



Univerzita
Pardubice
Fakulta
chemicko-technologická

62. SJEZD ASOCIACÍ ČESKÝCH A SLOVENSKÝCH CHEMICKÝCH SPOLEČNOSTÍ

PARDUBICE

28. – 30. června 2010

pořádající organizace:

Asociace českých chemických společností

Asociácia slovenských chemických a farmaceutických spoločností

Fakulta chemicko-technologická Univerzity Pardubice

62. sjezd asociací českých a slovenských chemických společností se koná při příležitosti oslav šedesátého výročí vysokého školství v Pardubicích pod záštitou děkana Fakulty chemicko-technologické.

Čestné předsednictvo

Jaromír Lederer	předseda Asociace českých chemických společností a předseda České společnosti průmyslové chemie
Petr Lošťák	děkan Fakulty chemicko-technologické, Univerzity Pardubice
Jozef Kollár	čestný předseda Asociácie slovenských chemických a farmaceutických spoločností
Jitka Ulrichová	předsedkyně České společnosti chemické
Milan Drábik	předseda Slovenské chemické spoločnosti
Jaroslav Deml	primátor Statutárního města Pardubice
Miloš Revús	předseda Asociácie slovenských chemických a farmaceutických spoločností

Organizační výbor

Tomáš Wágner (předseda)
Helena Pokorná
Alena Vlková
Radmila Řápková
Karel Ventura
Petr Mikulášek
Ladislav Svoboda
Petr Kalenda
Miroslav Vlček
Roman Svoboda
Vítězslav Zima
Alena Komárková
Ludmila Vařeková
Miloslava Rolečková
Božena Frumarová

Vědecký výbor

Miloslav Frumar (předseda)
Jitka Ulrichová
Milan Drábik
Ivan Lukeš
Miloš Sedlák
Michal Holčapek
Petr Čársky
Miroslav Urban
Miroslav Vlček
Andrea Kalendová
Vilím Šimánek
Hana Čtrnáctová
Jiří Hanika
Libor Červenka
Grazyna Martynková
Petra Šulcová
Jaromíra Chýlková

Sekce sjezdu a jejich garanti

Anorganická chemie (včetně bioanorganické)

I. Lukeš

Organická chemie (včetně bioorganické a farmaceutické)

M. Sedlák

Analytická chemie (včetně bioanalytické)

M. Holčapek

Fyzikální, teoretická a počítačová chemie

P. Čársky, M. Urban

Anorganické, kompozitní a polymerní materiály (včetně organických polymerů)

Mir. Vlček, A. Kalendová

Přírodní látky (fytoceutika, biologická aktivita, fytofarmaka)

V. Šimánek

Chemické vzdělávání, historie a popularizace chemie

H. Čtrnáctová

Průmyslová chemie (ChemProgres)

J. Hanika

Potravinářská chemie (včetně doplňků stravy, nutraceutik)

L. Červenka

Nanotechnologie (nanomateriály a nanotechnologie materiálů-chemického směru)

G. S. Martynková (ve spolupráci s projektem TEAM CMV – OP VpK)

Termická analýza a kalorimetrie

P. Šulcová

Environmentální inženýrství

J. Chýlková

Vážení účastníci 62. sjezdu Asociací chemických společností, vážení čtenáři!

Červnové 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 62. sjezdem Asociací českých a slovenských chemických společností. Jeho organizací byla Českou společností chemickou pověřena pardubická pobočka a připravila jej ve spolupráci s Fakultou chemicko-technologickou, Univerzity Pardubice. 62. sjezd asociací českých a slovenských chemických společností se koná při příležitosti oslav šedesátého výročí vysokého školství v Pardubicích pod záštitou děkana Fakulty chemicko-technologické.

Sborník obsahuje abstrakta 420 příspěvků, z nichž bude předneseno 200 a 220 bude vystaveno formou plakátového sdělení. Příspěvky jsou rozděleny do 12 odborných sekcí a jednotlivé odborné sekce jsou v péči odborných garantů sekcí. Organizátoři sjezdu jmenovitě pozvali 5 plenárních přednášejících ze zahraničí, 40 českých a slovenských chemiků na zvané přednášky v rámci jednotlivých odborných sekcí, aby dokumentovali směry a výsledky chemického výzkumu v obou republikách a v dalších zemích.

Letošní jubilejní sjezd chemiků bude zahájen přednáškou profesora Michaela Gratzela (Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne), objevitele nového typu solárních článků založených na oxidických částicích, jejichž cílivosť je zvyšována barevnými organickými látkami. Pozvání přijali dále profesor Helmut Coelfen (Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Potsdam) významný odborník v oblasti hybridních anorganicko-organických materiálů, profesor Josef Michl (University of Colorado, Boulder a Ústav Organické chemie a biochemie AVČR, v.v.i.) Dr.h.c. Univerzity Pardubice, vynikající odborník na molekulární elektroniku, profesor Jacques Lucas (University of Rennes) člen francouzské akademie věd, Dr.h.c. Univerzity Pardubice a světově uznávaný expert v oboru neoxidických skel a profesor Herbert Roesky (University of Göttingen) světově uznávaný odborník v oblasti anorganické chemie a organokovových sloučenin. Všichni tito zahraniční odborníci mají vazbu na výzkumné směry pěstované na hostitelské instituci 62. sjezdu, fakultě chemicko-technologické, Univerzity Pardubice.

Hosty sjezdu bude také šest mladých polských chemiků. Jejich účast je na sjezdech chemických společností již více než 17letou tradicí a nesporně přispívá ke vzájemnému poznávání obou blízkých komunit chemiků.

Nad každou sekcí převzala patronát významná firma (SHIMADZU Handels GmbH, SIGMA-ALDRICH spol. s r. o., MERCI s.r.o., Merck spol. s r. o., Fisher Scientific, spol. s r. o., Fosfa a. s., ILABO spol. s r. o., Metrohrn Česká republika, Nicolet CZ s.r.o., SPECION s.r.o., NETZSCH) orientovaná na chemii a udělí ocenění vždy jednomu příspěvku v sekci.

Součástí programu sjezdu je i soutěž o CENU SHIMADZU, která také letos proběhne nejen před odbornou porotou, ale také před účastníky sjezdu. Konference národních chemických společností svou polytematicností mají význam jako fórum pro prezentaci nových výsledků vědeckých týmů, ale i vzájemnou inspiraci pro mezioborovou spolupráci. Jsou však nesporně i místem střetávání názorů na nové směry i výsledky výzkumu, setkání chemiků z různých generací a pracovišť, místem přátelských a odborných diskusí. Pardubice jako univerzitní město s mnohaletou kulturní historií, svou přívětivou pohostinností je připraveno přijmout účastníky 62. sjezdu. Věříme, že červnové číslo 104. ročníku Chemických listů bude svým obsahem takové, že se k němu budou čtenáři vracet ještě dlouho po skončení konference.

62. sjezd je svého druhu také přípravou na rok 2011, který vyhlásilo UNESCO Mezinárodním rokem chemie – IYC2011. Jeho hlavním mottem je „Chemistry our life, our future“ (blíže viz <http://www.chemistry2011.org>).

62. sjezd by měl být příležitost a výzvou pro všechny členy Společnosti a účastníky, jak více přiblížit a popularizovat chemii široké veřejnosti.

Přejeme všem účastníkům, aby si z pobytu v Pardubicích odnesli hezké vzpomínky, obnovili staré a vytvořili nové odborné i přátelské kontakty, tak nezbytné pro úspěšnou vědeckou i pedagogickou práci.

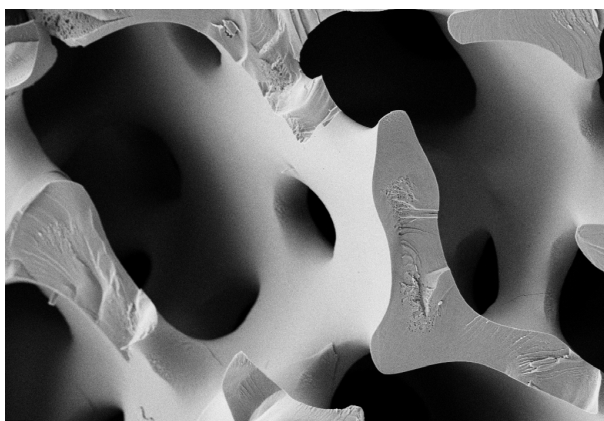
Tomáš Wágner
Miloslav Frumar

PL01
POLYMERS AND CRYSTALS –
A HAPPY MARRIAGE

HELMUT CÖLFEN^{a,b}

^a Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Colloid Chemistry, Am Mühlenberg, D-14424 Potsdam, ^b Universität Konstanz, Physical Chemistry, Universitätsstraße, D-78457 Konstanz

Biomaterials are remarkable materials with complex and often hierarchical structures (see image of sea urchin spine below) and superior physical properties compared to man made materials made at ambient conditions in aqueous environment. Biomaterials are organic-inorganic hybrid materials and the crystallization of the inorganic mineral is highly controlled by organic – usually polymeric additives. The formation processes of Biomaterials can be mimicked, which is the field of polymer controlled crystallization or bio-inspired mineralization. Polymers can have different and often multiple roles in a crystallization process. They can be a scaffold for mineral formation, complex ions, inhibit or enhance crystal nucleation, stabilize amorphous precursor faces, selectively adsorb on crystal faces changing their morphology, encode self organization of nanoparticles and many more. Examples for the various roles of polymers in crystallization processes to generate crystals with complex structures are given. Especially coding of nanoparticles by polymers for subsequent tailored aggregation of nanoparticles is an attractive new research field summarized as *Nonclassical Crystallization*. This crystallization path is based on nanoparticles instead of ions, atoms or molecules and offers new possibilities for the formation of crystals. These possibilities will be discussed too.



Microstructure of a sea urchin spine (Scanning electron micrograph). Although the spine has the properties of a single crystal, its morphology exhibits no crystal faces which are typical for single crystals.

PL02
MESOSCOPIC ELECTRODES FOR GENERATION
AND STORAGE OF ELECTRIC POWER FROM
SUNLIGHT

MICHAEL GRAETZEL

Laboratory of Photonics and Interfaces, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, CH-1015 Lausanne, Switzerland
 michael.graetzel@epfl.ch

The lecture covers our recent research on mesoscopic electrodes that made up of a network of nanometer-sized particles such as titanium dioxide, zinc oxide, tungsten trioxide, Fe_2O_3 or LiMnPO_4 . The pores between the particles are filled with an electrolyte or p-type semiconductor, in this way interpenetrating bicontinuous network composites are formed which are phase-separated by a hetero-junction. Electrons can percolate rapidly across the network of nanoparticles allowing the huge junction area to be addressed electronically. Intriguingly, cross surface electron and hole transfer in self-assembled monolayers (SAM) of redox-active molecules has also been observed. These mesoscopic oxide electrodes show great promise for a number of applications, such as high power lithium insertion batteries photo-electrochemical cells for solar hydrogen generation and dye-sensitized solar cells (DSCs). The DSC achieves currently a conversion efficiency of over 11 percent and exhibits excellent long term stability, rendering it a credible alternative to conventional silicon based devices. These new cells offers opportunities for applications in building integrated photovoltaic device and light weight solar power supplies. Recently large-scale production of flexible DSC modules has started.

REFERENCES

1. O'Regan B., Graetzel M.: Nature 353, 737 (1991).
2. Bach U., Lupo D., Comte P., Moser J. E., Weissörtel F., Salbeck J., Spreitzer H., Graetzel M.: Nature 395, 550 (1998).
3. Graetzel M.: Nature 414, 338 (2001).

PL03
GLASSES FOR SEEING BEYOND THE VISIBLE

JACQUES LUCAS

Glass and Ceramic Laboratory, Campus of Beaulieu University of Rennes, F 35042 Rennes

Our perception of the world is mainly due to the highly sophisticated optical performances of our eyes which allow us to sense the beauty of the so-called colours which extends from the blue to the red. This visible domain is just a very small part of the light spectrum which extends beyond the red, far to the infrared which is indeed the world of heat and the region of the vibrations signature of molecules.

In the last three decades tremendous progress has been accomplished towards visualizing this IR light by developing new glass optics as well as detectors playing the role of retina but operating beyond the visible The main strategic spectral

region is located around 10 μm where the atmosphere is transparent and which corresponds to the maximum emission of a thermal object at room temperature. The only glasses suitable for infrared optics are made from the chalcogens S, Se and Te associated to neighbours having the same electro negativity in order to produce polymeric glass forming network

IR lenses as well as IR optical fibres are now coming into the market for night vision system aiming at assistance in driving car in dark and foggy conditions as well as detecting hot objects.

The *in-situ* detection of molecules or bio-molecules using IR glass fibres have found applications in medicine and biology for the early detection of metabolism dysfunction, as well as in chemistry to elucidate some reactions mechanisms.

IR fibres with a specific optical configuration are also candidates in astronomy for detecting signs of life on earth like exoplanets.

Recent advances in infrared materials and devices with applications in night vision, medical and space applications as well as green house gas detection such as carbon dioxide will be presented.

PL04 MOLECULAR ROTORS AND BUBBLES

JOSEF MICHL^{a,b}

^a Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i., Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha, ^b Department of Chemistry and Biochemistry, University of Colorado, Boulder, CO 80309-01
michl@eeefus.colorado.edu

We describe the preparation of artificial dipolar molecular rotors of both azimuthal and altitudinal types, their mounting on surfaces, and characterization of the resulting structures by both spectroscopic and scanning microscopy techniques. The synthesis of the molecular rotors, which was initially performed using standard classical synthetic procedures, has more recently explored possibilities offered by molecular self-assembly followed by covalent stabilization.

We further describe attempts to arrange azimuthal dipolar rotors on a surface in a regular triangular array and to measure the barriers to rotation by methods of dielectric spectroscopy. The ultimate goal is a fabrication of an artificial ferroelectric film with minimal barriers to rotation and a controlled rate of propagation of an orientational wave front, which could be useful in nanoelectronics.

In the course of work on the project we noted that nitromethane solutions of certain self-assembled trigonal prismatic structures whose shape resembles an open trigonal tube have unusual properties that suggest that the tube contains a void, although it has space for a dozen solvent molecules and wide enough entrances for easy solvent access. The results have been modeled with methods of molecular dynamics. We propose that the behavior may have some generality and can be understood in terms of nanocapillarity.

PL05 INTERSTELLAR MOLECULES – MODELS FOR NEW CHEMISTRY

HERBERT W. ROESKY

University of Goettingen, Institute of Inorganic Chemistry, Tammannstrasse 4, 37077 Goettingen

The interstellar space is one of the most remarkable chemical laboratories. The existence of a number of species with low valent elements has been characterized by scientists from astrophysics. Therefore it is a challenge for a chemist to prepare compounds with low valent elements in the laboratory and study their chemistry.

We were able to prepare and study the chemistry of aluminum(I), silicon(I), silicon(II), germanium(I), germanium(II), and tin(II) compounds. The low valent state can be arrested by using sterically bulky ligands or base stabilizing procedures.

Methods for the preparation of compounds with the following composition $\text{NHC}\cdot\text{SiCl}_2$ (NHC = *N*-heterocyclic carbene), LSi(II)H (L = monovalent amidinate), LSi(II)F , LSi(I)-Si(I)L will be given, and their reactions with ketones, alkenes, partly- and per-fluorinated aromatics, 2,3-dimethylbutadiene, azobenzene, and diazo compounds are reported. In the case of germanium and tin the monohydrides of composition LM(II)H (L = β -diketiminato, M = Ge, Sn) have been prepared. Due to the larger radius of the M(II) in comparison with the M(IV) cations, the compounds show an increased reactivity. For example LGeH and LSnH react below room temperature with CO_2 under insertion into the metal-hydrogen bond. Comparable reactions with M(IV) species need an additional transition metal catalyst.

Furthermore, perfluorinated aromatics can be converted selectively to the monohydrides using Group 14 hydrides with low valent elements.

The X-ray structures and bonding properties of these new species will be discussed.

IIL-01 MAGNETS BASED UPON COORDINATION COMPOUNDS

ROMAN BOČA

*Institute of Inorganic Chemistry, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava
roman.boca@stuba.sk*

This report concerns low-nuclearity Ni(II) and Co(II) complexes that exhibit a magnetic ordering. Below a critical temperature T_C , the reported materials span the class of the molecule-based magnets.

Several magnetochemical techniques have been used in monitoring the magnetic properties. 1) The AC susceptibility mode scans the in-phase χ' (dispersion) and the out-of-phase χ'' (absorption) susceptibilities taken in a low field $\mu_0 H_{AC} = 3.8 \cdot 10^{-4}$ T. The latter is an indicator of the magnetic ordering as the transition temperature T_C refers to its maximum. When this maximum is frequency-dependent, the superparamagnetic behavior characteristic for the single-molecule magnets is proven. 2) The DC magnetization mode scans the isothermal magnetization M in two regimes: the field dependence of the magnetization taken at low temperature (usually $T_0 = 4.6$ or 2.0 K), and the temperature dependence of the magnetization taken at low field (usually $B_0 = 0.1$ T). The latter data used to be transformed to the magnetic susceptibility and effective magnetic moment, respectively. There are two standard procedures: the field-cooled magnetization – FCM (the sample is cooled under the small applied field, say $B_0 = 0.01$ T, and then the temperature-dependence of the magnetization is measured on the heating), and the zero-field cooled magnetization – ZFCM (the sample is cooled with the field switched off, at the lowest temperature a small field is applied, and then the data are taken in the heating regime). The intercept of the FCM/ZFCM curves indicates the ordering temperature T_C . Variable-field magnetization (VFM) is done at low temperature until the maximum available field B_{max} . Below T_C , the magnetic hysteresis can be detected by sweeping the field as $0 \rightarrow B_{max}$ (“virgin curve”) $\rightarrow 0$ (remnant magnetization M_r) $\rightarrow B_{max} \rightarrow 0 \rightarrow B_c$ (coercive field, when $M = 0$) $\rightarrow B_{max}$.

The dinuclear Ni(II) complex, $[(L^4)Ni(tcM)_2Ni(L^4)](ClO_4)_2 = \mathbf{I}$, consists of the tetradentate blocking ligand L^4 , and two tricyanomethanide bridges (Fig. 1). There is a weak ferro-magnetic exchange interaction well visible by monitoring the effective magnetic moment on cooling ($J/hc = +0.15$ cm^{-1})¹. However, the complex **I** shows: 1) a peak on the out-

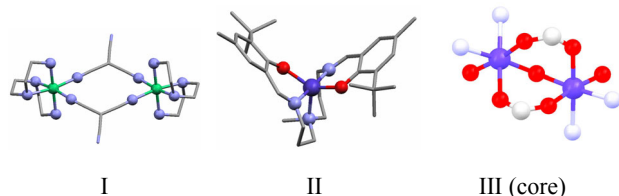


Fig. 1. Structure of **I**, **II** and **III** with highlighted donor set

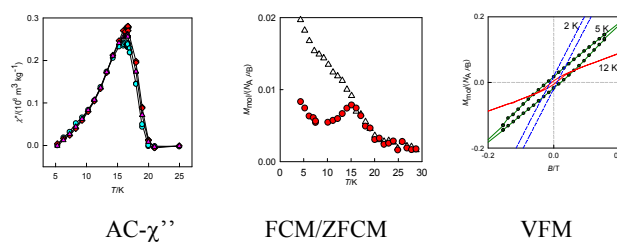


Fig. 2. Magnetic data for **I** showing $T_C = 16$ K

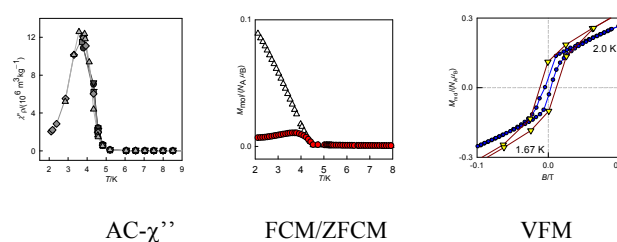


Fig. 3. Magnetic data for **II** showing $T_C = 4$ K

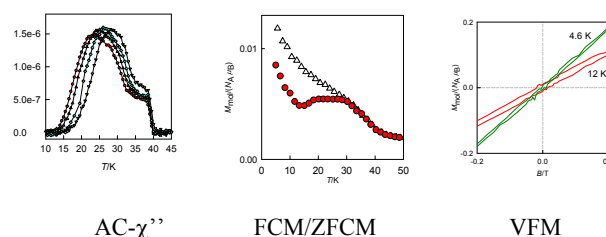


Fig. 4. Magnetic data for **III** showing $T_C = 30$ K

of-phase AC susceptibility at $T_C = 16$ K that is frequency independent, 2) the FCM/ZFCM intercept, and 3) the magnetic hysteresis below 12 K (Fig. 2). Therefore it can be regarded as a molecule-based magnet.

The mononuclear Co(II) complex based upon a pentadentate Schiff-base ligand, $[CoL^5] = \mathbf{II}$, orders at $T_C = 4$ K (Fig. 3)².

The dinuclear Co(II), aqua-bridged benzoato complex $[\mu_2-OH_2, (\mu_2-PhCOO)_2 \{Co(PhCOO-\kappa^1-O)(Mefupy-\kappa^1-N)_2\}_2] = \mathbf{III}$, contains methylfuro[3,2-*c*]pyridine (*Mefupy*). It belongs to the molecule-based magnetic materials ordered at temperature as high as $T_C = 30$ K (Fig. 4)³. Since the maximum at the out-of-phase AC susceptibility is frequency dependent, the complex is a kind of the single molecule magnet. A unique property of this system is that its ground state is diamagnetic, $S = 0$; on temperature propagation the magnetoactive states are populated. The hysteresis loop is open even at $T = 20$ K.

This work is supported by the Slovak grant agencies (VEGA 1/0213/08, APVV 0006-07, VVCE 0004-07).

REFERENCES

1. Boča R., Gembický M., Herchel R., Haase W., Jäger L., Wagner C., Ehrenberg H., Fuess H.: *Inorg. Chem.* 42, 6965 (2003).
2. Herchel R., Boča R.: *Dalton Trans.* 2005, 1352.
3. Boča R., Krutošíková A., Dlhán L., Moncol J.: submitted.

IIL-02

ANORGANICKÉ INHIBITORY HIV-PROTEASY

JAROMÍR PLEŠEK^a, VÁCLAV ŠÍCHA^a, VLADIMÍR KRÁL^b, PETR CÍGLER^{b,c}, MILAN KOŽÍŠEK^c, JANA POKORNÁ^c, PAVLÍNA ŘEZÁČOVÁ^c, JAN KONVALINKA^c, HANS-GEORG KRÄUSSLICH^d a BOHUMÍR GRÜNER^{a*}

^a Ústav anorganické chemie AV ČR, v.v.i., Řež 1001, 250 68 Řež, ^b Ústav analytické chemie, VŠCHT Praha, 166 28 Praha 6, ^c Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i., Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6, ^d Dpt. of Virology, Univ. Heidelberg, Neuenheimer Feld 324, 691 20 Heidelberg gruner@iic.cas.cz

Použití metalla bis(dikarbolidů)(1-) [(C₂B₉H₁₂)₂-M(III)] v medicíně se dosud omezovalo jen na případy, v nichž byly tyto klastrové molekuly využity jako inertní nosiče boru v borové neutronové záchytové terapii (BNCT), radiačně značené a kontrastní látky pro diagnostiku, nebo k elektrochemickému či paramagnetickému značení fragmentů DNA.

K nedávným významným výsledkům v této oblasti, k nimž přispěli autoři z ÚACh designem a syntézou účinných látek, patří objev možného využití anorganických látek na bázi metallakarboranových sendvičových komplexů jako virostarik pro léčbu AIDS. Tento objev vznikl v rámci rozsáhlé mezioborové spolupráce s týmy z ÚOCHB AV ČR, VŠChT Praha a University Heidelberg. Jak bylo prokázáno, vhodně substituované metalla bis(dikarbolidy)(1-) mohou sloužit jako specifické a účinné inhibitory HIV proteasy, virového enzymu, který je nezbytný pro zrání infekčních částic HIV¹⁻³. Metallakarboranové inhibitory jsou schopny účinně zablokovat replikaci viru, neinhibují jiné enzymy a nejsou toxické pro savčí buňky. Ze strukturálních studií bylo zjištěno, že se tyto sloučeniny váží do aktivního místa enzymu zcela novým, ojedinělým způsobem, což vysvětluje skutečnost, že jsou účinné i proti rezistentním mutantům virových proteas, izolovaným z HIV-pozitivních pacientů dlouhodobě léčených jinými typy inhibitorů^{1,3}.

Přednáška je zaměřena především na syntetické postupy použité při optimalizaci struktury aktivních látek a založené na výsledcích předchozího i současného systematického studia reakcí na skeletu metalla bis(dikarbolidů) na ÚACh. Klíčovým výsledkem po léta probíhajícího základního výzkumu reakcí je preparativní dostupnost metallakarboranových strukturálních bloků substituovaných vhodnými reaktivními skupinami. Ty byly přímo využity ke konstrukci více než dvou set doposud testovaných molekul s různě složitými strukturami. Dosud nejúčinnější inhibitory obsahují dva iontové klastry kobalt bis(dikarbolidu), které jsou propojeny s centrální amoniou skupinou pomocí dvou identických či rozdílných

linkerů. Na příkladech bude prezentováno, jak změny ve struktuře, stereochemii a celkovém náboji výsledné iontové částice ovlivňují biologickou aktivitu a mohou změnit i mechanismus inhibice (kompetitivní na nekompetitivní či a- kompetitivní). Výsledky budou diskutovány s ohledem na nedávné pokroky ve studiu chování těchto látek v roztoku, v testech inhibiční aktivity a ve strukturálních studiích.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA AV ČR IAAX00 320901 a výzkumného záměru MŠMT AV0Z40320502.

LITERATURA

1. Cígler P., Kožíšek M., Řezáčová P., Brynda J., Otwinowski Z., Pokorná J., Plešek J., Grüner B., Dolečková-Marešová L., Máša M., Sedláček J., Bodem J., Krausslich H. G., Král V., Konvalinka J.: *PNAS* 102, 15394 (2005).
2. Kožíšek M., Cígler P., Lepšík M., Fanfrlík J., Řezáčová P., Brynda J., Pokorná J., Plešek J., Grüner B., Grantz-Šašková K., Václavíková J., Krausslich H. G., Král V., Konvalinka J.: *J. Med. Chem.* 51, 4839 (2008).
3. Řezáčová P., Pokorná J., Brynda J., Kožíšek M., Cígler P., Lepšík M., Fanfrlík J., Řezáč J., Grantz-Šašková K., Siegllová I., Plešek J., Šícha V., Grüner B., Oberwinkler H., Sedláček J., Krausslich H. G., Hobza P., Král V., Konvalinka J.: *J. Med. Chem.* 52, 7132 (2009).

IIL-03

PŘEHLÍŽENÉ IONTY KOVŮ: GALLITÉ A SKANDITÉ KOMPLEXY PRO BIOMEDICÍNSKÉ APLIKACE

PETR HERMANN

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Hlavova 2030, 128 40 Praha 2 petrh@natur.cuni.cz

Radioizotopy kovů nabízejí nukleární medicíně větší škálu možných využití než nejčastěji aplikované diagnostické izotopy ¹⁸F a ^{99m}Tc. Kovové radionuklidy mohou být použity jak k diagnostickým účelům (emise γ -záření – metoda SPECT; emise pozitronů – metoda PET), tak pro terapii (emise částic schopných ničit okolní tkáň; většinou záření β^-). Pro *in vivo* použití musí být radionuklidy vázány do stabilních komplexů. Cílená radiofarmaka mají izotop kovu komplexován polydentátním organickým ligandem a přes tento ligand je komplex navázán na molekulu zajišťující řízenou biodistribuci (např. oligopeptid, protilátka nebo její fragment, vitamin, oligonukleotid atd.). V nukleární medicíně jako polydentátní ligandy nejčastěji vystupují polyaminopolykarboxylové kyseliny nebo jejich deriváty a analoga. Ligand musí zajistit (i) vysokou termodynamickou stabilitu komplexu (komplexace veškerého přítomného radioizotopu); (ii) selektivitu pro daný ion kovu (především vůči iontům mateřského/dceřinného izotopu); (iii) rychlý vznik komplexu za radiochemických podmínek (velice nízké koncentrace reaktantů) a už při laboratorní teplotě; (iv) vysokou kinetickou inertnost komplexu (v přítomnosti konkurenčních ligandů a/nebo iontů kovů, nižší/vyšší pH roztoku atd. musí chemický rozklad komplexu probíhat co nejpomaleji). Poslední parametr je nejpodstatnější

pro aplikace těchto komplexů *in vivo*.

Mezi kovovými prvky existují radioizotopy vhodné pro PET, které mohou být pokládány za alternativu k cyklotronovému a relativně drahému ^{18}F ($\tau_{1/2}$ 110 min, β^+ 97 %, E_{av} 243 keV): především ^{44}Sc ($\tau_{1/2}$ 3,9 h, β^+ 94 %, E_{av} 597 keV), ^{64}Cu ($\tau_{1/2}$ 12,7 h, β^+ 18 %, E_{av} 49 keV) a ^{68}Ga ($\tau_{1/2}$ 70 min, β^+ 89 %, E_{av} 740 keV). Izotop ^{64}Cu je také produkovan v cyklotronu, ale jeho cena postupně klesá. Další dva izotopy jsou generátorové. Generátor $^{68}\text{Ge}/^{68}\text{Ga}$ je komerčně dostupný a cena jedné dávky ^{68}Ga už mnohonásobně poklesla vůči situaci před několika lety; v některých aplikacích už ^{68}Ga úspěšně konkuruje ^{18}F . Izotop ^{44}Sc se jeví jako velice perspektivní (z hlediska $\tau_{1/2}$ a energie záření) a generátor $^{44}\text{Ti}/^{44}\text{Sc}$ by měl být v budoucnu dostupný¹.

Ga^{3+} a ještě více Sc^{3+} jsou ionty, jejichž koordinační chemie ve vodných roztocích nepatří k dobře prozkoumaným. Komplexy polydentálních ligandů nebyly studovány takřka vůbec a především zcela chybí metodika pro zjišťování konstant stability a sledování kineticky (de)komplexace a/nebo věrohodná data pro tyto veličiny. Tento příspěvek se bude zabývat koordinační chemií těchto iontů jak s základními ligandy používanými pro komplexaci kovových radionuklidů (H_5dtpa a H_4dota), tak s ligandy odvozenými od 1,4,7-triazacyklononanu (makrocyclus označovaný jako „tacn“; ligandy $\text{H}_6\text{PrP9}$ a $\text{H}_3\text{notp}^{\text{R}}$). Budou prezentována jak roztoková data a mechanistické aspekty (spolu technikou práce), tak struktury v pevné fázi.

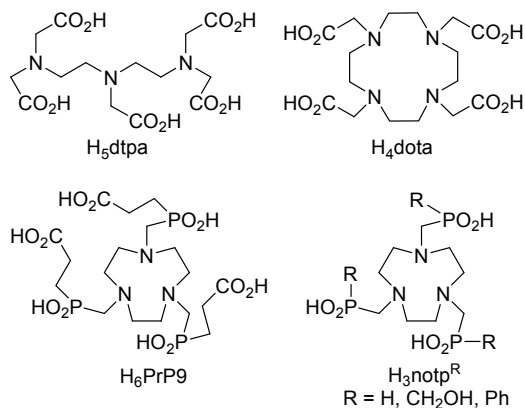


Schéma 1. Struktury diskutovaných ligandů

Ve všech komplexech má Ga^{3+} deformované oktaedrické okolí. Tyto komplexy jsou plně vytvořeny už v silně kyselém prostředí, a proto lze jejich stabilitu ($\log K_{\text{GaL}}$ 23–29)^{2,3} zjistit jen díky konkurenci s ionty OH^- . Komplexace v kyselém (vznik $[\text{Ga}(\text{L})]^{n-}$ z aquaiontu) a dekomplexace alkalickém (rozklad $[\text{Ga}(\text{L})]^{n-}$ na $[\text{Ga}(\text{OH})_4]^-$) prostředí je pomalá (až několik týdnů při laboratorní teplotě) s výjimkou $\text{H}_6\text{PrP9}$, jehož komplex vzniká v kyselém prostředí takřka okamžitě^{2,3}. V případě derivátů tacn bylo v kyselém prostředí možné sledovat vznik komplexů Ga^{3+} v čase a ukázalo se, že tyto komplexy vznikají kvantitativně dokonce už při pH 0–1, ale různou rychlostí². Prakticky okamžitý vznik komplexu $[\text{Ga}(\text{PrP9})]^{3-}$ byl prokázán i za radiochemických podmínek (beznošičové ^{68}Ga)². Rozklad komplexů $[\text{Ga}(\text{dota})]^-$ v kyselém prostředí (0,1–2 M HCl) je podstatně pomalejší ($\tau_{1/2}$ 12 dnů, pH 0, 25 °C)³ než u obdobných komplexů Ln^{3+} . U kom-

plexů Ga^{3+} s deriváty tacn nedochází v kyselině (sledováno > 6 měsíců, 6 M HClO_4 , 25 °C) k rozkladu vůbec².

Komplexy trojmocného skandia s H_5dtpa a H_4dota jsou oktakoordinované. V roztoku byly tyto komplexy zkoumány vůbec poprvé. Jejich konstanty stability jsou extrémně vysoké ($\log K_{\text{ScL}} \sim 28$) a jsou tedy o ~ 3 řády vyšší než u jejich komplexů $\text{Y}^{3+}/\text{Ln}^{3+}$. Úplný vznik komplexu $[\text{Sc}(\text{dota})]^-$ při pH 3–5 a 25 °C trvá jen několik dnů, tj. potřebná doba je podstatně kratší než u komplexů $\text{Y}^{3+}/\text{Ln}^{3+}$ - H_4dota (týdny). Komplex $[\text{Sc}(\text{dota})]^-$ je při pH 0–1 kineticky inertnější ($\tau_{1/2} \sim 60$ h, pH 0, 25 °C) než jsou komplexy H_4dota s trojmocnými lanthanoidy (několik hodin)

Tato práce vznikla za podpory grantů GAČR (203/09/1056), AV ČR (KAN201110651) a MŠMT (MSM0021620857 a program Barrande) a v rámci evropských projektů COST D38 a BM607.

LITERATURA

1. Filosofov D. V., Loktionova, N. S., Rösch F.: *Radiochim. Acta* 98, 149 (2010).
2. Notni J., Hermann P., Havlíčková J., Kotek J., Kubiček V., Plutnar J., Loktionova N. S., Riss P. J., Rösch F., Lukeš I.: *Chem. Eur. J.* 16 (2010), přijato do tisku.
3. Kubiček V., Havlíčková J., Kotek J., Hermann P., Tóth Ě., Lukeš I.: zasláno do *Dalton Trans.* 39 (2010).

1L-01**PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE VANADO-CENOVÝCH KOMPLEXŮ S AMINOKYSELINAMI OBSAHUJÍCÍMI SEKUNDÁRNÍ AMINOSKUPINU****TEREZA DĚDOURKOVÁ, JAROMÍR VINKLÁREK
a JAN HONZÍČEK***Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
terca.d@post.cz*

Interakce vanadocendichloridu a 1,1'-dimethylvanadocendichloridu s aminokyselinami obsahujícími sekundární aminoskupinu poskytuje tři strukturní typy komplexů (Schéma 1), kde dochází ke koordinaci:

A) jedné molekuly aminokyseliny chelátovým typem vazby pomocí atomu dusíku aminoskupiny a atomu kyslíku karboxylové skupiny,

B) dvou molekul aminokyselin monodentátním typem vazby prostřednictvím atomů kyslíku jejich karboxylových skupin,

C) jedné molekuly aminokyseliny chelátovým typem vazby přes oba atomy kyslíku karboxylové skupiny.

V komplexech s L-prolinem a N-methylglycinem byly získány typy vazeb A) a B), zatímco N-fenylglycin tvořil s vanadocenovým fragmentem pouze komplex typu C).

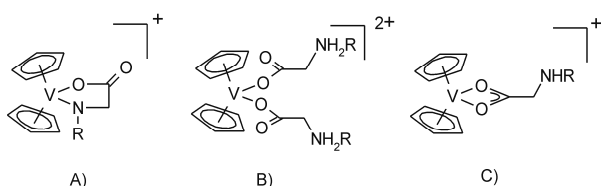


Schéma 1. Nalezené typy vazebných interakcí

Podářilo se izolovat 11 zcela nových vanadocenových komplexů, které byly charakterizovány pomocí vhodných analytických a spektroskopických metod. V případě sedmi komplexů, zahrnujících všechny tři strukturní typy, byly připraveny monokrystaly vhodné pro rentgenostrukturní analýzu.

Připravené a izolované komplexy jednoznačně potvrdily možnost vazebné interakce metalocenového fragmentu se sekundárními aminokyselinami jako vhodného modelového systému pro možnou interakci s peptidy. Výsledky této práce napomáhají popsat předpokládaný mechanismus účinku cytostaticky aktivních metalocenů inhibicí DNA procesních enzymů (proteinkináza C a topoizomeráza II)¹, nebo transportních bílkovin (transferin)^{2,3}.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru (MSM 0021627501).

LITERATURA

1. Kuo L. Y., Liu A. H., Marks T. J., v knize: *Metal Ions in Biological Systems*, kap. 33, s. 85. Marcel Dekker, New York 1996.

2. Nishida Y., Niinuma A., Abe K.: *Inorg. Chem. Commun.* 12, 198 (2009).
3. Du H., Xiang J., Zhang Y., Tang Y., Xu G.: *J. Inorg. Biochem.* 102, 146 (2008).

1L-02**VARIOUS APPROACHES TO SYNTHESIS OF FLUOROSULPHURIC PHASES CONTAINING MIXED-VALENT SILVER +1/+2****TOMASZ MICHAŁOWSKI***Faculty of Chemistry, University of Warsaw, Pasteura 1, 02-930 Warsaw
tmichalowski@chem.uw.edu.pl*

Ag(I)2Ag(II)(SO₃F)₄, a mixed-valent silver +1/+2 fluorosulphate first postulated by F. Aubke in 1978 (ref.¹) is reported to show antiferromagnetic properties with a high Neel temperature of 240 K. It has been theoretically predicted, that it could act as a precursor in the synthesis of a high-temperature superconductor based on silver compounds by the means of electron or hole doping². The compound itself has been only slightly characterized in literature for the time being.

Attempts of synthesis of the compound were made using a number of methods. Those included controlled thermal decomposition of a previously synthesized from commercial silver (II) fluoride and fluorosulphuric acid silver (II) fluorosulphate, reactions of silver fluorides with sulphur trioxide in a number of solutions, partial reduction of silver (II) fluorosulphate using a number of reducing agents and partial oxidation of silver (I) fluorosulphate.

Products of the reactions were characterized using a number of methods including simultaneous thermal analysis – thermogravimetric analysis coupled with differential scanning calorimetry and evolved gas analysis (TGA/DSC/EGA), mid and far infrared (MIR, FIR) and Raman spectroscopy, X-ray powder diffraction, magnetometry, combustion elemental analysis and traditional wet analytical methods.

Some of the attempted methods were unsuccessful in obtaining Ag(I)2Ag(II)(SO₃F)₄ but resulted in a better characterization of silver (II) fluorosulphate including possible crystallographic structures, reactivity and thermal decomposition paths.

Recent results show a high possibility of a successful synthesis of a mixed-valent compound.

REFERENCES

1. Leung P. C., Aubke F.: *Inorg. Chem.* 17, 1765 (1978).
2. Grochala W., Hoffman R.: *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* 40, 2742 (2001).

1L-03

SUPRAMOLEKULOVÉ SYNTÓNY AKO PROSTRIEDOK ZVYŠOVANIA DIMENZIONALITY KARBOXYLÁTOMEĎNATÝCH KOMPLEXOV

JÁN MONCOL^{a,*}, MARIA KORABIK^b a DUŠAN VALIGURA^a

^a Oddelenie anorganickej chémie, ÚAChTaM, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ^b Fakulta Chémie, Univerzita Wrocław, Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław
jan.moncol@stuba.sk

Komplexy prechodných kovov s ligandami vytvárajúci mi vodíkové väzby sú objektom záujmu aj ako stavebné bloky supramolekulových sietí s potenciálnym použitím v rôznych oblastiach ako sú optické, alebo magnetické materiály¹. V niektorých prípadoch karboxylátomeďnatých komplexov bol pozorovaný systém vodíkových väzieb, ktorý ovplyvňuje magnetické vlastnosti príslušných látok². Podobné supramolekulové syntóny boli pozorované aj v prípade iných karboxylátomeďnatých komplexov vykazujúcich supramolekulovú izomériu³. Pri štúdiu karboxylátomeďnatých komplexov s použitím aniónov rôznych derivátov kyseliny benzoovej a salicylovej boli pripravené jednojadrové a dvojjadrové komplexy nezvyčajného rozličného zloženia a štruktúry ale s podobnými magnetickými vlastnosťami^{4,5}, ktoré sú dôsledkom magnetických výmených interakcií podmienených špecifickými supramolekulovými syntónami. Tieto syntóny majú za následok vznik supramolekulových dimérov⁴ pospájaním monomérnych, a supramolekulových reťazcov⁵ pospájaním symetrických dimérnych komplexov cez vodíkové väzby. Pri systematickom štúdiu boli pripravené aj ďalšie jednojadrové⁶ a dvojjadrové karboxylátomeďnaté komplexy vykazujúce podobný systém vodíkových väzieb. Okrem toho bol pripravený a štruktúro-magnetickochemicky analyzovaný celý rad aj 1-D koordinačných polymérov, ktoré sú pospájané prostredníctvom podobných supramolekulových syntónov do vrstiev a vykazujú podobné magnetické vlastnosti.

Tato práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0562/10.

LITERATÚRA

1. Beatty A. M.: *Coord. Chem. Rev.* 246, 131 (2003).
2. Yamada Y., Ueyama N., Okamura T., Mori W., Nakamura A.: *Inorg. Chim. Acta* 275-276, 43 (1998).
3. Abourahma H., Moulton B., Kratsov V., Zaworotko M. J.: *J. Am. Chem. Soc.* 124, 9990 (2002).
4. Vasková Z., Moncol J., Korabik M., Valigura D., Švorec J., Lis T., Valko M., Melník M.: *Polyhedron* 29, 154 (2010).
5. Valigura D., Moncol J., Korabik M., Púčeková Z., Lis T., Mroziński J., Melník M.: *Eur. J. Inorg. Chem.* 2006, 3813.
6. Wołodkiewicz W., Brzyska W., Głowiak T.: *Monatsh. Chem.* 129, 111 (1998).

