6P-11
 Greifová M. 8L-02

- Gros L. 5L-08
 Grúz J. 3P-36
 Gruz J. 4P-08
 Gryčová L. 7L-03
 Gutwirth J. 1P-40
 Gyepes R. 1P-01, 1P-05, 1P-18
 Györyová K. 1P-01, 1P-18
- Hagarová I. 3L-16
 Hajšlová J. 8L-09
 Halamová K. 4P-05
 Halás L. 1P-18
 Halás L. 1P-01
 Hanika J. 6L-06
 Hanková Z. 3P-37
 Hánošová V. 7L-10
 Harangozo E. 8L-11, 8L-12, 8P-07, 8P-10, 8P-04
 Harvanová L. 5P-09
 Hasoň S. 3L-11
 Havran L. 3L-11
 Hegedús O. 4P-06, 8P-05, 8P-06
 Hegedúsová A. 4P-06, 8P-06, 8P-12, 8P-05
 Hejátko J. 3L-25
 Hekera P. 3P-09
 Herchel R. 1L-04, 1P-06
 Herich P. 1P-14
 Hilbert H. 5L-12, 5P-12
 Hinnerová P. 3L-07, 3P-08
 Hlinková M. 1P-32
 Hlúbiková S. 3L-12, 3P-37
 Hnyk D. 1P-12, 1P-16
 Hobza P. 7L-07, 7L-09
 Hof M. 7L-01
 Hojerová J. 3L-17, 3P-27
 Holub J. 1P-11, 1P-12
 Holubová J. 1L-06
 Holubová R. 5L-01
 Holý A. 2P-20, 2P-21, 2P-23, 2P-22
 Homzová E. 3P-21
 Hora L. 6L-04
 Horáková P. 3L-11
 Horna A. 3P-03
 Houck J. D. 1P-10
 Hradil P. 2L-09
 Hrachová J. 1P-30, 1P-33, 1P-39
 Hrbáč J. 4L-08
 Hrčková L. 6P-09
 Hrdličková M. 2P-15
 Hrdlovič P. 2P-08
 Hromádková Z. 3P-24
 Hruška V. 3P-01
 Hruškovičová A. 8L-13, 8P-07, 8P-11
 Hřívová D. 7P-18
 Hubáček T. 1P-24, 1P-25, 1P-26
 Huttel I. 1P-27
- Chaloupka A. 1P-25, 1P-26
 Chaloupková H. 2P-03
 Chlpík J. 8P-08
- Chmela Š. 2P-08, 6P-09
 Chmielarz L. 1L-20
 Chodák I. 2L-05, 2P-09
 Chorvát D. 7L-02, 7P-06, 7L-06
 Chorvát D. Jr. 2P-14, 4P-10
- Jágr M. 4P-03
 Jakab I. 5P-10, 5P-11
 Jakobová S. 8P-05, 8P-06
 Jakabský Š. 1P-37
 Jakl M. 3P-34
 Jaklová Dyrtrtová J. 3P-34
 Jakubcová I. 3P-35
 Jambrich M. 6L-07
 Janáčková A. 3P-04
 Jancurová M. 8L-10, 8P-01
 Jančová P. 3L-19, 4L-06
 Jáné E. 7L-02, 7P-08
 Janek M. 7L-06, 7P-15, 7P-16
 Janičkovič D. 1L-13
 Janigová I. 2L-16, 2P-09
 Janoušek Z. 1L-03
 Jansa P. 2P-21
 Jelínek I. 3L-01
 Jemelková Z. 3P-13
 Jesenák K. 1P-41
 Jevíková J. 3P-22
 Jimenez J. T. 8L-03
 Jindřich J. 3L-01
 Jodas B. 5L-07
 John J. 3P-22, 3P-32, 3P-33