1L-04

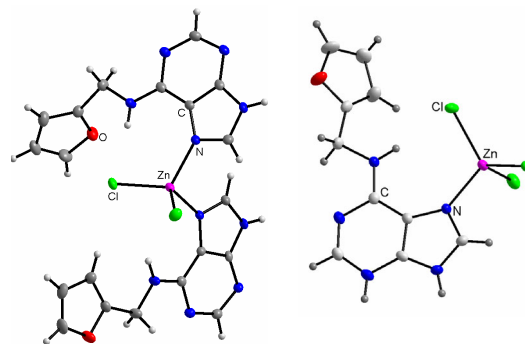
KINETIN A JEHO DERIVÁTY JAKO LIGANDY V KOMPLEXECH ZINKU A MEĎI

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

^a Katedra anorganické chémie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, ^b Ústav přírodních léčiv, Farmaceutická fakulta, Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, Palackého 1/3, 612 42 Brno
zdenek.travnicek@upol.cz

Kinetin (N6-furfuryladenin, kin) je prokázaným antioxidantem s výraznými antisenescentními¹ a jinými zajímavými biologickými účinky. Syntéza komplexů vybraných přechodných kovů s biologicky zajímavými organickými látkami, jako je kinetin, je motivována možným nárůstem této biologické aktivity u připravených komplexních sloučenin ve srovnání se samotným ligandem².

Tato práce se zabývá syntézou a charakterizací Zn(II) a Cu(II) komplexů s kinetinem a jeho deriváty. Důsledkem různých reakčních podmínek (reakční teplota, čas, pH, výchozí sůl) použitých v syntézách byly získány komplexní sloučeniny různých strukturních typů, přičemž způsob koordinace kinetinu a jeho derivátů a struktura Zn(II) a Cu(II) komplexů budou diskutovány v rámci prezentace. Komplexy byly plně charakterizovány elementární analýzou, infračervenou, Ramanovou, ¹H a ¹³C NMR spektroskopií, TGA/DTA termickou analýzou, vodivostními měřeními, rentgenostrukturní analýzou (viz obrázek 1) a v případě Cu(II) komplexů navíc elektronovou spektroskopií a magnetochemickými měřeními. Byla zkoumána cytotoxicita komplexů na buňkách *Nicotiana tabacum* BY-2 a dále vliv komplexů na proces mitózy u zmíněných buněk.



Obr. 1. Struktura komplexů [ZnCl₂(kin)₂] (vlevo) a [ZnCl₃(Hkin)] (vpravo)

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM6198959218.

LITERATURA

1. Rattan S. I. S.: United States Patent, No. 5,371,089 (1994).
2. Štarha P., Trávníček Z., Herchel, R., Popa I., Suchý P., Vančo J.: *J. Inorg. Biochem.* 103, 432 (2009).

1L-05

SPINOVÉ PRECHODY V KOOPERATÍVNYCH
DVOJJADROVÝCH SYSTÉMOCH S VÝMENNOU
INTERAKCIOUJÁN PAVLIK^{a*}, AZZEDINE BOUSSEKSOU^b, ROMAN
BOČA^a, IVAN NEMEC^a a RADOVAN HERCHEL^c

^a Ústav anorganické chémie, technológie a materiálov, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ^b Laboratoire de Chimie de Coordination, GDR Magnétisme et Commutation Moléculaires, Centre National de la Recherche Scientifique, 205, route de Narbonne 31077, Toulouse, Francúzsko, ^c Katedra anorganické chémie, Přírodovědecká Fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc
jan.pavlik@stuba.sk

Krivky spinového prechodu (angl. spin crossover) pri dvojjadrových komplexoch sú tvarovo bohatšie ako pri jednojadrových komplexoch. Dané je to predovšetkým možnosťou rozdielného vzájomného ovplyvňovania sa centier cez a mimo mostíkov.

Základný model Isingovho typu pre dvojjadrové komplexy s nerovnakými centrami, ktoré interagujú kooperatívne so svojim okolím aj medzi sebou navzájom¹, bol doplnený o člen zahŕňajúci izotropnú magnetickú výmennú interakciu medzi centrami. Pre prípad dvojjadrového d^6 systému – napr. Fe(II) – s rovnakými centrami má navrhovaný hamiltonián v aproximácii stredného poľa tvar

$$\hat{H}_{AB} = \frac{\Delta_{\text{eff}}}{2} (\hat{\sigma}_A + \hat{\sigma}_B) +$$

$$+ J (\langle \sigma_A \rangle \hat{\sigma}_A + \langle \sigma_B \rangle \hat{\sigma}_B) +$$

$$+ J' (\langle \sigma_A \rangle \hat{\sigma}_B + \langle \sigma_B \rangle \hat{\sigma}_A) +$$

$$+ J_{AB} (\hat{\sigma}_A \hat{\sigma}_B) -$$

$$- J_{EX} \hat{S}_A \cdot \hat{S}_B$$

kde J je parameter medzimolekulovej interakcie kooperatívnej povahy medzi rovnakými centrami, J' podobne ale medzi rozdielnymi centrami, J_{AB} je mierou vnútrómolekulovej interakcie a J_{EX} je výmenná interakcia medzi centrami. Riešením je sústava dvoch pomerne zložitých previazaných rovníc vyjadrujúcich zastúpenie spinových stavov na jednotlivých centrách ako funkciu teploty.

Model bol použitý na interpretáciu správania sa niektorých komplexov.

Táto práca vznikla vďaka podpore medzivládneho rámcového programu COST.

LITERATÚRA

1. Bousseksou A., Varret F., Nasser J.: J. Phys. I France 3, 1463 (1993).

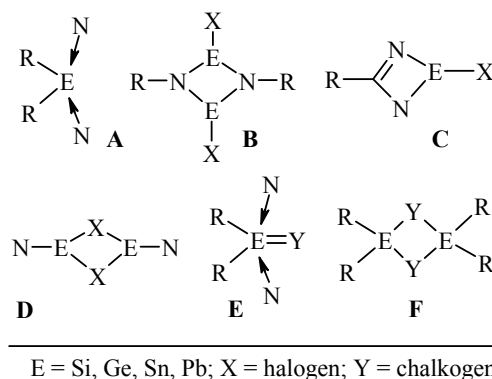
1L-06

SROVNÁNÍ CHEMIE RŮZNÝCH TETRYLENŮ

HANA VAŇKÁTOVÁ, TOMÁŠ CHLUPATÝ, ROMAN
OLEJNÍK, ZDEŇKA PADĚLKOVÁ a ALEŠ RŮŽIČKA

Katedra obecné a anorganické chémie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
ales.ruzicka@upce.cz

V rámci příspěvku bude diskutována struktura a reaktivita různých typů vyšších kongenerů karbenů (obr. 1).



Obr. 1. Typy diskutovaných tetrylenů

Tato práce vznikla za finanční podpory grantu GA AV ČR (KJB401550802).

1L-07

PŘÍPRAVA A REAKTIVITA
HYPER-KOORDINOVANÝCH FOSFINIMINŮ

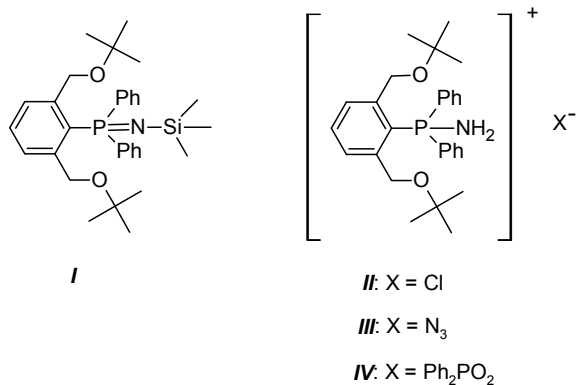
TOMÁŠ ŘEZNIČEK a ROMAN JAMBOR

Katedra obecné a anorganické chémie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
tomas_reznicek@yahoo.com

V poslední době se dostává do popředí zájem o studium vlastností a využití skupiny látek obsahujících násobnou vazbu mezi atomy dusíku a fosforu – fosfiniminů. Tyto sloučeniny jsou zajímavé z hlediska jejich využití jako polymeračních prekurzorů¹, stejně jako např. v případě přípravy poly(dichlorofosfazenů)², jež jsou základními meziprodukty v přípravě většiny vysokomolekulárních organofosfazenů³. Dalším velmi zajímavým jevem je snadná metallace těchto sloučenin za tvorby ylidů⁴, jež jsou vysoce nukleofilními činidly snadno reagujícími s různými elektrofilmi.

Naším cílem bylo připravit fosfiniminovou sloučeninu obsahující O,C,O-chelatující ligand obecného vzorce (O,C,O)Ph₂P=NSiMe₃, s ohledem na další studium reaktivity. Jako zajímavé a dále využitelné se jeví hydrolyzní produkty, tedy

fosfinimoniové sloučeniny **II-IV**, jejichž vznik je silně závislý na reakčních podmínkách. Tyto fosfinimoniové sloučeniny snadno podléhají metallaci a tvoří s elektrofilními sloučeninami jak kovalentní, tak i donor-akceptorové vazby N-M (M = kov).



Tento projekt je podpořen grantem SG300001.

LITERATURA

1. Montague R. A., Matyjaszewski K.: *J. Am. Chem. Soc.* **112**, 6721 (1990).
2. Mark J. E., Allcock H. R., West R.: *Inorganic Polymers*; Prentice Hall: Englewood Cliffs, New Jersey 1992.
3. Honeyman H. Ch., Manners I.: *J. Am. Chem. Soc.* **117**, 7035 (1995).
4. Rahier N. J., Volle J. N., Lacour A. M., Taillefer M.: *Tetrahedron*. **64**, 6654 (2008).

1L-08

SYNTHESIS, SPECTRAL AND MAGNETIC PROPERTIES AND CRYSTAL STRUCTURES OF CARBOXYLATECOPPER(II) COMPLEXES WITH N-HETEROCYCLIC LIGANDS

PETER SEGĽA, VLADIMÍR KUČTANIN, PETRA POLAKOVIČOVÁ, DUŠAN MIKLOŠ, JÁN MONCOL, and JOZEF ŠVOREC

*Department of Inorganic Chemistry, Slovak Technical University, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
peter.segla@stuba.sk*

Copper(II) carboxylates are very interesting compounds with pharmacological activities. These compounds can have anti-inflammatory, anti-arthritis, anti-cancer, anti-diabetic, antimutagenic, antimicrobial or cytogenic effects.

Preparation, spectral properties, magnetic properties, crystal structures as well as biological activity of pyridine-carboxylatecopper(II) complexes have been described in our several previous papers¹⁻³. Spectral, magnetic and structural characterization of the prepared complexes is important to understand the relations between their structure and biological activity.

In the present work, there have been studied spectral

(IR, electronic and EPR) and magnetic properties, as well as crystal structures of Cu^{II} complexes with 2-tiophenecarboxylic acid (2-tpcH), 3-methyl-2-tiophenecarboxylic acid (3-Me-2-tpcH), 5-methyl-2-tiophenecarboxylic acid (5-Me-2-tpcH), 2-furancarboxylic acid (2-fucH), 5-nitro-2-furancarboxylic acid (5-NO₂-2-fucH) or 5-bromo-2-furancarboxylic acid (5-Br-2-fucH) as well as their molecular adducts with *N*-heterocyclic ligands pyridine (py), nicotinamide (nia), isonicotinamide (isonia), ethylnicotinate (Etnic), *N,N*-diethylnicotinamide (Et₂nia), 3-hydroxymethylpyridine (3-pyme) and 4-hydroxy-methylpyridine (4-pyme) are reported.

Structural varieties of the complexes (monomers, dimers and polymers) are possible mainly due to various modes of carboxylates as well as *N*-heterocyclic ligands coordination (ionic, monodentate, bridging or chelating).

It may be summarized that a number of monomeric compounds with deformed tetragonal-bipyramidal structure, pentacoordinated with tetragonal-pyramidal structure, dimeric compounds as well as polymeric compounds have been prepared.

This work was financially supported by the Grants 1/4454/07 and 1/0353/08 of the Slovak Grant Agency for Science.

REFERENCES

1. Jašková J., Mikloš D., Korabik M., Jorík V., Segľa P., Kaliňáková B., Hudecová D., Švorec J., Fischer A., Mrozinski J., Lis T., Melník M.: *Inorg. Chim. Acta* **359**, 2711 (2007).
2. Segľa P., Mikloš D., Jašková J., Miklovič J., Kaliňáková B., Hudecová D., Švorec J., Lis T., Melník M.: *J. Coord. Chem.* **61**, 3763 (2008).
3. Segľa P., Miklovič J., Mikloš D., Mrázová V., Krupková L., Hudecová D., Ondrušová Z., Švorec J., Moncol J., Melník M.: *Trans. Met. Chem.* **34**, 15 (2009).

1L-09

KARBOSILANOVÉ DENDRIMERY FUNKCIONALIZOVANÉ CYKLOPENTADIENYLOVÝMI KOMPLEXY TITANU

TOMÁŠ STRAŠÁK* a JAN ČERMÁK

*Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Rozvojová 2, 165 02 Praha 6 - Suchbátka
strasak@icpf.cas.cz*

Dendrimery představují zvláštní typ makromolekulárních sloučenin, jejichž struktura je, na rozdíl od polymerů, přesně kontrolována během syntézy, volbou vhodně definovaných větvičích a prodlužovacích kroků. Široká škála postupů jejich modifikace a kombinace umožňuje přípravu makromolekul s požadovanými fyzikálně-chemickými vlastnostmi pro různorodé aplikace¹.

Karbosilanové dendrimery využívají křemíku jako větvičícího prvku mezi uhlíkatými řetězci. Vzniká tak molekula s dobrou stabilitou a bez nežádoucích interakcí s funkčními skupinami jiných sloučenin v systému. Nabízí se využít je jako nosiče různých funkčních molekul (homogenní katalyzátory atd.)². Karbosilanové dendrimery jsou připravovány

převážně tzv. divergentní syntézou, kdy se postupuje od středu molekuly k periférii. V našem případě byl jádrem dendrimery teraarylsilan nebo tetraarylsilan. Dvojící reakčních kroků: hydrosilylace dvojně vazby a alkenylace Si-Cl vazby Grignarovým činidlem, byla získána molekula požadované generace a větvení.

Dále byla pozornost zaměřena na ukotvení komplexů přechodných kovů na karbosilanové dendrimery. Oblastí zájmu jsou především cyklopentadienylové komplexy titanu, které jsou vhodným modelem pro optimalizaci syntézy. Připojení komplexu je realizováno pomocí cyklopentadienylového ligandu s vhodným spacerem, jehož délku je možno měnit a tím modifikovat flexibilitu připojených komplexů. Hydrosilylace jako reakční krok pro toto připojení je vhodný, neboť nevznáší do produktu žádný heteroatom, který by případně mohl interagovat s periferně uloženými komplexy. Byly zkoumány obě možnosti této reakce tj. přítomnost dvojně vazby na dendrimery a Si-H funkční skupiny na titaničitém komplexu i obrácená varianta.

Tato práce vznikla za podpory Centra základního výzkumu LC06070 MŠMT ČR.

LITERATURA

- Fréchet J. M., Tomalia D. A.: *Dendrimers and Other Dendritic Polymers*. John Wiley, New York 2002.
- Oosterom G. E., Reek J. N. H.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 40, 1828 (2001).
- Seyferth D., Son Y. D., Rheingold A. L., Ostrander R. L.: *Organometallics* 13, 2682 (1994).

1L-10

DETAILED EPR STUDY AND SOD-LIKE ACTIVITY OF COPPER (II) COMPLEXES WITH SELECTED NSAID LIGANDS

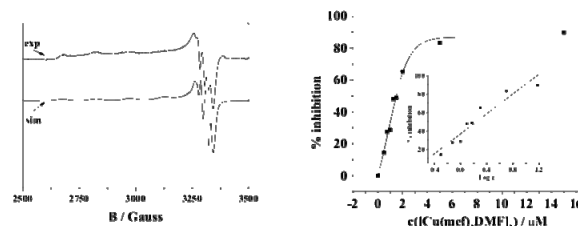
JOZEF SVOREC^a, DANA DVORANOVÁ^b, MILAN MAZÚR^b, VLASTA BREZOVÁ^b, MILAN MELNÍK^a, and MARIAN VALKO^b

^a Department of Inorganic Chemistry, Slovak Technical University, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ^b Department of Physical Chemistry, Slovak Technical University, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
jozef.svorec@stuba.sk

Many copper (II) complexes with different kind of ligands include aminoacids, peptides, sulfonamides or salens have been proposed as SOD-like compounds^{1,2}. Moreover, several copper complexes of non-steroidal anti-inflammatory drugs (NSAID) also exhibit superoxide scavenger activity *in vitro*³.

In the present work, a variety of Cu (II) complexes with mefenamic, niflumic, flufenamic acid and diclofenac have been investigated using EPR spectroscopy in solid state as well as in DMSO/DMF solutions at different temperatures. Furthermore, superoxide dismutase mimetic activity of the complexes has been measured using standard nitro-blue tetrazolium (NBT) assay. The studied complexes demonstrated the superoxide dismutase (SOD)-like activity in an enzymatically

superoxide anion-generating system, with IC₅₀ values in the low micromolar range.



Using EPR technique in combination with UV-Vis spectroscopy, the structure of the presented complexes in the solution is analyzed in detail and related to its high SOD activity.

This work was financially supported by the Grants 1/0353/08 and 1/0575/08 of the Slovak Grant Agency for Science.

REFERENCES

- Pogni R., Barrato M. C., Busi E., Basosi R.: *J. Inorg. Biochem.* 73, 157 (1999).
- Goodman B. A., Palivan C. G., Palivan H., Tomas S.: *App. Magn. Reson.* 25, 13 (2003).
- Weder J. E., Dillon C. T., Hambley T. W., Kennedy B. J., Lay P. A., Biffin J. R., Regtop H. L., Davies N. M.: *Coord. Chem. Rev.* 232, 95 (2002).

1L-11

IN VITRO CYTOTOXICITA Pt(II) A Pd(II) OXALATO A CYKLOBUTAN-1,1-DIKARBOXYLATO KOMPLEXŮ S N-DONOROVÝMI LIGANDY NA BÁZI N6-BENZYL-9-ISOPROPYLADENINU

PAVEL ŠTARHA^a, LUKÁŠ DVORÁK^a, ZDENĚK DVORÁK^b a ZDENĚK TRÁVNÍČEK^a

^a Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, ^b Katedra buněčné biologie a genetiky, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc
zdenek.travnicek@upol.cz

Platnaté oxalato a cyklobutan-1,1-dikarboxylato komplexy představují významnou skupinu látek, která má díky *oxaliplatině*, *karboplatině*, *nedaplatině* a *lobaplatině* využití v klinické onkologické praxi při léčbě různých typů lidských nádorů¹. Uvedené látky jsou odvozeny od prvního, a stále nejpoužívanějšího, chemoterapeutika na bázi platiny, kterým je *cisplatina*. Jak je patrné, skupina platnatých protirakovinových léčiv je poměrně bohatá, nicméně užívání těchto léků s sebou nese nežádoucí vedlejší účinky (např. nefrotoxicita, neurotoxicita, ototoxická). Stále tedy vznikají nové komplexy platiny i jiných přechodných kovů (Ru, Ti, Pd atd.) s cílem eliminovat tyto nežádoucí účinky a/nebo navýšit aktivitu nově připravených komplexů vůči již užívaným.

Mezi takovými sloučeninami lze počítat i zde prezentované Pt(II) a Pd(II) oxalato (ox) a cyklobutan-1,1-dikarboxylato

(cbdc) komplexy s deriváty *N*6-benzyl-9-isopropyladeninu (L_n) o složení $[Pt(ox)(L_n)_2]$, $[Pt(cbdc)(L_n)_2]$ a $[Pd(ox)(L_n)_2]$. Tyto látky byly charakterizovány dostupnými fyzikálně chemickými metodami včetně ESI+ hmotnostní spektrometrie, vícejaderné a 2D NMR spektroskopie a monokrystalové rentgenové strukturní analýzy. Jedná se o jednojaderné čtvercové komplexy s centrálním atomem koordinovaným bidentátně vázaným *O*-donorovým karboxylátovým dianionem (ox, cbdc) a dvěma molekulami derivátu *N*6-benzyl-9-isopropyladeninu vázanými přes atomy *N*7 adeninového kruhu.

U připravených komplexů byla detailně studována *in vitro* cytotoxická aktivita vůči lidským nádorovým liniím, konkrétně pak rakoviny vaječníků (A2780), rakoviny vaječníků rezistentní k *cisplatině* (A2780cis), maligního melanomu (G361), prsního adenokarcinomu (MCF7), plicního karcinomu (A549), osteosarkomu (HOS) a negroidního karcinomu epitelu děložního čípku (HeLa). Zástupci všech tří typů komplexů byly v testech výrazně aktivnější ve srovnání s *cisplatinou*. Tyto látky byly navíc v *in vitro* testech na lidských hepatocytech prokázány jako netoxické vůči jaterním buňkám člověka, což zvyšuje pravděpodobnost jejich využití jako možných protinádorových léčiv.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM6198959218.

LITERATURA

1. Kelland L. R., Farrell N. P., v knize: *Platinum-Based Drugs in Cancer Therapy*. Humana, Totowa 2000.

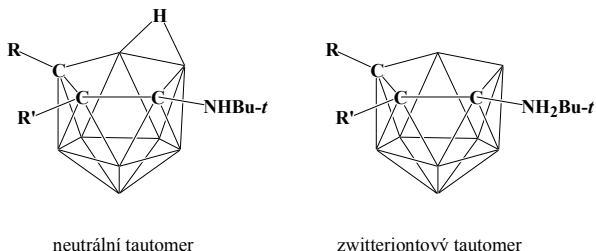
1P-01

PŘÍPRAVA C-SUBSTITUOVANÝCH *t*-BuNH-8,9-R,R'-*nido*-7,8,9-C₃B₈H₉ (R,R' = H,H; Me,H; Me,Me; Ph,H A Ph,Ph) TRIKARBOLLIDOVÝCH SLOUČENIN A JEJICH TAUTOMERNÍ PŘEMĚNY. EFEKT SUBSTITUENTŮ NA TAUTOMERNÍ ROVNOVÁHU MEZI NEUTRÁLNÍ A ZWITTERIONTOVOU FORMOU

MARIO BAKARDJIEV^a, JOSEF HOLUB^a, BOHUMIL ŠTÍBR^a a IVANA CÍSAŘOVÁ^b

^a Ústav anorganické chemie, AV ČR, v.v.i., 250 68 Řež u Prahy, ^b Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030, 128 40 Praha mario@iic.cas.cz

Reakci C-substituovaných *nido*-dikarbadekaboranů 5,6-R,R'-5,6-C₂B₈H₁₀ (kde R,R' = H,H; H,Me; Me,Me; H,Ph; a Ph,Ph) s 1,8-bis-(dimethylamino)naphthalenem (Proton Sponge = PS) a *t*-BuNC v CH₂Cl₂ s následným okyselením byla získána série neutrálních látek obecného vzorce 7-*t*-BuNH-8,9-R,R'-*nido*-7,8,9-C₃B₈H₉ (kde R,R' = H,H; H,Me; Me,Me; H,Ph a Ph,Ph), která vykazuje tautomerii¹. Rozpuštění těchto látek v protických rozpouštědlech, jako jsou CH₃CN a aceton, vede k tautomerní rovnováze s zwitteriontovými tautomery 7-*t*-BuNH₂-8,9-R, R'-*nido*-7,8,9-C₃B₈H₈, zatímco nesubstituovaná látka vykazuje absolutní tautomerii a 100% konverzi v zwitteriontový tautomer. Tautomerní chování jednotlivých látek je proto ovlivněno povahou substituentů, jak bylo stanoveno NMR spektroskopii. Jednotlivé tautomery byly charakterizovány ¹¹B a ¹H NMR spektroskopii a struktura monometylovaného neutrálního tautomeru byla určena X-ray difrakční analýzou.



Tato práce vznikla za podpory MŠMT ČR - LC 523.

LITERATURA

1. Bakardjiev M., Holub J., Hnyk D., Císařová I., Londeborough M. G. S., Perekalin D. S., Štíbr B.: *Angew. Chem., Int. Ed.* 44, 6222 (2005).

1P-02

OBJASNENIE GENÉZY ŠTRUKTÚRY MONTMORILLONITU HYDROTHERMÁLNOU SYNTÉZOU

VLADIMÍR ŠTEFAN FAJNOR^{a*}, PETER BILLIK^a, MILAN DRÁBIK^{a,b} 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 fajnor@fns.uniba.sk

Prvé práce venované experimentálnemu štúdiu podmienok úspešnej syntézy ílových minerálov sa začínajú objavovať v tridsiatych rokoch minulého storočia. Podmienky hydrotermálnej syntézy montmorillonitu uverejnil W. Noll v roku 1936. V päťdesiatych rokoch naviazali na tieto práce R. Roy a E. F. Osborn a prvá práca z našej katedry je z roku 1973 (L. Kuchta, J. Masár). Cieľom týchto syntéznych prác bola príprava montmorillonitu požadovaného chemického zloženia a predpokladaných vlastností. Objasneniu mechanizmu syntézy montmorillonitu sa zatiaľ nevenovala pozornosť.

Ako je známe, základnú štruktúrnú jednotku smektitov tvoria dve nepretržité siete tetraédrov s centrálnymi kremíkovými atómami, medzi ktorými je uložená jedna oktaedrická sieť s centrálnymi atómami hliníka čiastočne substituovanými atómami horčíka. Siete tetraédrov a oktaédrov majú spoločné atómy kyslíka.

Analýza výsledkov výskumu (RTG difrakčná analýza, IČ spektroskopía a metódy termickej analýzy) produktov hydrotermálnej syntézy montmorillonitu za zvyčajných podmienok (teplota 300 °C a tlak 8,8 MPa) po jednom, dvoch, troch a siedmich dňoch syntézy nás do veľkej miery oprávňuje k vyvodu záveru, že v prvej fáze syntézy vznikajú siete tetraédrov a neúplné siete oktaédrov, pričom sa vytvára kryštalová štruktúra v smere osí *a* a *b*. (Na RTG záznamoch dominujú difrakcie (hk0) a sú potlačené difrakcie (00l)). V druhej fáze sa konštituuje štruktúra v smere osí *c* a kompletizujú sa OH skupiny v oktaedrickej sieti. (Na DTA a DTG krivkách vzrastá intenzita pík prislúchajúcich dehydroxylácii montmorillonitu; podobne vibácie IČ spektier). V závere syntézy sa kompletizuje štruktúra trojvrstvi vymeniteľnými kationmi umiestnenými do ditrigonálnych medzier sietí tetraédrov. (Ohrevom minerálu nad teplotu 1000 °C kryštalizujú prvé vysokoteplotné fázy, čo dokumentuje exotermický pík na DTA krivkách s maximom pri teplote 1070 °C). Iste nie je bez zaujímavosti konštatovanie, že pri mechanicko-chemickej deštrukcii kryštalovej štruktúry montmorillonitu (v procese suchého vibračného mletia) má tento proces opačný sled krokov a ako posledné sa amorfizujú¹ siete tetraédrov SiO₄⁴⁻.

Tato práca vznikla za podpory grantu LPP-0372-09.

LITERATÚRA

1. Hrachová J., Madejová J., Billik P., Komadel P., Fajnor V. Š.: *J. Colloid Interf. Sci.* 316, 589 (2007).

1P-03**HYDROTERMÁLNA SYNTÉZA MONTMORILLONITU
ZO SYSTÉMU OXIDOV KREMIČITÉHO,
HLINITÉHO, HOREČNATÉHO A TITANIČITÉHO**

Venované 70. výročiu Prírodovedeckej fakulty UK
v Bratislave (1940 – 2010)

VLADIMÍR ŠTEFAN FAJNOR

Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta Uni-
verzity Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava
fajnor@fns.uniba.sk

Prítomnosť TiO₂ vo vzorkách prírodného montmorillonitu možno vysvetliť buď tak, že vzorka nie je monominerálna a obsahuje TiO₂ ako prímes, ktorá sa nedá oddeliť bežnými separačnými postupmi, alebo ako dôsledok substitúcie Ti[IV] za Al[III] v oktaedrických pozíciách kryštálovej štruktúry tohto ílového minerálu. Z tohto dôvodu sa študoval vznik hydrotermálnych produktov v systéme oxidov kremičitého, hlinitého, horečnatého a titaničitého pri podmienkach optimálnych pre syntézu dioktaedrického smektitu montmorillonitu: teplota 300 °C, tlak vodnej pary 8,8 MPa, doba syntézy (v autokláve s objemom 0,1 dm³) 145 hodín. Východiskové zmesi sa pripravili pridaním vodných roztokov dusičnanov hlinitého a horečnatého ku koloidnému oxidu kremičitému a následne sa pridal roztok chloridu titaničitého v HCl, resp. roztok oxalátotitaničitanu amónneho. Za stáleho miešania sa suspenzia vyzrážala vodným roztokom amoniaku a vzniknutý gél sa dôkladne premyl. Produkt sa vysušil a prípadne aj vyžíhal pri teplote 600 °C. Uskutočnilo sa 18 syntéz s rôznym chemickým zložením východiskových zmesí.

V prípade 16 vzoriek sa pomocou RTG fázovej analýzy ukázalo, že vzniknutý montmorillonit obsahuje aj prímes anatasu. Len v dvoch prípadoch sa získal dobre vykryštalizovaný monominerálny montmorillonit (bez RTG difrakcií TiO₂). Podrobnejšie štúdium pomocou elektrónovej mikroskopie však ukázalo, že v týchto dvoch vzorkách sú veľmi zriedkavé kubické častice anatasu, ako aj tetragonálne častice rutilu. Možno teda predpokladať, že Ti[IV] sa ako heterovalentná izomorfná substitúcia v štruktúre montmorillonitu nevyskytuje, ale chemická analýza nám zachytáva ťažko detegovateľnú prímes modifikácií TiO₂ v montmorillonite.

1P-04**SOME STRUCTURAL ASPECTS OF MONONUCLEAR
AND BINUCLEAR COPPER(II) IONIC COMPOUND
CONTAINING SCHIFF BASE**

**VRATISLAV LANGER^a, PAVOL MACH^b, DALMA
GYEPESOVÁ^{b*}, LUCIA ANDREZÁLOVÁ^c,
and MÁRIA KOHÚTOVÁ^d**

^a Environmental Inorganic Chemistry, Department of Chemical and Biological Engineering, Chalmers University of Technology, SE-41296 Göteborg, ^b Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, ^c Institute of Medical Chemistry, Biochemistry and Clinical Biochemistry, Faculty of Medicine, Comenius University, 811 08 Bratislava, ^d Department of Chemical Theory

of Drugs, Faculty of Pharmacy, Comenius University, 832 32 Bratislava
uachgyep@savba.sk

Recently, considerable attention has been devoted to the group of copper(II) complexes containing Schiff bases, derived from salicylaldehyde and various amino acids, and *N*-, or *O*- donor neutral ligands due to their interest in many fields of bioinorganic chemistry. From this group of substances the structures of (*N* – salicylidene – *rac* – glutamato) (1-methylimidazole) Cu(II)¹, (*N* – salicylidene – *rac* – glutamato) (2-methylimidazole) Cu(II)², aqua (*N*-salicylidene-methylester-L-glutamato) Cu(II) monohydrate³ and dimeric (isoquinoline) (*N* – salicylidene – *rac* – glutamato) copper (II) ethanol solvate⁴ have been determined. In continuation of these studies is a new complex *trans*-bis(ethanol)tetrakis(imidazole)Cu(II)(2+)bis[μ-(*N*-salicylidene-D,L-glutamato-*N,O*)-κO:κO'-(imidazole) Cu(II)](2-) presented here.

This complex has quite spectacular structural features. The cation is mononuclear, while the anion is binuclear. The anion has square-pyramidal copper(II) coordination defined by the tridentate *N*-salicylidene-*rac*-glutamato Schiff base dianion and the monodentate neutral imidazole ligand bound in the basal plane. The axial position is occupied by the phenolic oxygen from an adjacent chelate forming a centrosymmetric dimer. The cation display a slightly distorted octahedral coordination. A consistency between electronic structure investigated by the B3LYP method and X-ray data was found. The more detailed discussion of the structural features of this novel type of Cu(II) complex containing Schiff base will be presented.

Financial support of this work by the Scientific Grant Agency (VEGA, Slovak Academy of Sciences, Bratislava, project No 2/150/09) is gratefully appreciated.

REFERENCES

- Langer V., Scholtzová E., Gyepesová D., Kohútová M., Valent A.: Acta Cryst. E59, m1181 (2003).
- Langer V., Scholtzová E., Gyepesová D., Kohútová M., Valent A.: Acta Cryst. E60, m129 (2004).
- Langer V., Gyepesová D., Scholtzová E., Mach P., Kohútová M., Valent A., Smrčok E.: Z. Kristallogr. 219, 112 (2004).
- Langer V., Gyepesová D., Kohútová M., Valent A.: Acta Cryst. C65, m208 (2009).

1P-05**KOMPLEXY PRÍRODNÝCH POLYFENOLOV**

LADISLAV HABALA* a ANNETTE ROMPEL

Institut für Biophysikalische Chemie, Universität Wien,
Althanstr. 14, 1090 Wien
Ladislav.Habala@univie.ac.at

Flavonoidy sú dôležitou kategóriou prírodných látok. Sú produktami sekundárneho metabolizmu rastlín, kde zastávajú rôzne funkcie. Tieto látky vykazujú široké spektrum biologickej aktivity: fungujú ako vychytávače voľných radikálov

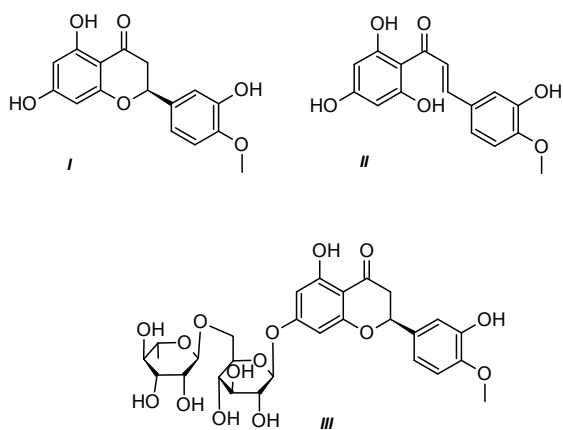


Schéma 1. Hesperetín I, hesperetín chalkón II a hesperidín III

a majú protivírusové, protizápalové, protirakovinové a protibakteriálne účinky.

Flavonoidy v rastlinnom organizme vystupujú ako účinné komplexanty pre kationy kovov. Tvorba komplexov s kovmi súvisí aj s ich funkciou ako antioxidantov a podieľa sa na detoxikácii týchto kovov¹.

V našej práci sa zaoberáme interakciou flavonoidov s kationmi viacerých kovových prvkov, ako napr. Cu, Mn, Fe, Pb, Hg, Cd, Ga, V a pod. Flavonoidy sa v prírode spravidla vyskytujú vo forme svojich glykozidov, ktorých chemické a biochemické vlastnosti sa môžu značne líšiť od aglykónov. Z tohoto dôvodu sa zaoberáme tak prípravou komplexov s voľnými flavonoidmi (aglykónmi), ako aj s ich glykozidmi, a takisto i s biochemickými prekurzormi flavonoidov – chalkónmi. Tieto tri fenolové deriváty sú vyobrazené v Schéme 1 pre flavonoid hesperetín. Pripravené komplexy sú charakterizované analytickými a fyzikálno-chemickými metódami, a v perspektíve i testované na svoju biologickú účinnosť, najmä protirakovinové vlastnosti.

Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG).

LITERATÚRA

1. Grazul M., Budzisz E.: *Coord. Chem. Rev.* 253, 2588 (2009).

1P-06

VYUŽITIE MEZOPÓROVITEJ SILIKY SBA-16 AKO MATRICE PRE KONTROLOVANÉ UVOLŇOVANIE INDOMETACÍNU

DÁŠA HALAMOVIÁ* a **VLADIMÍR ZELENÁK**

*Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, 041 54 Košice
dasa.halamova@upjs.sk*

Mezopórovité materiály sú predmetom intenzívneho vedeckého výskumu kôli ich unikátnym vlastnostiam. Vďaka ich veľkosti pórov (2–50 nm), pravidelnému usporiadaniu

a vinikajúcim adsorpčným schopnosťam, sú mezopórovité materiály vhodnými kandidátmi na použitie v rôznych oblastiach. Ich využitie spadá najmä do oblasti adsorpcie, katalýzy, chromatografie a adsorpcia plynov^{1,2}. Okrem týchto aplikácií sa skúma aj použitie mezopórovitých materiálov ako nosičov liečiv (drug delivery systems).

Ako prvá sa touto problematikou zaoberala M.V. Regí so svojou vedeckou skupinou. Študovali uzatváranie a uvoľňovanie ibuprofenu, amoxicilínu a gentamicínu do mofifikovaného aj nemodifikovaného mezopórovitého materiálu MCM-41, SBA-15 (cit.^{3–5}).

V tejto práci bolo študované uzatvorenie a následné uvoľnenie liečiva s analgetickým a antipyretickým účinkom indometacínu z mezopórovitého materiálu s kubickou štruktúrou SBA-16. Tento mezopórovitý materiál bol modifikovaný aminopropylóvymi ligandami (A-SBA-16) a hematitovými nanočasticami (Fe-SBA-16). Indometacín bol uvoľňovaný do fyziologického roztoku (0,9 % NaCl) z nemodifikovaného materiálu SBA-16/indo a modifikovaných materiálov A-SBA-16/indo a Fe-SBA-16/indov v presne definovaných časových intervaloch 1, 3, 5, 7, 24, 30, 48, 72 h. Množstvo uvoľneného liečiva bolo stanovené TLC chromatografiou s denzitometrickou detekciou.

Výsledky ukázali, že po 72 hodinách uvoľňovania, množstvo uzavretého liečiva predstavovalo 91 % v prípade SBA-16/indo, 63 % pre vzorku A-SBA-16/indo a 67,8 % pre Fe-SBA-16/indo. Všetky pripravené materiály boli charakterizované adsorpciou-desorpciou dusíka, SAXS, WAXS, FT-IR spektroskopiou a termogravimetriou. Magnetické vlastnosti materiálu Fe-SBA-16 boli merané SQUID magnetometrom.

Táto práca vznikla za podpory grantu APVV-6RPEU-0027-06.

LITERATÚRA

1. Zhang W. H., Lu J., Han B., Li M., Xiu J., Jing P., Li C.: *Chem. Mater.* 14, 3413 (2002).
2. Yang C. M., Sheu H.S., Chao K. J.: *Adv. Func. Mater.* 12, 143 (2002).
3. Regí M. V., Rámila A., Real R. P., Pariente J. P.: *Chem. Mater.* 13, 308 (2001).
4. Doadrio A. L., Sousa E. M. B., Doadrio J. C., Pariente J. P., Barba I. I., Regí M. V.: *J. Control. Release* 97, 125 (2004).
5. Regí M. V., Doadrio J. C., Doadrio A. L., Barba I. I., Pariente J. P.: *Solid State Ionics* 172, 435 (2004).

1P-07

VODÍKOVÉ VÄZBY V KOORDINAČNÝCH ZLÚČENINÁCH Cu(II) S FLUORIDO ANIÓNMI A N-METYLDERIVÁTMI ETÁN-1,2-DIAMÍNU

JAROSLAVA HANÍKOVÁ*, **JURAJ KUCHÁR**
a **JURAJ ČERNÁK**

*Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzešova 11, 041 54 Košice
jaroslava.hanikova@student.upjs.sk*

V rámci štúdia vodíkových väzieb ako potenciálnych výmenných ciest magnetických interakcií^{1,2} sa reakciou CuF₂

s *bmen* (*bmen* = *N,N'*-dimetyl-etán-1,2-diamín) pripravila nová látka $[\text{Cu}(\text{bmen})_2(\text{H}_2\text{O})_2]\text{F}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (**1**). Pripravená látka bola charakterizovaná chemickou prvkovou analýzou, IČ a UV-VIS spektroskopiou. V kryštálovej štruktúre **1** je atóm Cu(II) koordinovaný deformovane oktaedricky v tvare 4+2 v ekvatoriálnej rovine dvoma molekulami chelátového liganda *bmen* (hodnoty Cu–N sú 2,0264(2), resp. 2,0507(2)), kým axiálne polohy obsadzujú atómy kyslíka akva ligandov (Cu–O je 2,6693(3) Å). Kryštálová štruktúra **1** je stabilizovaná intramolekulovými vodíkovými väzbami typu N–H...O a bohatou sieťou intermolekulových vodíkových väzieb typov N–H...O a O–H...F, ktoré vedú k trojrozmernému usporiadaniu katiónov $[\text{Cu}(\text{bmen})_2(\text{H}_2\text{O})_2]^{2+}$ so vzdialenosťami Cu(II)...Cu(II) 6,5995(5), 8,2790(5) a 8,9517(7) Å. Analýzou teplotnej závislosti magnetickej susceptibility **1** (2–300 K) podľa Curie-Weisssoho zákona sa získali hodnoty Weisssovej konštanty $\theta = 1,0084(1)$ K a efektívneho magnetického momentu $\mu_{\text{eff}} = 2,03 \mu_{\text{B}}$. Výsledky sa diskutujú.

Za finančnú podporu ďakujeme grantom APVV 0006-07, VEGA 1/0089/09 a VVGS 37/09-10.

LITERATÚRA

- Ruiz-Perez C., Rodriguez-Martin Y., Molina M. H., Delgado F. S., Pasan J., Sanchiz J., Lloret F., Julve M.: *Polyhedron* 22, 2111 (2003).
- Orendáčová M., Kajňaková M., Černák J., Park J. H., Čížmár E., Orendáč M., Vlček A., Kravtchyna O. V., Anders A. G., Feher A., Meisel M. W.: *Chem. Phys.* 309, 115 (2005).

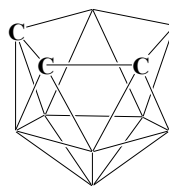
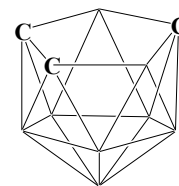
1P-08

DVĚ NOVÉ STRUKTURY MATEŘSKÝCH TRIKARBABORANOVÝCH ANIONTŮ

JOSEF HOLUB^a, BOHUMIL ŠTÍBR^a
a ALEŠ RŮŽIČKA^b

^a Ústav anorganické chemie, AV ČR, v.v.i., 250 68 Řež u Prahy, ^b Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
holub@iic.cas.cz

Možné syntézy zwitteriontových sloučenin 7-L-*nido*-7,8,9-C₃B₈H₁₀ (kde L = H₂N⁽⁻⁾, Me₃N a Bu⁺NH₂) jsou popsány z reakcí aniontu $[\text{nido-5,6-C}_2\text{B}_8\text{H}_{11}]^{(-)}$ s kyanidy alkalických kovů nebo s alkylisokyanidy RNC (např. R = Bu⁺). Deaminace Me₃N derivátu vedla k prvnímu nesubstituovanému 11ti vrcholovému trikarbaboranu¹ *nido*-7,8,9-C₃B₈H₁₂ a jeho aniontu $[\text{nido-7,8,9-C}_3\text{B}_8\text{H}_{11}]^{(-)}$. Zahřívání Cs⁽⁺⁾ soli tohoto aniontu na 350 °C vede ke vzniku izomerního aniontu $[\text{nido-7,8,10-C}_3\text{B}_8\text{H}_{11}]^{(-)}$. Obě dvě struktury aniontů byly určeny X-ray difrakční analýzou.

7,8,9-C₃B₈H₁₁⁽⁻⁾7,8,10-C₃B₈H₁₁⁽⁻⁾

Tato práce vznikla za podpory MŠMT ČR - LC 523.

LITERATURA

- Štíbr B., Holub J., Teixidor F., Viñas C.: *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 7, 795 (1995).

1P-09

Cu-Ni HETEROBIMETALICKÉ KOORDINAČNÉ ZLÚČENINY NA BÁZE KYANIDO LIGANDOV

IVANA KOČANOVÁ*, JURAJ ČERNÁK
a JURAJ KUCHAR

Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesova 11, 041 54 Košice
ivana.kocanova@gmail.com

V rámci nášho štúdia molekulových magnetov na báze Cu-Ni heterobimetalických zlúčenín¹ sa zo sústav Cu(II) – *bpy* – $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$ (*bpy* = 2,2'-bipyridín) izolovali dve nové zlúčeniny $[\text{Cu}(\text{bpy})_2(\text{CN})_2][\text{Ni}(\text{CN})_4] \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ (východiskový molárny pomer 1:3:1) (**1**) a $[\text{Ni}(\text{bpy})_3][\text{Cu}(\text{CN})_3] \cdot 4,5 \text{H}_2\text{O}$ (1:2:1) (**2**). Výsledky chemickej prvkovej analýzy, infračervenej spektroskopie a štruktúrnej analýzy ukázali, že v zlúčenine **1** koordinácia jedného kyanido liganda na atóm Cu(II) viedla k vzniku zriedkavého komplexného katiónu $[\text{Cu}(\text{bpy})_2(\text{CN})]^{+}$ s pentakoordinovaným atómom medi a k stechiometrii Cu:Ni v pomere 2:1. Uvedený katión bol doteraz popísaný iba v zlúčenine $[\text{Cu}(\text{bpy})_2(\text{CN})](\text{NO}_3) \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$ (cit.²). Súčasne pri príprave zlúčeniny **2** došlo v matečnom lúhu vzhľadom na zloženie reaktantov k výmene ligandov viazaných na centrálné atómy, čo vyústilo do vzniku komplexného katiónu $[\text{Ni}(\text{bpy})_3]^{2+}$ a redukcie Cu(II) na Cu(I) prítomnými kyanido skupinami za vzniku diamagnetického komplexného aniónu $[\text{Cu}(\text{CN})_3]^{2-}$. V oboch iónových kryštálových štruktúrach sa nachádzajú nekoordinované molekuly vody, ktoré sa zapájajú do tvorby vodíkových väzieb typov O–H...O a O–H...N. Výsledky sa diskutujú.

Táto práca vznikla za podpory grantov APVV-0006-07, VEGA 1/0089/09 a VVGS 37/09-10.

LITERATÚRA

- Kuchar J., Černák J., Sabová I., Kappenstein Ch., Kajňaková M., Orendáč M., Boča R.: *Solid State Sciences* 11, 950 (2009).
- Tyagi S., Hathaway B. J.: *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* 1983, 199.

1P-10
SUPRAMOLEKULOVÉ ŠTRUKTÚRY
NITROBENZOÁTOMEĎNATÝCH KOMPLEXOV
S 2,6-PYRIDÍNIMETANOLOM

JAROSLAVA MAROSZOVÁ^{a*}, ZUZANA VASKOVÁ^a,
JÁN MONCOL^a, ZDENKA PAĎELKOVÁ^b a DUŠAN
VALIGURA^a

^a Oddelenie anorganickej chémie, ÚAChTaM, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ^b Katedra obecné a anorganickej chémie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
 jaro-slava.maroszova@stuba.sk

Meďnaté komplexy s rôznymi organickými ligandmi sú predmetom intenzívneho výskumu kvôli ich zaujímavým vlastnostiam a potenciálnemu biologickému využitiu^{1–3}. Po sérii komplexov s pyridylmetanolmi, kde metanolová skupina je substituovaná v troch rôznych polohách (*o*-, *m*-, *p*-) sa načrtla potreba prekúmania prípravy a vlastností takýchto komplexov aj s tridentátnym ligandom 2,6-pyridíndimetanolom (2,6-(pydime)). Tento doposiaľ málo študovaný ligand je zaujímavý aj z hľadiska tendencie k deprotonizácii jeho –OH skupiny a tým aj vyššej variabilite pri tvorbe komplexov. Predkladaný príspevok prezentuje štyri nitrobenzoátomeďnaté komplexy, kde ligand vystupuje ako súčasť komplexného kationu [Cu(2,6-pydime)₂]²⁺ (schéma 1), kde atóm meď je koordinovaný v tvare deformovaného oktaédra prostredníctvom dvoch tridentátne viazaných molekúl 2,6-pydime. Na ich hydroxidové skupiny sú vodíkovými mostíkmi naviazané karboxylové skupiny aniónov príslušnej nitrobenzoovej kyseliny, (2-nitrobenzoovej (1), 3-nitrobenzoovej (2), 4-nitrobenzoovej (3) a 3,5-dinitrobenzoovej (4)). Pozornosť je taktiež venovaná systému vodíkových väzieb, vytvárajúcich tak supramolekulové štruktúry.

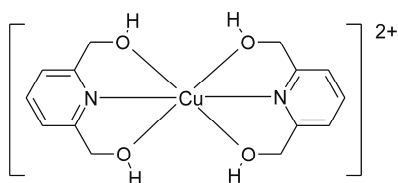


Schéma 1. Komplexný kation [Cu(2,6-pydime)₂]²⁺

Tato práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0562/10.

LITERATÚRA

1. Koman M., Melník M.: *Polyhedron* 16, 2721 (1997).
2. Andac O., Guney S., Topcu Y., Yilmaz V. T., Harrison W. T. A.: *Acta Crystallogr., Sect. C* 58, m17 (2002).
3. Winter S., Seichter W., Weber E.: *Z. Anorg. Allg. Chem.* 630, 434 (2003).

1P-11
CHLÓRBENZOÁTOMEĎNATÉ KOMPLEXY
S DIETYLNIKOTÍNAMIDOM

JANA MEDVECKÁ^{*}, MICHAELA STOLIČKOVÁ,
JÁN MONCOL a DUŠAN VALIGURA

Oddelenie anorganickej chémie ÚAChTaM, FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
 jana.medvecka@stuba.sk

Výsledky získané v sústavách nitrobenzoátomeďnatých komplexov s *N,N*-dietylnikotínamidom (denia) ukázali¹, že denia ligand vykazuje výraznejšiu variabilitu koordinačných možností ako sa pôvodne predpokladalo. Systematické štúdium viedlo k rozšíreniu o systémy obsahujúce anión kyseliny 2-, 3-, 4-chlórbenzoovej. Potvrdil sa aj tu vplyv reakčných podmienok (teplota, stechiometrické pomery reaktantov, typ rozpúšťadla, reakčný čas) na druh vznikajúcich nových produktov. Zmenou podmienok reakcie boli pripravené komplexy zloženia: [Cu₂(2-Clbz)₄(denia)₂].[Cu₂(2-Clbz)₄(MeOH)₂] (1), [Cu₂(2-Clbz)₄(denia)₂].[Cu₂(2-Clbz)₄(EtOH)₂] (2), [Cu(2-Clbz)₂(denia)₂(H₂O)₂] (3)³, [Cu(4-Clbz)₂(denia)₁(H₂O)₁] (4), [Cu(3-Clbz)₂(denia)₁(H₂O)₁] (5), [Cu₂(3-Clbz)₄(denia)₂] (6), [Cu₂(2-Clbz)₄(denia)₂] (7). Na rozdiel od komplexov (1) a (2) obsahujúcich príslušný alkohol² pripravených v daných rozpúšťadlách, komplexy (3)–(7) boli pripravené z vodného prostredia. Produkty (4) a (5) kryštalizovali pri laboratórnej teplote, pri pomere reaktantov Cu : denia = 1 : 1, za krátky reakčný čas, na rozdiel od produktu (6), ktorý kryštalizoval po dlhodobom miešaní reakčnej zmesi. Produkt (3) kryštalizoval pri laboratórnej teplote, pričom komplex (7) sa získal pri zvýšenej teplote. Všetky produkty boli charakterizované IČ a UV spektroskopiou a elementárnou analýzou. Komplexy (1), (2), (3), (4), (6) boli podrobené aj RTG analýze.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0353/08.

LITERATÚRA

1. Kavalírová J., Korabik M., Stachová P., Moncol J., Sil-lanpää R., Lis T., Mikloš D., Melník M., Mroziński J., Valigura D.: *Polyhedron* 27, 1333 (2008).
2. Kavalírová J., Valigura D., Moncol J.: v zborníku *Insights into Coordination, Bioinorganic and Applied Inorganic Chemistry* (Melník M., Segľa P., Tatarko M., ed.), Vol. 9, p. 133. Press of Slovak Technical University, Bratislava 2009.
3. Moncol J., Koman M., Melník M., Mikloš D., Głowiak T.: v zborníku *Challenges for Coordination Chemistry in the New Century* (Melník M., Sirota A., ed.), Vol. 5, p. 77. Slovak University Press, Bratislava 2001.

1P-12
SYNTHESIS, CRYSTAL STRUCTURE
AND SPECTRAL PROPERTIES OF COPPER(II)
5-NITROFURAN-2-CARBOXYLATES

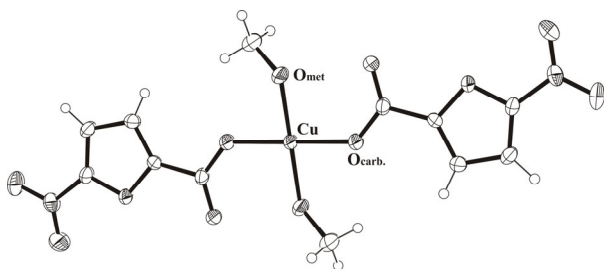
JOZEF MIKLOVIČ^a, IVANA MITASOVÁ^a, DUŠAN MIKLOŠ^b, VLADIMÍR KUČTANIN^b, and PETER SEGĽA^b

^a Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, University of St. Cyril and Methodius, 917 01 Trnava,

^b Department of Inorganic Chemistry, Slovak Technical University, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
 jozef.miklovic@ucm.sk

Coordination compounds of heterocyclic carboxylic acids alone as well as their complexes with other heterocyclic ligands are interesting from structural as well as biological point of view^{1,2}.

Synthesis and characterization of six Cu(II) complexes with 5-nitrofuran-2-carboxylic acid (5-NO₂-2-fucH) and heterocyclic ligands are reported. The complexes were characterized by elemental analyses, infrared and electronic spectra. Infrared spectra of the complexes were compared with spectra of sodium salt of 5-NO₂-2-fucH. Structure of the complex [Cu(5-NO₂-2-fuc)₂(CH₃OH)₂] was determined by X-ray crystal structure analysis.



Cu(II) with carboxylic acids usually creates dimeric complexes, which, when reacted with neutral ligands, afford monomeric complexes. Our complexes Cu(II) with 5-nitrofurano-2-carboxylic acid are only monomeric with the composition [Cu(5-NO₂-2-fuc)₂L₂] (where L= H₂O, CH₃OH, furo[3,2-*c*]pyridine, 2-methylfuro[3,2-*c*]pyridine, [1]benzofuro[3,2-*c*]pyridine, isoquinoline). In these complexes, asymmetrical bidentate chelate or monodentate type of coordination of carboxyl group on central atom is suggested. Monodentate mode of coordination of carboxyl group was confirmed by X-ray crystal structure analysis for the complex [Cu(5-NO₂-2-fuc)₂(CH₃OH)₂].

This work was financially supported by the Grants 1/4454/07; 1/0353/08 and VEGA 1/1005/09 of the Slovak Grant Agency for Science.

REFERENCES

1. Segľa P., Mikloš D., Jašková J., Miklovič J., Kaliňáková B., Hudecová D., Švorec J., Lis T., Melník M.: J. Coord. Chem. 61, 3763 (2008).

2. Segľa P., Miklovič J., Mikloš D., Mrázová V., Krupková L., Hudecová D., Ondrušová Z., Švorec J., Moncol J., Melník M.: Trans. Met. Chem. 34, 15 (2009).

1P-13
AKTIVACE SI-OH SKUPIN POMOCÍ STANNYLENU

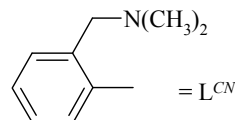
ALEŠ RŮŽIČKA a ZDEŇKA PADEĽKOVÁ

Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice

zdenka.padelkova@upce.cz

Stannylen¹ (L^{CN})₂Sn obsahující C,*N*-chelující ligand (obr. 1) (= 2-(*N,N*-dimethylaminomethyl)fenyl-; značen L^{CN}) byl využit pro aktivace² sloučenin obsahujících Si-OH a Sn-OH skupiny.

Studium bylo zaměřeno na popis struktury a vlastností produktů vzniklých z reakcí stannylenu s různými typy silanolů a stannanolů.



Obr. 1. Chelující ligand 2-(*N,N*-dimethylaminomethyl)fenyl-

Veškeré produkty byly studovány pomocí NMR spektroskopie v roztoku a v některých případech byla určena i totální struktura na monokrystalickém materiálu pomocí XRD techniky.

Tato práce vznikla za finanční podpory grantu GA ČR (P207/10/P092).

LITERATURA

1. Angermund K., Jonas K., Kruger C., Latten J. L., Tsay Y. H.: J. Organomet. Chem. 353, 17 (1988).
2. Patai S., Rappoport Z., v knize: *The chemistry of functional groups - The chemistry of organic germanium, tin and lead compounds*. J. Wiley, Chichester 1995.

1P-14
METYL A METOXY-SALICYLÁTOMEĎNATÉ
KOMPLEXY S ANTIFEROMAGNETICKOU
INTERAKCÍOU SPROSTREDKOVANOU
VODÍKOVÝMI MOSTÍKMI

ZUZANA REPICKÁ^{a*}, JÁN MONCOL^a, MARIA KORABÍK^b, MIROSLAVA PUCHOŇOVÁ^a a DUŠAN VALIGURA^a

^a Oddelenie anorganickej chémie, ÚAChTaM, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ^b Fakulta Chémie, Univerzita Wrocław, Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław
 zuzana.repicka@stuba.sk

Salicylátomedňaté komplexy sú objektom záujmu v oblasti katalýzy, supramolekulovej chémie a kryštálového inžinierstva, i v oblasti medicínskej chémie^{1,2}. Bola pripravená séria nových látok sumárneho vzorca $[\text{Cu}(\text{Xsal})_2(\text{nia})(\text{H}_2\text{O})_2]$ ($\text{X} = 5\text{-Me}, 5\text{-MeO}$)³, $\text{Cu}(\text{Xsal})_2(\text{denia})(\text{H}_2\text{O})$ [4] ($\text{X} = 4\text{-}, 5\text{-MeO}, 3\text{-}, 5\text{-Me}$) a $\{[\text{Cu}_2(5\text{-MeOSal})_4(\text{H}_2\text{O})_4]_{0,8}[\text{Cu}_2(5\text{-MeOSal})_4(\text{EtOH})_2(\text{H}_2\text{O})_2]_{0,2}\} \cdot 0,2 \text{H}_2\text{O}$. Vo všetkých študovaných komplexoch sa medňatý katión nachádza v štvorcovopyramidálnom obklopení, pričom v ekvatoriánej rovine sú dva atómy kyslíka salicylátových aniónov, molekula vody a atóm dusíka (kyslíka) mostíkujúceho nikotínamidu, dietyl nikotínamidu alebo salicylátového aniónu. V axiálnej polohe sa nachádza atóm kyslíka mostíkujúceho liganda. Susediace štruktúrne jednotky opisovaných látok sa spájajú vďaka rovnakému systému medzimolekulových vodíkových väzieb sprostredkovaných atómami vodíka molekúl vody a nekoordinovanými atómami kyslíka karboxylovej skupiny do nekonečných reťazcov. Všetky komplexy vykazujú neobvyklé magnetické vlastnosti, maximum susceptibilitý medzi 6–10 K a správanie vyhovujúce Bleaney-Bowersovej rovnici. Toto správanie je podmienené antiferomagnetickou interakciou susediacich spinov.

Tato práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0353/08.

LITERATÚRA

1. Valigura D., Mikloš D., Púčeková Z., Melník M.: *Advances in Coordination, Bioinorganic and Inorganic Chemistry*, 425. STU Press, Bratislava 2005.
2. Ranford J. D., Sadler P. D. Tocher D. A.: *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* 1993, 3393.
3. Valigura D., Moncol J., Korabik M., Púčeková Z., Lis T., Mroziński J., Melník M.: *Eur. J. Inorg. Chem.* 2006, 3813.
4. Repická J., Moncol J., Krupková L., Hudecová D., Korabik M., Valigura D.: *Insights into Coordination, Bioinorganic and Applied Inorganic Chemistry*, 286. STU Press, Bratislava 2009.

1P-15

ORGANOANTIMONITÉ A ORGANOBISMUTITÉ FOSFOREČNANY STABILIZOVANÉ NCN CHELATUJÍCÍM LIGANDEM

TOMÁŠ SVOBODA a **LIBOR DOSTÁL**

Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
tomas.svoboda@student.upce.cz

V súčasnej dobe je naša pracovná skupina študovaná reaktivita organoantimonitého oxidu¹ $[\text{LSbO}]_2$ **1** a organobismutitého oxidu² $[\text{LBiO}]_2$ **2**, kde jsou centrální atomy antimon a bismut stabilizovány NCN chelátujícím ligandem, $\text{L} = [2,6\text{-(CH}_2\text{NMe}_2)_2\text{C}_6\text{H}_3]^-$. Reaktivita těchto výchozích komplexů je studována na modelových reakcích s organofosforečnými kyselinami $\text{EtP}(\text{OH})_2\text{O}$, $\text{tBuP}(\text{OH})_2\text{O}$, $\text{PhP}(\text{OH})_2\text{O}$, dále s organofosforitou kyselinou $\text{PhPH}(\text{OH})\text{O}$ a s anorganickými kyselinami H_3PO_4 a H_3PO_3 . Vzniklé produkty jsou charakterizovány

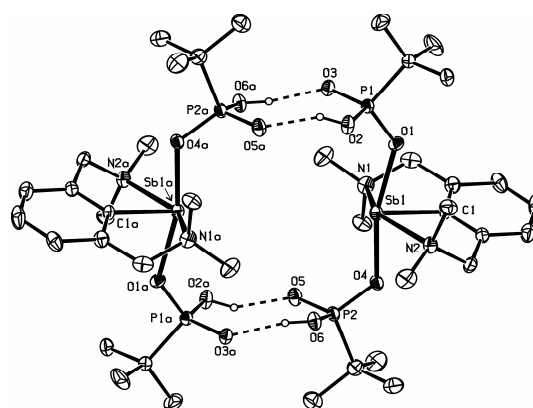


Schéma 1. Zobrazení typu ORTEP komplexu $\text{LSb}[\text{O}^t\text{BuP}(\text{OH})\text{O}]_2$ (30% pravděpodobnosti, vodíkové atomy jsou pro přehlednost vynesčány)

pomocí ^1H , ^{13}C a ^{31}P NMR spektroskopie, IČ spektroskopie a získané monokrystaly byly charakterizovány rentgenostruktúrní analýzou. Výsledky toho výzkumu budou prezentovány a diskutovány.

Tato práce vznikla za finanční podpory grantové agentury ČR (106/10/0443) a MŠMT ČR MSM 0021627501a SG 300001.

LITERATURA

1. Dostál L., Jambor R., Růžička A., Erben M., Jirásko R., Černošková E., Holeček J.: *Organometallics* 28, 2633 (2009).
2. Fridrichová A., Svoboda T., Jambor R., Padělková Z., Růžička A., Erben M., Dostál L.: *Organometallics* 28, 5522 (2009).

1P-16

SYNTÉZA A STUDIUM POLYJADERNÝCH KYANIDOKOMPLEXŮ VYBRANÝCH PŘECHODNÝCH KOVŮ

TOMÁŠ ŠILHA, **ZDENĚK ŠINDELÁŘ** a **ZDENĚK TRÁVNÍČEK**

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc
zdenek.travnicek@upol.cz

Tato práce zahrnuje přípravu a charakterizaci polyjaderných kyanidokomplexů železa obsahujících ve své struktuře i jiný vybraný přechodný prvek (M), a to $\text{Fe}(\text{III})$, $\text{Cr}(\text{III})$, $\text{Mn}(\text{II})$, $\text{Ni}(\text{II})$ nebo $\text{Co}(\text{II})$ s Schiffovou bází, v našem případě 2,2'-{iminobis[ethan-2,1-diyl nitrilo(*E*)methyllyliden]} difenol (H_2salden).

Syntézy těchto polyjaderných kyanidokomplexů vychází z koordinačně nenasyceného komplexu příslušného přechodného kovu s výše uvedenou Schiffovou bází typu $[\text{M}(\text{salden})]^{n+}$ (kde $n = 1$ nebo 0), který reaguje¹ s $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$.

Produkty byly charakterizovány těmito metodami: elementární analýza (CHN), UV/VIS, infračervená, Ramanova a Mössbauerova spektroskopie, termická analýza (TG/DTA)

a magnetochemické měření (SQUID). Na základě výsledků uvedených metod bylo popsáno několik sloučenin obecného složení $\{[M(\text{salden})]_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]\}$, kde M je vybraný přechodný kov.

Další fáze studia zahrnuje obměny Schiffovy báze výchozího koordinačně nenasyceného komplexního kationtu např.: N,N' -bis[(1*E*)-fenylmetylen]cyklohexan-1,2-diamin s dalšími kyanidokomplexy např.: $[\text{Co}(\text{CN})_6]^{3-}$ a $[\text{Cr}(\text{CN})_6]^{3-}$. Cílem těchto variací je změna vlastností produktů, zejména změny ve spektrálních a magnetických vlastnostech těchto látek. Připravené komplexy mohou nalézt uplatnění např. jako materiály v elektronických nebo magnetických² aplikacích.

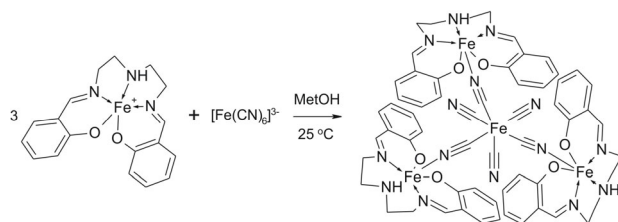


Schéma 1. Příprava komplexu $\{[\text{Fe}(\text{salden})]_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]\}$

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM6198959218.

LITERATURA

1. Shatruck M., Avendano C., Dunbar K. R.: Prog. Inorg. Chem. 56, 155 (2009).
2. Suh M. P., Cheon Y. E., Lee E. Y.: Coord. Chem. Rev. 252, 1007 (2008).

1P-17

POLYMORFNÉ MODIFIKÁCIE $[\text{Cu}(\text{men})_2][\text{Pt}(\text{CN})_4]$ (*men* = *N*-METYL-ETÁN-1,2-DIAMÍN)

MARTIN VAVRA^a, IVAN POTOČŇÁK^a
a ERIK ČIŽMÁR^b

^a Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Moyzesova 11, 041 54 Košice, ^b Centrum fyziky nízkych teplôt, Prírodovedecká fakulta UPJŠ, Park Angelinum 9, 041 54 Košice
martin.vavra@upjs.sk

Výskumom v období posledných desaťročí sa kyanidokomplexné zlúčeniny s prechodnými kovmi ukázali ako látky, ktoré vytvárajú polymérne štruktúry rôznej rozmernosti a zároveň sa stali predmetom štúdia ich magnetické vlastnosti¹.

Jedným z cieľov nášho výskumu je príprava nízkorozmerných (iónových, jedno- a dvojrozmerných) mednatých zlúčenín s aniónom $[\text{Pt}(\text{CN})_4]^{2-}$. V rámci tejto aktivity sa nám zo sústavy obsahujúcej ako blokujúci ligand *men* (*men* = *N*-metyl-etán-1,2-diamín) podarilo získať dve odlišné polymorfné modifikácie látky, ktorej zloženie vyjadruje vzorec $[\text{Cu}(\text{men})_2][\text{Pt}(\text{CN})_4]$.

Prvou modifikáciou tejto zlúčeniny sú kryštály fialovej farby (*I*) a druhou sú kryštály modrej farby (*2*), ktoré sa pri-

pravili iba v hydrotermálnych podmienkach v autokláve. Rozdiel medzi týmito zlúčeninami potvrdili aj výsledky IČ a UV-VIS spektroskopie. Rovnaké zloženie obidvoch modifikácií, predpokladané na základe výsledkov elementárnej analýzy, nakoniec dokázalo vyriešenie ich kryštálových štruktúr. Tie ukázali, že obidve modifikácie vytvárajú rovnaký typ jednorozmerného 2,2-*TT* reťazca (pre nomenklatúru pozri²). Tieto reťazce vytvárajú v prípade obidvoch modifikácií vrstvy, v rámci ktorých sú samostatné reťazce navzájom rovnobežné. Najväčší rozdiel medzi týmito modifikáciami predstavuje usporiadanie jednotlivých reťazcov v priestore. Zatiaľ čo v *I* (priestorová grupa *P*-1) sú jednotlivé reťazce susedných vrstiev navzájom rovnobežné, tak v *2* (*P*₄/*m*) sú dané reťazce susedných vrstiev na seba kolmé.

V tomto príspevku uvádzame prípravu, fyzikálno-chemickú charakterizáciu (IČ a UV-VIS spektroskopie, merania magnetických vlastností) a kryštálové štruktúry obidvoch polymorfných modifikácií $[\text{Cu}(\text{men})_2][\text{Pt}(\text{CN})_4]$.

Táto práca vznikla za podpory grantov APVV-VVCE- 0058-07, APVV-0006-07, VEGA 1/0079/08 a VVGS 37/09-10.

LITERATÚRA

1. Boča R.: Coord. Chem. Rev. 173, 167 (1998).
2. Černák J., Orendáč M., Potočňák I., Chomič J., Orendáčová A., Skoršepa J., Feher A.: Coord. Chem. Rev. 224, 51 (2002).

1P-18

ŠTVORCOVOPLANÁRNE KOMPLEXY PALÁDIA S BIOLOGICKY AKTÍVNYMI LIGANDAMI

PETER VRANEC^a, IVAN POTOČŇÁK^a a MARIÁN SABOL^b

^a Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Katedra anorganickej chémie, Moyzesova 11, 041 54 Košice, ^b Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Lekárska fakulta, Ústav lekárskej mikrobiológie, Tr. SNP 1, 040 66 Košice
peter.vranec@student.upjs.sk

Onkologické ochorenia sú jednou z hlavných príčin celosvetovej úmrtnosti. V súčasnosti používané liečivá odvodené od cisplatiny¹ sa vyznačujú vysokou toxicitou, a preto sa pripravujú nové, efektívnejšie liečivá. Jedným zo spôsobov ako zvýšiť efektívnosť protirakovinových farmaceutík, je príprava nových liečiv vo forme komplexov obsahujúcich biologicky aktívny kov a biologicky aktívne ligandy, ktoré majú vhodné chelátové vlastnosti a priaznivé profily toxicity. Medzi takéto ligandy patrí skupina chinolínov², konkrétne 5-chloro-7-jodo-8-hydroxychinolín (CQ) a jeho deriváty.

Kvôli zaujímavým biologickým vlastnostiam CQ sme sa rozhodli pripraviť štvorcovo-planárne komplexy Pt(II) a Pd (II), u ktorých očakávame zvýšenú protirakovinovú aktivitu. V tomto príspevku uvádzame prípravu, vlastnosti a kryštálové štruktúry látok obsahujúcich centrálny atóm paládia: $[\text{Pd}(\text{CQ})_2]$ (*I*), $[\text{Pd}(\text{CQ})\text{Cl}_2]\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2$ (*2*), $[\text{Pd}(\text{CQ})\text{Cl}_2]\text{H}_2\text{O}$ (*3*) a $[\text{Pd}(\text{IQ})_2]$ (*4*) (IQ = 5,7-dijodo-8-hydroxychinolín), pričom sa na ich charakterizáciu použili IČ a UV-VIS spektroskopie, ako aj CHN a RTG štruktúrna analýza.

Z výsledkov štruktúrnej analýzy komplexov **1** a **4** sa zistilo, že sa jedná o molekulové látky, pričom na centrálny atóm Pd(II) sú koordinované dve molekuly liganda v štvorcovoplanárnom usporiadaní pomocou atómu kyslíka fenolickej časti a atómu dusíka pyridínovej časti príslušného liganda. V oboch prípadoch sa jedná o *trans*-izoméry. Štruktúry látok **2** a **3** sú iónové a centrálny atóm Pd(II) je tiež v štvorcovoplanárnom obklopení, avšak dva chloridové anióny koordinované na atóm Pd(II) vytvárajú *cis*-usporiadanie. Záporný náboj je kompenzovaný prítomnosťou nekoordinovaného dimetylamóniového katiónu, resp. protonizovanou molekulou CQ. Okrem toho sa v štruktúre látky **3** nachádza aj nekoordinovaná molekula vody.

U látok **1** a **2**, ktoré sa pripravili v dostatočnom množstve, sa študovala aj biologická aktivita, výsledky ktorej budú prezentované na posterí.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA-1/0079/08, APVV-VVCE-0058-07 a APVV-0006-07.

LITERATÚRA

1. Hay R. W., Miller S.: Polyhedron 17, 2337 (1998).
2. Ding W. Q., Liu B., Vaught J. L., Yamauchi H., Lind S. E.: Cancer Res. 65, 3389 (2005).

2IL-01 STEREOSELEKTIVNÁ MANNICHOVA REAKCIA V SYNTÉZE DERIVÁTOV α -AMINOKYSELÍN

DUŠAN BERKEŠ, ANDREJ ĎURIŠ, DANIELA MORAVČÍKOVÁ a LUBOŠ SLÍŽIK

*Oddelenie organickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
dusan.berkes@stuba.sk*

Jedným z primárnych cieľov a výziev modernej chémie je vývoj stereoselektívnych transformácií umožňujúcich tvorbu funkcionalizovaných opticky aktívnych molekúl s vysokým stupňom štruktúrnej diverzity a to všetko z jednoduchých a dostupných východiskových molekúl. Vhodné substráty pre takéto transformácie predstavujú aj syntetické γ -oxo- α -aminokyseliny vybavené funkčnými skupinami, ktoré definujú priestorovú charakteristiku uhlíkového zvyšku aminokyselín a tým ich uplatnenie v špecifických ligandoch, a zároveň predstavujú enantioméne čisté syntóny pre syntézu biologicky účinných zlúčenín. Jednu z najužitočnejších metód prípravy takýchto derivátov predstavuje Mannichova reakcia s využitím derivátov kyseliny glyoxylovej, najmä jej katalytická verzia s preformovými iminoglyoxylátmi^{1–3}. Enantioména čistota býva excelentná (> 90 % ee), pre niektoré aplikácie je však nedostatočná a je účelnejšie využiť lacnú chirálnu auxiliáriu uľahčujúcu dočistenie produktu⁴.

V prednáške bude diskutovaná nami vyvinutá diastereo-selektívna trojkomponentná Mannichova reakcia v tandeme s kryštalizáciou indukovanou asymetrickou transformáciou (CIAT)⁵, ktorá predstavuje výhodnú alternatívu k dvojstupňovému procesu cez *aza*-Michaelovu adíciu^{6,7} (Schéma 1). Mannichove reakcie spojené s kryštalizáciou jedného zo stereoizomérov budú aplikované aj v diastereo-selektívnej syntéze substituovaných indolylglycínov ako aj β -nitro- α -aminokyselín.

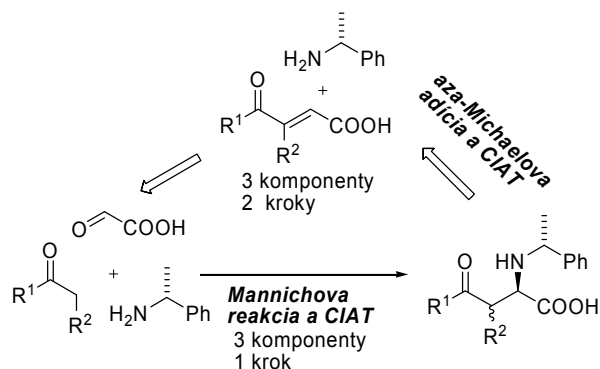


Schéma 1.

Prípravené enantioméne čisté γ -oxo- α -amino kyseliny predstavujú výhodné multifunkčné chirálne syntóny pre následné stereoselektívne transformácie. Prezentované bude ich využitie v syntéze inhibitorov vnútrobunkového prenosu ceramidov – HPA-12 a jeho derivátov, metylénových homológov

inhibitorov glukozylceramidázy typu PDMP, či konformačne obmedzených GABA analógov (Schéma 2).

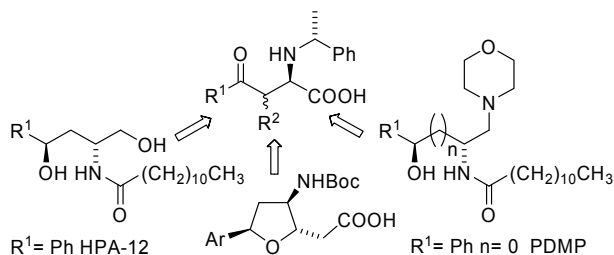


Schéma 2.

Pozornosť bude venovaná aj výsledkom štúdia oxo-enolovej tautómie Mannichových báz, s aplikáciami v syntéze diastereo-čistých polysubstituovaných oxopropilínov, či β -amino ketónov.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA SR 1/0629/08.

LITERATÚRA

1. Cordova A.: *Acc. Chem. Res.* 37, 102 (2004).
2. Notz W., Tanaka F., Barbas C. F.: *Acc. Chem. Res.* 37, 580 (2004).
3. Najera C., Sansano J. M.: *Chem. Rev.* 107, 4584 (2008).
4. Chi Y. G., English E. P., Pomerantz W. C., Horne W. S., Joyce L. A., Alexander L. R., Fleming W. S., Hopkins E. A., Gellman S. H.: *J. Am. Chem. Soc.* 129, 6050 (2007).
5. Jakubec P., Petráš P., Ďuriš A., Berkeš D.: *Tetrahedron: Asymmetry* 21, 69 (2010).
6. Berkeš D., Jakubec P., Winklerová D., Považanec F., Daich A.: *Org. Biomol. Chem.* 121 (2007).
7. Jakubec P., Berkeš D., Kolarovič A., Považanec F.: *Synthesis* 4032 (2006).

2IL-02 ORGANICKÉ CHROMOFORY S VNITŘNÍM PŘENOSOM NÁBOJE: DESIGN, SYNTÉZA, VLASTNOSTI

**FILIP BUREŠ*, JIŘÍ KULHÁNEK
a OLDŘICH PYTELA**

*Ústav organickej chémie a technológie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
filip.bures@upce.cz*

Organické chromofory substituované vhodnými donory a akceptory jsou v poslední době velice intenzivně studovány pro jejich optoelektronické vlastnosti a především pro jejich vysokou optickou nelinearitu (NLO) druhého a třetího druhu¹. Organické NLO-aktivní sloučeniny našly uplatnění především jako záznamová média, prepínače, modulátory či OLED diody. Typický organický NLO-aktivní chromofor sestává ze silných elektron-akceptorů A (např. NO₂ či CN skupiny) a silných elektron-donorů D (např. NR₂ či OR skupiny) spojených π -konjugovaným systémem (π -linker, viz schéma 1).



Schéma 1. Organický chromofor s vnitřním přenosem náboje (schématicky)

U polárních sloučenin typu D- π -A dochází k intramolekulárnímu přenosu elektronů resp. náboje, který lze jednoduše popsat rezonančními strukturami. Optické lineární i nelineární vlastnosti takových sloučenin pak závisejí na polarizovatelnosti π a n elektronů přítomných v chromoforu. Míru přenosu náboje lze obecně ovlivňovat modifikací připojených donorů a akceptorů nebo změnou π -konjugované cesty (délka, planarita). Organický push-pull systém aplikovatelný jako NLO-aktivní chromofor by měl dále vykazovat vysoké hodnoty hyperpolarizabilit β a γ , dobré optické vlastnosti, chemickou a termickou stabilitu a rovněž rozpustnost v běžných organických rozpouštědlech. Obecně jsou hledány takové sloučeniny, které vykazují kompromis mezi uvedenými vlastnostmi.

Byly studovány tři základní typy organických push-pull systémů (schéma 2). Zatímco první třída sloučenin využívala jako základní π -konjugovaný systém kombinaci dvojných a trojných vazeb (**1**),^{2–5} druhá třída chromoforů byla připravena na bázi aromátů (**2**)^{5,6}. Třetí skupinu chromoforů tvoří sloučeniny s heteroaromatickým základním skeletem, zejména imidazolem (**3**)^{7–10}. Jako donorů bylo využito *N,N*-dimethylamino či methoxy skupin a jako akceptorů pak kyan skupiny. Uvedené sloučeniny typu **1–3** lze připravit s využitím moderních syntetických postupů zahrnujících zejména cross-coupling reakce. Připravené chromofory byly charakterizovány pomocí běžných analytických metod, jako jsou ¹H- a ¹³C-NMR, MS, IR či elementární analýza, a molekulová struktura

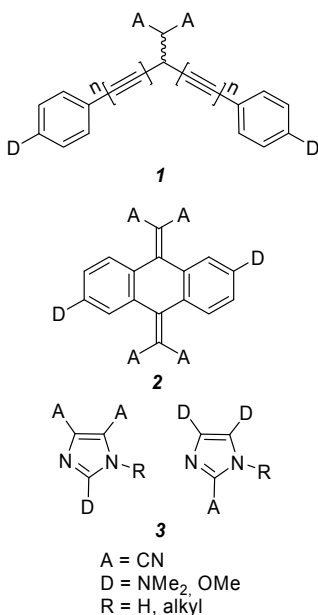


Schéma 2. Struktura studovaných organických D- π -A chromoforů

celé řady chromoforů byla rovněž potvrzena pomocí rentgenostrukturní analýzy. Další vlastnosti D- π -A chromoforů byly studovány pomocí UV/Vis spektroskopie, elektrochemie, hyperpolarizabilit třetího řádu (DFWM) nebo DFT kalkulacemi.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR (MSM 0021627501) a GA ČR (203/08/0076).

LITERATURA

1. Speciální vydání „Materials for Electronics“, (Miller R. D., Chandross E. A., ed.). Chem. Rev. 110, 1-574 (2010).
2. Bureš F., Schweizer W. B., May J. C., Boudon C., Gisselbrecht J. P., Gross M., Biaggio I., Diederich F.: Chem. Eur. J. 13, 5378 (2007)
3. May J. C., LaPorta P. R., Esembeson B., Biaggio I., Michinobu T., Bureš F., Diederich F.: Proc. of SPIE 6331, 633101 (2006).
4. May J. C., Biaggio I., Bureš F., Diederich F.: Appl. Phys. Lett. 90, 251106 (2007).
5. Bureš F., Schweizer W. B., Boudon C., Gisselbrecht J. P., Gross M., Diederich F.: Eur. J. Org. Chem. 2008, 994.
6. Bureš F., Pytela O., Diederich F.: J. Phys. Org. Chem. 22, 155 (2009).
7. Patel A., Bureš F., Ludwig M., Kulhánek J., Pytela O., Růžička A.: Heterocycles 78, 999 (2009).
8. Kulhánek J., Bureš F., Ludwig M.: Beilstein J. Org. Chem. 5, 11 (2009).
9. Kulhánek J., Bureš F., Pytela O., Mikysek T., Ludvík J., Růžička A.: Dyes Pig. 85, 57 (2010).
10. Bureš F., Kulhánek J., Mikysek T., Ludvík J., Lokaj J.: Tetrahedron Lett. 51, 2055 (2009).