 Jomová K. 8P-11, 8P-16
 Jóna E. 1L-14, 6L-10, 6P-12
 Jun D. 7P-01
 Jureček E. 6L-08
 Jurečka P. 7P-19, 7L-09
- Kačer P. 3L-22
 Kafka S. 2L-10, 2P-02
 Kalafutová J. 5P-02
 Kalíková K. 3L-06, 3P-01
 Kalina J. 4P-15
 Kameníček J. 1P-09
 Karády M. 3P-03
 Kasák P. 2P-12
 Kasálková N. 1P-22, 1P-23
 Kašiarová S. 5L-10, Kašiarová S. 5L-11
 Kašpárková V. 2P-02
 Kaustová J. 2P-07
 Keďžuch S. 7P-13
 Kimmel R. 2L-10
 Kizlink J. 6L-05, 6P-04
 Klanicová A. 1P-10
 Klečková M. 5P-06
 Kleinová A. 2L-05
 Kleinová V. 2P-03
 Klementová Š. 3P-28
 Klepetářová B. 2P-23
 Klika Z. 6P-16, 6P-17
 Klištincová L. 1P-04
- Klouček P. 8L-04
 Klučáková M. 5P-01
 Knob R. 3L-06, 3L-07, 3P-08, 5P-08
 Kobliha D. 3P-32, 7P-17
 Kodým R. 5L-16, 7P-04
 Kokoška L. 4P-05, 8L-04
 Kolář M. 4P-08
 Kolářová K. 1P-08, 1P-22
 Kollár J. 2P-08
 Kolláriková G. 2P-14
 Kolomazník K. 6P-13
 Koloros P. 5L-17
 Kolská Z. 1P-24, 7P-01
 Koman M. 1L-07
 Komárek K. 3P-30
 Komora L. 6L-03
 Koperska M. A. 3L-13
 Korabik M. 1P-20
 Korenko M. 1L-13
 Koreňová A. 2P-11
 Kosina P. 3L-19, 4L-06, 4P-08
 Koslowski D. 4L-08
 Kostečka P. 3L-11
 Kostka P. 1P-48
 Košinová P. 4L-08
 Košmrlj J. 2L-10, 2P-02
 Košvancová M. 4P-15
 Kotouček M. 5P-15
 Kotulanová E. 1P-40
 Kovačič V. 6P-11
 Kováčová S. 2P-19
 Kovářová J. 1P-01, 1P-18, 2P-15
 Kowalczyk A. 2L-15
 Kowalska M. 3L-07
 Kozánková J. 6P-15
 Kozler J. 4P-13, 6P-01
 Kožíšek J. 2P-17
 Kožušníková A. 1P-36
 Krajancová P. 3P-31
 Krajčová E. 8L-02, 8L-05
 Kratochvíl B. 1L-02
 Krchnak V. 2L-01, 2L-02
 Křišťůfek V. 4P-03
 Krmela J. 3P-22
 Kronek J. 2L-07, 2L-15
 Kroneková Z. 2P-12, 4P-10
 Kroupa J. 3P-33
 Krupa I. 4P-10
 Krupčík J. 3L-02, 3P-05
 Kryštof V. 2L-06
 Křen V. 4L-07, 4L-08
 Kříž D. 3P-28
 Křížek T. 3P-07
 Kubala M. 5L-01, 5P-03, 7L-03
 Kubešová K. 7L-08
 Kubíček J. 4P-13
 Kuča K. 7P-01
 Kuchár J. 1P-13, 1P-21
 Kucharík M. 1L-13, 6L-12
 Kulakova T. 3P-26
 Kulich J. 8P-04, 8L-14, 8P-10