2IL-03

ENANTIOSELEKTIVNÍ ALLYLACE ALDEHYDŮ A JEJÍ APLIKACE V ORGANICKÉ SYNTÉZE

MARTIN KOTORA^{a,b}

^a Katedra organické a jaderné chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze, Hlavova 8, 128 43 Praha 2,

^b Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemingovo náměstí 2, 166 10 Praha 6
katora@natur.cuni.cz

Deriváty chirálních bipyridinů jsou často využívány jako katalyzátory v asymetrické syntéze, kde vystupují jako Lewisovské báze. V rámci vývoje nových katalyzátorů tohoto typu byla vyvinuta metoda přípravy symetricky a nesymetricky substituovaných bis(tetrahydroisochinolinů) pomocí [2+2+2]-cyklotrimerizace hexadekatetraynu s nitrily katalyzovaná CpCo(CO)₂. Připravené látky byly oxidovány na příslušné *N,N'*-dioxidy a rozděleny na enantiomery^{1–5}. Opticky čisté dioxidy byly použity jako katalyzátory pro enantioselektivní allylace aryl- a α,β -nenasyčených aldehydů allyltrichlorsilanem. Ve většině případů byly získány homoallylové alkoholy s vynikající enantioselektivitou (> 90% ee) a v některých případech bylo dosaženo až 99 % ee. Kromě toho byl pozorován rozhodující vliv rozpouštědla jak na mechanismus katalytické allylace, tak na enantioselektivitu⁶.

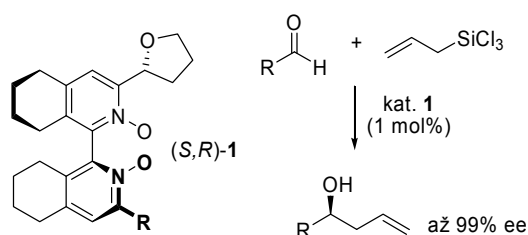
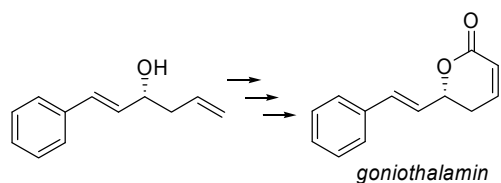


Schéma 1.

Získané chirální homoallylalkoholy byly použity pro syntézu řady přírodních sloučenin. Jako příklad může sloužit příprava cytotoxické sloučeniny goniothalaminu.



Tato práce vznikla za podpory projektů 203/08/0350, LC06070, MSM0021620857.

LITERATURA

- Hrdina R., Kadlčíková A., Valterová I., Hodačová J., Kotora M.: *Tetrahedron: Asymmetry* 17, 3185 (2006).
- Hrdina R., Valterová I., Hodačová J., Kotora M.: *Adv. Synth. Catal.* 349, 822 (2007).
- Hrdina R., Dračínský M., Valterová I., Hodačová J., Čiřáková I., Kotora M.: *Adv. Synth. Catal.* 350, 1449 (2008).
- Kadlčíková A., Hrdina R., Valterová I., Kotora M.: *Adv. Synth. Catal.* 351, 1279 (2009).
- Kadlčíková A., Kotora M.: *Molecules* 14, 2918 (2009).
- Hrdina R., Opekar F., Roithová J., Kotora M.: *Chem. Commun.* 2314 (2009).

2IL-04

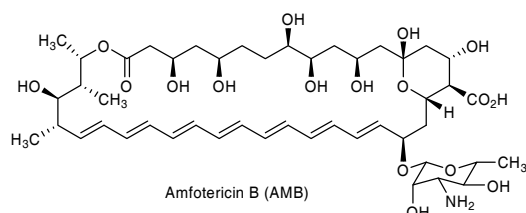
SMĚROVANÉ KONJUGÁTY AMFOTERICINU B

MILOŠ SEDLÁK

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
Milos.Sedlak@upce.cz

Amfotericin B (AMB) je polyenové makrocyclické, membránově aktivní antifungální antibiotikum produkované *Streptomyces nodosus* M4575, které již 50 let zůstává život zachraňujícím lékem v léčbě systémových houbových infekcí¹. Jedná se o velmi účinný lék, s převážně fungicidním působením, aplikovaný zejména u imunosupresivních pacientů, po orgánových transplantacích a transplantacích kostní dřevě, rovněž při syndromu získané imunodeficiency (AIDS) a u pacientů s tumory a hematologickými malignitami. Klinické použití AMB je však limitováno jeho špatnou rozpustností

ve vodě a zvýšeným výskytem nežádoucích akutních a chronických příznaků, zejména nefrotoxicitou¹. Ke zvýšení terapeutického indexu AMB byly v naší laboratoři připraveny dva typy cílených konjugátů AMB s funkcionalizovanými poly(ethylenglykoly)^{2–4}.



Tyto cílené polymerní konjugáty AMB představují nadějný způsob zvýšení terapeutického indexu AMB. Imino vazba AMB k polymernímu nosiči představuje alternativu pro cílený transport AMB na místa s patologicky sníženou hodnotou pH (cit.^{2,3}). Ve druhém typu konjugátů⁴ jsou čtyři molekuly AMB vázány na sPEG. Konjugát obsahuje β-D-glukopyranosidový molekulární spínač citlivý k β-glukosidasám (E.C.3.2.1.21). Enzymatickou hydrolyzou β-glukosidické vazby vzniká glukosa a následnou 1,6-eliminací se velmi rychle uvolní AMB⁴. Přes veškeré uvedené výhody zde diskutovaných derivátů a polymerních konjugátů AMB je však nutno konstatovat, že uvedené typy těchto konjugátů nereprezentují širší jejich klinického použití. Pro případné klinické aplikace schází jejich plné otestování v souladu s požadovanou legislativou.

Tato práce vznikla za podpory projektu MŠMT ČR 002162 7501.

LITERATURA

- Sedlák M.: *Mini-Rev. Med. Chem.* 9, 1306 (2009).
- Sedlák M., Pravda M., Staud F., Kubicová L., Týčová K., Ventura K.: *Bioorg. Med. Chem.* 15, 4069 (2007).
- Sedlák M., Pravda M., Kubicová L., Mikulčíková P., Ventura K.: *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 17, 2554 (2007).
- Sedlák M., Drabina P., Bílková E., Šimůnek P., Buchta V.: *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 18, 2952 (2008).

2L-01 SYNTEZA N-ETYLOVANÝCH SELENADIAZOLO-CHINOLÓNŮV

MAROŠ BELLA a VIKTOR MILATA*

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská
Technická Univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
viktor.milata@stuba.sk

V našej predchádzajúcej práci sme opisali prípravu angulárne anelovaných selenadiazolochinolónov použitím Gouldovej-Jacobsovej reakcie¹. U týchto zlúčenín však bola zistená len slabá antimikrobiálna aktivita. Preto sme sa rozhodli pripraviť ich *N*-etylované analógy **4**, ktoré by mohli preukázať lepšiu biologickú aktivitu. Priama etylácia vyššie spomenutých selenadiazolochinolónov a ich prekursorov viedla len k polyetylovaným produktom, východiskovým zlúčeninám resp. ku zmesi *O*- a *N*-etylovaných produktov. Selektívna monoetylácia aminobenzoselenazolov **1** poskytla *N*-etylované aminobenzoselenadiazoly **2**. Nukleofilnou vinylovou substitúciou vhodných alkoxyetylénových derivátov *N*-etylovanými aminobenzoselenadiazolmi **2** boli získané príslušné enamíny **3**, ktoré po následnej cyklizácii v PPA poskytli cieľové *N*-etylované selenadiazolochinolóny **4** (Schéma 1).

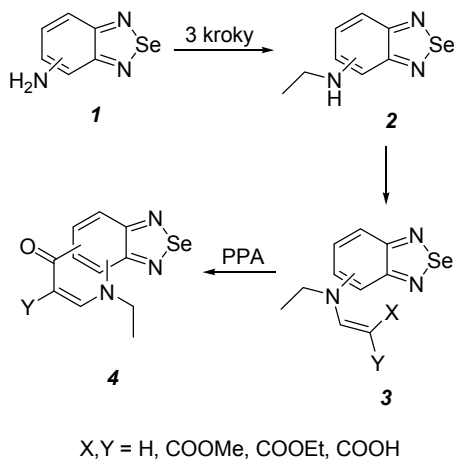


Schéma 1.

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

LITERATÚRA

1. Bella M., Milata V.: Chem. Listy 102, 616 (2008).

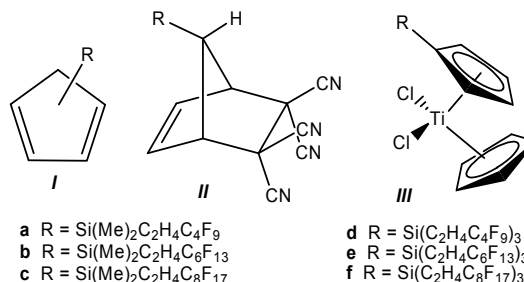
2L-02 „NÍZKO“ A „VYSOCE“ FLUOROVANÉ SILYLKYKLOPENTADIENY

LUCIE ČERVENKOVÁ ŠTASTNÁ

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

Fluorované látky lze podle obsahu fluoru rozdělit na vysoce fluorované (> 60 %) a nízko fluorované. Vysoce fluorované látky lze separovat extrakcí kapalina/kapalina, zatímco nízko fluorované sloučeniny využívají separaci pomocí fluorované stacionární fáze. Vysoce fluorované komplexy přechodných kovů nachází uplatnění ve dvoufázové katalýze, která využívá specifické rozpustnosti fluorovaných katalyzátorů v perfluorovaných rozpouštědlech, jejichž mísitelnost s organickými rozpouštědly je teplotně závislá¹.

Cílem práce je příprava a systematický screening katalytických vlastností fluorovaných katalyzátorů na bázi titanocenných nesoucích fluorované řetězce připojené pomocí vhodné silylskupiny^{2,3}. V prvním kroku jsou syntetizovány cyclopentadienylové ligandy **I**. Tyto ligandy jsou obtížně charakterizovatelné, protože vzniká směs isomerů, z nichž některé vykazují fluxionální chování a navíc tyto látky nejsou stálé. Pomocí NMR měření při proměnných teplotách se podařilo identifikovat jednotlivé isomery a popsat jejich fluxionální chování⁴. Pro definitivní potvrzení struktury jednotlivých ligandů je možno podrobit cyclopentadieny Diels-Alderově reakci s TCNE, tyto produkty (**II**) většinou ochotně krystalují. V posledním kroku jsou reakcí s CpTiCl₃ připraveny dichlorotitanocenyl **III**. Takto připravené komplexy titanu budou testovány jako modelové látky pro fluorovou dvoufázovou katalýzu.



Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR LC06070.

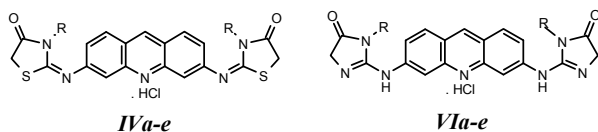
LITERATURA

1. Gladysz J. A., Curran D. P., Horváth I. T., v knize: *Handbook of Fluorous, Light Fluorous Chemistry – A user's Guide*, kap. 8, s. 128. WILEY-VCH, Weinheim 2004.
2. Čermák J., Štastná L., Sýkora J., Císařová I., Kvičala J.: *Organometallics* 23, 2850 (2004).
3. Červenková Štastná L., Auerová K., Kvičala J., Čermák J.: *J. Organomet. Chem.* 692, 1974 (2007).
4. Červenková Štastná L., Čermák J., Cuřínová P., Sýkora J.: *Organomet. Chem.* 695, 537 (2010).

2L-03

SYNTEZA, CYTOTOXICITA A DNA INTERKALÁCIA
3,6-BIS(SUBSTITUOVANÝCH AMINO)AKRIDÍNŮV –
NOVÝCH ANALÓGOV PROFLAVÍNUJÁN IMRICH*, LADISLAV JANOVEC, JÁN
UNGVARSKÝ, MÁRIA KOŽURKOVÁ, DANICA
SABOLOVÁ a HELENA PAULÍKOVÁÚstav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita
P. J. Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 041 67 Košice
jan.imrich@upjs.sk

Za účelom hľadania nových antitumorových zlúčenín sme pripravili štyri série analógov proflavínu (akridín-3,6-diamín, **I**) na báze nami opísaného syntónu, akridín-3,6-diizotiokyanátu (**II**). Jeho reakciou s alifatickými aminmi sme získali príslušné symetricky dialkylsubstituované 3,6-bis(tiomočoviny)akridínu.HCl **IIIa-e** (alkyl = Et, *n*-Pr, *n*-Bu, *n*-Pen, *n*-Hex), z ktorých reakciou s metylesterom kyseliny brómoctovej sme pripravili 3,6-bis((3-alkyl-4-oxo-1,3-tiazolidin-2-ylidén)imino)akridín hydrochloridy **IVa-e**¹. Použitím mezytylnitroxidu sa tiomočoviny premenili na príslušné symetricky dialkylsubstituované 3,6-bis(močoviny)akridínu **Va-e**². S HgO/Na₂SO₄/Et₃N sa bis-tiomočoviny previedli *in situ* na 3,6-bis(karbidimidyl)akridínu, z ktorých reakciou s etylesterom glycinu.HCl sme pripravili 3,6-bis((1-alkyl-5-oxoimidazolín-2-yl)amino)akridín hydro-chloridy **VIa-e**.



V uvedených sériách sme skúmali ich väzbovú afinitu na DNA teľacieho týmusu (CT) a plazmidovú (pUC19) DNA pomocou UV-vis či fluorimetrických titrácií a cirkulárneho dichroizmu, stanovili väzbové konštanty ($K = 2.2\text{--}6.2 \times 10^4 \text{ M}^{-1}$ pre **IVa-e**; $1.9\text{--}7.1 \times 10^5 \text{ M}^{-1}$ pre **VIa-e**) a teplotné denaturačné profily CT DNA. Najvyššia *in vitro* cytotoxická aktivita voči bunkovým líniam HeLa a L1210 sa zistila u bis(propyltiazolidín)akridínu.HCl s hodnotami IC_{50} 12.9 μM a 6.3 μM a bis(hexylimidazolín)akridínu.HCl – 5.28 μM a 2.12 μM . V sérii bis-imidazolínov **VIa-e** sme pomocou dockingu vypočítali parametre ich interkalácie do modelových duplexov DNA dekamérov C:G a A:T a získané údaje využili pre simuláciu molekulovej dynamiky. Z takto získaných priestorových parametrov sme vypočítali zmeny hodnôt SASA (solvent-accessible surface areas), zmenu tepelnej kapacity u komplexov akridín-DNA a zmenu členu ΔG_{hyd} ako kľúčovej zložky poklesu väzbovej Gibbsovej energie počas komplexácie akridínov s DNA. Na základe analýzy efektu substituentov na ΔG_{celk} a ΔG_{hyd} sme navrhli podstatné faktory vplývajúce na proces interkalácie.

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA MŠ SR
1/0053/08, 1/0476/08 a 1/0097/10.

LITERATÚRA

- Janovec L., Sabolová D., Kožurková M., Paulíková H., Kristian P., Ungvarský J., Moravčíková E., Bajdichová M., Podhradský D., Imrich J.: *Bioconjugate Chem.* 18, 93 (2007).
- Kožurková M., Sabolová D., Janovec L., Mikeš J., Koval J., Ungvarský J., Fedoročko P., Kristian P., Imrich J.: *Bioorg. Med. Chem.* 16, 3976 (2008).

2L-04

KRYSŤALOVÉ FORMY DERMATOLOGIKA
ALAPTIDUBOHUMIL KRATOCHVÍL, KATARÍNA BULIAKOVÁ
a JAN ROHLÍČEKÚstav chemie pevných látok, Fakulta chemické technológie,
Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5,
166 28 Praha 6
kratochb@vscht.cz

Alaptid je spirocyklický dipeptid [(8*S*)-8-methyl-6,9-diazaspiro[4,5]dekan-7,10-dion], C₉H₁₄N₂O₂, tvorený spojením päťčlenného a šesťčlenného kruhu (Schéma 1). Jeho syntéza bola popsána Kasafirkem a spol.¹

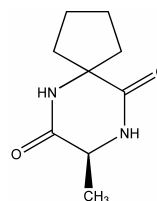


Schéma 1. Alaptid

Alaptid se používá ve formě veterinární masti na léčbu kožních a slizničních poranění, popálenin, odřenin, omrzlin, proleženin atd.

Molekulová a krystalová struktura alaptidu byla predikována² modulem Polymorph (Material Studio, Accelrys) a potom experimentálně potvrzena z práškových difrakčních dat pořízených na synchrotronu³. Šestičlenný kruh zaujímá v pevné fázi vaničkovou konformaci, přičemž navázaný methyl je v ekvatoriální poloze. Pětičlenný kruh má konformaci obálky. V krystalové struktuře jsou molekuly alaptidu propojeny intermolekulárními vazbami N-H...O do nekonečných řetězců paralelních se směrem osy *c*.

Krystalický alaptid je ovšem velmi málo rozpustný a proto jsou hledány i jeho další pevné formy. Protože se jedná o relativně malou molekulu, disponující dobrými donory i akceptory protonu pro H-vazby, byl testován i jeho kokrystalizační potenciál. Byly vyzkoušeny následující kokrystalizační techniky: kokrystalizace z roztoku, společné mletí, syntéza z taveniny a následující kokrystalizační partneři: vinná k., imidazol, glycin, uracil, nikotinová k., sacharin a močovina. Produkty byly identifikovány RTG difrakcí, IČ a NMR spektroskopii.

Tato práce byla podpořena granty MSM 6046137302 a NPV II
2B08021 MŠMT ČR.

LITERATURA

1. Kacafírek E., Štunc A., Roubalová A.: Collect. Czech. Chem. Commun. 57, 179 (1992).
2. Rohlíček J., Hušák M., Kratochvíl B.: Acta Crystallogr. A65, s317 (2009).
3. Rohlíček J., Maixner J., Pažout R., Hušák M., Cibulková J., Kratochvíl B.: Acta Crystallogr. E66, o821 (2010).

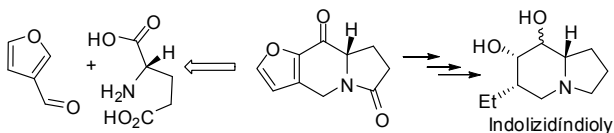
2L-05

STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA NOVÝCH
ALKYLINDOLIZIDÍNDIOLOV

ŠTEFAN MARCHALÍN, JOZEFÍNA ŽÚŽIOVÁ
a PETER ŠAFÁŘ

Oddelenie organickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
stefan.marchalin@stuba.sk

Indolizínový kruh s rôznymi stupňami nasýtenia je súčasťou veľkého počtu prírodných zlúčenín nachádzajúcich sa v rastlinnej a živočíšnej ríši, vykazujúcich široké spektrum biologickej aktivity¹. Medzi uvedenými zlúčeninami významnú skupinu predstavujú indolizidínové alkaloidy, z ktorých niektoré polyhydroxyindolizidíny (kastanospermí, swainsonín) sú veľmi účinnými inhibítormi dôležitých biologických procesov, napr. ako je inhibícia glykozidáz¹. Náš syntetický prístup k substituovaným indolizidíndiolom využíva internú asymetrickú indukciu, pričom chiralita sa v molekule derivuje z vhodne zabudovaného stereogénneho centra.



Sledom stereokontrolovaných redukcí indolizidíndiónov je možné kontrolovať konfiguráciu na novovzniknutých stereogénnych centrách indolizidínového skeletu². Výsledkom nášho nedávneho štúdia katalytickej hydrogenácie furo[3,2-f]indolizidíndiónu bolo zistenie, že diastereoselektivita tohto procesu môže byť efektívne ovplyvnená vhodnou voľbou heterogénneho katalyzátora, pričom k ataku vodíka dochádza z *exo* strany tricyklického systému, analogicky ako pri reduktívnej desulfurizácii (benzo)tienoindolizínov³. Kľúčový krok v syntéze nových epimérnych indolizidíndiolov predstavuje tandém reakcií: diastereoselektívna katalytická hydrogenácia furánového kruhu a následné regioselektívne otvorenie príslušného tetrahydrofuránového kruhu.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0210-07 a grantom VEGA č. 1/0161/08.

LITERATÚRA

1. Winchester B. G.: Tetrahedron: Asymmetry 20, 645 (2009).
2. Szemes F., Kadlečíková K., Marchalín Š., Bobošíková

M., Dalla V., Daich, A.: Tetrahedron: Asymmetry 15, 763 (2004).

3. Šafář P., Žúžiová J., Marchalín Š., Tóthová E., Prónayová N., Švorc E., Vrábek V., Daich A.: Tetrahedron: Asymmetry 20, 626 (2009).

2L-06

ACTIVATED ENOLETHERS – THEIR PREPARATION,
PROPERTIES AND UTILIZATION OF BIOACTIVE
COMPOUNDS

VIKTOR MILATA

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
viktor.milata@stuba.sk

Enolethers are frequently used intermediates in the synthesis of various types of organic compounds¹. Because being electron rich substrates, various types of electrophiles react with them. In the case of activation with (two) electron withdrawing group(s) in beta-position to alkoxygroup they become reactive towards nucleophiles.

Because three possible different nucleophiles can react with activated enolethers they are trifunctional electrocyclophiles. Two new enolethers were developed².

We studied physico-chemical, spectral and biological properties³ of this class of compounds and products of their reaction with mono- and bifunctional nitrogen nucleophiles. Presented will be the mechanism of nucleophilic vinylic substitution with inversion of configuration⁴.

Thus prepared *N*-substituted enamines serve in Gould-Jacobs type of thermal cyclocondensation to produce various types of substituted/condensed quinolones⁵ (fluoro-, nitro-, azolo-, pyrazino-, selenadiazolo etc.) – mechanism was also proposed. Selenadiazoloquinolines are active in photoinduced processes (see also other presentations).

Furthermore, the principally new approach to parent unsubstituted heterocycles will be displayed: in one case we described new, unique coupled ring contraction.

Quinolones can be modified through chloroaromatization, which offer possibility for preparation of new type of pyrrolo-, thieno-, pyrazolo-, pyrimido-, pyridopyrimido-, pyrimidobenzimidazo- and pyrimidotriazolo fused polyheterocycles. Some compounds cause cell apoptosis.

This study was financially supported by Scientific Grant Agency (VEGA Projects 1/0225/08) and Research and Development Agency (contract No. APVV-0055-07).

REFERENCES

1. Milata V., Rádl S., Voltrová S. v knize: *Science of Synthesis* (kap. 32.5.3. Product Subclass: Enol Ethers (acyclic, cyclic, i.e. endocyclic C=C-O- unit)), s. 589-756. Georg Thieme Verlag, Stuttgart 2008.
2. Černuchová P., Vo-Thanh G., Milata V., Loupy A., Janťová S., Theiszová M.: Tetrahedron 61, 5379 (2005).
3. Milata V.: Acta Chimica Slovaca 1, 221 (2008).
4. Saloň J., Milata V., Gatál A., Prónayová N., Leško J., Černuchová P., Vo-Thanh G., Loupy A.: Eur. J. Org.

Chem. 22, 4870 (2005).

5. Černuchová P., Vo-Thanh G., Milata V., Loupy A.: *Heterocycles* 64, 177 (2004).

2L-07**CHIROPTICKÉ MOLEKULOVÉ PREPÍNAČE NA BÁZE BINAFTALÉNU**

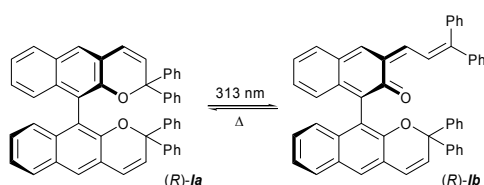
**MARTIN PUTALA^a, ANNA KICKOVÁ^a
a PETER KASÁK^b**

^a *Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava*, ^b *Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava*
putala@fns.uniba.sk

V materiálovom výskume sa značná pozornosť venuje vývoju optických pamäťových médií na báze fotochrómnych molekulových systémov. Dôležitú úlohu hrá rýchlosť a dokonalá vratnosť prenutia, nezávislá a citlivá detekcia stavu prepínača. Jednu z možností čítania stavu molekulového prepínača prináša CD spektroskopía, ak fotochemická premena vyvolá zmenu CD signálu. Takúto možnosť prinášajú aj prepínače obsahujúce binaftalénovú štruktúrnú jednotku. V prednáške bude uvedených viacero príkladov takýchto prepínačov z literatúry, kde CD signál je ovplyvnený:

- zmenou dihedrálneho uhla binaftalénu (CD signál prináša kvalitatívnu informáciu o jeho zmene),
- zmenou chirálneho chromofóru (prepojeného s binaftalénom),
- alebo kombináciou týchto faktorov.

Prehľad bude doplnený o vlastné výsledky výskumu, keď pripravený binaftopyránový prepínač *I* podlieha fotochemickému otváraníu jedného pyránového kruhu:



Tento prepínač vykazoval pri prepínaní v roztoku značnú mieru únavy. Jeho imobilizácia v tenkom polymérnom filme zabezpečila veľmi dobrú opakovateľnosť prenutia. Zatiaľčo zmena absorbancie *I* pri vratnom prepínaní nepresahovala 9 % intenzity signálu, pozorovaná bola viac ako 6-násobná zmena intenzity CD signálu *I* v polystyrénovom filme. Pozorované zosilnenie chiroptickej odozvy je pripisované π - π interakcii prepínača s benzénovými jednotkami polyméru.

Táto práca vznikla za podpory grantov APVV-0128-07 a VEGA 1/0243/09.

LITERATÚRA

1. Kicková A., Donovalová J., Kasák P., Putala M.: *New. J. Chem.* 34 (2010), v tlači.

2L-08**PROGRAM MASSCHECKER JAKO NÁSTROJ OVĚŘENÍ STRUKTURY Z HMOTNOSTNÍCH SPEKTER****OLDŘICH PYTELA**

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 573, 532 10 Pardubice
oldrich.pytela@upce.cz

Program MassChecker je součástí programu OPchem (<http://webak.upce.cz/~koch/cz/veda/OPgm.htm>) a slouží k rychlému ověření navržené struktury organické sloučeniny prostřednictvím nízkorozlišeného hmotnostního spektra. Ze zadané struktury molekuly ve formátu .mol jsou vygenerovány všechny možné kombinace fragmentů vzniklých současným štěpením jedné až pěti chemických vazeb. Typ a počet štěpených vazeb lze podle potřeby měnit. Vygenerovaný soubor fragmentů je porovnán s experimentálně získaným hmotnostním spektrem. Míru shody je možno posoudit graficky nebo číselně. V zobrazeném hmotnostním spektru lze označit vybraný pik a následně vykreslit odpovídající fragment zadané molekuly v 3D-grafice. Nezávisle lze kombinovat zadání struktury molekuly a experimentálního hmotnostního spektra. Tímto způsobem lze rychle a efektivně analyzovat např. i produkty ve směsích z výstupu GC-MS.

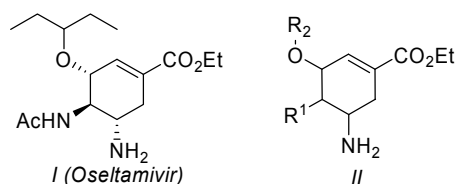
Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 203/08/0208.

2L-09**STUDIES OF ORGANOCATALYTIC MICHAEL ADDITION TOWARDS TAMIFLU DERIVATIVES**

MARTIN HUŤKA, ŠTEFAN TOMA, and RADOVAN ŠEBESTA*

Faculty of Natural Sciences, Comenius University Bratislava, Mlynska dolina CH-2, 842 15 Bratislava
sebesta@fns.uniba.sk

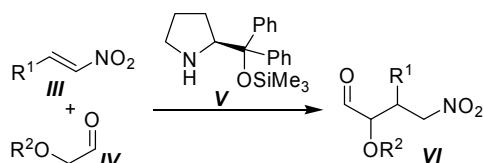
Oseltamivir *I* is highly sought target in organic synthesis. Several its syntheses have been reported¹, but catalytic synthesis excluding use of transition metals would be highly desirable. Moreover, eventual preparation should enable easy access to Oseltamivir derivatives, such as *II* (Scheme 1).



Scheme 1.

Therefore we studied Michael addition of alkyl- and aryloxyacetaldehydes *III* to nitroalkenes *IV* (Scheme 2). A range of organocatalysts have been tested and silylated aminoalcohol *V* afforded the best results in terms of yield and

enantioselectivity. The resulting nitroaldehydes *VI* could serve as a starting material for Oseltamivir synthesis² or the Michael addition can be a part of cascade process.



Scheme 2.

Products *VI* were obtained in good yields and in high enantiomeric purity (up to 96 % ee). Diastereoselectivity, however was low (*syn/anti* 50:50–83:17). Reaction intermediates were observed by HRMS and also studied by DFT computational methods.

This work has been supported by European Commission grant Cataflu.or (FP7-201431) and Slovak Research and Development Agency under the contract No. DO7RP-0017-08.

REFERENCES

- Shibasaki M., Kanai M., Matsunaga S., Kumagai N.: *Acc. Chem. Res.* 42, 1117 (2009).
- Ishikawa H., Suzuki T., Hayashi Y.: *Angew. Chem., Int. Ed.* 48, 1304 (2009).

2L-10

VÝRAZNÉ OVLIVNĚNÍ PRŮBĚHU TRANSFORMAČNÍ REAKCE S-FTALID-3-YL ISOTHIURONIOVÝCH SOLÍ METHYL SUBSTITUCÍ

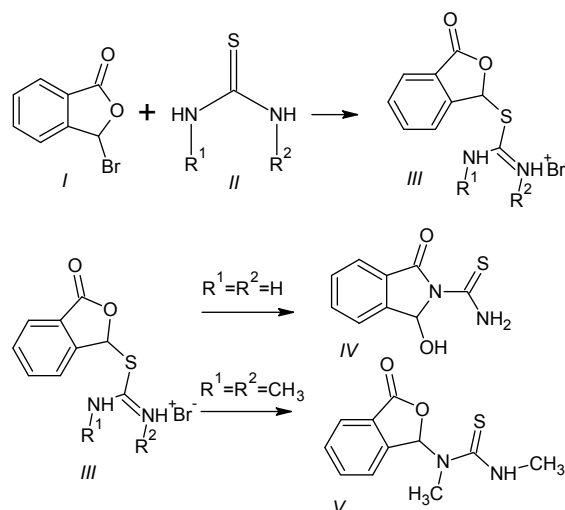
JIŘÍ VÁŇA, JIŘÍ HANUSEK a MILOŠ SEDLÁK

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
jiri.vana@student.upce.cz

Transformační reakce, při kterých z jednoho heterocyklu vzniká heterocyklus jiný, patří k účinným nástrojům organické syntézy. S jejich pomocí lze často velice snadno v několika málo krocích připravit sloučeniny jinak velmi obtížně připravitelné¹.

Reakci 3-bromftalidu *I* se substituovanými thiomocoviny *II* byly připraveny příslušné isothiuroniové soli *III*, které v bazickém prostředí přesmykují v závislosti na methyl substituci na různé produkty. V případě thiomocovin s jednou volnou aminoskupinou je produktem substituovaný isoindol *IV*, v případě *N,N'*-substituovaných thiomocovin dochází ke vzniku *N*-ftalid-3-yl thiomocovin *V*. Struktura isothiuroniových solí i produktů transformace byla potvrzena pomocí RTG, NMR a elementární analýzy.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru MŠMT ČR č. 0021627501.



LITERATURA

- Váňa J., Hanusek J., Růžička A., Sedlák M.: *J. Heterocyclic Chem.* 46, 635 (2009).

2L-11

NOVÁ HETEROCYKLICKÁ ANTITUBERKULOTIKA

KAREL WAISSER* a EVA PETRLÍKOVÁ

Karlova Univerzita v Praze, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Katedra anorganické a organické chemie, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové
waisser@faf.cuni.cz

Tuberkulóza pronásleduje lidstvo během celého jeho vývoje. Byla prokázána ve vzorcích kostí a měkkých tkání mumií pocházejících z let 3000–2400 př. Kr.¹ Ani objev R. Kocha v r. 1882 o původci tuberkulózy, *M. tuberculosis*, nedokázal vyřešit léčbu choroby. Historii léčby choroby můžeme rozdělit do několika časových úseků: a) Období beznaděje (přibližně do konce druhé světové války). b) Období objevu úspěšných antituberkulotik (do roku 1965). Za neúspěšnější antituberkulotikum se považuje heterocyklická sloučenina, hydrazid kyseliny isonikotinové. Byla syntetizována v r. 1912 na pražské Vysoké škole technické. Nevědělo se však o jejím významu při léčbě tuberkulózy. V době, kdy umíral náš básník Wolker, možný lék ležel ve sbírkách Vysoké školy technické. c) Období stagnace (přibližně do roku 1985). Vycházelo se z chybné prognózy, že kolem roku 2000 ve vyspělé části světa tuberkulóza nebude existovat. Více se investovalo do klinického výzkumu (současné podávání malých množství více antituberkulotik). d) Období útoků multirezistentních kmenů mykobakterií na lidskou populaci. V roce 2007 bylo v Evropě registrováno 463 500 nových případů onemocnění. Situace v rozvojových zemích je mnohem kritičtější. Celkem bylo registrováno 9,27 milionů nových onemocnění. (V České republice bylo v roce 2008 registrováno 857 nových případů a hlášeno 57 úmrtí.) Naše fakulta se od svého vzniku zabývala hledáním nových skupin potenciálních antituberkulotik. Prof. Waisser od svého příchodu do Hradce v r. 1972 vycházel z filosofie, že vědečtí pracovníci neustále pátrají po nových

poznatcích, avšak nesnaží se analyzovat uveřejněná fakta. Rešerše nejprve třídil podle chemické struktury součenin. Z heterocyklických sloučenin to byly deriváty furanu a thiofenu², thiazolidinu³, thiazolu⁴, fenazinu a chinoxalinu⁵ a pyrazinu⁶. Později jsme se soustředili pouze na poznatky z posledních 15 let^{7–9}. Tím naše snahy o rešerše skončily, protože později se již jednalo ročně o tisíce sloučenin (důsledek, že prognóza byla mylná). Naše rešerše přinesla své plody. Poznali jsme některé farmakofory, které se ve sloučeninách často vyskytovaly. Pomáhali jsme v hledání nových potenciálních antituberkulotik zahraničním pracovištím (např. univerzitám v Drážďanech, Jeně a Mnichově) a o některé poznatky se opírá i náš současný výzkum. Naše prognózy byly přesné, avšak nedokázali jsme předpovídat vedlejší nežádoucí účinky. V přednášce bude část věnována novým potenciálním heterocyklickým antituberkulotikům z posledních let (podle Chem. Abstr.) V roce 2009 vyšlo 66 prací věnovaných potenciálním heterocyklickým antituberkulotikům. Při jejich porovnání vznikají komplikace, protože autoři používají různých způsobů vyjádření aktivity (někteří při vyjádření minimální inhibiční koncentrace pracují v molárních koncentracích, jiní ve váhových koncentracích, často své látky neporovnávají s hodnotami používaných léčiv).

Sdělení jsou převážně uveřejňována ve významných časopisech, jako je J. Med. Chem., Heterocycles, Arch. Pharm., Eur. J. Med. Chem., Tetrahedron, Bioorganic and Medicinal Chemistry, Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters, Journal of Chemical Sciences, Molecules, Pharmaceutical Chemistry Journal, Science, Antimicrobial Agents Chemotherapy, Arzneimittel Forschung, Journal of Heterocyclic Chemistry, Letters in Drug Design and Discovery, Journal of Antimicrobial Chemotherapy. Méně významné časopisy (např. ruské, polské, čínské, indické) jsou v menšině. Lze však konstatovat, že i když probíhá velmi intenzivní výzkum antituberkulotik, pokrok je velmi malý. Posledními látkami v praxi jsou chinolony. Řada sloučenin je však v klinických testech. Evropa, i když multirezistentními kmeny ohrožená, věnuje výzkumu jen nevelké úsilí. Nejvíce do výzkumu investuje USA.

V našich studiích preferujeme molární koncentrace a vždy současně pro srovnání sledujeme aktivitu hydrazidu isonikotinové kyseliny. Z posledních let se lze zmínit o 1-fenyl-5-benzylsulfanyl-tetrazolech (I), 1,3-benzoxazine-2,4-(3H)-diones (II), 3-(4-alkyl)fenyl-4-thioxo-2H-1,3-benzoxazin-2(3H)-onech (III), 3-(4-alkylfenyl)-1,3-benzoxazin-2,4-(3H)-dithionech (IV). Řada látek svojí aktivitou *in vitro* překonává soudobá léčiva. Jsou účinnější než hydrazid isonikotinové kyseliny (INH). Látky nejsou dosud

publikované. V tabulce I jsou tři představitelé skupiny. Záleží tedy na vedlejších účincích, zda se jako léčiva prosadí.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR 62808.

LITERATURA

1. Zink A., Sola C., Rejchl I., Graber W., Rastogi N., Wolf H., Nerlich A.: J. Clin. Microbiol. 41, 359 (2003).
2. Waisser K., Goderema W., Čeladník M.: Česk. Farm. 37, 79 (1988).
3. Waisser K., Kucharčík P., Čeladník M.: Česk. Farm. 38, 36 (1989).
4. Waisser K., Vohnická M.: Česk. Farm. 38, 312 (1989).
5. Waisser K., Hougbedji N.: Česk. Farm. 39, 233 (1990).
6. Dlabal K., Waisser K.: Česk. Farm. 41, 25 (1992).
7. Waisser K., Drhová L.: Česk. Slov. Farm. 48, 147 (1999), 48, 195 (1999).
8. Waisser K., Dostál H., Kubicová L., Kolář K.: Česk. Slov. Farm. 49, 113 (2000).
9. Waisser K., Holý P., Bureš O.: Česk. Slov. Farm. 49, 211 (2000), 49, 268 (2000), 50, 159 (2001), 50, 211 (2001), 50, 267 (2001).

Tabulka I

Antimykobakteriální aktivity 6-brom-3-(4-alkyl)fenyl-4-thioxo-2H-1,3-benzoxazin-2(3H)-onů (III)

Alkyl	MIC [$\mu\text{mol l}^{-1}$] inkubace 14d/21d		
	<i>M. tuberculosis</i>	<i>M. avium</i>	<i>M. kansasii</i>
ethyl	0,5/0,5	32/32	4/8
isopropyl	0,25/0,5	4/8	4/8
sek-butyl	0,25/0,5	16/32	2/4
INH	1/1	>250/>250	8/8

2P-01**PŘÍPRAVA DERIVÁTU KYSELINY HYALURONOVÉ ZA UŽITÍ RHODAMINU JAKO LIGANDU****MIROSLAVA BERKOVÁ***, RADOVAN BUFFA, MARTIN PRAVDA a VLADIMÍR VELEBNÝCPN, Dolní Dobrouč 401, 561 02 Dolní Dobrouč
berkova@contipro.cz

Hyaluronan (HA) je anionický, nesulfátovaný glykosaminoglykan, který je součástí pojivové, výstelkové a nervové tkáně. Hyaluronan je tvořen disacharidickou jednotkou obsahující D-glukuronovou kyselinu a N-acetyl-D-glukosamin, vzájemně propojené alternující β -1,4 a β -1,3 glykosidickou vazbou¹.

Ze skupiny rhodaminů byl použit rhodamin 110, protože má volnou aminovou skupinu. Rhodamin 110 náleží do skupiny látek, které mají ve své struktuře fluoron – odtud fluoronová barviva. Obecně rhodaminová barviva fluoreskují, využívají se např. v biotechnologii ve fluorescenční mikroskopii, dále jako laserová barviva.

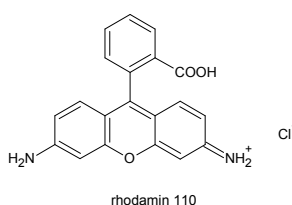


Schéma 1. Rhodamin 110

Byla připravena oxidovaná forma hyaluronanu v poloze 6 na N-acetyl-D-glukosaminu. Dále byla použita pro přípravu derivátu s rhodaminem reductivní aminace. V prvním kroku vznikají hydrolyticky nestabilní iminy, které za užití redukčního činidla lze redukovat na stabilní sekundární aminy.

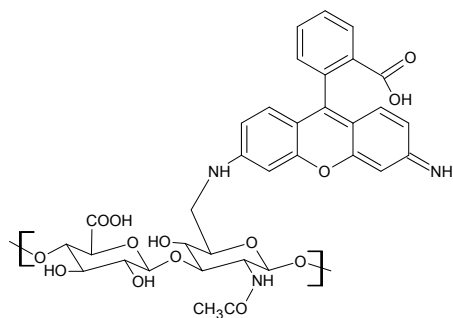


Schéma 2. Navázaný rhodamin na HA vazbou přes sekundární amin

Charakterizaci produktu jsme provedli ve smyslu prokázání modifikace, určení stupně substituce a stanovení čistoty. K tomuto účelu bylo využito instrumentálních analytických metod (UV/VIS a IR spektrofotometrie, NMR spektroskopie, gelová permeační chromatografie). Z NMR DOSY a GPC experimentů jsme získali důkazy podporující závěr, že dochá-

zí ke vzniku kovalentní vazby mezi ligandem a řetězcem polysacharidu.

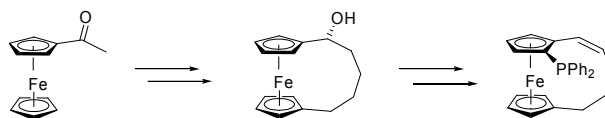
LITERATURA

- Frasher J. R. E., Laurent T. C., Laurent U. B. G.: J. Intern. Med. 242, 27 (1997).

2P-02**FEROCÉNOVÉ KOMBINOVANÉ FOSFÁNOVÉ LIGANDY V ASYMETRICKEJ KATALÝZE****JANA CSIZMADIOVÁ** a MÁRIA MEČIAROVÁUniverzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava
csizmadiovaj@fns.uniba.sk

Vo väčšine chirálnych ligandov použitých v asymetrickej katalýze sú donorom elektrónov voľné elektrónové páry heteroatómov (dusík, alebo fosfor). Chirálné fosfánové a fosforamidové ligandy zabezpečujú vysokú enantioselektivitu v rôznych katalytických reakciách. Aj napriek tomuto faktoru je stále potrebná syntéza nových ligandov, ktoré by zvýšili selektivitu reakcie, alebo by boli vhodné na katalýzu menej reaktívnych substrátov. Aplikácia fosfán-olefinových hybridných ligandov odhaľuje novú sľubnú triedu ligandov. Pozitívne efekty rôznych typov donorov sú takto kombinované v jednej ligandovej štruktúre: atóm fosforu sa v porovnaní s dvojitou väzbou olefinu lepšie koordinuje s prechodným kovom, zatiaľ čo olefin poskytuje možnosť vytvoriť vhodnejšie chirálne prostredie¹. Cieľom tejto práce bolo prispieť k vývoju nových fosfán-olefinových ligandov na báze [5]ferocenofánov a študovať ich účinnosť na vybraných reakciách.

Fosfán-olefinový ligand sa pripravil desať krokovou syntézou z acetylferocénu. V zhladom k tomu, že cieľovou zlúčeninou je chirálny ligand, vytvorenie stereogénneho centra z prochirálného substrátu je kľúčovým krokom celej syntézy. Z hľadiska chemických výtazkov aj stereoselektivity bola najlepšou metódou prípravy (*R*)-[5]ferocenofán-1-olu asymetrická boránová redukcia s CBS katalyzátorom².



Pripravený ligand sa testoval v ródium katalyzovanej asymetrickej arylácii arylboronových kyselín na *N*-tozylarylimíny a v paládiom katalyzovanej asymetrickej alylovej alkylácii.

Táto práca vznikla za podpory Slovenskej grantovej agentúry VEGA, č. grantu 1/0265/09.

LITERATÚRA

- Defieber Ch., Grützmacher H., Carreira E. M.: Angew. Chem. Int. Ed. 47, 4482 (2008).
- Šebesta R., Mečiarová M., Molnár É., Csizmadiová J., Fodran P., Onomura O., Toma Š.: J. Organomet. Chem. 693, 3131 (2008).

2P-03 PYRROLINONOVÁ BARVIVA

ZDENĚK ELIÁŠ^a, STANISLAV LUŽÁK Jr.^a, ANTONÍN LYČKA^b, JAN VYŇUCHAL^c, KATEŘINA VYŇUCHALOVÁ^a a RADIM HRDINA^a

^a Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice, ^b Výzkumný ústav organických syntéz a.s., Rybitví 296, 533 54 Rybitví, ^c Synthesia a.s., Semtín 103, 532 17 Pardubice
elias.zd@seznam.cz

Reakcí aromatických nitrilů s pyrrolinonovým esterem (ethyl-5-oxo-2-fenyl-4,5-dihydro-1*H*-pyrrol-3-karboxylát) vznikají nesymetrické diketo-pyrrolo-pyrrolové (DPP) pigmenty¹. Vyjímkou je reakce se skořicovým nitrilem, při níž dochází k adici na dvojnou C=C vazbu a produktem jsou cyklopenta-pyrrolinony². Výsledkem bázíky katalyzované kondenzace aromatických aldehydů s pyrrolinonovým esterem jsou arylmethyliden-pyrrolinony (**I**), vznikající výhradně jako *Z* isomery, u nichž dochází k fotochemické *Z-E* isomeraci³. V prezentované práci je poprvé prokázáno, že při reakci *trans* skořicového aldehydu s pyrrolinonovým esterem nedochází k adici na C=C vazbu a produkt reakce vzniká kondenzací ve formě *EZ* isomeru (**II**). Jeho ozařováním vzniká výhradně *EE* isomer, boční reakce na *ZZ* isomer ani následná reakce na *EE* isomer neprobíhají.

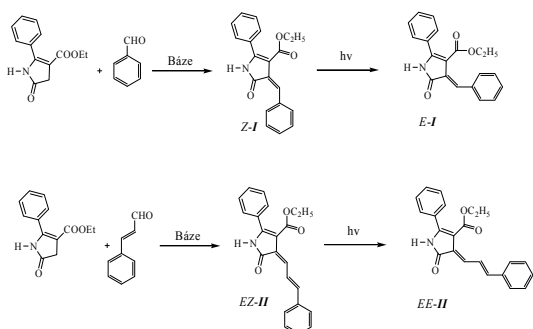


Schéma 1. Syntéza a fotoisomerace pyrrolinonových barviv

Boční karboxy esterová skupina v reakčním produktu **I** a **II** je vždy v *s-trans* uspořádání. Tato konformace je při *EZ-EE* fotochemické isomeraci **II** zachována, zatímco *E*-isomer **I** si stericky vynucuje její změnu na *s-cis*, což ho činí potenciálně zajímavým v oblasti tzv. fotopřepínačů. Látka **II** je vlivem rozšířeného konjugovaného systému batochromně posunutá vůči **I** a oproti **I** fluoreskuje v roztoku. *N*-methylované deriváty obou látek jsou výrazně rozpustnější, vykazují obdobné fotochemické a fotofyzikální chování v roztoku a navíc je u nich pozorována i silná fluorescence v polykrystalické pevné fázi.

LITERATURA

- Lužák Jr. S., Havel L., Vyňuchal J., Horáková P., Kučerík J., Weiter M., Hrdina R.: *Dyes Pigm.* 85, 27 (2010).
- Morton C. J. H., Gilmour R., Smith D. M., Lightfoot P., Slawin A. M. Z., MacLean E. J.: *Tetrahedron.* 58, 5547 (2002).

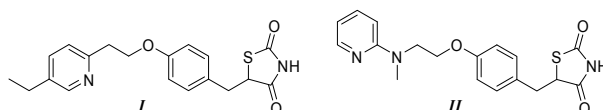
- Vyňuchal J., Lužák Jr. S., Hatlapatková A., Hrdina R., Lyčka A., Havel L., Vyňuchalová K., Jirásko R.: *Dyes Pigm.* 77, 266 (2008).

2P-04 NETRADIČNÍ REDUKCE DVOJNÉ VAZBY MEZI UHLÍKY VEDOUcí K LÉČIVŮM HYPERGLYKÉMIE

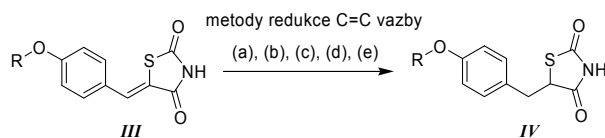
ALEŠ HALAMA, PETR LUSTIG, JOSEF JIRMAN a JAN RYMĚŠ

Zentiva k.s., U Kabelovny 130, 102 37 Praha 10
ales.halama@zentiva.cz

Při neinzulinové léčbě diabetu druhého typu se používá celá řada syntetických látek. Významnou skupinu orálních antihyperglykemik představují deriváty thiazolidin-2,4-dionu, v generickém názvosloví označované jako glitazony. Látky tohoto typu pozitivně působí na insulinovou rezistenci, přičemž zvyšují citlivost organismu k insulinu. Hlavními zástupci této skupiny léčiv jsou v současnosti pioglitazon **I** a rosiglitazon **II**.



V chemické syntéze glitazonů hraje klíčovou roli redukce benzylidienthiazolidindionů **III** na benzylthiazolidindiony **IV**, viz. Schéma. Vzhledem k mimořádnému významu, byla této redukci v literatuře věnována značná pozornost. Jednu možnost, jak tuto reakci prakticky provést, představuje katalytická hydrogenace¹, další pak hořčík v methanolu², lithné borohydridy v pyridinu³ nebo biochemické procesy⁴.



- (a) H₂, 10 %-ní Pd/C, dioxan, (b) Mg / MeOH, (c) LiBH₄, pyridin, THF
(d) *Rhodotorula rubra*, dioxan, (e) NaBH₄, CoCl₂, dimethylglyoxim, DMF, voda

Naším příspěvkem je proces přípravy rosiglitazonu založený na redukci dvojné vazby C=C pomocí borohydridu sodného za katalýzy komplexem dvojmocného kobaltu. Po optimalizaci tento proces dosahuje konverze výchozího benzylidenu více než 99,9 %, navíc se použitý proces provádí netradičně ve vodném prostředí a za technologicky i ekonomicky výhodných podmínek⁵.

LITERATURA

- Hindley R. M.: EP 306228 (B1), 1999.
- Cantello B. C. C., Cawthorne M. A., Cottam G. P., Duff P. T., Haigh D., Hindley R. M., Lister C. A., Smith S. A., Thurlby P. L.: *J. Med. Chem.* 37, 3977 (1994).
- Giles R. G., Lewis N. J., Quick J. K., Sasse M. J., Urquhart M. W. J., Youssef L.: *Tetrahedron* 56, 4531 (2000).

- Cantello B. C. C., Eggleston D. S., Haigh D., Haltiwanger R. C., Heath C. M., Hindley R. M., Jennings K. R., Sime J. T., Woroniecki S. R.: *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1*, 3319 (1994).
- Halama A., Lustig P., Jirman J.: EP 178608 (B1), 2008.

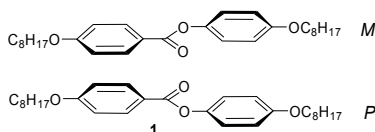
2P-05

NOVÉ KAPALNÉ KRYSTALY S LATERÁLNÍ SUBSTITUCÍ JÁDRA

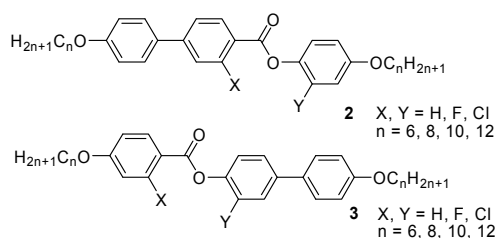
MARTIN CIGL^a, FRANTIŠEK HAMPL^a,
JIŘÍ SVOBODA^a, NATALIA PODOLIAK^b
a MILADA GLOGAROVÁ^b

^a VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, ^b Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i., Na Slovance 2, 182 21 Praha 8
Martin.Cigl@vscht.cz

Spontánní tvorba chirálních útvarů z achirálních molekul se vyskytuje u řady supramolekulárních systémů. V posledních letech se diskutuje možnost podobného chování i u kapalných krystalů tyčinkovitého tvaru, jako je např. 4-(oktyloxy)fenyl-4-(oktyloxy)benzoát (**1**)^{1,2}. Chirální domény jsou podle autorů tvořeny konformery *P* a *M* látky **1**. Jako důvod jejich vzniku autoři uvádějí zvýšení bariéry rotace okolo konformačně flexibilní esterové funkce ve smektické C fázi.



Na základě těchto předpokladů jsme syntetizovali analogy látky **1** na bázi esterů 4'-alkoxybifenyl-4-karboxylové kyseliny **2** a na bázi 4'-alkoxybifenyl-4-yl-4-alkoxybenzoátů **3**, substituované fluorem a chlorem v *ortho* polohách k esterové funkci. U připravených látek (v porovnání s estery **1**) jsme očekávali vyšší pravděpodobnost spontánního vzniku chirálních domén v důsledku zvýšení rotační bariéry okolo vazeb esterové funkce.



Studium mesomorfního chování připravených látek bylo provedeno pomocí optické polarizační mikroskopie a kalorimetrických měření (DSC). Výsledky ukázaly, že pro laterální substituci jsou vhodné jak atomy fluoru tak chloru.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 202/09/0047.

LITERATURA

- Kajitani T., Masu H., Kohmoto S., Yamamoto M., Yamaguchi K., Kishikawa K.: *J. Am. Chem. Soc.* 127, 1124 (2005).
- Walba D. M., Korblova E., Huang C. C., Shao R., Nakata M., Clark N. A.: *J. Am. Chem. Soc.* 128, 5318 (2006).

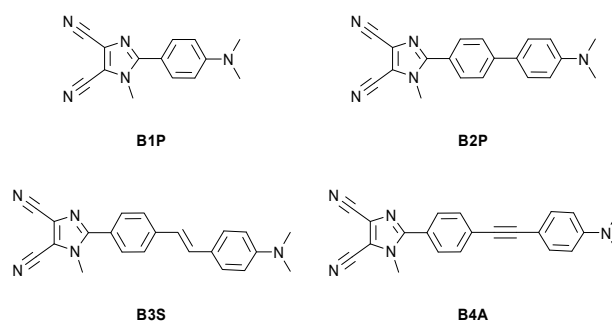
2P-06

SPECTRAL PROPERTIES OF PUSH – PULL FLUOROPHORES BASED ON IMIDAZOL-4,5-DICARBONITRILE; COMPARISON IN SOLUTION AND IN POLYMER MATRICES

PAVOL HRDLOVIČ^a, MARTIN DANKO^a, JIŘÍ KULHÁNEK^b, and FILIP BUREŠ^b

^a Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dubravská cesta 9, 842 36 Bratislava, ^bInstitute of Organic Chemistry and Technology, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentska 537, 532 10 Pardubice
upolhrdl@savba.sk

Novel type of fluorophores based on push-pull systems end-capped with electron donating *N,N*-dimethylaminophenyl and electron accepting imidazol-4,5-dicarbonitril groups were examined. The π -conjugated linkers between these two moieties were formed by phenyl (**B1P**), biphenyl (**B2P**), (*E*)-phenylethenylphenyl (**B3S**) or phenylethynylphenyl (**B4A**) bridges. Their absorption and fluorescence spectra were taken in solutions such as cyclohexane, chloroform, acetonitril and methanol and in polymer matrices such as polystyrene (PS), poly(methylmethacrylate) (PMMA) and poly(vinylchloride) (PVC).



Scheme 1. The chemical structures of investigated fluorophores

Absorption spectra of the studied fluorophores showed the longest wavelength absorption bands within the range of 300–400 nm. The intense fluorescence was observed in non-polar cyclohexane and chloroform within the range of 380–500 nm. The fluorescence was red shifted and partially quenched in polar acetonitrile and methanol. The fluorescence was rather intense in polymer matrices. The relative quantum yield of fluorescence to anthracene was above one for non-polar solvents and polymer matrices. The life time of fluorescence was short (1–4 ns) for all of the investigated fluorophores.

res. The Stoke's shift was within the range of 8000–5000 cm^{-1} with the largest one being observed for **BIP**. The large Stoke's shift indicated a large difference between the absorbing and emitting states. The involvement of different excited states was discussed.

Authors thank grant agency VEGA (project 2/0097/09) and the Czech Science Foundation (203/08/0076).

2P-07

SYNTÉZA A STUDIUM VLASTNOSTÍ ORTHO-SUBSTITUOVANÝCH 3-FENYLISOALLOXAZINŮ

HANA KOTOUČOVÁ^{a*}, RADEK CIBULKA^b, ONDŘEJ SOLNÍČKA^a a RADEK JUROK^b

^a Pedagogická fakulta UK v Praze, Katedra chemie a didaktiky chemie, M.D. Rettigové 4, 116 39 Praha 1, ^b Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav organické chemie, Technická 5, 166 28 Praha 6
hana.kotoucova@pedf.cuni.cz

Atropoisomerní flaviniové soli typu **I** s ortho-substituovanou fenylovou skupinou v poloze 3 představují slibné organokatalyzátory enantioselektivních *S* a *N* oxidací využívajících peroxid vodíku nebo kyslík jako stechiometrické reagenty. Jednou z možností zavedení fenylové skupiny do polohy 3 molekuly flavinu je přímá *N*-arylace^{1,2}, druhou pak postupná syntéza flavinového skeletu^{3–5} (Schéma 1).

V příspěvku bude diskutována příprava flavinových systémů, kde R je -CH₃, -CF₃, -Br, způsob jejich rozdělení na enantiomery a rychlost racemizace.

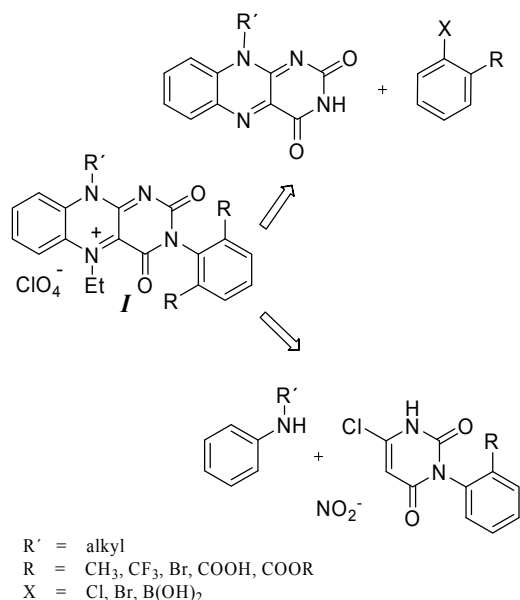


Schéma 1.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 203-07-1246.

LITERATURA

- Lam P. Y. S., Vincent G., Clark C. G., Deudon S., Jadhav P. K.: *Tetrahedron Lett.* 57, 3415 (2001).
- Ghosh A., Sieser J. E., Riou M., Cai W., Rivera-Ruiz L.: *Org. Lett.* 5, 2207 (2003).
- Yoneda F., Shinosuka K., Tshuda K.: *J. Heterocyclic Chem.* 16, 1365 (1979).
- Akiyama T., Simeno F., Murakami M., Yoneda F.: *J. Am. Chem. Soc.* 114, 6613 (1992).
- Ohno A., Kunitomo J., Kakai Y., Kawamoto T., Tomishima M., Yoneda F.: *J. Org. Chem.* 61, 9344 (1996).

2P-08

CHARAKTERIZACE DEFEKTŮ VE STRUKTUŘE POLYALLYLKARBOSILANOVÝCH DENDRIMERŮ A ODVOZENÝCH POLYOLŮ

ALENA KRUPKOVÁ^{a*}, JAN ČERMÁK^a, ZUZANA WALTEROVÁ^b a JIŘÍ HORSKÝ^b

^a Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Rozvojová 2, 165 02 Praha 6 - Suchbát, ^b Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6
krupkova@icpf.cas.cz

Karbosilanové dendrimery jsou dynamicky se rozvíjející skupinou polymerů vyznačujících se specifickými vlastnostmi, které je předurčují pro využití v mnoha aplikacích (imobilizace homogenních katalyzátorů, senzory atd.)¹. Protože jsou většinou připravovány divergentním postupem, který zahrnuje transformaci mnoha funkčních skupin na jedné molekule, vysoká konverze a selektivita všech dílčích reakcí je klíčová pro přípravu dobře definovaných látek s nízkou polydispersitou a minimem defektů ve struktuře. Optimalizace syntézy ovšem vyžaduje vhodné analytické postupy, schopné detegovat i malá množství produktů případných vedlejších reakcí.

S využitím standardních postupů divergentní syntézy karbosilanových dendrimerů^{2–4} jsme připravili sérii dendrimerů první až třetí generace odvozených od tetraallylsilanu. Reakční sekvence zahrnovala hydrosilylaci periferních allylových skupin dichlormethylsilanem resp. chlordinethylsilanem a reakci vzniklých dendritických chlorsilanů s allylmagnesium bromidem. Připravené polyallylkarbosilanové dendrimery byly dále převedeny na dendritické polyoly sekvencí hydroborace a oxidace periferních allylových skupin. V průběhu optimalizace syntézy byly kombinací analytických technik NMR spektroskopie, gelové permeační chromatografie a MALDI-TOF hmotnostní spektrometrie identifikovány vedlejší reakce vedoucí k defektům ve struktuře dendrimera, tyto defekty byly charakterizovány a byl vyhodnocen jejich dopad na čistotu dendrimera a jeho další syntetické využití. Množství defektů a konverze dílčích reakcí byly z hmotnostních spekter určeny na základě vztahů odvozených z teoretického modelu⁵ vzniku a propagace defektů ve struktuře.

Tato práce vznikla za podpory Centra základního výzkumu LC06070 MŠMT ČR.

LITERATURA

1. Dvornic P. R., Owen M. J.: *Silicon-Containing Dendritic Polymers*. Springer, 2009.
2. van der Made A. W., van Leeuwen P. W. N. M.: *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* 1992, 1400.
3. Zhou L. L., Roovers J.: *Macromolecules* 26, 963 (1993).
4. Seyferth D., Son D. Y., Rheingold A. L., Ostrander R. L.: *Organometallics* 13, 2682 (1994).
5. Krupková A., Čermák J., Walterová Z., Horský J.: *Anal. Chem.* 79, 1639 (2007).

2P-09

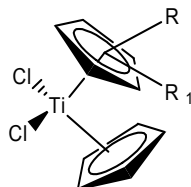
SYNTEZA A FLUOROFILNÍ CHOVÁNÍ
FLUOROVANÝCH DICHLOROTITANOCENŮLUCIE ČERVENKOVÁ ŠTASTNÁ, MILAN KURFÜRST, TOMÁŠ STRAŠÁK a JAN SÝKORA

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

Fluorované komplexy přechodných kovů nacházejí uplatnění ve dvoufázové homogenní katalýze, která využívá specifické rozpustnosti (fluorofility) fluorovaných sloučenin v perfluorovaných rozpouštědlech, jejichž mísitelnost s organickými rozpouštědly je teplotně závislá¹.

Fluorofilita (f_i) kvantifikuje specifickou rozpustnost sloučeniny k fluorové fázi, a je definována jako logaritmus poměru koncentrací sloučeniny v jednotlivých fázích směsi perfluor(methylcyklohexan) / toluen. Pokud je $f_i > 0$, látka je označována jako fluorofilní.

Cílem práce byla příprava a studium fluorofilního chování cyklopentadienylových komplexů titanu (*I,II*) v závislosti na délce a počtu perfluorovaných řetězců.

*I,II*

I $R_1 = H$ **a** $R = Si(Me)_2C_nF_{2n+1}$ $n=4,6,8$
II $R_1 = R$ **b** $R = Si(C_2H_4C_nF_{2n+1})_3$

Bylo zjištěno, že fluorofilita připravených látek je úměrná objemu perfluorovaných řetězců, a u vybraných zástupců byla testována katalytická aktivita a míra recyklovatelnosti katalyzátoru.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR LC06070 a GACR GP203/08/P412.

LITERATURA

1. Gladysz J. A., Curran D. P., Horváth I. T., v knize: *Handbook of Fluorous, Light Fluorous Chemistry – A user's Guide*, kap. 8, s. 128. WILEY-VCH, Weinheim 2004.

2P-10

VYUŽITIE MICHAELOVÝCH ADÍCIÍ PRI PRÍPRAVE
PREKURZORU OSELTAMVIRU A JEHO ANALÓGOVATTILA LATIKA*, JURAJ REHÁK, HENRICH
BRATH a JÚLIUS DURMIS

SYNKOLA, s.r.o., Mlynská dolina CH-2, 842 15
Bratislava
latika@synkola.sk

Fosfát oseltamviru *I* je účinnou látkou Tamiflu[®], ktorý patrí v súčasnosti k najpoužívanejším antivirotikám určených na liečenie rôznych kmeňov chrípky vrátane kmeňa H5N1 (cit.¹). Oseltamvir je vyrábaný 13 krokovou syntézou z kyseliny Shikimovej firmou Hoffmann-La Roche², pričom i ďalšie známe syntézy pozostávajú z mnohých syntetických krokov^{3,4}. Jedna z najoriginálnejších syntéz opublikoval Hayashi v roku 2009 (cit.⁵). Kľúčovým krokom jeho syntézy bola organokatalytická Michaelova adícia α -alkoxyaldehydu s príslušným nitrolefinom. Našou snahou bolo využit' analogickú organokatalytickú reakciu a takto pripravený medziprodukt upraviť v 2–3 stupňoch na požadovaný Oseltamvir. V prvej fáze sa nám podarilo pripraviť požadované prekurzory vo vynikajúcich výťažkoch. Následne sme ich použili v organokatalytických reakciách, ktoré poskytli požadované produkty vo vynikajúcich výťažkoch a enantioselektivitách. Takto pripravené Michaelove adukty sme následne použili v adično-cyklizačnom kroku z ktorého sa nám podarilo pripraviť očakávané prekurzory oseltamviru a jeho analógov.

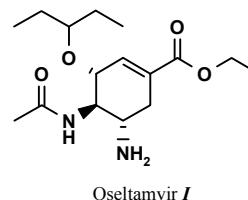
Oseltamvir *I*

Schéma 1.

LITERATÚRA

1. Lew W., Chen X., Kim C.U.: *Curr. Med. Chem.* 6, 663 (2000).
2. Abrecht S., Harrington P., Iding H., Karpf M., Trussardi R., Wirz B., Zutter U.: *Chimia* 58, 621 (2004).
3. Yeung Y. Y., Hong S, Corey E. J.: *J. Am. Chem. Soc.* 128, 6310 (2006).
4. Fukuta Y., Mita T., Fukuda N., Kanai M., Shibasaki M.: *J. Am. Chem. Soc.* 128, 6312 (2006).
5. Ishikawa H., Suzuki T., Hayashi Y.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 48, 1304 (2009).

2P-11

KINETIKA DEGRADACE HYALURONANU PŘI KYSELÉ A ZÁSADITÉ HYDROLÝZE

TEREZA EHLOVÁ*, VERONIKA LEIEROVÁ a VLADIMÍR VELEBNÝ

Contipro C, Dolní Dobrouč 401, 561 02 Dolní Dobrouč
ehlova@contipro.cz

Hyaluronan (HA) je vysokomolekulární (10^5 – 10^7 Da) lineární glykosaminoglykan (GAG), který se nachází v extracelulární matrix tkání obratlovců. Strukturu polymeru tvoří opakující se disacharidové jednotky kyseliny D-glukuronové a N-acetyl-D-glukosaminu¹. Je známo, že fyzikálně-chemické vlastnosti a biologická aktivita nativního polymeru se významně liší od vlastností nízkomolekulárních fragmentů². Literatura uvádí řadu postupů, jimiž lze vysokomolekulární hyaluronan fragmentovat. Mezi nespécifické metody štěpení patří např. tepelná degradace a kyselá nebo zásaditá hydrolýza³.

Pokles molekulové hmotnosti hyaluronanu v 1% roztoku při teplotě 97 °C byl sledován v závislosti na pH (3–10). Molekulová hmotnost byla stanovena pomocí metody SEC-MALS. Bylo zjištěno, že pokles molekulové hmotnosti hyaluronanu je za konstantní teploty funkcí pH. Nejrychleji probíhala degradace při kyselém pH 3–5, naopak pomalu v rozmezí pH 6–10. Získané kinetiky degradace lze využít k přípravě fragmentů hyaluronanu o předem definované molekulové hmotnosti. Produkty degradací se v závislosti na pH liší v parametru polydisperzity, přičemž obecně platí, že frakce získané zásaditou hydrolýzou vykazovaly nižší polydisperzitu než frakce o srovnatelné molekulové hmotnosti připravené za kyselých podmínek.

LITERATURA

1. Laurent T. C., v knize: *Chemistry and biology of hyaluronan*, kap. 1, s. 1. Elsevier Ltd., Oxford 2004.
2. Kou J. W., v knize: *Practical aspekt of hyaluronan based medical products*, kap. 6, s. 184. CRC Press, Boca Raton 2006.
3. Stern R., Kogan G., Jedrzejewski M. J., Šoltés L: *Biotechnol. Adv.* 25, 543 (2007).

2P-12

SYNTEZA A BIOLOGICKÉ VLASTNOSTI NOVÝCH DERIVÁTŮ CYKLOFANŮ

ALEŠ MAREK^{a,b*}, JIŘÍ KULHÁNEK^b
a ŠARKA ŠTĚPÁNKOVÁ^b^a ÚOCHB AV ČR, v.v.i., Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6,
^b Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice
ales.marek@uochb.cas.cz

Makrocikly odvozené od aminokyselin nabývají na významu pro své biologické, katalytické a vazebné vlastnosti¹.

Opticky aktivní cyklofany **3** obsahující ve svém skeletu imidazolové jádro (imidazoliofany) byly připraveny N-alkylací chirálních derivátů imidazolů **1** odvozených od

α -aminokyselin za přípravy nejprve precyklofanů **2a** a **2b** a následnou dvojnásobnou kvarternizací jejich N3-dusíků. Byla provedena i syntéza jejich nechirálních analogů **4**.

U připravených chirálních i nechirálních derivátů byla studována inhibiční aktivita vůči acetyl- a butyrylcholinesterase. Naměřené hodnoty IC₅₀ se pohybovaly v oblasti mikro- až nano-mol/l.

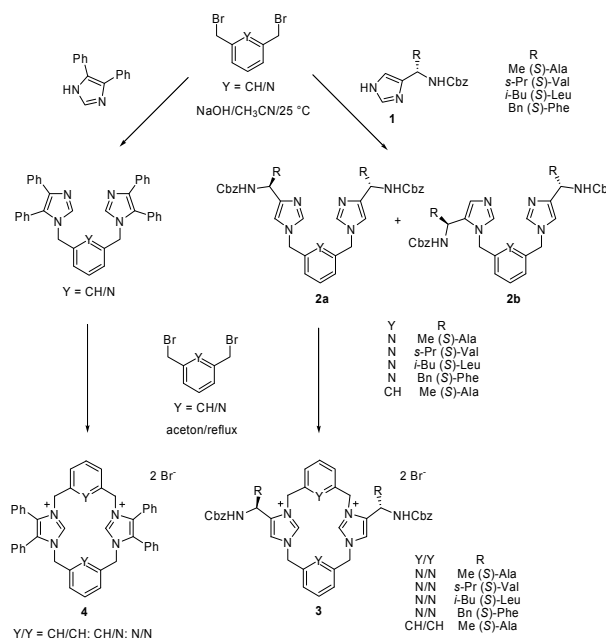


Schéma 1. Syntéza imidazolidinů

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR (MSM 0021627501 and MSM 0021627502) a ÚOCHB AV ČR (výzkumný záměr Z4 055 0506).

LITERATURA

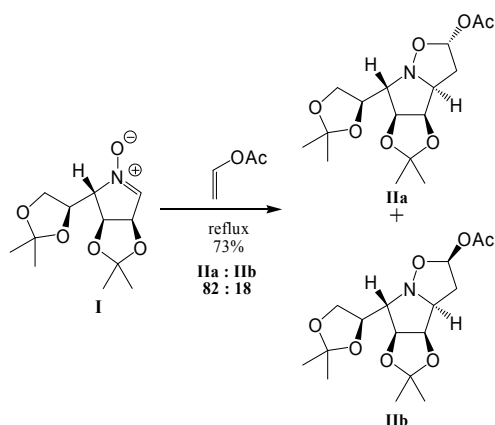
1. Gibson S. E., Lecci C.: *Angew. Chem., Int. Ed.* 45, 1364 (2006).
2. Marek A., Kulhánek J., Ludwig M., Bureš F.: *Molecules* 12, 1183 (2007).

2P-13

PREPARATION AND USE OF POLYHYDROXYLATED BICYCLIC ISOXAZOLIDINES

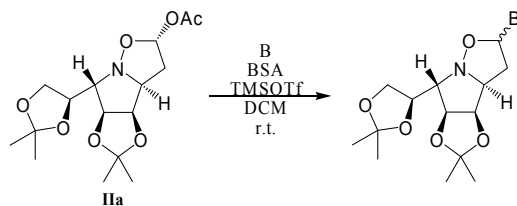
MICHAL MEDVECKÝ, MILICA SABOLOVÁ,
and EUBOR FIŠERAInstitute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry,
Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava
mmedvecky@gmail.com

The 1,3-dipolar cycloaddition of the chiral cyclic nitron **1** with vinyl acetate proceeded with good diastereoselectivity and good yields affording the bicyclic isoxazolidines **IIa,b** as the mixture of the two diastereoisomers (Scheme 1)¹.



Scheme 1.

The obtained cycloadducts **IIa,b** are employed as potential building blocks for the preparation of the polyhydroxylated pyrrolidines². Moreover, the isoxazolidinyl derivatives **IIa,b** were used for the synthesis of the bicyclic isoxazolidinyl nucleosides (scheme 2)³.



B = uracil, 5-fluorouracil

Scheme 2.

REFERENCES

- Hýrošová E., Fišera L., Medvecký M., Reissig H. U., Al-Harrasi A., Kooš M.: *ARKIVOC* ix, 122 (2009).
- Liautard V., Christina E. A., Desvergnés V., Martin O. R.: *J. Org. Chem.* 71, 7337 (2006).
- Hýrošová E., Medvecký M., Fišera L., Hametner C., Fröhlich J., Marchetti M., Allmaier G.: *Tetrahedron* 64, 3111 (2008).

2P-14

SYNTÉZA A VYUŽITIE OBJEMNÝCH FOSFÁNOVÝCH LIGANDOV NA BÁZE BINAFTYLU

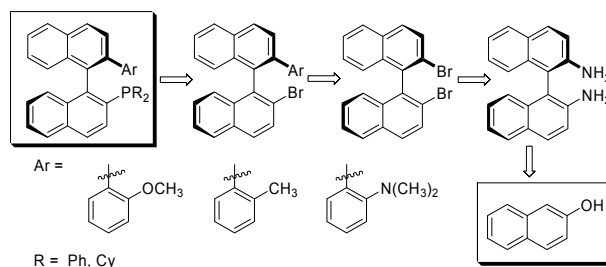
MICHAELA MEŠKOVÁ a MARTIN PUTALA

*Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava
meskova@fns.uniba.sk*

Komplexy objemných fosfánových ligandov s atómom prechodného kovu (pre katalýzu najčastejšie Pd, Ni, Ru, Rh) (cit.^{1,2}) slúžia ako katalyzátory v organických reakciách pri

syntéze významných zlúčenín. Osobitne zaujímavé vlastnosti v katalýze (univerzálnosť typov katalyzovaných reakcií, efektívna katalýza) preukázali objemné bifenylové ligandy³. V literatúre je opísaných len málo príkladov ich chirálnych analógov na báze binaftyly⁴.

Inšpirovaní aplikáciami rôznych fosfánov sme chceli prispieť k príprave chirálnych objemných monoarylfosfánových binaftylových ligandov, ktoré obsahujú stericke náročné orto-substituované fenyl s elektrónovo-bohatým substituentom. Vyskúšali sme viacero syntetických prístupov pre ich prípravu. Najefektívnejšia príprava vychádzala z enantiomérmu čistého DABN. Z neho sa sledom reakcií, vrátane rezolúcie pripravil príslušný dibromid. Nasledovala katalyzovaná Negishiho cross-couplingová reakcia arylzinkium-chloridom s dibromidom binaftyly. Prípravou monoarylovaného bromidu binaftyly sme zabezpečili ľahkosť zavedenia diaryl-, ale aj dialkylfosfanylových skupín na binaftylový skelet (fosfanyláciou cez 2-litnu soľ).



V návaznosti na prípravu fosfánových ligandov sme otestovali ich katalytickú aktivitu v enantioselektívnej Suzuki-Miyauraovej reakcii za vzniku chirálnych biarylov.

Táto práca vznikla za podpory Slovenskej grantovej agentúry VEGA, č. grantu 1/0265/09.

LITERATÚRA

- Vogler A., Kunkely H.: *Coord. Chem. Rev.* 230, 243 (2002).
- Dias P. B., Minas de Pidade M. E., Simões J. A. M.: *Coord. Chem. Rev.* 135/136, 737 (1994).
- Milne J. E., Buchwald S. L.: *J. Am. Chem. Soc.* 126, 13028 (2004).
- Whitesell J. K.: *Chem. Rev.* 89, 1581 (1989).

2P-15**N-BENZYLALICYLTHIOAMIDY: SLOUČENINY S ANTIFUNGÁLNÍM A ANTIBAKTERIÁLNÍM ÚČINKEM**

EVA PETRLÍKOVÁ^a, KAREL WAISSER^a, PETR JÍLEK^a, VLADIMÍR BUCHTA^b, IDA DUFKOVÁ^a a JARMILA KAUSTOVÁ^c

^a Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, ^b Fakultní nemocnice v Hradci Králové, Ústav klinické mikrobiologie, Sokolská 581, 500 05 Hradec Králové, ^c Zdravotní ústav se sídlem v Ostravě, Partyzánské náměstí 7, 702 00 Ostrava
Eva.Petrlikova@faf.cuni.cz

Antibiotika patří k nejvýznamnějším objevům 20. století, které pomohly zachránit mnoho lidských životů. V současnosti ale dochází k nárůstu počtu patogenních organismů, které jsou vůči antibiotikům rezistentní. Nárůst onemocnění je spojen s celosvětovým rozšířením infekce HIV, s rostoucím počtem pacientů léčených preparáty ovlivňujícími imunitu (transplantace, léčba rakoviny) a také s migrací obyvatel. U *N*-benzylsalicylthioamidů, které byly připraveny thioanací *N*-benzylsalicylamidů byla zjišťována jejich biologická aktivita proti čtyřem kmenům mykobakterií: *Mycobacterium tuberculosis*, *M. avium* a dvěma kmenům *M. kansasii*, dále aktivita proti Gram-pozitivním bakteriím (*Staphylococcus aureus*, *S. aureus methicilin rezistentní*, *S. epidermidis*, *Enterococcus sp.*), aktivita proti Gram-negativním bakteriím (*E. coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Klebsiella pneumoniae*) a proti některým houbovým organismům (*Candida albicans*, *C. tropicalis*, *C. krusei*, *C. glabrata*, *Trichosporon*, *Aspergillus fumigatus*, *Absidia corymbifera* a *Trichophyton mentagrophytes*). INH, neomocin, penicilin G, ciprofloxacín, fenoxypenicilin a flukonazol byly použity jako standardy k posouzení minimální inhibiční koncentrace (MIC). Testované sloučeniny vykazovaly vysokou aktivitu vůči mykobakteriím¹, vůči Gram-pozitivním bakteriím a byly také aktivní vůči houbovým organismům. Jejich biologická aktivita vůči Gram-negativním bakteriím byla zanedbatelná. U sloučenin byl dále zjišťován vztah mezi jejich strukturou a biologickou aktivitou (QSAR) a na základě zjištění, že na aktivitu má významný vliv lipofilita (log P) byla provedena i studie lipofility pomocí tenkovrstvé chromatografie. Z výsledků výzkumu plyne, že připravené sloučeniny představují skupinu biologicky aktivních látek, které svým účinkem překonávají některá souborá antibiotika.

Projekt je částí výzkumného projektu Ministerstva školství a mládeže ČR, No. MSM0021620822.

LITERATURA

1. Doležal R., Waissner K., Petrlíková E., Kuneš J., Kubicová L., Macháček M., Kaustová J., Dahse Hans M.: Arch. Pharm. Chem. Sci. 342 (2009).

2P-16**KINETIKA SULFURIZACE TRIFENYL-FOSFITU SUBSTITUOVANÝMI 5-FENOXY-1,2,4-DITHIAZOL-3-ONY**

OLEKSANDR PONOMAROV* a JIŘÍ HANUSEK

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
oleksandr.ponomarov@student.upce.cz

1,2,4-Dithiazoly jsou perspektivními činidly pro sulfurizaci sloučenin obsahujících fosfor^{1,2}. Námí studované 5-fenoxy-1,2,4-dithiazol-3-ony byly připraveny z příslušných fenolů a charakterizovány pomocí ¹H, ¹³C NMR a X-ray analýzy.

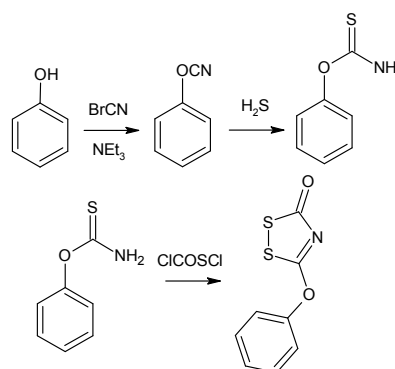


Schéma 1. Příprava 5-fenoxy-1,2,4-dithiazol-3-onu

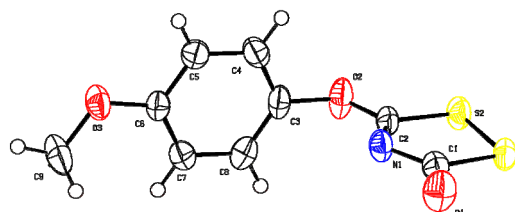


Schéma 2. ORTEP-diagram 5-(4-methoxyfenoxy)-1,2,4-dithiazol-3-onu

Kinetika sulfurizační reakce 5-fenoxy-1,2,4-dithiazol-3-onu s trifenyl-fosfitem byla sledována za podmínek pseudo-prvního řádu v přebytku P(OPh)₃ metodou stopped flow.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru MŠMT ČR č. 002 162 7501.

LITERATURA

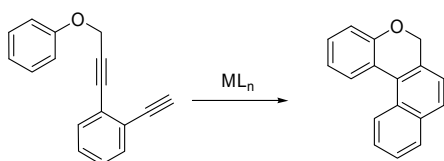
1. Hanusek J., Russel M., Laws A., Jansa P., Atherton J., Fettes K., Page M.: Org. Biomol. Chem. 5, 4778 (2007).
2. Hanusek J., Russel M., Laws A., Page M.: Tetrahedron Lett. 48, 417 (2007).

2P-17 VYUŽITÍ TANDEMOVÉ CYKLOISOMERACE K SYNTÉZE HELIKÁLNÍCH MOLEKUL

JAN STORCH*, JINDŘICH KARBAN a JAN SÝKORA

Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Rozvojová 2/135,
165 02 Praha 6 - Suchbátka
storchj@icpf.cas.cz

Cykloisomerační reakce enynů katalyzované komplexy či solemi přechodných kovů představují jednoduchý, čistý a levný proces s možností navýšit měřítko procesu. Reakce je v mnoha případech možné provádět na vzduchu bez nutnosti inertní atmosféry. Mnoho substrátů podléhajících těmto reakcím jsou s úspěchem katalyzovány sloučeninami $PtCl_x$ ($x = 2, 4$), za vzniku širokého spektra karbo- i hetero- produktů v závislosti na podmínkách a struktuře výchozích reaktantů. Formální adice aromatické C-H vazby na trojnou může být rovněž považována za cykloisomeraci enynů. Deriváty bifenyly, které mají v *ortho* poloze alkynový řetězec, spadají do skupiny enynů a jako takové poskytují odpovídající cykloisomerační produkty¹. V naší skupině byl nedávno vyvinut syntetický postup vedoucí k [6]helicenům, který využívá dvojnásobnou cykloisomeraci bifenyly-naftalenů nesoucích v *ortho* polohách propylylové řetězce². Tato metoda byla rozšířena o tandemovou verzi, která byla využita při přípravě helikálních molekul obsahujících pyranový kruh, jejichž výsledky budou zde prezentovány.



Tato práce vznikla za podpory grantů MŠMT ČR LC06070 a GA ČR P207/10/1124.

LITERATURA

- Mamane V., Hannen P., Fürstner A.: Chem. Eur. J. 10, 4556 (2004).
- Storch J., Sýkora J., Čermák J., Karban J., Císařová I., Růžička A.: J. Org. Chem. 74, 3090 (2009).