- Kulichová B. 3P-03
 Kušíková Z. 8L-10, 8P-01
 Kušnierová L. 2P-19
 Kutschy P. 3P-06
 Kuzma M. 3L-22
 Kuzněcovová L. 6P-02
 Kvítek L. 5L-01, 5L-05, 5P-06
 Kvítek O. 1P-27
- Labuda J. 3L-12
 Lacík I. 2P-12, 2P-14, 4P-10, 7P-06
 Lahučký L. 8L-15, 8P-04, 8P-10, 8P-13
 Ľalíková S. 6L-10, 6P-12
 Landa P. 4P-05
 Lang K. 1L-12
 Lanková P. 4P-12
 Lánský Z. 7L-03
 Lapčík O. 4L-04, 4P-02, 4P-12
 Lazor P. 8P-07, 8P-10
 Lazzaroni R. 4L-08
 Lederer J. 6L-01
 Lednický F. 2L-16
 Lehn J.-M. 2L-03, PL1
 Lehotay J. 3P-29
 Lemr K. 3L-07, PL5
 Lhoták P. 3P-33
 Lintnerová L. 2P-19
 Lis T. 1L-07
 Lísa M. 3L-20
 Lokajová J. 3L-06
 Londesborough M. G. S. 1P-16
 Loos D. 4P-01
 Lorenc D. 7L-06
 Loukotková L. 3L-06, 3L-21
 Lovás M. 1P-37
 Lustoň J. 2L-07, 2L-15
 Luxová J. 1P-44
 Lyutakov O. 1P-27
- Maciejowska I. 5L-08
 Macková A. 1L-18, 1P-08
 Macháček J. 1P-16
 Macho V. 6L-03, 6L-08
 Maier V. 3L-06, 3L-07, 3P-08, 5L-01, 5P-08
 Makajová Z. 1P-22
 Mališ J. 6P-06
 Malovíková A. 3P-24
 Marek J. 1P-17
 Marchalín Š. 2P-13
 Marsal P. 4L-08
 Maršálek R. 7L-05
 Maršík P. 4P-05
 Martonová M. 1P-21
 Mařák D. 2P-20
 Matejdes M. 7P-15
 Matejovičová M. 4P-04
 Matíková-Mařarová M. 1L-05
 Matoušek J. 6P-14
 Matoušek V. 3L-22
- Mazíková V. 6P-08
 Medovčíková A. 3P-27
 Medvecká E. 8P-16
 Medved' M. 2P-19
 Megová M. 3L-06
 Mechoulam R. 4L-01
 Melicháčová S. 8L-14, 8L-16, 8P-02, 8P-12
 Melichar F. 2P-04
 Melichová Z. 1P-38, 5P-09
 Melník M. 1L-08
 Michaeli S. 4P-10
 Michalka M. 7P-14
 Mikula M. 3P-27
 Mikulík J. 1P-15
 Milata V. 2L-12
 Milczarek J. M. 3L-08
 Militký J. 6P-11
 Minarovičová L. 8L-10, 8P-01
 Mizera J. 3P-21
 Mlčoch A. 1L-11
 Mlčoch T. 3P-25
 Mocák J. 3P-29, 3P-35
 Mokrejš P. 6P-13
 Molenda M. 1L-20
 Molnár J. 5L-01
 Molnárová M. 4P-11
 Moncoľ J. 1P-20
 Moravčíková D. 2P-11
 Moriňigo M. A. 8L-03
 Mošková D. 2L-16
 Motro B. 4P-10
 Mrázová V. 3P-35
 Mrkvová M. 1P-29
 Mroziński J. 1L-07
 Múčka V. 7P-12, 7P-17
 Müller L. 3L-06
 Müller L. 5L-01, 5L-06, 5L-15
 Musilová J. 3P-18, 8L-12, 8P-11, 8P-14, 8P-09
 Mydlová-Memersheimerová J. 3L-02
- Nádaský P. 8L-07
 Nádherná M. 3P-10
 Nagy N. V. 1L-08
 Nagyová I. 1P-38, 5P-09
 Nagyová S. 1P-34, 1P-35
 Náhlík J. 1P-24
 Navrátil T. 3P-34
 Navrátilová Z. 3P-31
 Nedorostová L. 8L-04
 Němcová K. 3L-11
 Němec M. 3P-32
 Němečková D. 2P-06
 Netopilík M. 2P-15
 Nevěčná T. 5L-01
 Nielsen P. 2L-14
 Noga J. 7P-13
 Nógellová Z. 2P-09
 Novák B. 5L-01
 Novák I. 2L-05, 6L-09
- Novák J. 4P-13, 6P-01
 Novák O. 3P-36
 Nováková M. 4P-09
 Novotná R. 2L-08
 Novotný Č. 3L-10
 Novotný L. 3P-11, 3P-12
 Novotný V. 3L-23
- Obst O. 5L-15
 Olčák D. 1P-34
 Olexová A. 7P-02
 Olšovský M. 6L-03, 6L-08, 6P-08, 6P-12
 Ondo D. 3L-24
 Ondrejковиčová I. 1L-07
 Ondrušová D. 6L-10, 6P-12
 Opekar F. 3P-10
 Orava J. 1P-40
 Orságová L. 3L-17
 Otmar M. 2P-20
 Otyepka M. 5L-01, 7L-03, 5P-04, 7L-08, 7L-10
 Owen J. R. 1P-45
- Pacáková V. 3L-09
 Pacigová S. 1P-05
 Pagurko A. 8L-02
 Paidar M. 6P-05, 6P-06
 Pajtášová M. 6L-10, 6P-12
 Paláčková H. 1L-06
 Palát K. 2P-07
 Pálszegi T. 7L-02, 7P-14, 7P-11
 Papajová E. 2P-14
 Pařízek M. 1P-23
 Pastorek R. 1P-09, 1P-47
 Paulová H. 4P-09
 Pavelková T. 7P-12
 Pavlásková M. 2P-18
 Pavlíček M. 5P-06
 Pavlík V. 1L-14
 Pazdera P. 2L-04, 2L-11, 2P-06, 6P-07
 Pecková K. 3L-02, 3L-18, 3P-14, 3P-15, 3P-16, 3P-17, 3P-18
 Pekař M. 5P-01
 Peltznerová L. 8L-12, 8P-12, 8P-14, 8P-15
 Pěničik A. 4P-16
 Pěničiková K. 4P-07
 Peš O. 3L-25
 Petr J. 3L-06, 3L-07, 3P-08, 5P-08
 Petrášová V. 6L-10
 Petrovaj J. 3P-06
 Petrovič P. 7P-07
 Petříček M. 4P-03
 Petříček V. 1P-09
 Piechowicz M. 3L-08
 Pikna Ľ. 3P-19
 Pivoňková H. 3L-11
 Plesch G. 1P-41
 Plevová E. 1P-36, 3P-23, 3P-31
 Plocková M. 8L-01