2P-18 β-ENAMINOESTERY A JEJICH REAKCE S 4-SUBSTITUOVANÝMI BENZENDIAZONIUM- TETRAFENYLBORÁTY

MARKÉTA SVOBODOVÁ, PETR ŠIMŮNEK
a VLADIMÍR MACHÁČEK

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-
technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10
Pardubice
marketa.svobodova@upce.cz

Je známo, že polarizované ethyleny (např. enaminy, enaminoamidy, enaminoimidy) reagují se substituovanými benzendiazonium-tetrafluorboráty při poměru 1:1 za vzniku azokopulačních produktů *I* (cit.¹). Pokud jsme při reakcích těchto ethylenů použili benzendiazonium-tetrafenylboráty, izolovali jsme heterocyklické sloučeniny *II* a *III* (Schéma 1)^{2,3}.

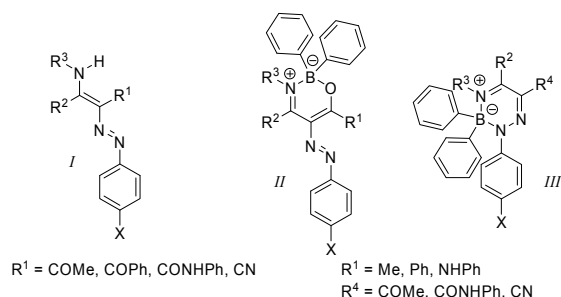


Schéma 1.

Navrhli jsme také mechanismus vzniku oxazaborinů, který byl podložen i izolací málo stabilního intermediátu² *IV* (Schéma 2). V případě reakce ethyl-3-aminobut-2-enoátu se 4-substituovanými benzendiazonium-tetrafenylboráty jsme naopak izolovali pouze intermediát *V* (Schéma 2), který stabilní je (krystalizace z toluenu).

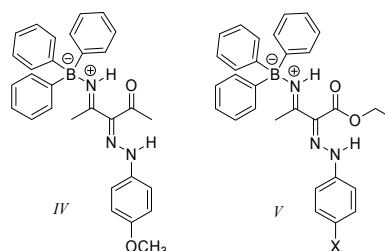


Schéma 2.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR (Projekt MSM 0021627501).

LITERATURA

- Šimůnek P., Macháček V.: Dyes Pigments, v tisku.
- Pešková M., Šimůnek P., Bertolasi V., Macháček V., Lyčka A.: Organometallics 25, 2025 (2006).
- Svobodová M., Bárta J., Šimůnek P., Bertolasi V., Macháček V.: J. Organomet. Chem. 694, 63 (2009).

2P-19

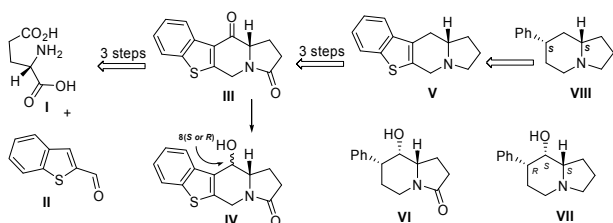
HIGHLY DIASTEREOSELECTIVE APPROACH TO PHENYLINDOLIZIDINOLS BASED ON A BENZO[B] THIOPHENE REDUCTIVE DESULFURIZATION

EVA TÓTHOVÁ, PETER ŠAFÁŘ, JOZEFÍNA ŽÚŽIOVÁ, EUBOMÍR ŠVORC, and ŠTEFAN MARCHALÍN

Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
peter.safar@stuba.sk

Polyhydroxylated indolizidines alkaloids are excellent inhibitors of biologically important pathways¹. In this line, castanospermine and swainsonine have shown respective glycosidase and mannosidase inhibitory activities, respectively^{2,3}.

Chiral (11a*S*)-keto lactam **III** and the ancillary alcohol **IV** were generated from benzothiophene-2-carboxaldehyde (**II**) and (*S*)-glutamic (**I**) acid in three and four steps, respectively, in good overall yields and both high enantio- and diastereomeric purities. The reduction of the keto-lactam **III** with NaBH₄, Et₃SiH/TFA and LAH led to a novel benzothieno analogue **V** of the bioactive alkaloid tylophorine. Applying a thiophene reductive desulfurization, compound (*S*)-**V** was readily converted into a new alkaloid 7-phenylindolizidine **VIII**. We have also successfully introduced a new and expedient synthetic way to epimeric 7(*S*)-phenyl-8(*R* or *S*)-indolizidinols **VII**. Our uncommon strategy uses as key step a reductive desulfurization of the benzothiophene ring with a Raney-nickel reductant in which the benzothiophene ring in ketone **III** constitutes an original phenyl source⁴. Ultimately, the synthesis of target 7-phenyloctahydroindolizine **VII** was completed by LAH reduction of the lactams **VI**.



The authors thank the Grant Agency of Slovak Republic, Grant No. 1/0161/2008 and the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-0210-07 for the financial support for this research program.

REFERENCES

1. Michael J. P.: Nat. Prod. Rep. 25, 139 (2008).
2. Karanjule N. S., Markad S. D., Shinde V. S., Dhavale D. D.: J. Org. Chem. 71, 4667 (2006).
3. Kim I. S., Zee O. P., Jung J. H.: Org. Lett. 8, 4401 (2006).
4. Šafář P., Žúžiová J., Marchalín Š., Tóthová E., Prónayová N., Švorc E., Vrabel V., Daich A.: Tetrahedron: Asymmetry 20, 626 (2009).

2P-20

KONVERGENTNÍ SYNTÉZA LIDSKÉHO PRIONOVÉHO PEPTIDU 106-126 S VYUŽITÍM CHEMICKÉ LIGACE A DESULFURACE-DESELENACE

JAROSLAV ŠEBESTÍK, ZBIGNIEW ZAWADA, MARTIN ŠAFÁŘÍK a JAN HLAVÁČEK

Ústav organické chemie a biochemie, AV ČR, v.v.i., Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha
jsebestik@seznam.cz

Prionové proteiny způsobují různá neurodegenerativní onemocnění, jako jsou CJD, BSE, nvCJD, GSS atd¹. Prionový peptid HuPrP106-126 je považován za sekvenci, která je obtížně dostupná Fmoc přístupem². Uskutečnili³ jsme optimalizovanou divergentní syntézu HuPrP106-126 s výtěžkem 9 %. Abychom zvýšili výtěžek, rozhodli jsme se použít konvergentní syntézu s využitím ligace 2 a 3 peptidových fragmentů a následným odstraněním SH či SeH skupiny⁴. U 2-fragmentové ligace byly spojovány peptidy KTNMKHMAG* s CAAAGAVVGGLG nebo UAAAGAVVGGLG; a KTNMKHMAGAAAAG* s CVVGGLG nebo UVVGGLG (* zastupuje ester, thioester⁵ nebo cyklickou močovinu⁶). Vzhledem k omezeným výtěžkům u syntézy delších fragmentů, byly provedeny syntézy založené na ligaci 3 menších fragmentů. V prvním případě jsme testovali možnost kineticky řízené ligace⁷ s využitím chemoselektivity SH a SeH skupin (KTNMKHMAG*, CAAAG* a UVVGGLG). V druhém případě byl testován přístup následných ligací⁸. Ligace Thz-AAAG* a UVVGGLG byla následována otevřením thiazolidinového kruhu NH₂OH. Nově vzniklý Cys byl spojen s KTNMKHMAG*. Produkty byly přeměněny na HuPrP106-126 desulfurací/deselenací podle Danishefského postupu⁴. Bude prezentováno srovnání konvergentních a divergentních přístupů k syntéze HuPrP106-126.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 203-07-1517 a výzkumného záměru Z40550506.

LITERATURA

1. Prusiner, S.B.: PNAS USA 95, 13363 (1998).
2. Jobling M., Barrow C., White A., Masters C., Collins S., Cappai R.: Lett. Pept. Sci. 6, 129 (1999).
3. Sebestik J., Hlavacek J., Stibor I.: Biopolymers 84, 400 (2006).
4. Wan Q., Danishefsky S. J.: Angew. Chem. Int. Ed. 46, 9248 (2007).
5. von Eggelkraut-Gottanka R., Klose A., Beck-Sickinger A. G., Beyermann M.: Tetrahedron Lett. 44, 3551 (2003).
6. Blanco-Canosa J. B., Dawson P. E.: Angew. Chem. Int. Ed. 47, 6851 (2008).
7. Bang D., Pentelute B. L., Kent S. B. H.: Angew. Chem. Int. Ed. 45, 3985 (2006).
8. Bang D., Kent S. B. H.: Angew. Chem. Int. Ed. 43, 2534 (2004).

2P-21
CROSS-METATHEZE ALLYL-KARBORANŮ
S ALLYL- β -CYKLODEXTRINŮ

IVAN ŠNAJDR^a, ZBYNĚK JANOUŠEK^b, JINDŘICH JINDŘICH^a a MARTIN KOTORA^{a,c}

^a Katedra organické a jaderné chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze, Hlavova 8, 128 43 Praha 2, ^b Ústav anorganické chemie AV ČR, Husinec-Řež 1001, 250 68 Řež, ^c Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemingovo náměstí 2, 166 10 Praha 6
 snaji0aa@natur.cuni.cz

Cyklodextriny jsou látky přírodního původu široce používané ve farmaceutickém průmyslu například jako solubilizátory pro lipofilní látky, stabilizátory pro fotosenzitivní léčiva a také jako nosiče pro řízené uvolňování léčiv¹. Karborany jsou sloučeniny obsahující velké množství atomů bóru a proto jsou používány jako nosiče atomu ¹⁰B při protinádorové terapii (borová neutronová záchytová terapie, BNCT)². Náš cílem je spojení těchto dvou sloučenin pomocí cross-metatheze alkenů³ katalyzované karbenovými komplexy ruthenia (Schéma 1).

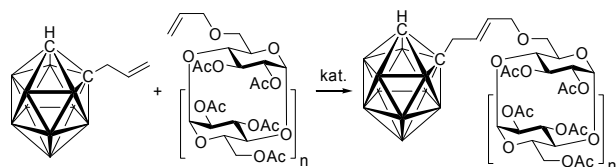


Schéma 1.

Jako modelové látky byly použity různé druhy per-Ac-monoallyl- β -cyklodextrinů a různé allyl-karborany. Jako katalyzátor se osvědčil Hoveyda-Grubbsův katalyzátor druhé generace. Reakce probíhaly s uspojitými výtežky.

Tato práce vznikla za podpory Centra pro nová antivirotika a antineoplastika MŠMT (projekt č. 1M0508) a grantové agentury AVČR (projekt č. IAA 400 550 609).

LITERATURA

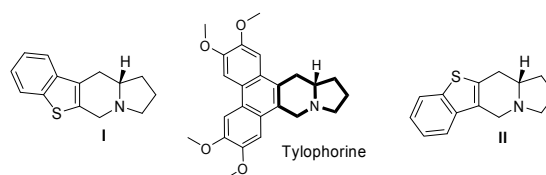
- Hirayama F., Usami M., Komara K., Uekama K.: Eur. J. Pharm. Sci. 5, 23 (1997).
- Hawthorne M. F., Madema A.: Chem. Rev. 99, 3421 (1999).
- Chatterjee A. K., Choi T. L., Sanders D. P., Grubbs R. H.: J. Am. Chem. Soc. 125, 11360 (2003).

2P-22
AN EFFICIENT SYNTHESIS OF NOVEL
BENZOTHIENO ANALOGOUS OF TYLOPHORINE

PETER ŠAFÁŘ, JOZEFÍNA ŽŮŽIOVÁ, and ŠTEFAN MARCHALÍN

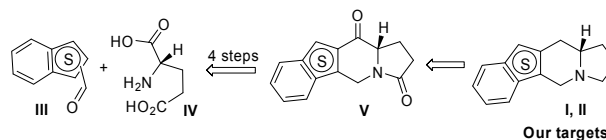
Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
 peter.safar@stuba.sk

In this work we introduce a preparation of izomeric benzothienoindolizine analogues **I**, **II** of the bioactive alkaloid tylophorine (Scheme 1).



Scheme 1.

The targeted compounds **I** and **II** can be envisioned as coming from isomeric keto-amides **V** (readily available from benzo[*b*]thiophene-2 or (3)-carboxaldehyde **III** and (*S*)-glutamic acid) via a double ketone and lactam reduction. The asymmetry as well as the nitrogen atom source could be effectively derived from the same chiral pool approach using (*S*)-glutamic acid **IV** as the starting substrate¹.



Scheme 2.

While the targeted indolizine **I** was prepared with the LAH reduction of corresponding amide, surprisingly, reduction of izomeric lactam with LAH in refluxing THF was unsuccessful and starting material was recover. Ultimately, reduction with $\text{BH}_3 \cdot \text{Me}_2\text{S}$ in THF provided the targeted compound (11*aS*)-hexahydro[*b*]benzothieno[3,2-*f*]indolizine **II** in 85% yield².

The authors thank the Grant Agency of Slovak Republic, Grant No. 1/0161/2008 and the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-0210-07 for the financial support for this research program.

REFERENCES

- Šafář P., Žůžiová J., Marchalín Š., Tóthova E., Prónayova N., Švorc Ľ., Vrabel V., Daich A.: Tetrahedron: Asymmetry 20, 626 (2009).
- Šafář P., Žůžiová J., Bobošiková M., Marchalín Š., Prónayova N., Comesse S., Daich A.: Tetrahedron: Asymmetry 20, 2137 (2009).

3IL-01 SOUČASNÉ TRENDY HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE

MICHAEL VOLNÝ^a, KAREL LEMR^b, MARIÁN
HAJDÚCH^b, VERONIKA VIDOVÁ^a, MIROSLAV
ŠULC^a, MAREK KUZMA^a, OLDŘICH BENADA^a
a VLADIMÍR HAVLÍČEK^{a*}

^a Mikrobiologický ústav AV ČR v.v.i., Vídeňská 1083, 142 20
Praha 4, ^b Universita Palackého v Olomouci, Tř. 17. listopadu
12, 771 46 Olomouc
vlhavlic@biomed.cas.cz

Hmotnostní spektrometrie slaví letos stoleté výročí svého vzniku. Během dvacátého století prožívala horší i lepší chvíle, několikrát byla „otci-zakladateli“ označena za mrtvou metodu, aby v osmdesátých letech přispěla ke vzniku zcela nových, zvláště biologických oborů a aplikací. První dekáda XXI století pak charakterizuje hmotnostní spektrometrii (mimo jiného) třemi hesly: ambientní techniky, vysoké rozlišení a hmotnostní zobrazování. Ambientní techniky zahrnují ionizační procesy, které probíhají za normálního tlaku a teploty a v některých případech proto mohou sloužit i k ionizaci/desorpci látek z živých objektů. Vysoce rozlišující analyzátoři se stávají zcela běžnou instrumentací, a to díky své přesnosti a správnosti měření, občas spojené i s dobrým dynamickým rozsahem měření a rychlým sběrem dat. Do této kategorie patří na principu iontové cyklotronové rezonance (ICR), orbitrapu a moderní analyzátoři z doby letu (TOF). Z nových aplikací hmotnostní spektrometrie poslední doby nelze nezmínit hmotnostní mikroskopii (2D hmotnostní zobrazování). V anglosaské literatuře se hovoří o technice „Mass Spectrometry Imaging“. U hmotnostního zobrazení jsou vizualizovány dvourozměrné obrazy povrchu získané počítačovou rekonstrukcí iontových druhů, které jsou ze zobrazovaného objektu desorbovány. Děje se tak rastrovacím způsobem, a to při prostorovém rozlišení zatím v řádu jednotek až stovek mikrometrů podle typu primárního ionizujícího svazku, kterým může být laser (při asistenci matrice hovoříme o MALDI zobrazení), svazek iontů (např. C60) nebo svazek nabitých kapiček (DESI mikroskopie). Oproti ostatním zobrazovacím technikám hmotnostní mikroskopie nedává pouze odpověď typu „je tam něco, vypadá to jako“, ale současně i informaci o chemické povaze příslušného zkoumaného objektu. Hmotnostní zobrazení/mikroskopie je tedy potenciálním nástrojem pro identifikaci a charakterizaci biomarkerů, např. molekul charakterizujících patologický stav. Pokud to dovolí dynamický rozsah, můžeme hodnotit mj. nádorovou tkáň, případně subtypy tumorů na základě souboru bílkovin nebo jiných specifických molekul, které jsou ve zdravých tkáních zastoupeny jinak. Při hledání molekulárních znaků nějakého infekčního onemocnění, lze přímo porovnávat tkáň zdravou a infikovanou. Můžeme se dívat, do jakých orgánů se deponuje podané nízkomolekulární léčivo a jak je metabolizováno. Můžeme sledovat, jaká je molekulární odezva na příslušný léčebný proces. V rámci přednášky budou dokumentovány biologické aplikace s důrazem na analýzu lipidů a peptidů.

Tato práce vznikla za podpory grantů MŠMT ČR LC07017 a MSM6198959216 a výzkumného záměru AV0Z50200510.

3IL-02 VÍCEROZMĚRNÁ KAPALINOVÁ CHROMATOGRAFIE

PAVEL JANDERA

Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická,
Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
pavel.jandera@upce.cz

Při analýze složitých biologických a jiných vzorků je často třeba separovat a stanovit velký počet látek. K tomuto účelu často nepostačuje separace na jedné koloně při tzv. "jednorozměrné" chromatografii. Hlavním cílem vícerozměrné HPLC je zvýšení počtu separovaných látek v průběhu jedné analýzy ve složitých vzorcích. Vedle použití účinných kolon má zásadní význam použití systémů s různými separačními selektivitami v jednotlivých dimenzích, nejlépe tzv. "ortogonálních" systémů, vykazujících velmi nízkou míru korelace retence. Dvourozměrná HPLC byla dosud využívána především v proteomickém výzkumu, v poslední době stále rostou aplikace v dalších oblastech – při analýzách látek rostlinného původu, potravin, životního prostředí, metabolitů léčiv, syntetických polymerů a dalších technických produktů.

Techniky dvourozměrné HPLC se již dlouho využívaly v tzv. off-line uspořádání, kdy se izolovala část vzorku separovaného v jednom systému a potom se podrobila separaci v jiném systému. Občas se používalo i on-line zapojení, kde se vybraná frakce eluátu z jedné kolony převáděla pomocí šesticestného přepínacího ventilu do jiné kolony. Obě tyto pracovní techniky umožňovaly získat podrobné informace pouze o vybrané části vzorku.

Úplnou informaci o složení celého vzorku lze získat při poměrně nové technice tzv. "comprehensive" (úplné, celostní) LCxLC kapalinové chromatografie, kde se převádí veškerý eluát z kolony v první dimenzi v malých frakcích přímo (in-line) do druhé dimenze ve dvou střídavých cyklech s předem nastavenou frekvencí odběru frakcí z kolony v první dimenzi. Tímto způsobem je celý vzorek podroben separaci v obou dimenzích a lze získat úplnou informaci o jeho složení. Zatím co se předchozí frakce z první smyčky (obohacovací kolony) analyzuje na koloně ve druhé dimenzi, následující frakce se jímá ve druhé smyčce (či na druhé obohacovací kolonce) Zařízení pro praktickou realizaci této techniky lze sestavit z běžného kapalinového chromatografu, pomocného HPLC čerpadla pro druhou dimenzi a převodníku frakcí mezi první a druhou dimenzí, obvykle deseticestného nebo dvou šesticestných ventilů se dvěma stejnými dávkovacími smyčkami nebo krátkými obohacovacími mikrokolonkami. Mobilní fáze v obou systémech je třeba volit s ohledem na vzájemnou kompatibilitu. Je výhodné aby mobilní fáze použitá v první dimenzi měla malou eluční sílu v druhé dimenzi. Protože separace ve druhé dimenzi musí proběhnout v čase, vyhrazeném pro jímání následující frakce z kolony v první dimenzi, je nezbytné sladit rozměry kolon, velikost částic náplně, průtok mobilní fáze v obou systémech s frekvencí cyklů převodu frakcí. Pro úspěšnou aplikaci je vedle volby "ortogonálních" separačních systémů s nekorelovanými selektivitami pro dosažení maximální píkové kapacity velmi důležité i potlačení rozšiřování zón látek, ředění vzorku a snížení citlivosti detekce ve druhé dimenzi využitím různých modulačních technik při

automatickém převodu frakcí z první do druhé dimenze.

V prezentaci jsou ukázány možnosti modulace převodu frakcí s využitím dvou střídavě pracujících identických kolon v druhé dimenzi, obohacovacích kolonek a "back-flushing" techniky, využití mikrokolon v první dimenzi a krátkých účinných kolon, dále kombinace paralelní gradientové eluce v obou dimenzích a vysokoteplotní HPLC v druhé dimenzi. Tyto postupy jsou demonstrovány na analýze přírodních antioxidantů ve vzorcích piva, vína a rostlinných extraktů při kombinaci různých typů stacionárních fází v první a druhé separační dimenzi – silikagelu modifikovaného chemicky vázanými C₁₈, polyethylenglykolovými, fenylovými, diolovými a dalšími skupinami. Vedle náplňových kolon lze ve druhé dimenzi s výhodou využít monolitických kolon nebo kolon s povrchově porézními částicemi.

Řada postupů a aplikací uvedených v tomto příspěvku vznikla za podpory MŠMT ČR v rámci výzkumného záměru 253100002 a Grantové Agentury ČR v rámci projektu 203/07/0641.

LITERATURA

1. Jandera P.: J. Sep. Sci. 29, 1763 (2006).
2. Jandera P., Česla P., Hájek T., Vohralík G., Vyňuchalová K., Fischer J.: J. Chromatogr., A 1189, 207 (2008).
3. Jandera P.: J. Sep. Sci. 31, 1421 (2008).
4. Česla P., Hájek T., Jandera P.: J. Chromatogr., A 1216, 3443 (2009).

3L-01
POKROKY V ENVIRONMENTÁLNÍ
ELEKTROANALÝZE ORGANICKÝCH POLUTANTŮ

JIŘÍ BAREK, ALEŠ DAŇHEL, IVAN JIRÁNEK,
OXANA YOSYPCHUK, JAN FISCHER, VLASTIMIL
VYSKOČIL a KAROLINA PECKOVÁ

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

Cílem příspěvku bude seznámit posluchače s možnostmi a omezeními moderních voltametrických a amperometrických metod při stanovení stopových množství biologicky aktivních organických látek (chemických karcinogenů, pesticidů, barviv, protinádorových léčiv, rozpojovačů hormonů atp.) v různých environmentálních matricích.

Kromě rtuťových elektrod, které dodnes zůstávají ideálními senzory pro monitorování elektrochemicky redukovatelných organických látek¹, bude věnována pozornost i využití tuhých či pastových amalgámových elektrod² vhodných rovněž pro stanovení látek elektrochemicky redukovatelných, borem dopovaných diamantových filmových elektrod³ použitelných jak pro katodické, tak pro anodické děje, uhlíkových pastových elektrod na bázi mikrokuliček ze skleněného uhlíku⁴ rovněž vhodných pro stanovení látek oxidovatelných i redukovatelných, elektrod kompozitních⁵ a různých typů sítotiskových elektrod na jedno použití.

Diskutováno bude využití výše uvedených typů elektrod ve vsádkové i v průtokové analýze, kombinace elektroanalytických metod s předběžnou separací a prekoncentrací a otázky miniaturizace příslušných zařízení a automatizace používaných postupů. Zmíněno bude i použití výše uvedených netradičních elektrodových materiálů ve vysokoúčinné kapalinové chromatografii či v průtokové injekční analýze s elektrochemickou detekcí v tenkovrstvých elektrochemických detektorech či v detektorech typu wall-jet, tabulárních detektorech či detektorech mikrocylindrických.

Tato práce byla finančně podporována Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy (projekt LC 06035, MSM 0021620857 a RP 14/63) a Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (projekt SVV 261204).

LITERATURA

1. Vyskočil V., Berek J.: Crit. Rev. Anal. Chem. 39, 173 (2009).
2. Yosypchuk B., Berek J.: Crit. Rev. Anal. Chem. 39, 189 (2009).
3. Pecková K., Musilová J., Berek J.: Crit. Rev. Anal. Chem. 39, 148 (2009).
4. Zima J., Švancara I., Berek J., Vytřas K.: Crit. Rev. Anal. Chem. 39, 204 (2009).
5. Navrátil T., Berek J.: Crit. Rev. Anal. Chem. 39, 131 (2009).

3L-02
VOLTAMETRIC AND AMPEROMETRIC
DETERMINATION OF SELECTED
AMINONITROPHENOLS

HANA DEJMKOVÁ, JIŘÍ ZIMA, and JIŘÍ BAREK

*Department of Analytical Chemistry, Faculty of Science, UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Charles University in Prague, Albertov 6, 128 43 Prague 2
 hdejmkova@natur.cuni.cz*

Aminonitrophenols are aromatic hydrocarbon derivatives, used in the industry of dyes. Their occurrence is monitored due to their carcinogenic and mutagenic properties¹. They are also formed by metabolization of related compounds. The presence of both oxidizable and reducible functional groups makes them amenable for voltammetric and amperometric detection.

Several methods for the determination of five aminonitrophenol isomers were developed, including those based on cyclic voltammetry, differential pulse voltammetry and HPLC with amperometric detection. This selection covers techniques suitable both for rapid and straightforward measurements in simple matrices and for more demanding analyses in complex samples. Carbon paste electrode (CPE)² and boron-doped diamond electrode (BDDE)³ were used as working electrodes in the methods. The conditions of the measurement, particularly mobile phase and electrolyte composition, detection potentials and electrode treatment, were optimized. The advantages and disadvantages of the methods are discussed from the point of view of sensitivity, selectivity and repeatability. BDDE shows favourable results regarding reached limits of detection, while CPE is preferable for its adaptability. Practical applicability of the methods was tested on model samples of hair dyes and urine.

This work was financially supported by the Czech Ministry of Education, Youth and Sports (projects No. MSM 0021620857, RP14/63 and LC06035) and GA UK (project No. SVV 261204).

REFERENCES

1. IARC Monographs on the Evaluation of the Carcinogenic Risks to Humans, Vol. 57, p. 167. Lyon, 1993.
2. Zima J., Švancara I., Berek J., Vytřas K.: Crit. Rev. Anal. Chem. 39, 204 (2009).
3. Pecková K., Musilová J., Berek J.: Crit. Rev. Anal. Chem. 39, 148 (2009).

3L-03 VYUŽITÍ KATALYTICKÉHO VYLUČOVÁNÍ VODÍKU NA RTUŤOVÝCH A AMALGÁMOVÝCH ELEKTRODÁCH PŘI ANALÝZE BIOPOLYMERŮ

MIROSLAV FOJTA

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

Rtuťové a některé amalgamové elektrody jsou vynikajícími nástroji studia elektrochemické redukce řady látek díky vysokému vodíkovému přepětí (potenciálu potřebného k elektroredukci protonů na elementární vodík), umožňujícímu sledovat elektroodové procesy v oblasti velmi negativních potenciálů. Některé látky mohou snižovat vodíkové přepětí modifikací povrchu elektrody nebo působit jako katalyzátory redukce protonů. Katalytické proudy související s těmito procesy mohou být v řadě případů využívány analyticky. Díky vysokým elektronovým výtěžkům lze měřením katalytických proudových signálů dosáhnout vysokých citlivostí stanovení příslušných analytů (jedna molekula stanovené látky nebo produktu její elektrochemické přeměny může katalyzovat redukci velkého množství protonů, které jsou za vhodných podmínek v základním elektrolytu přítomny v nadbytku).

Využití katalytického vylučování vodíku na rtuťových a amalgamových elektrodách se ukázalo jako výhodné při analýze biopolymerů, a to jak nemodifikovaných (kdy působí jako katalyzátor redukce protonů funkční skupina samotného biopolymeru, což je případ většiny peptidů a bílkovin poskytujících tzv. pik H^1 , příp. peptidů a proteinů obsahujících cystein, které v přítomnosti iontů kobaltu poskytují tzv. Brdičkovu reakci²), tak chemicky modifikovaných. Ve druhém případě je elektrokatalyticky aktivní skupina uměle vnesena do molekuly biopolymeru. Typickými případy těchto modifikací jsou komplexy přechodných kovů kovalentně navázané na nukleové kyseliny. Tyto komplexy mohou sloužit jako elektroaktivní značky (komplexy oxidu osmičelého tvořící kovalentní adukty s pyrimidinovými zbytky v nukleových kyselinách³), nebo jako léčiva, jejichž farmakologická aktivita je spojena s chemickou modifikací DNA (cisplatina a analogické komplexy platiny⁴). S využitím katalytických procesů doprovázejících elektrochemickou redukci kovů v těchto komplexech (aduktech s DNA) je možno stanovit velmi malá množství modifikovaných (značených) nukleových kyselin nebo sledovat nízké stupně modifikace DNA.

Tato práce vznikla za podpory grantů GA AVČR IAA-400040901 a MŠMT ČR LC06035.

LITERATURA

1. Paleček E., Ostatná V.: *Electroanalysis* 19, 2383 (2007).
2. Fojta M., Fojtova M., Havran L., Pivonková H., Dorcak V., Sestakova I.: *Anal. Chim. Acta* 558, 171 (2006).
3. Paleček E., Trefulka M., Fojta M.: *Electrochem. Commun.* 11, 359 (2009).
4. Horakova P., Tesnohlikova L., Havran L., Vidlakova P., Pivonková H., Fojta M.: *Anal. Chem. doi 10.1021/ac902987x*, (2010).

3L-04 LIPIDOMICKÁ ANALÝZA S VYUŽITÍM HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE

MICHAL HOLČAPEK, MIROSLAV LÍSA,
EVA ČÁNOVÁ a KATEŘINA NETUŠILOVÁ

Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická,
Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
michal.holcapek@upce.cz

Lipidomická analýza se zabývá komplexní charakterizací maximálního počtu tříd lipidů ve vzorcích tělních tekutin (např. plazma, sérum), živočišných a rostlinných tkání s cílem identifikovat rozdíly mezi základním stavem (zdravý organismus) a změněným stavem (různé typy nemocí, vliv léčby, suplementace, genetické modifikace, apod.) s potenciálním využitím pro terapeutické a diagnostické účely. Základní technikou v lipidomické analýze je hmotnostní spektrometrie s ionizací elektrosprejem obvykle ve spojení (ultra)s vysokou účinnou kapalinovou chromatografií, (U)HPLC, nebo jinými separačními technikami v kapalně fázi. Různé separační módy (systémy s reverzními nebo normálními fází, argentační chromatografie, chromatografie hydrofilních interakcí, apod.) v jedno- nebo dvoudimenzionálním uspořádání lze využít pro separaci různých tříd polárních nebo nepolárních lipidů. Vzhledem k velkému objemu získaných výsledků je pro jejich vyhodnocení výhodné použít statistické zpracování, jako např. analýzu hlavních komponent (PCA). Možnosti jednotlivých technik budou ukázány na praktických příkladech.

Tato práce byla podporována grantovým projektem MSM0021627502 (MŠMT) a projekty č. 203/09/0139 a 203/09/P249 (GAČR).

3L-05 PRESERVING DYES IN ART MATERIALS. IS ANOXIA THE SOLUTION?

MONIKA KOPERSKA* and JOANNA ŁOJEWSKA

Jagiellonian University, ul. Ingardena 3, Kraków
mkoperska@gmail.com

Anoxia by definition is an atmosphere without oxygen. From the middle of 19th century scientists research the idea of placing objects of cultural heritage into anoxia cabinets in order to stop their deterioration and preserve museum objects for future generations. However it is the last years that are characterized by the increased attention to the subject.

To investigate the effect of anoxia on natural colorants five natural and historically important dyes: indigo, saffron, dragon's blood, carminic acid and madder dyes were submitted to accelerated ageing by exposure to intensive light in the visible range in both oxygen free and normal conditions. Decomposition of the samples was investigated by several analytical techniques (ATR/FT-IR, Raman, Reflectance UV-Vis, XRF).

Based on the comparison of the spectra obtained with ATR-FTIR, FT-Raman and UV/VIS of the dyes aged in the

differentiating conditions the estimators of the degradation progress have been proposed. These allowed classifying the dyes according to their degradation susceptibility under anoxia and oxidative conditions. According to the classification made, the dyes of high symmetry are less prone to degradation and are resistant to anoxia atmosphere. The degradation effects for anthraquinone based dyes are higher in oxygen free conditions and with extreme ageing decomposed to phthalic anhydride and dimethyl phthalate.

These results do not contradict the conviction that objects benefit from being placed in oxygen free cassettes but highlight the fact that surrounding of the dye molecule (binding media, textile or paper fibers or other dye molecules) has a profound effect on the color stability of an object.

Research contributes to the ANOXIA project run together with the National Museum in Cracow, Poland.

REFERENCES

1. Marengo E., Liparota M. C., Robotti E., Bobba M.: *Vib. Spectrosc.* 225, 40 (2008).
2. Cheusson A., Obendorf S.: *Text. Res. J.* 949, 74 (2004).
3. Hoon Bong P.: *Bull. Korean Chem.* 81, 21 (2000).
4. Seixas de Melo J. S., Melo M. J.: *Photochem. Photobiol. Sci.* 2008, 1353.
5. Marengo E., Liparota M. C., Robotti E., Bobba M., Genaro M. C.: *Talanta* 1158, 66 (2005).
6. Mills John S.: *White Raymond - The Organic Chemistry of Museum Objects*. Butterworth Heinemann, 2003.

3L-06

MODERN HPLC TECHNOLOGIES FOR BIOMEDICAL ANALYSIS

LENKA KRČMOVÁ^{a,b,*}, DAGMAR SOLICHOVÁ^b, LUBOR URBÁNEK^{a,b}, MARKÉTA KAŠPAROVÁ^{a,b}, LUBOŠ SOBOTKA^b, and PETR SOLICH^a

^a *Department of Analytical Chemistry, Faculty of Pharmacy, Charles University, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové*, ^b *Department of Metabolic Care and Gerontology, Teaching Hospital, Sokolská 581, 500 05 Hradec Králové*
lenkakrcmova@seznam.cz

In recent time there are high requirements on biomedical analyses (time of analyses, amount of samples, quantity of samples, automatization, limits of detection etc.).

The new HPLC methods for determination of urine neopterin and serum liposoluble vitamins using modern technologies (HPLC autosampler with microtitration plates – Rack Changer, monolithic technologies, micro solid phase extraction, fluorescence detector etc.) with accent on short time of analyses, utilization of small amount of sample, with possibility of automatization, high sensitivity and ruggedness were developed in our Research laboratory and are presented.

In order to monitor cancer patients, concentrations of different biologically active compounds are monitored in blood and urine samples by the means of HPLC. Neopterin, a marker of immune system activation, represents another compound useful in cancer patients monitoring. On-line analysis of neopterin requires a sensitive and efficient analyti-

cal system for its determination in urine. Modern HPLC technologies, such as new types of stationary phases or modern instrumentation introduce alternative approaches for the chromatographic analysis of this compound.

Retinol and α -tocopherol are endogenous antioxidants involved in the pathogenesis of different disorders, including cancer. The evaluation of blood levels of these micronutrients contributes to the clarification of their potential role in cancer prevention. Furthermore, after administration of high doses of vitamin A, serum concentrations of retinol and retinyl esters allow the assessment of intestinal mucosal damage that represents a frequent side effect of anticancer therapy. The novel method for the determination of retinol, retinyl esters and α -tocopherol in human serum by the means of high performance liquid chromatography using monolithic C18 column was developed.

The application of monolithic columns into the clinical practice can reduce the amount of time and resources usually dispensed during the analysis of significant number samples using the common silica HPLC columns.

The results of clinical studies using introduced methods will be included to the presentation.

This work was supported by Research Project MZO-00179906, MSM 0021620820 and MSM 002160822.

3L-07

MODERNÉ METÓDY NMR V ANALYTICKEJ CHÉMII

TIBOR LIPTAJ

Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Radlinského 9, 812 07 Bratislava
tiber.liptaj@stuba.sk

NMR prešla v posledných desaťročiach búrlivým rozvojom. Tento rozvoj bol inicializovaný technickým pokrokom v oblasti výpočtovej techniky, konštrukcie supravodivých magnetov a digitálnej rádiotechniky. Využili sa špecifické vlastnosti NMR, ktoré umožňujú vykonávať komplikované NMR spektroskopické experimenty, pri ktorých sa vhodným spôsobom manipuluje so vzorkou, tak aby sa získali žiadané spektrálne informácie. Dôsledkom veľkého rozvoja NMR bolo významné rozšírenie jej aplikácií. NMR sa v súčasnosti využíva prakticky v celej oblasti prírodných vied – od geológie, fyziky, chémie, biológiu až po medicínu. NMR sa stala jedným z najuniverzálnejších a najefektívnejších prostriedkom výskumu v oblasti prírodných vied.

Cieľom prednášky je oboznámiť poslucháčov so súčasným stavom rozvoja NMR ako ja naznačiť najnovšie aplikácie a trendy jej rozvoja v oblasti analytickej chémie.

Vyššia citlivosť a lepšie rozlíšenie základných ¹H NMR spektier dosiahnuté vďaka pokroku v kvalite NMR sond a zvyšovaniu pracovnej frekvencie NMR spektrometrov, umožňujú ich výhodné využitie pri analýze zmesných vzoriek bez nutnosti ich separácie: analýza telových tekutín, štúdium metabolizmu, analýza potravín, .. NMR sa v kombinácii s chemometrickou analýzou sa stala jednou zo základných metód metaboloniky. Zlepšovanie citlivosti NMR a miniatu-

rizácia NMR sond umožňujú kombináciu NMR so separačnými metódami, hlavne kvapalinovou chromatografiou. Rozlíšenie zložiek zmesi aj bez separačných metód umožňujú špeciálne NMR metódy na základe rozdielov v ich pohyblivosti v roztoku (Diffusion Ordered Spectroscopy, DOSY). Identifikácia látok zostáva stále dominantnou úlohou NMR v analytickej chémii. Moderné NMR metódy, založené na prenose signálu medzi interagujúcimi spinmi umožňujú veľmi efektívne tejto úlohy.

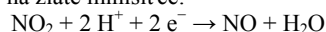
3L-08**SOLID-STATE ELEKTROCHEMICKÝ SENSOR PRO NO₂ S ELEKTROLYTEM S IONTOVOU KAPALINOU**

**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

Vzhľadom k intenzívnemu zájmu spoločnosti o ochranu životného prostredia sú vyvíjajú nové metódy sledovania znečistenia ovzdušia a vod. Koncentrace NO₂, agresívneho a jedovatého plynu, je jedným z dôležitých sledovaných parametrov. Vyvinuli sme amperometrický senzor pro NO₂ s novým elektrolytom na bázi iontového kapaliny ukotvené v polymere. Zde se uplatní vlastnosti iontových kapalin, jako je téměř nulová tenze par, vysoká tepelná stabilita a především výborné elektrochemické vlastnosti. Principem detekce je měření proudu generovaného elektrochemickou redukcí NO₂ na zlaté minisíťce:



Na základě našeho dosavadního výzkumu¹ jsme použili elektrolyt poly(ethylenglykol)methylether methakrylát – hexafluorofosforečnan 1-butyl-3-methylimidazolia. Elektrochemické měření ukázalo jeho dobrou iontovou vodivost ($2,4 \cdot 10^{-4} \text{ S cm}^{-1}$) a výbornou elektrochemickou stabilitu (přes 4,1 V na Au). Termogravimetrická analýza potvrdila předpoklad vysoké tepelné stability až do 250 °C.

Připravený elektrolyt byl úspěšně testován v miniaturizovaném senzoru s indikační elektrodou ze zlaté minisíťky² (Goodfellow, UK). Experimenty byly prováděny při potenciálu, kdy byla odezva senzoru na analyt nejvyšší, tj. při –900 mV vs. Pt/air. Byla nalezena lineární koncentrační závislost signálu v rozsahu koncentrací NO₂ 0,3–1,1 ppm, byla zjištěna mez detekce 0,1 ppm a studován vliv rel. vlhkosti plynu na citlivost senzoru.

Pro zjištění vlivu velikosti třířázového rozhraní pracovní elektrody na signál byly sestaveny 4 senzory s různou velikostí minisíťky. Zvýšení poměru p^2/S (p délka třířázového rozhraní (cm), S geometrická plocha elektrody exponovaná analytem (cm²)) z $4,2 \cdot 10^5$ na $5,9 \cdot 10^6$ vedlo ke zvýšení citlivosti senzoru více než o jeden řád.

Další výzkum zahrnuje studium vlivu interferentů (SO₂ a H₂S) a přípravu elektrolytů s dalšími iontovými kapalinami.

Tato práce vznikla za podpory Akademie věd ČR (AV0Z40320502), MŠMT ČR (MSM0021620857) a Grantové

agentury AV ČR (KJB200320901).

LITERATURA

1. Nádherná M., Opekar F., Reiter J.: Chem. Listy 102, 704 (2008).
2. Langmaier J., Opekar F., Samec Z.: Sens. Actuators B 41, 1 (1997).
3. Nádherná M., Opekar F., Reiter J.: 216th ECS Meeting, Vídeň, Rakousko, 4.-9.10.2009. Abstrakt 3151.

3L-09**UHLÍKOVÁ PASTOVÁ ELEKTRODA MODIFIKOVANÁ UHLÍM**

**ZUZANA NAVRÁTILOVÁ, BOLESLAV TARABA
a ROMAN MARŠÁLEK**

Ostravská univerzita v Ostravě, Dvořákova 7, 708 00
Ostrava 1

zuzana.navratilova@osu.cz

Modifikace uhlíkové pastové elektrody různými typy sorbentů (ionexy, jílové minerály apod.) patří již mezi klasické elektroanalytické využití těchto látek. Uhlí v přírodní i upravené formě (oxidované, aktivované) vykazuje rovněž neuvěřitelně vysokou sorpční, případně komplexační a iontovýmenné vlastnosti. Možnost využití uhlíkové pastové elektrody modifikované černým a hnědým uhlím ke studiu sorpce kovů byla ukázána nedávno¹. V prostředí běžných vodných elektrolytů je možné s touto elektrodou měřit v poměrně širokém potenciálovém rozsahu, zbytkový proud je nižší než 100 nA, redoxní pár $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-/4-}$ vykázal kvazi-reverzibilní chování srovnatelné s nemodifikovanou elektrodou.

Bezprúdová (“open-circuit”) sorpce Cd, Pb a Cu s následnou diferenčně pulsní voltametrií prokázala vliv typu uhlí na jeho sorpční schopnosti. Pomocí repetitivní cyklické voltametrie lze rovněž studovat kinetiku sorpce kovů na uhlí.

Vzhľadom k možnému využití uhlí jako sorbentu pro odstraňování tenzidů z vod byl studován vliv hexadecyltrimethylamoniového (HDTM) kationtu na sorpci mědi². Voltametrické studium sorpce na uhlí upravené sorpci HDTM potvrdilo inhibici sorpce mědi, ve srovnání s neupraveným uhlím klesla sorpce dvakrát.

Voltametrická měření na popsané elektrodě jsou vhodná ke studiu sorpčních vlastností uhlí, lze pomocí nich sledovat i vlivy ovlivňující sorpci (pH a složení sorpčního roztoku, teplota).

Studovaná elektroda je rovněž vhodná pro anodickou rozpouštěcí voltametrii Cd, Pb a Cu; poskytuje vyšší proudové odezvy ve srovnání s elektrodou nemodifikovanou. Zvýšení citlivosti modifikované elektrody lze přisoudit předběžnému nahromadění kovů stejně jako v případě jiných sorpčních modifikátorů (montmorillonit). Výsledky tak naznačují možné analytické využití elektrody modifikované uhlím.

Tato práce vznikla za podpory GA AV ČR, projekt IAA 301870801.

LITERATURA

1. Navrátilová Z.: *Electroanalysis* 21, 1758 (2009).
2. Maršálek R., Navrátilová Z.: předneseno na 60th Annual meeting of the International society of electrochemistry, Beijing, 16.8.2009.

3L-10

COMPARISON OF ENZYME REACTORS BASED ON THREE DIFFERENT COLUMNS

PETR SMEJKAL^{a,b}, SILVIJA ABELE^c, OKSANA YAVORSKA^d, TOMASZ PIASECKI^d, FRANTISEK FORET^b, and MIREK MACKA^d

^a University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Studentská 573, 532 10 Pardubice, ^b Institute of Analytical Chemistry of the ASCR, v.v.i., Veveří 97, 602 00 Brno, ^c University of Latvia, 19 Raina Blvd., LV 1586 Riga, ^d National Centre for Sensor Research and School of Chemical Sciences, Dublin City University, Dublin 9
smejkal@iach.cz

The aim of this work was to provide an experimental comparison of three different columns as the reactor formats for on-line enzymatic protein digestion. Pepsin A as an enzyme with a low pH working area was immobilised onto the surface of bare silica capillaries and both full and porous layer open tubular¹ (PLOT) monolithic columns. Reactors were online coupled with MS in positive mode and obtained mass spectra of digested myoglobin were compared to evaluate the digestion efficiency of enzymatic reactors.

Poly(glycidylmethacrylate-co-ethylidimethacrylate (GMA-EDMA) PLOT monolithic columns and full monolithic columns were prepared in silica capillaries with different inner diameters: 25 µm, 50 µm, and 100 µm. Pepsin A was immobilised through epoxy groups by reductive amination directly onto the surface of the monoliths or fused silica capillary². The reactors were then connected into a system where a solution of myoglobin as a model protein was pumped continuously through the column and the digested protein was on-line sprayed into a Mariner ESI-TOF MS.

Pepsin is known for its low digestion selectivity and therefore a library of reference MS spectra was first prepared for the peptides of digested myoglobin. With a purpose to compare MS spectra from digestion in solution with spectra obtained from on-line digests, a straightforward routine was used based on counting matching peptides of identical mass with a help of a programme written in LabView.

The results showed that digestion of Myoglobin in only 6 cm long monolithic reactors (both PLOT and full monolith) was comparable with digestion in a 30 cm long reactors prepared in plain silica capillaries. The PLOT monolithic reactors compared to full monolithic reactors have significantly lower backpressure and can be easily flushed what is an additional advantage of PLOT columns.

Acknowledgements: MSMT 0021627502, AV0Z 40310501 of the Academy of Sciences of the Czech Republic, SFI SRC Irish Separation Science Cluster, EC Marie Curie Excellence Grants fellowship and grant-MEXT-CT-2004-014361.

REFERENCES

1. Abele S., Smejkal P., Yavorska O., Foret F., Macka M.: *Analyst* 135, 447 (2010).
2. Křenková J., Klepárník K., Foret F.: *J. Chromatogr., A* 1159, 110 (2007).

3L-11

LC-NMR – APLIKACE

JAN SÝKORA

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

Před osmi lety byla v České republice nainstalována první a zdá se, dosud také poslední kombinace HPLC-NMR. Tato experimentální technika se poprvé objevila na konci 70. let minulého století a v dnešní době je už rozšířena celosvětově a je nejvíce využívána při analýzách přírodních látek nebo při kontrole výroby léčiv či analýzách jejich metabolitů v tělních tekutinách¹.

V centrální LC-NMR laboratoři se převážně zaměřujeme na analýzy reakčních směsí, kde tato metoda pomáhá identifikovat kýžené produkty a výrazně urychluje hledání optimálních reakčních podmínek. Zvláště se osvědčila při syntéze helicenových prekurzorů, kde při cyklizačních reakcích běžně vznikají různé izomery, které se jinými metodami prakticky nedají rozlišit². Během osmileté praxe došlo i na analýzy rostlinných extraktů a příměsí ve farmaceutických substancích. Zde šlo například o látky obtížně separovatelné³, LC-NMR dokáže rozlišit i několik látek (opět často izomerů) v případné koeluci. Světové unikum zatím držíme v analýzách různých druhů křemíkatých oligo/polymerů^{4,5}. Při identifikaci siloxanových polymerů předčí LC-NMR nejčastěji používané GPC a přináší nové informace nejen o skutečné distribuci molekulových vah ale i funkčních skupin. Jako klíčová se jeví i role LC-NMR při analýzách polyfenylsilanových polymerů, kde přináší dodatečnou informaci o takticitě polymeru či případně redistribuci funkčních skupin.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA AV ČR IAA-400720706 a GA ČR 203/09/1574.

LITERATURA

1. Albert K. (ed): *On-line LC-NMR and Related Techniques*. J. Wiley, Chichester 2002.
2. Storch J., Sýkora J., Čermák J., Karban J., Císařová I., Růžička A.: *J. Org. Chem.* 74, 3090 (2009).
3. Sýkora J., Bernášek P., Zarevúcká M., Kurfürst M., Sovová H., Schraml J.: *J. Chromatogr., A* 1139, 152 (2007).
4. Blechta V., Sýkora J., Heftlejš J., Šabata S., Schraml J.: *Magn. Reson. Chem.* 44, 7 (2006).
5. Blechta V., Kurfürst M., Sýkora J., Schraml J.: *J. Chromatogr., A* 1145, 175 (2007).

3L-12

MATRIX FREE LASER DESORPTION-IONIZATION MASS SPECTROMETRY IMAGING COUPLED TO FT-ICR**MICHAEL VOLNÝ***, **VERONIKA VIDOVÁ**, **PETR NOVÁK**, **MARTIN STROHALM**, **JAROSLAV PÓL**, and **VLADIMÍR HAVLÍČEK***Laboratory of Molecular Structure Characterization, Institute of Microbiology of the ASCR, v.v.i., Videnska 1083, 142 20 Prague
volny@biomed.cas.cz*

Desorption-Ionization Mass Spectrometry (DI-MS) techniques represent a portfolio of tools that have always been important in bioanalytical chemistry, but in recent years some of them become nearly indispensable for biological and biomedical sciences. The foundation of DI-MS experiment is desorption and ionization of the analyte molecules, which are introduced on a suitable surface. The gas-phase ions are then mass-analyzed (with optional dissociation steps) and detected. Because this approach allows for a direct analysis of surfaces, without spatial disruption of the analytes prior to the analysis, molecular imaging of tissue sections is one of the biologically relevant applications of DI-MS. Spectra obtained from tissue section are usually very complex and utilization of high resolution mass analyzers is thus especially advantageous.

In this work we introduced mass spectrometry imaging of tissue lipids by laser desorption mass spectrometry from commercially available nanostructured surfaces coupled to high resolution FT-MS instrument. The nanostructured surfaces were developed for matrix free laser desorption ionization and were previously used for analysis of small molecules. The technique combines the well-known advantages of MALDI with the newly introduced advantages of DESI. The experiment is based on a lithographic transfer of lipids from tissue section to a nanostructured surface that allows ionization without introduction of ionization matrix. The lipids are transferred by a simple imprinting procedure onto a nanostructured surface for Nano-Assisted Laser Desorption/Ionization (NALDI) MS.

The NALDI spectra are generally less complex than MALDI spectra (due to the absence of alkali adducts and matrix clusters ions). Identification by exact mass measurement and tandem MS was also demonstrated.

The work was supported by the Ministry of Education, Youth, and Sports of the Czech Republic (LC07017, MSM 6198959216) and by an Institutional research concept of the Institute of Microbiology (AV0Z50200510). MV's research was supported by a Marie Curie IR Grant within the 7th European Community Framework Program and by the Czech Science Foundation (project P206/10/P018).

3L-13

VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ GENOTOXICKÝCH NITRO- A OXODERIVÁTŮ FLUORENU**VLASTIMIL VYSKOČIL****, **JÁN LABUDA^b** a **JIRÍ BAREK^a***^a Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř elektrochemie životního prostředí, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2, ^b Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav analytickej chémie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
vyskocil@natur.cuni.cz*

Studované nitro- a oxoderiváty polycyklického aromatického uhlovodíku fluorenu (jmenovitě 2-nitrofluoren, 2,7-dinitrofluoren, 9-fluorenon, 2-nitro-9-fluorenon a 2,7-dinitro-9-fluorenon), vznikají především při spalování fosilních paliv. Vzhledem k jejich genotoxickým účinkům neustále roste potřeba mimořádně citlivých a selektivních metod stanovení těchto látek v různých matricích¹. Snadná elektrochemická redukovatelnost nitro- a oxoskupiny, vázaných na aromatickém jádře, umožňuje ke stanovení úspěšně využít elektrochemických metod². Tradiční visící rtuťová kapková elektroda (HMDE) a rtuťovým meniskem modifikovaná stříbrná pevná amalgamová elektroda (m-AgSAE) byly užity v kombinaci s moderními voltametričnými technikami (DC voltametrie, diferenční pulsní voltametrie a adsorpční rozpouštěcí diferenční pulsní voltametrie) pro vývoj nových metod stanovení stopových množství výše uvedených xenobiotik v pitné a říční vodě^{3,4} v koncentračním rozmezí 10^{-8} až 10^{-7} mol l⁻¹. Další zvýšení selektivity a citlivosti bylo dosaženo pomocí předběžné separace a prekoncentrace pomocí extrakce na tuhou fázi⁵.

Elektrochemický DNA biosensor na bázi dispozibilních sítotiskových uhlíkových pastových elektrod byl následně užit pro *in vitro* detekci poškození DNA imobilizované na povrchu pracovní elektrody jednak přímou interakcí s 2-nitrofluorenem či 2,7-dinitrofluorenem, jednak interakcí DNA s intermediáty elektrochemické přeměny studovaných nitrofluorenů⁶.

Tato práce byla finančně podpořena Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy ČR (projekty LC 06035, MSM 0021620857 a RP 14/63) a Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (projekt SVV 261204). Ján Labuda děkuje Vedeckej grantovej agentúre Ministerstva školstva SR a Slovenskej akadémie vied (projekt 1/0852/08) za finančnú podporu.

LITERATURA

1. Vyskočil V., Barek J., Jiránek I., Zima J., v knize: *Progress on Drinking Water Research*, kap. 5, s. 171. Nova Science Publishers, New York 2008.
2. Vyskočil V., Barek J.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 39, 173 (2009).
3. Vyskočil V., Barek J.: *Collect. Czech. Chem. Commun.* 74, 1675 (2009).
4. Vyskočil V., Navrátil T., Polášková P., Barek J.: *Electroanalysis* 22 (2010), v tisku.
5. Vyskočil V., Labuda J., Barek J.: *Anal. Bioanal. Chem.* 396 (2010), publikováno online.

3L-14**UHLÍKOVÉ PASTY V ANALÝZE BIOLOGICKY
AKTIVNÍCH ORGANICKÝCH SLOUČENIN****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 se v elektroanalytické chemii využívají v různých formách, např. jako prosté binární směsi pastovací kapaliny a uhlíkového prášku, chemicky či biologicky modifikované elektrody, elektrody modifikované různými filmy či chráněné membránami. V širším smyslu jsou od nich odvozeny i elektrody síťotiskové. V analýze biologicky aktivních sloučenin se v současné době uplatňují především různými způsoby modifikované uhlíkové pasty^{1–3}, které umožňují využít největší výhodu uhlíkových past, kterou je jejich snadná modifikovatelnost podle řešeného analytického problému. Kromě klasických voltametrických metod se pasty využívají i jako elektrochemické detektory v HPLC, což umožňuje pasty na základě mikrokuliček skelného uhlíku, které nepodléhají ve směsných vodně organických prostředích degradaci.

V tomto příspěvku bude věnována pozornost využití uhlíkových past v naší laboratoři ke stanovení environmentálně významných organických látek, karcinogenních látek a farmaceutických látek pomocí vsádkových voltametrických metod a pomocí HPLC s elektrochemickou detekcí na uhlíkových pastách v konfiguraci wall-jet. Popis optimalizace nových metod stanovení vybraných analytů bude vždy doplněn příklady jejich praktického využití na reálných či modelových vzorcích^{4–6}.

Tato práce vznikla za podpory MŠMT ČR, projekty LC0603, MSM 021620857, RP 14/63 a Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (projekt SVV 261204).

LITERATURA

1. Zima J., Švancara I., Barek J., Vytřas K.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 39, 204 (2009).
2. Švancara I., Vytras K., Kalcher K., Walcarius A., Wang J.: *Electroanalysis* 21, 7 (2009).
3. Švancara I., Walcarius A., Kalcher K., Vytras K.: *Central. Eur. J. Chem.* 7, 598 (2009).
4. Vokálová V.: *Diplomová práce*. Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Praha 2009.
5. Kalusová M.: *Diplomová práce*. Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Praha 2010.
6. Vysoká M.: *Diplomová práce*. Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Praha 2010.

3P-01
QUANTITATIVE DETERMINATION OF PLATINUM
GROUP ELEMENTS IN OMBROTROPHIC PEAT
PROFILE (BRDY HIGHLAND, CZECH REPUBLIC)

LINDA BARSOVÁ^{a,b}

^a ČVUT v Praze, Fakulta stavební, Katedra fyziky, Thákurova 7, 166 29 Praha, ^b Ministerstvo životního prostředí, Vršovická 65, 100 00 Praha
 linda.barsova@fsv.cvut.cz

An improved traditional Ni-S fire-assay¹⁻³ separation procedure for ICP-MS analyses of platinum group elements (PGE) has been revisited with the aim of reducing value of blank samples and application for monitoring of ultratrace concentration of PGE in sixteen peat sample layers (were dated by measurement of ²¹⁰Pb activity⁴). The dry ashed samples were mixed with fluxes and collector (Ni+S) thoroughly in a fire-clay crucible, and the fusions were done in a temperature controlled muffle furnace. Mechanically separated Ni-S button were then selectively dissolved in (I) HCl and (II) HCl+H₂O₂ and the final solution (containing PGE) was dissolved in 1M HCl. All samples were further diluted and then measured using ICP-MS. The detection limits were low and varied from 0,024 ppb (for Rh) to 0,2 ppb (for Pd). External reproducibility of this method was monitored using WMG-1 reference material (CCRMP, Canada). No effect of spectral interferences on the determination of PGE was observed in the analysis of peat samples.

The measured PGE data display a wide range of concentrations, from 0,046 to 1 ppb for Ru, from 0,024 to 2,3 ppb for Rh, from 0,2 to 24 ppb for Pd, from 0,04 to 1,8 ppb for Ir and 0,086 ppb to 54 ppb for Pt. Generally, the concentration patterns of PGE exhibit increasing trend from the second half of 20th century. Values 24 ppb for Pd and 54 ppb for Pt from the upper part of the studied peat profile represent remote values and the contribution of PGE (in pollution) from near base-metal metallurgical works and/or automobile catalytic converters is not evident. Due to decreasing concentration values in the upper layers of profile we presume possible leaching of PGE from the upper layers.

Tato práce vznikla za podpory grantového projektu č. KJ-B300130612.

REFERENCES

1. Paukert T.: Chem. Listy 87, 8 (1993).
2. Paukert T., Rubeška I.: Anal. Chim. Acta 278, 125 (1993).
3. Rao C. R. M., Reddi G. S.: Trends Anal. Chem. 19, 565 (2000).
4. Zuna M.: *Diplomová práce*. Univerzita Karlova, Praha 2005.

3P-02
FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÉ STUDIUM ZÁTĚŽE
CEMENTÁRNÍ KRÁLŮV DVŮR U BEROUNA
NA PŮDY V JEJÍM OKOLÍ

JITKA ROLLOVÁ*

Katedra fyziky, Fakulta stavební, České vysoké učení technické v Praze, Thákurova 7, 166 29 Praha 6
 jitka.rollova@seznam.cz

Půda, nedílná součást přírodního bohatství, je velice složitý otevřený systém, který je úzce spojen s okolním prostředím.

Úrodnost půdy, neboli schopnost půdy zajistit na ní rostoucím rostlinám dostatek živin a vody, je ovlivňována širokým souborem půdních vlastností. Mezi ně patří např. sorpční schopnost půd, oxidačně redukční procesy, půdní reakce, obsah biogenních prvků apod.

Jedním z prvků, který významně ovlivňuje metabolismus rostlin, je vápník. Rostlina ho přijímá v iontové formě z půdního roztoku ve formě Ca²⁺. Při jeho nedostatku se na kořenech rostlin netvoří kořenové vlásky a kořeny zahnívají. Při jeho nadbytku je omežována půdní sorpce, což je schopnost půdy vázat ionty nebo celé molekuly různých sloučenin z půdního roztoku do pevné fáze půdy, a tím může docházet k narušování rovnováhy živin potřebných pro správný růst a vývin rostlin.

Odpadem z cementárny je především Ca(OH)₂ a CaO. Obě sloučeniny reagují alkalicky a uvolňují Ca²⁺ ionty do půdního roztoku.

V několika lokalitách poblíž cementárny Beroun – Králův Dvůr byly odebrány z hloubek 5 a 35 cm půdní vzorky, z nichž byly po jejich vysušení připraveny vzorky jemnozemě, které byly podrobeny následujícím analýzám.

Ve vodních výluzích bylo měřeno pH a specifická vodivost, dále byl stanoven obsah CaO rozpustných ve vodě a pro půdy, u nichž bylo pH vyšší než 7,2 byla stanovena celková alkalita. Nakonec bylo provedeno stanovení obsahu CaO nerozpustných ve vodě.

Z naměřených a stanovených hodnot vyplývá zřejmá souvislost, tj. vysoké pH vodního výluhu odpovídá vysoké specifické vodivosti a vysokému obsahu Ca²⁺ iontů.

Půdám se středním a vyšším obsahem humusu vyšší obsah uvolněných Ca²⁺ iontů nevádí, neboť tyto ionty se váží, avšak v případě námi zjištěného vysokého obsahu Ca²⁺ iontů jsou sorpční schopnosti půdy omezené.

LITERATURA

1. Tomášek M.: *Půdy České republiky*, ČGS (2003).
2. Bouška V., Jakeš P., Pačes T., Pokorný J.: *Geochemie*. Academia Praha, Praha 1980.
3. Henning O., Lach V.: *Chemie ve stavebnictví*. SNTL, Praha 1983.
4. Bárta R.: *Chemie a technologie cementu*. ČSAV, 1961.
5. Škvára F.: *Technologie anorganických pojiv I, část 1: Hydraulické maltoviny, cementy, skripta Ústavu skla a keramiky*, VŠCHT, Praha 1994.

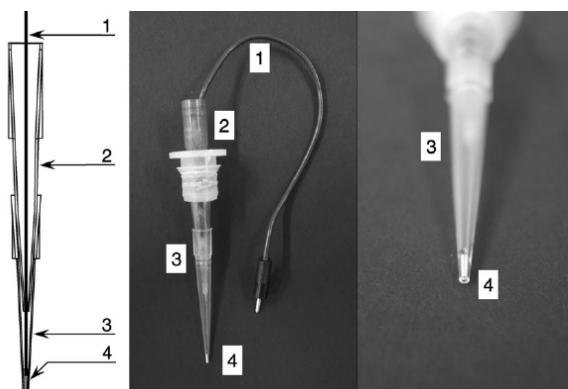
3P-03 VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ 5-NITROBENZIMIDAZOLU NA ŠPIČKOVÉ AMALGAMOVÉ PASTOVÉ ELEKTRODĚ

**DANA DEÝLOVÁ, JIŘÍ BAREK* a BARBORA
CHLÁDKOVÁ**

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 genotoxická sloučenina ze skupiny nitrovaných heterocyklických aromatických sloučenin. Vzniká mimo jiné při spalování fosilních paliv¹. 5-NBIA, látka v minulosti užívaná a polarograficky stanovená jako součást roztoku ustalovače pro barevné fotografie², je dnes prokázáným karcinogenem a mutagenem³.

V tomto příspěvku budou prezentovány optimální podmínky pro stanovení mikromolárních koncentrací této látky pomocí DC voltametrie (DCV) a DP voltametrie (DPV) na špičkové amalgamové pastové elektrodě (AgA-PE) (obr. 1.) v prostředí Brittonova-Robinsonova pufru.



Obr. 1. Schéma a fotografie AgA-PE; 1) kovový drátek, 2) větší pipetovací špička jako držák, 3) menší pipetovací špička ($600 \pm 25 \mu\text{m}$) jako tělo elektrody, 4) pastový amalgám (11 % Ag)

Tato práce vznikla za podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (projekt LC 06035, MSM 0021620857 a Rp14/63) a Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (projekt SVV 261204).

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-04 VYUŽITÍ BTBP SLOUČENIN PRO SEPARACI MINORITNÍCH AKTINOIDŮ PŘI RECYKLACI VYHOŘELÉHO JADERNÉHO PALIVA

PETR DISTLER^a a JAN JOHN^{a,b}

^a Katedra jaderné chemie, ^b Centrum pro radiochemii a radiační chemii, ČVUT v Praze – FJFI, Břehová 7, 115 19 Praha 1
petr.distler@jfifi.cvut.cz

Problém vyhořelého jaderného paliva je v současné době řešen převážně dočasným skladováním v meziskladech vyhořelého jaderného paliva. V případě konečného uložení do hlubinných úložišť je z důvodu přítomnosti dlouhodobých radionuklidů doba potřebná pro jeho bezpečnou izolaci od životního prostředí okolo jednoho milionu let. Za tuto dobu klesne aktivita vyhořelého paliva na úroveň přírodního uranu. Pokud se z vyhořelého paliva podaří odstranit plutonium a minoritní aktinoidy, klesne doba potřebná k uložení vysokoaktivního odpadu pod tisíc let.

Bis-TriazynylBiPyridinové (BTBP) sloučeniny jsou syntetizovány jako možné extrahenty pro kapalinovou extrakci minoritních aktinoidů z roztoků vzniklých při přepracování vyhořelého jaderného paliva. V této práci byly testovány nově syntetizované molekuly $\text{Cy}_5\text{-S-Me}_4\text{-BTBP}$ a $\text{Cy}_5\text{-O-Me}_4\text{-BTBP}$, jejich účinnost byla porovnávána s referenční molekulou $\text{CyMe}_4\text{-BTBP}$.

Cílem testování bylo v prvním kroku zjištění rozpustnosti v různých organických rozpouštědlech. Největší pozornost byla věnována 1-oktanolu a cyklohexanonu. Jako vodná fáze při kapalinové extrakci byla použita dusičná o různých koncentracích. Dále byly pro jednotlivé systémy stanoveny rozdělovací poměry D pro amerícium a pro europium a na jejich základě i separační faktor $SF(\text{Am}/\text{Eu})$. Byla zkoumána stechiometrie vznikajících komplexů americia s $\text{Cy}_5\text{-S-Me}_4\text{-BTBP}$. Velká pozornost byla věnována kinetickému chování systému rozpouštědlo – molekula a částečně také radiační a hydrolytické stabilitě. Kromě poznatků základního charakteru bylo hlavním výstupem z testování zhodnocení vlastností $\text{Cy}_5\text{-S-Me}_4\text{-BTBP}$ a $\text{Cy}_5\text{-O-Me}_4\text{-BTBP}$ a jejich vhodnosti pro praktické využití v kombinaci s použitým rozpouštědlem.

Financováno za podpory grantu MSM 6840770020.

3P-05 MOŽNOSTI STANOVENÍ ALKYLNITRÁTŮ V MOTOROVÉ NAFTĚ

BOHUSLAV DVOŘÁK* a KAREL VENTURA

Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
bohoslav.dvorak@upce.cz

Alkylnitráty jsou látky, které se přidávají do motorové nafty pro zvýšení cetanového čísla. Množství alkylnitrátů v naftě se pohybuje v rozmezí 0,03–0,30 % (v/v). Obsah těchto

to látek v naftě se v České republice stanovuje metodou, kterou popisuje Česká technická norma ČSN EN ISO 13759 z května 1999 (cit.¹). Stanovení pomocí této metody se provádí spektrometricky v UV oblasti po předchozí extrakci v soustavě kapalina-kapalina. Pro přesné určení obsahu alkylnitrátů touto metodou je nezbytně nutné vědět, o jaké konkrétní alkylnitráty se v daném vzorku jedná, protože je tato metoda založena na porovnávání s referenčním vzorkem. Pokud není známo, o jaký konkrétní alkylnitrát se jedná, porovnává se výsledek s referenčním alkylnitrátem, kterým je 2-ethylhexylnitrát. To může mít za následek nepřesné určení skutečného obsahu.

Protože jsou alkylnitráty látky těkavé, dají se s výhodou stanovovat metodou plynové chromatografie s hmotnostní detekcí. Motorová nafta je ale matrice velice komplikovaná a při detekci běžně používanou elektronovou ionizací dává vysoké pozadí a je detekována celá řada látek, které ruší vlastní stanovení. Z tohoto důvodu byla použita negativní chemická ionizace. Tento typ ionizace redukuje vysoký vliv pozadí na minimum a v chromatogramu je pozorován pouze jediný pík, a to pík alkylnitrátu, popř. vnitřního standardu.

Další možností je použití techniky multidimenzionální GC/MS. Pomocí této techniky je možné i tak složitou matici, jakou je motorová nafta, rozdělit v takové míře, aby bylo možné alkylnitráty detekovat a kvantifikovat i pomocí běžné elektronové ionizace.

Všechny vyjmenované metody lze použít pro stanovení alkylnitrátů v motorové naftě. Normovaná metoda je ovšem velice zdoluhavá a z důvodu velkého počtu kroků přípravy a úpravy vzorku náchylná na celou řadu chyb. Chromatografické metody jsou v tomto směru mnohem jednodušší a rychlejší, protože pro vlastní stanovení není třeba vzorek jakkoliv upravovat. Velice důležité je také zdůraznit, že při použití chromatografických metod v plynné fázi, ať už je to GC/MS nebo multidimenzionální GC/MS, není třeba používat žádná rozpouštědla.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru MSM 0021627502.

LITERATURA

1. ČSN EN ISO 13759 (1999).

3P-06

PROTONAČNÍ ROVNOVÁHY METHOTREXÁTU

ZUZANA FERENČÍKOVÁ a MILAN MELOUN

*Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
zuzana.ferencikova@student.upce.cz*

Disociační konstanty pK_a léčiv jsou pro farmaceuty a lékaře důležitou veličinou při aplikaci medikamentu. Léčiva představují slabé kyseliny nebo slabé báze. Slabé kyseliny lépe přestupují do krve v kyselém prostředí žaludku, slabé báze pak v zásaditém prostředí střev.

Bylo provedeno stanovení termodynamických disociačních konstant léčiva methotrexát (dodané firmou IVAX Pharmaceuticals, s.r.o.) pH-spektrofotometrickou titrací při více

vlnových délkách. Prvním krokem bylo určení počtu částic rovnovážné směsi. V programu S-PLUS byl vytvořen algoritmus INDICES (cit.¹) s 12 rozličnými metodami faktorové analýzy. Vzájemným porovnáním metod byl určen počet světlo-absorbujících částic roven 3.

Dalším krokem při stanovení pK_a je prokázání věrohodnosti hypotézy modelu na základě těsnosti proložení vypočtené absorbanční responsní plochy (směrodatná odchylka absorbance $s(A)$ či Hamiltonův R -faktor relativní těsnosti proložení). V programu SQUAD(84) byly porovnávány různé protonační modely. Statistická analýza reziduí ukazuje, že na základě nejlepšího dosaženého proložení byl prokázán model trojsytné kyseliny s částicemi L, LH, LH₂ a LH₃. Byl učiněn pokus o vyhodnocení tří blízkých disociačních konstant pK_{a1} , pK_{a2} a pK_{a3} methotrexátu regresní analýzou A-pH křivek při vybraných dominantních vlnových délkách 260, 313, 325, 340 a 375 nm. Methotrexát vykazuje křivky molárních absorpčních koeficientů částic LH₂ a LH₃ velmi podobné a značně se překrývající, a proto metody faktorové analýzy absorbanční matice v Cattelově indexovém grafu určují počet světlo-absorbujících částic pouze roven 3. Byl hledán protonační model pomocí A-pH křivek methotrexátu za porovnání těsnosti proložení dvojsytné LH₂ a trojsytné kyseliny LH₃. Byl potvrzen model tří disociačních konstant pK_{a1} , pK_{a2} a pK_{a3} trojsytné kyseliny LH₃. Ze závislosti nalezených smíšených disociačních konstant na odmocnině z iontové síly byly nelineární regresi Debye-Hückelova vztahu stanoveny hodnoty: $pK_{a1}^T = 2,95(4)$, $pK_{a2}^T = 4,410(6)$, $pK_{a3}^T = 5,726(8)$ při 25 °C a $pK_{a1}^T = 3,089(8)$, $pK_{a2}^T = 4,392(10)$, $pK_{a3}^T = 5,585(14)$ při 37 °C.

Tato práce vznikla za podpory vědeckých záměrů Ministerstva školství, kultury a mládeže č. MSM0021627502.

LITERATURA

1. Meloun M., Čapek J., Mikšík P., Brereton T. G.: Anal. Chim. Acta 423, 51 (2000).
2. Meloun M., Ferenčíková Z., Vrána A.: Centr. Eur. J. Chem., v tisku.

3P-07

MODERNÁ SPEKTROMETRICKÁ METÓDA PRI ANALÝZE SEDIMENTOV

SILVIA RUŽIČKOVÁ, VLADISLAVA BOKOVÁ, MIROSLAVA REVŤÁKOVÁ a BEÁTA FIOOVÁ

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

Práca je pokračovaním optimalizácie neštandardnej bezrozkladovej spektrometrickej techniky, ktorá spája prednosti riadeného oblúkového výboja jednosmerného prúdu (DCA-OES) s prednosťami vysokocitlivého CID detektora, Echelle optického systému a sofistikovaného softvéru. Spektrometer Atomcomp 2000, ktorý bol pôvodne využívaný pre priamu analýzu keramických práškov je teraz optimalizovaný pre účely environmentálnej analýzy. Možnosti spektrometra vytvárajú podmienky pre rýchlú kvalitatívnu i kvantitatívnu

analýzu v rámci celého spektra vlnových dĺžok. Vychádzajúc z výsledkov štúdia vyparovania vybraných rizikových prvkov (Cd, Cr, Ni, a Pb) v modelových vzorkách¹, aktuálny príspevok nadväzuje v experimentálnej práci ďalším štúdiom vyparovania vybraných prvkov v reálnych vzorkách dnových sedimentov vodných nádrží Domaša a Šírava. Cieľom tohto optimalizačného kroku bolo zistiť vplyv experimentálnych podmienok na priebeh vyparovania. Pracovalo sa bez použitia a s použitím nižšieho a vyššieho prietoku Ar. Sledovaný bol taktiež vplyv spektrochemického prídavku (Li_2CO_3 , AgCl) na efektívnosť vyparovania^{2,3}. Zo získaných vyparovacích kriviek boli zhotovené normované vyparovacie krivky, z ktorých boli stanovené hodnoty polčasu vyparenia ($t_{50\%}$), ktoré nám poskytujú informáciu o kinetike vyparovania a hodnoty času totálneho vyparenia ($t_{100\%}$), ktoré sú zase podmienkou dobrej dôkazuschopnosti, keďže informačný obsah tohto údaju hovorí o tom, za aký čas bol sledovaný analyt totálne vyparený. Výsledky analýzy reálnych vzoriek potvrdili, že expozičný čas 60 s za použitia AgCl je postačujúci pre totálne vyparenie prvkov, avšak správanie sa jednotlivých prvkov počas vyparovania je prvkovo špecifické, čo je ale podmienené ich minerologickým zložením a formou viazania jednotlivých prvkov.

Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore projektov VEGA 1/0459/08 a 1/0461/08. Podakovanie patrí aj Ing. P. Huckovi z VÚVH v Bratislave za poskytnutie vzoriek sedimentov.

LITERATÚRA

1. Ružičková S., Boková V., Flórián K.: *Konferencia Sedimenty vodných tokov a nádrží*. Bratislava, 2009.
2. Ružičková S., Matherny M.: *Trans. of Univ.* 2-3, 127 (2006).
3. Ružičková S., Matherny M.: *Chem. Listy* 102, 453 (2008).

3P-08

VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ CHLORAMFENIKOLU NA BÓREM DOPOVANÉ DIAMANTOVÉ FILMOVÉ ELEKTRODĚ

JAN FISCHER, JANA JEČMÍNKOVÁ a JIŘÍ BAREK

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

Chloramfenikol (zkratka CAP; 2,2-dichlor-*N*-[(1*R*, 2*R*)-2-hydroxy-1-(hydroxymethyl)-2-(4-nitrofenyl)ethyl]acetamid) patřící do skupiny často používaných antibiotik¹ a je také hojně používaný ve veterinární praxi jako doplňková látka pro podporu růstu. To vede ke zvýšené poptávce po nových finančně nenáročných, dostatečně selektivních a citlivých metodách stanovení CAP, mezi něž lze úspěšně zařadit voltametrické metody na moderních elektrodových materiálech². V praxi se doposud bórem dopované diamantové filmové elektrody používaly převážně k elektrochemickým oxidacím, ale díky nízké míře pasivace, nízkému šumu a svému širokému potenciálovému oknu jsou vhodné i pro stanovení snadno redukovatelných látek³.

CAP má ve své struktuře nitroskupinu na aromatickém jádře, kterou je možné snadno elektrochemicky redukovat, tudíž lze k jeho stanovení s výhodou využít tento druh elektrody.

Budou prezentovány nově vyvinuté metody stanovení chloramfenikolu pomocí DC voltametrie (DCV) a diferenční pulzní voltametrie (DPV) na bórem dopované diamantové filmové elektrodě, kde látka poskytuje v prostředí Brittonova-Robinsonova (BR) pufru o pH od 2 do 12 jednu vlnu, nebo jeden pík. Jako optimální bylo pro DCV i DPV stanovení chloramfenikolu zvoleno prostředí BR pufru o pH 6. Za těchto podmínek nebyla pozorována pasivace elektrody produkty elektrochemické redukce. Závislost proudu na koncentraci v oblasti koncentrací chloramfenikolu od $2 \cdot 10^{-6}$ mol l^{-1} do $1 \cdot 10^{-4}$ mol l^{-1} je lineární a opakovatelná v celém sledovaném koncentračním rozsahu. Obě metody jsou pro stanovení chloramfenikolu přibližně stejně citlivé s mezi stanovitelností na úrovni $3 \cdot 10^{-6}$ mol l^{-1} .

Tento výzkum byl finančně podporován MŠMT ČR (projekty PR 14/63, LC 06035 a MSM 0021620857), z prostředků Grantové agentury České republiky (projekt P206/10/P087) a Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (projekt SVV 261204).

LITERATURA

1. Fodeya T., Murillab G., Cannavanc A., Elliott C.: *Anal. Chim. Acta* 592 (2007)
2. Berek J., Fischer J., Navrátil T., Pecková K., Yosypchuk B., Zima J.: *Electroanalysis* 19, 2003 (2007).
3. Peckova K., Musilova J., Berek J.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 39, 148 (2009).

3P-09

POUŽITÍ NOVÝCH NETOXICKÝCH LÁTEK JAKO STABILIZÁTORŮ DO BEZDÝMNÝCH PRACHŮ

ONDŘEJ FRYŠ* a KAREL VENTURA

*Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
ondrejfrys@email.cz*

Jedním z požadavků na vlastnosti hnacích náplní je jejich stabilita. Hnací hmoty nesmí vykazovat v průběhu předepsané životnosti chemické změny (chemická stabilita). Tu zajišťují tzv. stabilizátory hnacích náplní. V současné době tuto úlohu výborně splňují sloučeniny odvozené od močoviny, nebo třída aromatických aminů (nejčastěji akardit II – *N*-methyl-*N,N'*-difenylmočovina, centrality – *N,N'*-dialkyl-*N,N'*-difenylmočoviny, difenylamin)¹. V současné době je pozornost zaměřena na toxicitu hnacích hmot a jejich vliv na zdraví člověka a životní prostředí. Problémem jsou právě zmíněné stabilizátory – jsou toxické, nebo obsahují toxické (karcinogenní) nečistoty a/nebo tvoří toxické (karcinogenní) rozkladné produkty během výroby a/nebo při stárnutí hnacích hmot. Výše uvedené stabilizátory tvoří *N*-nitrosoaminy, které jsou látkami se silným karcinogenním a mutagenním účinkem. Koncentrace těchto látek se v hnacích hmotách pohybuje od 0,01 do 0,5 %, někdy až 1,0 % (cit.¹).

Cílem této práce je nahradit tyto stabilizátory látkami jinými, které by tedy neměly obsahovat atom dusíku, nebo by aminoskupina nového stabilizátoru neměla obsahovat reaktivní protony (např. trifenylamin). My jsme se zaměřili na použití rostlinných olejů, které jsou směsí alifatických nenasyčených mastných kyselin, tedy neobsahují atom dusíku a nemohou tvořit *N*-nitrosoaminy. Vycházeli jsme z práce G. Heeba², který testoval sojový olej. My jsme přidali olej lněný a směs mastných kyselin C14–C22 ve formě 2-ethylhexylesterů. Byly připraveny dvousložkové bezdýmné prachy na bázi nitrocelulózy a nitroglycerinu obsahující nové stabilizátory a zároveň i akardit II jako konvenční stabilizátor. Prachy byly podrobeny zkouškám chemické stálosti (např. mikrokolorimetrie, zkouška při 100 °C, váhová ztráta), bezpečnostním zkouškám (např. citlivost k nárazu a ke tření) a zároveň je vyvíjena metoda ke stanovení olejů v bezdýmných prašících (GC/FID) a k navržení mechanismu stabilizace prachů novými látkami (GC/MS). Výsledky testů u prachů s novými látkami byly porovnávány s prachy obsahující akardit II.

Výborné výsledky všech zkoušek ukazují vhodnost nových látek jako stabilizátorů do bezdýmných prachů.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru MSM 0021627502 a grantu MPO ČR (ev. č. FR-TII/142).

LITERATURA

1. Heeb G., Wilker S.: New stabilizers for nitrocellulose based propellants. *37th International Annual Conference of ICT on Energetic Materials*, 2006.
2. Heeb G., Langelage R.: New stabilizers for nitrocellulose based propellants – Part II. *39th International Annual Conference of ICT on Energetic Materials*, 2008.

3P-10

METODIKA STANOVENIA RÁDIONUKLIDOV

**MICHAL GALAMBOŠ, OLGA ROSSKOPFOVÁ
a PAVOL RAJEC**

*Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta,
Katedra jadrovej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava
galambos@fns.uniba.sk*

Do životného prostredia sa rádionuklidy (RN) dostávajú z rozmanitých zdrojov, prostredníctvom mnohých systémov a ciest¹. Medzi významné antropogénne zdroje patria: výroba jadrových zbraní, ich testovanie a jadrové výbuchy; ťažba, spracovanie uránových rúd a obohatenie uránu; jadrove-energetické zariadenia a elektrárne na fosilne palivá; závody na prepracovanie vyhorého paliva; jadrové nehody a havárie; výroba RN, ich aplikácia v nukleárnej medicíne a ostatné zdroje.

Sledovanie a hodnotenie radiačnej záťaže obyvateľov prírodnou rádioaktivitou a rádioaktivitou z umelých zdrojov si vyžaduje pravidelný monitoring zložiek životného prostredia, ktorého hlavnou súčasťou sú metódy stanovenia ekotoxicky významných RN.

Problematika stanovenia RN predstavuje jednu z hlavných výskumných činností Katedry jadrovej chémie PriF UK v Bratislave. Medzi základné metodologické kroky

stanovenia patria^{1,2}: Predúprava vzorky: drvenie, homogenizácia, sitovanie, kvartácia a sušenie vzorky (pri 105 °C do konštantnej hmotnosti). Spracovanie vzorky: spaľovanie vzorky pri 550 °C, spracovanie popola (rozpúšťanie, HF + koncentrované minerálne kyseliny; mokré lúhovanie; mikrovlnný rozklad), pridanie stopovacích RN, úprava oxidačných stupňov, zakoncentrovanie sledovaného RN (extrakcia tuhou fázou, extrakčná chromatografia, iónovymenná chromatografia, kvapalinová extrakcia, odparovanie). Rádiochemická separácia: extrakcia tuhou fázou, kvapalinová extrakcia, extrakčná chromatografia, iónovymenná chromatografia, spoluzrážanie, kombinácia týchto metód. Príprava spektrometrického α - a β -zdroja na meranie: odparovanie z organických roztokov (α -aktívne), elektrolytická depozícia (α -aktívne), mikrosopoluzrážanie s fluoridmi/filtrácia (s NdF₃, LaF₃, CeF₃), membránová filtrácia 0,2 μ m (α -aktívne), sušenie na kovovej podložke (β -aktívne), zmiešanie s vhodným scintilačným koktailom (β -aktívne). Meranie rádioaktivity pripraveného zdroja: α -spektrometria, γ -spektrometria, kvapalinová scintilačná spektrometria, hmotnostná spektrometria s indukčne viazanou plazmou. Spracovanie experimentálnych údajov: vyhodnotenie nameraného spektra, spracovanie nameraných hodnôt (určenie objemovej, resp. mernej aktivity), interpretácia získaných výsledkov.