- Podešva J. 2P-15
 Podhradská S. 2P-09
 Polášková P. 3P-12, 3P-16
 Polcr P. 7P-19
 Polonský J. 6P-05
 Popa A. 4P-14
 Popa I. 1L-09, 1L-10, 2L-08, 4P-14
 Pospíšil M. 7P-10, 7P-17
 Pospíšil R. 8P-08
 Potočňák I. 1P-07, 1P-14
 Prášilová M. 5L-15
 Pražáková V. 1L-05
 Preiler J. 3L-25
 Procházka M. 5P-13
 Proklešková E. 1P-46
 Prokudina E. A. 4P-02, 4P-12
 Prokůpek L. 2P-15
 Prónayová N. 2P-11, 2P-13
 Příbylová M. 2P-01, 4P-05

 Rábara L. 7P-05
 Rakovský E. 1P-04
 Ranc V. 3L-07
 Rauch P. 1P-23
 Ravas R. 6L-07
 Reháč J. 2P-17
 Reháková M. 1P-32, 1P-34, 1P-35
 Reiter J. 1P-42, 1P-45, 3P-10
 Repaská K. 3P-05
 Richterek L. 5L-01, 5P-06
 Ringstrand B. 1L-03
 Rockenbauer A. 1L-08
 Rodová A. 1L-15
 Rolčík J. 4P-16
 Rulišek L. 7L-10
 Ruppenthalová L. 6P-02
 Ryparová O. 3L-07, 3P-08
 Ryvolová M. 3L-25

 Sabová I. 1P-13
 Sajdl P. 1P-26
 Salahub D. R. 7L-09
 Salayová A. 3P-06
 Sališová M. 2P-19
 Salwiński A. 3L-15
 Sandra P. 3P-05
 Sasinková V. 3P-24, 6P-08
 Sedlářová I. 6L-11
 Sedmera P. 4L-07, 4L-08
 Sekretár S. 8L-05, 8L-06, 8L-08, 8P-03
 Senajová J. 3P-09
 Serbin R. 3P-06, 3P-26
 Shiu K. K. 3L-18
 Shomaker R. K. 1L-03
 Schmidt Š. 8L-02, 8L-05, 8L-06, 8L-08, 8P-03
 Schulzová V. 8L-09
 Schwarze M. 6P-10
 Schwendt P. 1P-03, 1P-04
 Siegel J. 1L-18, 1P-25

 Sivák M. 1P-05
 Sklenovský P. 5P-04, 7L-03, 7L-08
 Skopalová J. 5L-06, 5L-15, 5P-15
 Slaninová I. 4P-04
 Slavík M. 5L-07, 5L-14
 Slepíčka P. 1L-18, 1P-08, 1P-22, 1P-23, 1P-24, 1P-25
 Slouka J. 2P-18
 Slovák P. 1P-47
 Slovák V. 1P-47, 7P-03
 Slunská Z. 4P-04
 Smolka M. 5L-02, 5L-03, 5L-04
 Smrčková E. 6P-15
 Smreková E. 7P-09
 Sobotníková J. 3P-07
 Solčán T. 2P-16
 Součková J. 5L-06, 5L-15
 Soukupová J. 5L-05
 Soral M. 2L-02
 Spáčilová L. 2L-14
 Sroková I. 3P-24, 6P-08
 Stach M. 2P-12, 7P-06, 6P-09
 Stančíková M. 3L-14
 Stanovič R. 8L-16, 8P-12, 8L-11
 Stratilová E. 5L-08
 Strnad M. 3P-36, 4P-16
 Studenyak J. 3P-26
 Stupavská M. 3P-20, 5P-13
 Stýskala J. 2P-18
 Suchomelová J. 4P-07, 4P-08
 Sukop S. 6P-13
 Svobodová A. 4L-08
 Svobodová B. 4P-05
 Svozil D. 7L-10
 Synytsya A. 8P-18
 Szabó-Plánka T. 1L-08
 Szöcs V. 7L-02, 7L-06, 7P-11, 7P-14

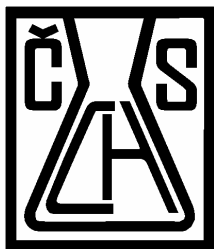
 Šafař P. 2P-13
 Šafařík I. 3P-30
 Šafaříková M. 3P-30
 Šebor G. 6L-01
 Šeršeň F. 4P-01
 Šestáková I. 3P-34
 Ševčík J. 3L-06, 3L-07, 3P-08, 5L-02, 5P-08, 5L-03
 Ševčík R. 2L-11
 Šilha T. 1P-15
 Šima J. 1L-08
 Šimánek V. 3L-19, 4P-08, 4L-06
 Šimbera J. 2L-04, 6P-07
 Šimko F. 6L-12
 Šimková D. 3L-12
 Šimunek J. 7P-13
 Šindelář Z. 1P-06
 Šipoš R. 1L-08
 Šivová M. 6L-09
 Škovier J. 5P-14
 Šmogrovičová D. 8L-07
 Šnita D. 7P-04

 Špaček V. 2P-15
 Špáňík I. 3P-04, 3P-05
 Špendlíková I. 3P-33
 Špírková M. 2L-05
 Šponer J. 7L-10
 Štamberg K. 3P-22
 Štarha P. 1L-10
 Šťastná K. 3P-32
 Štefániková S. 1L-07
 Štefánová S. 3P-19
 Štěpnička P. 1P-11
 Števiar M. 2L-05
 Štíbr B. 1P-11, 1P-12
 Štolcová M. 8L-04
 Šturdíková M. 8L-03
 Šugárková V. 3P-23, 3P-31
 Šulcová P. 1L-17, 1P-43, 1P-44, 1P-46
 Švecová H. 2P-03, 2P-04
 Švikruhová J. 4P-06
 Švorčík V. 1L-18, 1P-08, 1P-22, 1P-23, 1P-24, 1P-25, 1P-26, 1P-27
 Švrček J. 5L-01

 Táborská E. 4L-03, 4P-09, 4P-07, 4P-04
 Tanovič R. 8P-15
 Taraba B. 7P-03
 Taraba J. 1P-02
 Tarkowski P. 3P-02, 5L-05
 Teisinger J. 7L-03
 Ten-No S. 7P-13
 Tesařová E. 3L-06, 3L-09, 3L-21, 3P-01, 3P-07
 Tesařová H. 4P-05
 Timoracká M. 8L-14, 8P-02, 8P-14
 Tisovský P. 2P-16
 Toma Š. 2L-13
 Tomáš J. 8L-15, 8P-09, 8P-10, 8P-13, 8P-15
 Tomečková V. 1P-32
 Tomšovský M. 8P-18
 Topinka D. 5L-04
 Toporková M. 8L-05
 Tóth T. 8P-08, 8P-09, 8P-10, 8P-11, 8P-12
 Trávníček Z. 1L-05, 1L-09, 1L-10, 1P-06, 1P-10, 1P-15, 1P-17, 1P-19, 2L-08, 2P-05
 Trebichalský P. 8L-11, 8P-07, 8L-16, 8P-08
 Trojan M. 1L-17, 1P-44
 Trouillas P. 4L-08
 Tschirner K. 4P-08

 Učňová L. 7P-06
 Udatný J. 2P-15
 Uherek F. 7P-14
 Uhlířová T. 1P-42, 1P-45
 Ulrichová J. 1P-02, 4P-08
 Urban O. 1L-15, 4P-15

- Urmínská D. 8P-02
- Vaculíková L. 1P- 36, 1P-37, 3P-23, 3P-31
- Vadinská M. 3L-06
- Váhovská L. 1P-14
- Valent I. 7P-09, 7P-07
- Valigura D. 1P-20
- Valterová I. PL2
- Vančo J. 1L-05, 1P-17
- Vaněk T. 2P-01
- Vanková V. 5P-10, 5P-11
- Vargová A. 8P-05, 8P-06
- Vargová M. 1P-41
- Vasková Z. 1P-20
- Vašíčková M. 5P-06
- Vavra M. 1P-07
- Večeřa M. 2P-15
- Végh D. 2P-16
- Velič D. 3L-14, 3P-20, 5P-13, 5P-14, 7L-06, 7L-02, 7P-05, 7P-08
- Veselá A. 8P-18
- Veselý V. 6L-06
- Vetešník A. 3P-21, 3P-22
- Vídenský J. 6L-11
- Vinklárek J. 1L-06, 5P-05
- Vinter V. 5L-05
- Vitásková L. 1P-43
- Vladimírová M. 5L-13
- Vlasák F. 7P-04
- Vlček M. 1P-40
- Vnenčáková J. 6L-07
- Vogt U. 1P-41
- Vollmannová A. 8L-11, 8P-02, 8P-04, 8P-09, 8P-11
- Vostálová J. 4L-05, 4L-08, 4P-08
- Votruba I. 2P-20
- Vrublová E. 4P-08
- Vrzalová L. 3P-15
- Vyskocil V. 3L-18, 3L-02, 3P-16, 3P-17
- Vyskočilová P. 5P-08
- Vysloužil P. 5L-03, 5L-02, 5L-04
- Wágner T. 1P-40
- Walko M. 4P-01
- Wallace R. G. 5L-08
- Walter N. G. 7L-10
- Walterová D. 4L-08
- Yosypchuk B. 3L-04, 3L-18
- Zahradník I. 7P-07
- Zahradníková A. 7P-07
- Zachař P. 3L-10
- Zacher T. 7P-16
- Zaitz M. M. 1L-20
- Zajíček J. 5L-08
- Zajoncová L. 5L-01, 5L-05
- Zapadlo M. 3P-09
- Zbořil R. 1P-06, 7L-04
- Zelený T. 5P-04
- Zelinka K. 6P-07
- Zięba-Palus J. 3L-08
- Zima J. 3L-03, 3P-13, 3P-14
- Znaleziona J. 3L-06, 3L-07, 3P-08, 5P-08
- Zufarov O. 8L-05, 8L-08, 8P-03, 8L-06
- Žabová H. 3L-26
- Žák Z. 1P-03, 1P-13
- Žemberyová M. 3L-16
- Žigo O. 6L-09
- Žitňan M. 7L-02, 7P-08
- Žúžiová J. 2P-13



Česká společnost chemická
Sekretariát a redakce Chemických listů
Novotného lávka 5
116 68 Praha 1
tel./fax: 222 220 184, redakce tel. 222 221 778
e-mail: chem.spol@csvts.cz
<http://www.csch.cz>

Proč se stát členem České společnosti chemické

Zapojení v České společnosti chemické, členu Asociace českých chemických společností, přináší individuálním chemikům kromě vlastního členství v největší a nejstarší profesní organizaci chemiků:

- celosvětově uznávanou příslušnost k jedné z nejstarších profesních organizací v chemii na světě,
- možnost zapojení se do práce a komunikace v jedné z místních či odborných poboček ČSCH,
- kontakty, informace, služby, možnosti, uplatnění...
- podstatné slevy u vložného na sjezdech a konferencích, jejichž oficiálním pořadatelem je ČSCH,
- možnost dostávat 4× ročně zdarma tzv. „bulletinové číslo“ Chemických listů,
- možnost objednání předplatného Chemických listů s významnými slevami,
- možnost objednání „osobního balíku předplatného“ Chemických listů a časopisů konsorcia EUChemSoc,
- členské informace o nových knihách, produktech a službách i o připravovaných odborných akcích na celém světě, informace o dění v evropských chemických strukturách
- možnost zažádání o evropskou nostrifikaci chemického vzdělání a odborné praxe spojenou s udělením titulu Eurchem, platného v celé EU,
- přístup ke službám a slevám poskytovaným členskými organizacemi EuCheMS pro členy národních organizací,
- možnost přidruženého členství v IUPAC,
- možnost získání a doporučení členské přihlášky do významných zahraničních chemických společností (RSC, ACS, GDCh, GÖCh, SFC aj.),
- možnost získání příležitostných slev obchodních firem spolupracujících s ČSCH,
- možnost uplatnit informace z vlastní pracovní činnosti (výsledky, novinky, inzerce, tisková oznámení aj.),
- možnost zveřejnění vlastního oznámení v rubrice Bulletinu Chemických listů „Práci hledají“,
- vedle individuálního členství je možné kolektivní členství firem,
- a řadu dalších služeb.

Jak se stát členem ČSCH

Členská přihláška je k dispozici na internetových stránkách ČSCH nebo na sekretariátu ČSCH. Členství je přístupné pro všechny zájemce o chemii a přijetí nového člena doporučí dva členové ČSCH (doporučení je možné nahradit odborných životopisem), členství nabývá platnosti po schválení hlavním výborem ČSCH.

Výši členských příspěvků a možné slevy schvaluje na návrh předsednictva hlavní výbor ČSCH.

OBSAH

Úvodník	586
Plenární přednášky	595
Sekce 1 – přednášky	599
Sekce 2 – přednášky	610
Sekce 3 – přednášky	619
Sekce 4 – přednášky	631
Sekce 5 – přednášky	636
Sekce 6 – přednášky	645
Sekce 7 – přednášky	652
Sekce 8 – přednášky	658
Sekce 1 – postery	667
Sekce 2 – postery	690
Sekce 3 – postery	701
Sekce 4 – postery	718
Sekce 5 – postery	726
Sekce 6 – postery	733
Sekce 7 – postery	741
Sekce 8 – postery	751
Seznam přednášek	760
Seznam posterů	766
Autorský rejstřík	774

CONTENTS

Editorial	586
Plenary Lectures	595
Section 1 – Lectures	599
Section 2 – Lectures	610
Section 3 – Lectures	619
Section 4 – Lectures	631
Section 5 – Lectures	636
Section 6 – Lectures	645
Section 7 – Lectures	652
Section 8 – Lectures	658
Section 1 – Posters	667
Section 2 – Posters	690
Section 3 – Posters	701
Section 4 – Posters	718
Section 5 – Posters	726
Section 6 – Posters	733
Section 7 – Posters	741
Section 8 – Posters	751
List of Lectures	760
List of Posters	766
Author's Index	774

CHEMICKÉ LISTY • ročník/volume 102 (2008), čís./no. 8 • LISTY CHEMICKÉ, roč./vol. 132, ČASOPIS PRO PRŮMYSL CHEMICKÝ, roč./vol. 118 • 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 Praha, s ČSPCH a ÚOCHB AV ČR za finanční podpory Nadace Český literární fond a kolektivních členů ČSCH • IČO 444715 • Published by the Czech Chemical Society • VEDOUcí REDAKTOR/EDITOR-IN-CHIEF: B. Kratochvíl • REDAKTOŘI/ EDITORS: J. Barek, Z. Bělohav, P. Drašar, J. Hetflejš, P. Holý, J. Horák, P. Chuchvalec, J. Podešva, P. Rauch, J. Volke; Bulletin: I. Valterová; Webové stránky: R. Liboska, P. Zámstný • ZAHRANIČNÍ A OBLASTNÍ REDAKTOŘI/FOREIGN AND REGIONAL EDITORS: F. Švec (USA), V. Větvicka (USA), L. Opletal (Hradec Králové), P. Tarkowski (Olomouc), Z. Kolská (Ústí nad Labem) • KONZULTANT/CONSULTANT: J. Kahovec • VÝKONNÁ REDAKTORKA/EDITORIAL ASSISTANT: R. Řápková • REDAKČNÍ RADA/ADVISORY BOARD: E. Borsig, M. Černá, L. Cervený, E. Dibuszová, J. Hanika, Z. Havlas, I. Kadlecová, J. Káš, J. Koubek, T. Míšek, J. Pacák, V. Pačes, O. Paleta, V. Růžička, 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, chem.ekonom@csvts.cz • PLNÁ VERZE NA INTERNETU/FULL VERSION ON URL: <http://www.chemicke-listy.cz> • Editor čísla (ISSUE EDITOR) P. Tarkowski, V. Kryštof • TISK: České Tiskárny, s.r.o., Generála Svobody 335, 533 51 Pardubice - Rosice nad Labem; SAZBA, ZLOM: ČSCH, Chemické listy • Copyright © 2008 Chemické listy/Česká společnost chemická • Cena výtisku 153 Kč, roční plné předplatné 2008 (12 čísel) 1570 Kč, individuální členské předplatné pro členy ČSCH 785 Kč. Roční předplatné ve Slovenské republice 83 EUR (doručování via SCHS), individuální členské předplatné pro členy ČSCH 63 EUR (doručování via SCHS), 234 EUR (individuální doručování), ceny jsou uvedeny včetně DPH • DISTRIBUTION ABROAD: KUBON & SAGNER, POB 34 01 08, D-80328 Munich, FRG; Annual subscription for 2008 (12 issues) 225 EUR • This journal has been registered with the Copyright Clearance Center, 2322 Rosewood Drive, Danvers, MA 01923, USA, where the consent and conditions can be obtained for copying the articles for personal or internal use • Pokyny pro autory najdete v čísle 1/2002 a na internetu, zkratky časopisů v čísle 10/97 na str. 911 • Chemické listy obsahující Bulletin jsou zaslány zdarma všem individuálním a kolektivním členům ČSCH a ČSPCH v ČR i zahraničí, do všech relevantních knihoven v ČR a významným představitelům české chemie a chemického průmyslu; v rámci dohod o spolupráci i členům dalších odborných společností • Molekulární námět na obálce: M. Pojarová • Dáno do tisku 6.8.2008.