LITERATÚRA

1. Tölgyessy J., Harangozó M., v knihe: *Rádioekológia*. kap. 2, s. 6. UMB FPR, Banská Bystrica 2000.
2. Navrátil O., Hála J., Kopunec R., Lešetický L., Macášek F., Mikulaj V., v knihe: *Jaderná chemie*, kap. 6, s. 165. Academia, Praha 1985.

3P-11

VOLTAMMETRIC DETERMINATION OF 5-AMINO-QUINOLINE USING CARBON SCREEN PRINTED ELECTRODE

**IVAN JIRANEK^{a*}, JIRI BAREK^a, and FRANK
MICHAEL MATYSIK^b**

^a *Charles University in Prague, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, Hlavova 8, 128 43 Prague 2,*
^b *University of Regensburg, Institute of Analytical Chemistry, Chemo- and Biosensors, Universitätsstraße 31, 93053 Regensburg
jiraneck@natur.cuni.cz*

Screen printed electrodes were developed as an inexpensive and disposable tool for quick and simple analysis in combination with well portable equipment which can be used e.g. for environmental field analysis or bioanalytical measurements. Possible problems with passivation are coped with by replacing the old electrode for a new one. There are several types of screen printed electrodes available on the market and in this work we used carbon screen printed electrode (model DRP 110; Dropsens)¹. Among main advantages of the carbon material belong wide potential window covering both anodic and cathodic region and relatively high signal/noise ratio.

For testing of this electrode, a well oxidizable model substance 5-aminoquinoline was used in relation to our previ-

ous experimental work². 5-Aminoquinoline belongs among genotoxic substances and together with other aminoquinolines is known mainly in connection with antimalaric agents^{3,4}.

In this contribution, determination of 5-aminoquinoline using several methods, namely DC, DP and SW voltammetry, was developed and optimized. Moreover, cyclic voltammetric behaviour of the substance in different media was studied. Performance of DP and SW voltammetry was comparable with the limit of detection of ca $3 \cdot 10^{-7}$ mol l⁻¹ and about one order of magnitude better than that of DC voltammetry. The possibility of direct determination of the test substance in drinking and river water was successfully tested, too.

The financial support from the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (projects LC 06035, MSM 0021620857 and RP 14/63), ERASMUS (application 901906) and GA UK (project No. SVV 261204) is gratefully acknowledged.

REFERENCES

1. <http://www.dropsens.com/en/productos.html>, (accessed 05. 03. 2010)
2. Barek J., Fischer J., Navratil T., Peckova K., Yosypchuk B., Zima J.: *Electroanalysis* 19, 2003 (2007).
3. <http://en.wikipedia.org/wiki/Primaquine>, (accessed 18.03. 2010).
4. Khan M. S., LaMontagne M. P.: *J. Med. Chem.* 22, 1005 (1979).

3P-12

ATR-FTIR A HPLC CHARAKTERIZÁCIA HISTORICKÝCH PAPIEROVÝCH DOKUMENTOV

FRANTIŠEK KAČÍK, IVETA ČABALOVÁ, MARTA LAUROVÁ a JOZEF SIVÁK

*Technická univerzita vo Zvolene, Drevárska fakulta, T.G.Masaryka 24, 960 53 Zvolen
kacik@vsld.tuzvo.sk*

Evolúcia výroby papiera od XVIII. storočia v Európe bola charakterizovaná kontinuálnymi zmenami v buničino- vých vláknach a v ďalších materiáloch (celulóza, drevovina, plnivá, glejivá, farbivá, opticky zjasňovacie prostriedky apod.). Papier a iné lignocelulózové materiály podliehajú rôznym vplyvom (svetlo, UV žiarenie, teplota, vlhkosť, kyslík, kyseliny...). Tieto sú príčinou degradácie makromolekulo- vých látok (najmä hydrolyza a oxidácia), čo sa prejaví na zmenách chemických, fyzikálnych a mechanických vlastností materiálov^{1,2}.

Vzorky papiera z historických kníh (7 vzoriek z obdobia od r. 1700 do r. 2007) boli študované metódou jednodrazovej ATR-FTIR, karboxylové kyseliny (mravčia, octová) metódou HPLC na kolóne Polymer IEX H-forma v 9 mM H₂SO₄, acidita papiera bola zistená meraním povrchového pH a stanovením pH vo vodnom výluhu³⁻⁵.

Metódou jednodrazovej ATR-FTIR boli u jednotlivých vzorkách starého papiera v rozsahu 1500 až 1800 cm⁻¹ pozorované spektrálne rozdiely v pásoch, ktoré prislúchajú deformačným vibráciám oxidačným produktov celulózy. Po-

dobné rozdiely boli zaznamenané aj v prípade absorpčných pásov pri vlnopočte 1540 cm⁻¹, ktoré prislúchajú ligninovej makromolekule⁶.

Vo vzorkách z rokov 1700 až 1869 prevládalo pH (povrchové aj v roztoku) mierne kyslé až zásadité (6,27–7,20), papiere vyrobené v XX. storočí mali pH kyslé (4,61–5,34).

Množstvá karboxylových kyselín (mravčej a octovej) boli väčšie pri starších knihách s výnimkou papierov z XX. storočia, kde aciditu spôsobujú aj iné kyslé látky.

Získané výsledky môžu byť využité pri voľbe vhodnej metódy na zachranu kultúrneho dedičstva na tradičných nosičoch informácií.

Táto práca vznikla s podporou projektu VEGA 1/0490/09.

LITERATÚRA

1. Calvini P., Gorassini A.: *Restaurator* 23, 48 (2002).
2. Kačík F., Kačíková D., Jablonský M., Katusčák S.: *Polymer Degrad. Stab.* 94, 1509 (2009).
3. Polovka M., Polovková J., Vizárová K., Kirschnerová S., Bieliková L., Vrška M.: *Vibrat. Spec.* 41, 112 (2005).
4. Jablonský M., Hroboňová K., Tiňo R.: *Chem. Listy* 102, 265 (2008).
5. Strlič M., Kolar J., Kočar D., Drnovšek T., Šelih V. S., Susič R., Pilhar B.: *e-Preservation Science* 1, 35 (2004).
6. Brandt N. N., Chikishev A. Yu., Itoh K., Rebríkova N. L.: *Laser Physics* 19, 483 (2009).

3P-13

HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE S DESORPČNÍ ELEKTROSPREJOVOU IONIZACÍ: KONSTRUKCE IONTOVÉHO ZDROJE A JEHO OPTIMALIZACE

FILIP KAFTAN^a, JOSEF CVAČKA^{a*} a MICHAEL VOLNÝ^b

*^a Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i., Flemingo-
govo nám. 2, 166 10 Praha 6, ^b Mikrobiologický ústav AV ČR,
v.v.i., Vědeňská 1083, 142 20 Praha 4
cvacka@uochb.cas.cz*

Desorpční elektrosprejová ionizace (DESI) je nový způsob ionizace za atmosférického tlaku umožňující analyzovat polární i nepolární analyty v kapalných, pevných i plynných formách, a to bez jejich jakékoliv předchozí úpravy nebo chromatografické separace^{1,2}.

V první fázi projektu byla zkonstruována a optimalizována DESI instrumentace artikulující s inletem hmotnostního spektrometru LCQ Fleet (Thermo Fisher Scientific, USA). Následně byly optimalizovány parametry sprejery (průměry, délky a profily zakončení sprejovací kapiláry s mobilní fází a kapiláry s přívodem nebulizačního plynu) a jeho geometrie tj. vzdálenost a úhel, pod kterým dopadají primární kapičky spreje mobilní fáze a pod kterým vstupují sekundární kapičky do inletu MS. Dále byl optimalizován průtok mobilní fáze a nebulizačního plynu a velikost vloženého napětí. Pozornost byla věnována výběru a studiu vlastností vzorkovacích povrchů (sklo, PTFE aj.) ve spojení s různými standardy a odlišným složením mobilní fáze. Ukázalo se, že jedním z hlavních

kritérií úspěšnosti desorpce analytu je právě povrch, na který je vzorek nanesen^{2,3}.

S pomocí DESI-MS instrumentace byly zkoumány vzorky přírodního původu, zejména povrchy a tkáňové řezy několika druhů rostlin a hmyzu.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru Z4 055 0506 a grantu GA ČR č. P206/10/P018.

LITERATURA

1. Takats Z., Wiseman J. M., Gologan B., Cooks R. G.: *Science* 306, 471 (2004).
2. Takats Z., Wiseman J. M., Cooks R. G.: *J. Mass Spectrom.* 40, 1261 (2005).
3. Iřa D. R., Manicke N. E., Rusine A. L., Cooks R. G.: *Rapid Commun. Mass Spectrom.* 22, 503 (2008).

3P-14

COMPARISON OF METHODS FOR SPECIFIC ISOLATION OF PHOSHOPEPTIDES BY IMMOBILIZED METAL ION AFFINITY CHROMATOGRAPHY (IMAC)

TOMAS KROUPA^a, BARBORA JANKOVICOVÁ^a, LENKA HERNICHOVÁ^b, and ZUZANA BILKOVA^a

^a *University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology Studentská 573, 532 10 Pardubice,* ^b *University of Defence, Faculty of Military Health Sciences, Třebešská 1575, 500 01 Hradec Králové*
tomas.kroupa@student.upce.cz

Protein phosphorylation is one of the most frequent post-translational modifications (PTM) which plays a significant role in a wide range of cellular processes, like signal transduction, metabolic maintenance, cell division, etc. The identification of phosphoproteins and the characterization of their phosphorylation sites are necessary for understanding of their biological roles. To understand these biological processes at molecular level, it is necessary to characterize the phosphorylation states of specific proteins. However, phosphopeptides are often present in low abundance and strongly suppressed by non-phosphorylated ones during MS ionization. Thus, highly sensitive detection methods combining with selective isolation or enrichment of phosphorylated peptides/proteins are urgently required¹.

In this context IMAC is one of the strategies how obtain preferably phosphorylated peptides for next analysis. The model Phosphopeptide Standard Mixture (INVITROGEN), digested α -casein and β -casein has been applied for selective enrichment of phosphopeptides.

We compared commercially available IMAC particles such as IDA magnetic particles (Chemicell), Profinity™ IMAC resin (Bio-Rad) and PHOS-Select™ Iron Affinity Gel (Sigma Aldrich). Parameters such selectivity, required instrumentation and time-consumption were evaluated.

This work was supported by the Ministry of Education of Czech Republic (ME08105 and MSMT 0021627502) and by Czech Science Foundation (GA 203/09/0857 and

GA203/08/1536).

REFERENCE

1. Zhang L.: *Proteomics* 9, 4093 (2009).

3P-15

COMPARISON OF CLASSICAL AND SEQUENTIAL INJECTION SPECTROPHOTOMETRIC METHOD FOR DETERMINATION OF MOLYBDENUM USING STYRYL DYE 2-[(E)-2-(4-DIPROPYLAMINO-PHENYL)-1-ETHENYL]-1, 3, 3-TRIMETHYL-3H-INDOLIUM CHLORIDE

MARTINA LEŠKOVÁ^{a*}, JÁN PETROVAJ^a, YAROSLAV BAZEL^a, HANA SKLENÁŘOVÁ^b, and PETR SOLICH^b

^a *Department of Analytical Chemistry, Faculty of Science, P. J. Šafárik University, Moyzesova 11, Košice 040 01,* ^b *Department of Analytical Chemistry, Faculty of Pharmacy, Charles University, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové*
matka.leskova@gmail.com

Spectrophotometric method for the determination of molybdenum was developed. The method is based on the reaction between thiocyanate complex of molybdenum and the polymethine dye 2-[(E)-2-(4-dipropylaminophenyl)-1-etenyl]-1,3,3-trimethyl-3H-indolium chloride (DETI) in a hydrochloric acid medium. It is modified thiocyanate method, when molybdenum forms a ternary ion association colored complex with maximum of absorbance at 620 nm. The additional reagent (DETI) enhances speed of complex formation. For the determination of molybdenum two techniques: classical (manual mixing of reaction solutions) and automatic (automated mixing of reaction solutions by Sequential Injection Analysis – SIA) were used.

Classical technique requires stabilization of the created system adding a solution of the non-ionic surface-active compound OC-20. The optimal condition of the reaction has been found. Ion associate is created mixing the sample with 0.5 ml of 1.2 mol l⁻¹ KSCN, 1 ml of 1 mol l⁻¹ HCl, 0.3 ml of 10⁻³ mol l⁻¹ DETI and 1 ml of 1% OC-20 in water medium, respectively. Total volume of reaction system is 5 ml. Limit of detection of molybdenum is 0.015 mg l⁻¹ and limit of quantitation is 0.050 mg l⁻¹.

Automatic technique does not need the use of the non-ionic surface-active compound OC-20. For the optimization of reaction conditions a commercial flow system with eight-port selection valve (FIA-lab® 3500, USA) supplemented with the fiber-optic charge-coupled detector USB 2000 was used. The SIA parameters (volumes and concentration of reagents, flow rate, zones sequence) that affect the signal response have been optimized. Ion associate is created mixing 68 ml of 8·10⁻⁴ mol l⁻¹ DETI, 50 μ l of sample, 26 μ l of 1.44 mol l⁻¹ KSCN, 60 μ l of 0.3 mol l⁻¹ of HCl in water medium, respectively. Total volume of reaction system is cca 500 ml. Flowrate is 70 ml s⁻¹. The calibration curve is linear over the range 0.96–3.84 mg l⁻¹ of molybdenum. The proposed methods can be used to determine molybdenum in water samples.

The work is supported by the Grant Agency APVV (project SK-UA-0009-09) of Slovak Republic, International Visegrad Fund (50910689) and by the Czech Ministry of Education (MSM 0021620822).

3P-16

ŠTÚDIUM STEREOSELEKTÍVNEJ SEPARÁCIE NOVÝCH ANALÓGOV INDOLOVÝCH FYTOALEXÍNŮV

JÁN PETROVAJ^{a*}, TAĽÁNA GONDOVÁ^a, PETER KUTSCHY^b, ZUZANA ČURILLOVÁ^b, ANETA SALAYOVÁ^b a MARTINA LEŠKOVÁ^a

^a Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesova 11, 040 01 Košice,

^b Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesova 11, 040 01 Košice
jan.petrovaj@azet.sk

Medzi najčastejšie používané stacionárne fázy v chirálnej HPLC patria makrocyclické glykopeptidové antibiotiká (teikoplanin, vankomycin, avoparcin, ristocetin A, atď.), ktoré vďaka svojej komplementárnej enantioselektivitě umožňujú separáciu širokej škály chirálnych zlúčenín.

Enantioselektivity makrocyclických glykopeptidov je ovplyvnená priestorovou štruktúrou a stereochemickým usporiadaním funkčných skupín v rôznych typoch mobilných fáz. Oblúbeným chirálnym selektorom na báze makrocyclických glykopeptidov je teikoplanin, známy pod komerčným názvom kolóny Chirobiotic T, ktorý prvýkrát použil D. W. Armstrong v roku 1994 (cit.¹).

Fytoalexíny sú nízkomolekulové sekundárne metabolity produkované rastlinami (*cruciferae*) ako odpoveď na rôzne formy stresu, ako aj proti mikrobiologickým útokom a chorobám. Viac ako 30 indolových fytoalexínov bolo izolovaných z krížokvetých rastlín repky olejnej, brokolice, kapusty, čínskej kapusty a repy. Tieto zlúčeniny sú zaujímavé pre ich antibakteriálne, antitumorové a chemopreventívne vlastnosti^{2,3}. Syntetizujú sa aj nové analógy fytoalexínov s presne definovanou biologickou aktivitou. Na ich separáciu, určenie optickej čistoty, ako aj na stanovenie enantioméneho prebytku stereoselektívnych syntéz sa využívajú techniky chirálnej chromatografie.

S využitím chirálneho selektora na báze makrocyclických glykopeptidov bola študovaná separácia nových analógov indolových fytoalexínov metódou HPLC. Uskutočnilo sa aj termodynamické štúdium chirálnej separácie.

Práca bola podporovaná grantom APVV SK-UA-0009-09.

LITERATÚRA

1. Armstrong D.W., Tang Y., Chen S., Zhou Z., Bagwill C.: *Anal. Chem.* **66**, 173 (1994).
2. Plátová M., Šarišský M., Kutschy P., Miroššay A., Mencev R., Čurillová Z., Suchý M., Monde K., Mirossay L., Mojžiš J.: *Leukemia Res.* **29**, 415 (2000).
3. Soledade M., Pedras C., Addio A. M., Suchy M., Okinyo D. P. O., Zheng Q. A., Jha M., Sarwar, M. G.: *J. Chromatogr., A* **1133**, 172 (2006).

3P-17

ESI MASS SPECTROMETRY STUDY OF SOME DIGLYCOSYLAMINES

JULIA MICOVA^a, VLADIMIR PATOPRSTY^a, LUDOVIT SKULTETY^b, and SILVIA VLCKOVA^a

^a Institute of Chemistry SAS, Dubravska 9, 845 38 Bratislava,

^b Institute of Virology SAS, Dubravska 9, 845 38 Bratislava
chemjumi@savba.sk

Mono- and diglycosylamines are the compounds of interest for the enzymology of carbohydrates because they are considered as reversible inhibitors of different glycosidases^{1,2}. These compounds are also used as universal auxiliaries for the synthesis of biologically active compounds³.

Some monoglycosylamines were prepared by reaction of reducing sugar residue with concentrated alcoholic solution of ammonia in cold. These derivatives were used as reagent to next reaction step-transglycosylation in boiling methanol.

By this way the set of combined diglycosylamine from monoglycosylamines was prepared, so that resultants contained different two saccharide units (pentose, hexose, deoxyhexose, heptose). The structures of those products were determined by spectrometric methods. Mass spectra were obtained by electrospray QTOF MS. The primary effect of the nanoelectrospray method in positive mode is the protonation of the molecule, giving rise to the formation of $[M+H]^+$ adducts.

ESI analysis and MS/MS were performed with a mass spectrometer QToF Premier, (Waters Manchester, UK), equipped with a nanoelectrospray ionization source.

For analysis, 1 mg of the sample was dissolved in 1 ml of acetonitrile/water (1:1, v/v) and introduced into the ion source at a flow rate of 5 $\mu\text{l min}^{-1}$, and entered via a metal capillary held at high voltage (3.5 kV). The mass spectra interpretation software Mass Frontier 4.0 was used in order to assist in the elucidation of the fragmentation mechanisms. The Fragments and Mechanisms module of the program is based on a mathematical approach for the simulation of unimolecular ion-decomposition reactions.

The structures of the prepared compounds were proved by mass spectrometry. Protonated molecular ions and MSMS measurement were in agreement with a disaccharide structures. The nESI QToF MS can be successful used for the elucidation of compounds of this type. In positive mode also the stable cation adducts of molecular ions and the shortened fragment ions Y and B should be used. The anomers were not distinguished. It is very important to proper localize the cation adduct on the saccharide by molecular modeling – then mass spectra are in a good agreement with fragmentation rules.

REFERENCES

1. Lai H. Y. L., Axelrod B.: *Biochem. Biophys. Res. Commun.* **54**, 463 (1973).
2. Lalegerie B., Legler G., Yon J.: *Biochimie* **64**, 977, (1982).
3. Kunz H., Ruck K.: *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **32**, 336, (1993).

3P-18
VOLTAMETRICKÉ A AMPEROMETRICKÉ
STANOVENÍ NITROFENOLŮ POMOCÍ BOREM
DOPOVANÉ DIAMANTOVÉ FILMOVÉ ELEKTRODY

JANA MUSILOVÁ*, JIŘÍ BAREK a KAROLINA PECKOVÁ

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Hlavova 8, 128 43 Praha 2
 Jana.Musilova@seznam.cz

Nitrofenoly patří podle US Environmental Protection Agency mezi přední polutanty¹. Jejich zdrojem v životním prostředí jsou zplodiny automobilů, průmyslové odpadní vody z výroby herbicidů, pesticidů, barviv a rozpouštědel a také jejich používání v zemědělství jako hnojiv pro stimulaci růstu kořenového systému.

Příspěvek se zabývá stanovením 2-nitrofenolu (2-NP), 4-nitrofenolu (4-NP) a 2,4-dinitrofenolu (2,4-DNP) ve vsádkovém (diferenční pulsní voltametrii) i průtokovém (průtokovou injekční analýzou s amperometrickou detekcí) uspořádání pomocí borem dopované diamantové filmové elektrody (BDDFE). BDDFE disponují řadou vynikajících vlastností, zejména mechanickou i chemickou stabilitou, malou náchylností k pasivaci, nízkým zbytkovým proudem, nízkou adsorpcí látek na jejich povrchu a biokompatibilitou^{2,3}. Významnou výhodnou vlastností BDDFE je široké potenciálové okno v katodické i anodické oblasti, které umožňuje stanovení jak oxidovatelných, tak redukovatelných látek. V případě nitrofenolů lze využít jak redukce, tak i oxidace, a tím zvýšit spolehlivost stanovení. Aktivace elektrodového povrchu byla prováděna pomocí cyklické voltametrie mezi $-2,5$ a $+2,5$ V v 1M HNO₃ za neustálého míchání, dokud nebylo dosaženo stabilního signálu.

Pro voltametrické stanovení v katodické oblasti byl použit Britton-Robinsonův (BR) pufr o pH 4 (pro 2-NP a 2,4-DNP) a pH 6 (pro 4-NP). Pro stanovení v anodické oblasti byl použit BR pufr o pH 10 (pro 2,4-DNP) a pH 11 (pro 4-NP). Při voltametrickém stanovení 2-NP docházelo k pasivaci elektrody, což znemožňuje použití této metody. Při použití průtokové injekční analýzy s amperometrickou detekcí k pasivaci elektrodového povrchu nedochází a lze ji tedy použít ke stanovení nitrofenolů v katodické i anodické oblasti.

Tato práce vznikla za podpory grantu Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy (projekt LC 06035, MSM 0021620857 a RP 14/63) a Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (projekt SVV 261204).

LITERATURA

1. <http://www.epa.gov>, staženo 19.3.2010.
2. Fujishima A., Einaga Y., Rao T. N., Tryk D. A.: *Diamond electrochemistry*. Elsevier, Amsterdam 2005.
3. Peckova K., Musilova J., Berek J.: Crit. Rev. Anal. Chem. 39, 148 (2009).

3P-19
VOLTAMETRICKÉ A AMPEROMETRICKÉ
STANOVENÍ RESVERATROLU

LENKA NĚMCOVÁ, JIŘÍ ZIMA a JIŘÍ BAREK

Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř environmentální elektrochemie, Albertov 6, 128 43 Praha 2
 nemcova.len@seznam.cz

Resveratrol (3,5,4'-trihydroxystilben) je přírodně se vyskytující fytoalexin produkovaný některými rostlinami jako odpověď na stres, např. napadení patogeny, UV záření, expozice ozónem nebo mechanické poškození¹. Byla prokázána jeho řada zdravích prospěšných účinků, jako např. protizánětlivé, antioxidační účinky, ochrana před koronárním onemocněním². V rostlinném materiálu se obvykle vyskytuje směs obou isomerů (*trans*- a *cis*-), většinou však převažuje *trans*-isomer.

Cílem této práce bylo nalézt optimální podmínky pro voltametrické a amperometrické stanovení této látky pomocí uhlíkové pastové elektrody, ověřit možnost stanovení obou isomerů vedle sebe a pokusit se o praktickou aplikaci nově vyvinutých metod na stanovení resveratrolu v přírodním materiálu. Vzhledem k tomu, že k extrakci resveratrolu z rostlinného materiálu se používá ethanol, bylo nutné pracovat ve směsi vody a organického rozpouštědla, kde klasické pastové elektrody nejsou vhodné a je třeba používat pastové elektrody na bázi mikrokuliček ze skleného uhlíku³⁻⁵.

V příspěvku budou prezentovány naše poznatky týkající se voltametrického chování *cis* a *trans* isomeru testovaného analytu na této elektrodě a možnosti jeho analytického využití. Závěrem bude demonstrována možnost stanovení *trans*-resveratrolu v pohance pomocí HPLC s fotometrickou detekcí při 306 nm a elektrochemickou detekcí při $E = +1.2$ V na výše uvedené uhlíkové pastové elektrodě.

Tato práce vznikla za podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR (projekt LC06035, MSM 021620857 a RP 14/63) a Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (projekt SVV 261204).

LITERATURA

1. Šmidrkal J., Filip V., Melzoch K., Hanzlíková I., Buckiová D., Kříska B.: Chem. Listy 95, 602 (2001).
2. Pirola L. Frojdo S.: Life 60, 323 (2008).
3. Berek J., Muck A., Wang J., Zima J.: Sensors 4, 47 (2004).
4. Zima J., Švancara I., Berek J., Vytřas K.: Crit. Rev. Anal. Chem. 39, 204 (2009).
5. Zima J., Švancara I., Pecková K., Berek J., v knize: *Progress on drinking water research* (LeFebvre M. H., Roux M. M., ed.), kap. 1, s. 1–53. Nova Science Publishers, Inc., New York 2008.

3P-20

ANALÝZA MASTNÝCH KYSELIN V LIDSKÉ PLAZMĚ

KATEŘINA NETUŠILOVÁ, MIROSLAV LÍSA
a MICHAL HOLČAPEK*Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická,
Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
Katerina.Netusilova@upce.cz*

Analýzou profilu mastných kyselin v biologickém materiálu je možné získat důležité informace o složení lipidů u zdravých či nemocných jedinců. Změny zastoupení mastných kyselin je možné registrovat u různých onemocnění (diabetes mellitus, kardiovaskulární onemocnění, rakovina, Alzheimerova choroba, obezita, atd.). Standardní metodou využívanou pro stanovení profilu mastných kyselin je analýza methylesterů mastných kyselin (FAME) pomocí plynové chromatografie s plamenově-ionizační detekcí (GC/FID). Cílem této práce je analýza profilu mastných kyselin v lidské plazmě pomocí GC/FID a hmotnostní spektrometrie s ionizací elektrosprejem (ESI-MS) a následné porovnání výsledků z obou použitých technik. Lipidy byly extrahovány z lidské plazmy pomocí směsi chloroform/methanol/voda metodou podle Bligh a Dyer. Lipidový extrakt obsahující vnitřní standard byl reesterifikován na FAME pomocí methanolátu sodného. Dále byla testována reesterifikace lipidů z neupravené plazmy s přidavkem vnitřního standardu. Připravené FAME byly analyzovány pomocí GC/FID a ESI-MS. V ESI hmotnostních spektrech se FAME vyskytují především jako adukty se sodnými, popř. lithnými ionty v závislosti na přidaném aditivu. Následně byly mastné kyseliny kvantifikovány pomocí odezvoových faktorů získaných při měření identických standardů FAME.

Tato práce byla podporována grantovým projektem MSM0021627502 Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy a projektem č. 203/09/0139 Grantové agentury České republiky.

3P-21

¹³C ISOTOPIC DISCRIMINATION IN HUMIC SUBSTANCESFRANTIŠEK NOVÁK^a, MARTINA ŠESTAUBEROVÁ^a,
and FRANTIŠEK BŮZEK^b^aBiology Centre AS CR, 370 05 České Budějovice, ^bGeology Survey, 118 21 Prague
novakf@upb.cas.cz

The ¹³C/¹²C isotopic ratio is widely exploited in plant ecology¹. We used this technique to understand processes of plant biomass transformation into humic substances.

Humic (HA) and fulvic acids (FA) were isolated by standard method from individual soil horizons of relatively undisturbed mountain spruce forest in Šumava National Park². HA maturity indices were determined from the FTIR spectra as ratios of intensities I₁₇₁₀/I₁₀₅₀ and I₁₆₁₀/I₁₀₅₀. Isotopic ana-

lyses were carried on the elemental analyzer Fisons 1108 linked to mass spectrometer Mat 251 in continual regime. The ratio of ¹³C/¹²C was expressed as δ¹³C with reference to NBS 22 standard. Samples were measured 2-times, the deviation was <0.15 ‰.

The results shown, that the δ¹³C value of HA continuously increases with soil depth (Fig. 1), which probably reflects HA maturing. Similar increase of δ¹³C with soil depth was described also for entire soil organic matter in European forests³. The δ¹³C of mature HA from horizons A_h and B_{hs} was –26.5 ‰. It is evident from the comparison of δ¹³C values of these deepest horizons, that mature humic acids alter their composition very slowly. The δ¹³C of humic acids highly correlated with HA maturity indices (0.78* and 0.93**, respectively). The δ¹³C values of fulvic acids were a bit higher in comparison with relevant HA.

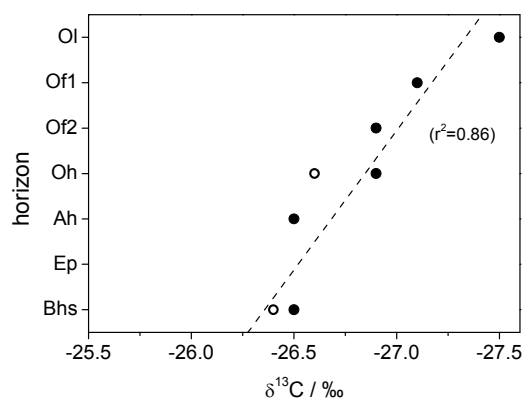


Fig. 1. Decrease of δ¹³C in humic and fulvic acids (open circle) with soil depth

This work was supported by the grant OC10023 of MŠMT ČR.

REFERENCES

- Dawson T. E., Mambelli S., Plamboeck A. H., Templer P. H., Tu K. P.: *Annu. Rev. Ecol. S.* 33, 507 (2002).
- Novák F., Kalousková N., Machovič V., Brus J.: *J. Forest Sci.* 45, 554 (1999).
- Bůzek F., Pačes T., Jačková I.: *Appl. Geochem.* 24, 1686 (2009).

3P-22

VOLTAMMETRIC DETERMINATION OF ACLONIFEN AT A SILVER SOLID AMALGAM ELECTRODE AND A CARBON PASTE ELECTRODE**VÍT NOVOTNÝ* and JIŘÍ BAREK**

Charles University in Prague, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, UNESCO laboratory of environmental electrochemistry, Hlavova 8, 128 43 Prague
novotny1@natur.cuni.cz

Aclonifen (AC) a diphenylether herbicide (DPhEH) is an important agrochemical used worldwide for the protection of important crops. It has been discovered that DPhEH pose a high risk to aquatic life. Moreover, some studies hint that they can have varied adverse effects on mammals, including teratogenesis, mutagenesis, cancerogenesis, interference with hormonal balance and adverse effects on blood formation. Considering these facts the need arises for the ability to track such substances in the environment. Although appropriate methods for the determination of DPhEH in the environment already exist, it still makes sense to develop new voltammetric methods. This is because substances of our interest do exhibit electrochemical activity¹ and electrochemical methods are convenient in many ways. Namely their cheapness, the ease with which they are performed and low detection limits². Carbon paste electrodes (CPE) are particularly suitable for the determination of many important electrochemically active compounds in trace amounts³. So are solid silver amalgam electrodes (AgSAE)⁴. In accordance with these facts a method for the determination of AC at a CPE and AgSAE using differential pulse voltammetry will be presented. Optimal conditions for the determination will be stated. Calibration dependencies and limits of detection will be discussed.

The financial support of The Czech Ministry of Youth and Sports (project LC06035, MSM 021620857 and RP14/63) is gratefully acknowledged.

REFERENCES

1. Rupp E. B., Zuman P., Šestáková I., Horák V.: *J. Agric Food Chem.* 40, 2016 (1992).
2. Barek J., Fischer J., Navrátil T., Pecková K., Yosypchuk B., Zima J.: *Electroanalysis* 19, 2003 (2007).
3. Zima J., Švancara I., Barek J., Vytřas K.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 39, 204 (2009).
4. Yosypchuk B., Barek J.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 39, 189 (2009).

3P-23

AMPÉROMETRICKÁ DETEKCE GENOTOXICKÝCH AMINODERIVÁTŮ POLYCYKlickÝCH AROMATICKÝCH UHLOVODÍKŮ S VYUŽITÍM PLATINOVÝCH A BÓREM DOPOVANÝCH DIAMANTOVÝCH ELEKTROD**HANA DEJMKOVÁ, LUCIE MAIXNEROVÁ, JAROSLAVA ZAVÁZALOVÁ, JIŘÍ BAREK a KAROLINA PECKOVÁ***

Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Albertov 6, 128 43 Praha 2 kpeckova@natur.cuni.cz

Aminoderiváty polycyklických aromatických uhlovodíků (APAH) patří mezi významné polutanty pracovního a životního prostředí s možnými mutagenními až karcinogenními účinky¹. Používají se v průmyslu např. při výrobě potravinářských barviv a barviv používaných v kosmetice². V organismu vznikají metabolizací příslušných nitroderivátů polycyklických aromatických uhlovodíků³.

Přítomnost oxidovatelné aminoskupiny ve struktuře APAH umožňuje jejich přímou elektrochemickou oxidaci a rozvoj voltammetrických a ampérometrických metod stanovení s využitím klasických (platina, zlato, skelný uhlík a uhlíkové pasty) a novějších (bórem dopovaný diamant⁴) elektrodo- vých materiálů. Určité omezení elektrochemických způsobů analýzy APAH může představovat pasivace elektrod, která je způsobená tvorbou dimerů a polymerních filmů vzniklých následnými reakcemi meziproductů. Při použití ampérometrické detekce v průtoku jsou tyto problémy méně výrazné díky průběžnému odstraňování produktů elektrooxidace mobilní fáze.

Perpektivy využití ampérometrické detekce APAH v HPLC jsou v tomto příspěvku nastíněny na příkladě HPLC stanovení 1- a 2-aminonafthalenu a 2-, 3- a 4-aminobifenylu. Separace vybraných směsí bylo dosaženo na reverzní C₁₈ fázi či na koloně LiChroCART ChiraDex (Merck) s kovalentně vázaným β-cyklodextrinem. Ampérometrická detekce s využitím detektorů na bázi bórem dopovaného diamantu v tenkovstředném uspořádání a “wall-jet” uspořádání poskytla meze stanovitelnosti v koncentračním řádu 10⁻⁸ mol l⁻¹ obdobně jako ampérometrická detekce na platinové tubulární elektrodě.

Tato práce vznikla za podpory MŠMT ČR (projekty LC 06035, MSM 0021620857 a RP 14/63) a Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (projekt SVV 261204).

LITERATURA

1. <http://www.iarc.fr/en/publications/list/monographs/index.php>, staženo 18.3.2010.
2. Brede C., Skjevraak I., Herikstad H.: *J. Chromatogr., A* 983, 35 (2003).
3. O'Neill I. K., Fishbein L.: *Int. J. Environ. Anal. Chem.* 26, 229 (1986).
4. Fujishima A., Einaga Y., Rao T. N., Tryk D. A.: *Diamond Electrochemistry*. Elsevier, Amsterdam 2005.

3P-24

**TIŠTĚNÉ UHLÍKOVÉ ELEKTRODY
MODIFIKOVANÉ ALKOHOL DEHYDROGENASOU
A OXIDEM RHODIČITÝM**
VOJTĚCH POLAN a KAREL VYTRÁS

*Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická,
Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
vojtech.polan@student.upce.cz*

V současné době se stále více zvyšuje poptávka po rychlých, selektivních, spolehlivých a hlavně levných analytických metodách. U potravinářských výrobků je nutné sledovat, nedošlo-li k mikrobiální či jiné kontaminaci, dále je potřeba kontrolovat dodržení daných technologických postupů a vstupních surovin. Tyto požadavky kladou na analýzu daných vzorků velmi vysoké nároky. Samotná analýza by měla být velmi rychlá, dostatečně citlivá a přesná, ale také levná. Dobrou alternativou pro splnění těchto kritérií nabízejí elektrochemické biosenzory.

Elektrochemické biosenzory spojují dvě výhody, a to specifitu enzymu k dané molekule a převod biochemického signálu na signál elektrochemický¹. Díky tomu jsou tyto biosenzory selektivní při stanovení konkrétního substrátu^{2,3}. Pomocí těchto biosenzorů je možné stanovit velké množství látek (např. hypoxantin, galaktózu, glukózu, tyramin, biogenní aminy, laktát, ethanol a cholin) i ve složitých matricích.

V této práci je popisována příprava, optimalizace a analytické vlastnosti enzymového biosenzoru, který byl připraven sítotiskovou technikou a modifikován oxidem rhodičitým a alkohol dehydrogenasou imobilizovanou ve vrstvě *m*-fenyldiaminu.

Biosenzor byl optimalizován a testován v modelových vzorcích etanolu. Biosenzor vykazoval lineární rozsah v rozmezí 15 až 120 g l⁻¹ etanolu s detekčním limitem 3,3 g l⁻¹ (stanoveným jako 3 σ) a dobou odezvy 19 s. Takto optimalizovaný biosenzor byl poté použit ke stanovení etanolu v reálných vzorcích (víno, whisky, vodka).

Dobré výsledky při stanovení etanolu v těchto vzorcích mimo jiné naznačují, že stanovení etanolu s tímto biosenzorem není ovlivněno složitější matricí vzorku, což slibuje dobrou perspektivu pro využití při podobných aplikacích v potravinářské a klinické analytické praxi.

Tato práce vznikla za podpory Ministerstva školství, mládeže a sportu České republiky (projekt MSM0021627502) a Grantové agentury ČR (projekt 203/08/1536).

LITERATURA

1. Turner A. P. F., Karube I., Wilson G. S., v knize: *Biosensors: Fundamentals and Applications*, s. 180. Oxford University, New York 1987.
2. Moody G. J., Sangbera G. S., Thomas J. D. R.: *Analyst* 112, 65 (1987).
3. Okuma H., Takahashi H., Sekimukai S., Kawahara K., Akahoshi R.: *Anal. Chim. Acta* 244, 161 (1991).

3P-25

**VYUŽITÍ COULARRAY ELEKTROCHEMICKÉHO
DETEKTORU PRO SLEDOVÁNÍ ANTIOXIDAČNÍ
KAPACITY U MERUNĚK**
**JÍŘÍ SOCHOR^a, ONDŘEJ ZÍTKA^b, ZBYNĚK GAZDÍK^a,
BORIS KRŠKA^d, ALEŠ HORNA^c a RENÉ KIZEK^{b*}**

*^a Ústav šlechtění a množení zahradnických rostlin, ^d Ústav ovocnictví, ZF, Valtická 337, 691 44 Lednice, ^b Ústav chemie a biochemie, Mendelova univerzita v Brně, Zemědělská 1, 613 00 Brno, ^c Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, T.G. Masaryka 275, 762 72 Zlín
kizek@sci.muni.cz*

Celková antioxidační kapacita je jedním z významných ukazatelů biologické hodnoty a kvality ovoce. Vzhledem k faktu, že se antioxidanty snadno účastní redoxních reakcí, vymezují se tyto látky jako velmi vhodné k elektrochemické detekci¹. Tato práce byla zaměřena na ověření a validaci metody HPLC s elektrochemickým CoulArray detektorem pro stanovení celkové antioxidační kapacity u plodů hybridů meruněk (*Armeniaca vulgaris*) vyšlechtěných na experimentálním pracovišti ZF Mendelovy univerzity v Lednici. Především za účelem zlepšení odolnosti rostlin a nutričních vlastností.

Celkový antioxidační potenciál byl sledován pomocí TAC – CoulArray, metody založené na principu HPLC s coulometrickou detekcí, představující jednu z nejcitlivějších detekčních technik vůbec. Coulometrická detekce, zejména ve své vícekanálové modifikaci, nabízí řadu výhod proti klasickému amperometrickému uspořádání¹. Podmínky byly optimalizovány podle následujících parametrů: objem nástřiku činil 30 μ l, mobilní fáze A sestávala z 0,2 % (v/v) kyseliny mravenčí, mobilní fázi B představoval acetonitril. Profil gradientu byl lineárně zvětšován od 12 na 22 % pro B (v/v) do 20 min od startu, na 50 % B do 25 min, na 55 % do 30 min. Průtokový poměr činil 0,8 μ l \cdot min⁻¹. Elektrochemický detektor snímal odezvy při aplikovaném potenciálu na pracovní elektrody –80, 0, 80, 160, 240, 320, 400, 480, 560, 640, 720 a 800 mV. Na základě rozdílů mezi plochami piků jednotlivých chromatogramů byla vytvořena srovnávací řada stanovených plodů, v níž je rozdíl v obsahu antioxidačně aktivních flavonoidů stanovených plodů vyjádřen v relativních procentech a interpretován jako relativní antioxidační kapacita. Elektrochemická detekce byla korelována s fotometricky určenou antioxidační aktivitou.

Díky ED bylo možno sledovat reaktivní kinetiku antioxidantů v aplikovaném potenciálu, vyhodnotit struktury antioxidačních komplexů a jejich celkovou antioxidační kapacitu. Nejvyšší antioxidační potenciál byl stanoven u hybridů LE-3241 a LE-10278, jež korespondoval s vysokými obsahy polyfenolických sloučenin, především pak látek flavonoidního skeletu a fenolických kyselin.

Tato práce vznikla za podpory grantu NAZV 91A032.

LITERATURA

1. Gazík Z., Krška B., Adam V., Saloun J., Pokorna T., Řezníček V., Horna A., Kizek R.: *Sensors* 8, 7564 (2008).

3P-26

VYŽITÍ TANDEMOVÉ DETEKCE HPLC-UV-VIS-ED PRO STANOVENÍ FENOLICKÉHO PROFILU V PLODECH HYBRIDŮ MERUNĚK**JIRÍ SOCHOR^a, ONDŘEJ ZÍTKA^b, ZBYNĚK GAZDÍK^a, BORIS KRŠKA^d, ALEŠ HORNA^c a RENÉ KIZEK^{b*}**

^a Ústav šlechtění a množení zahradnických rostlin, ^d Ústav ovocnictví, ZF, Valtická 337, 691 44 Lednice, ^b Ústav chemie a biochemie, Mendelova univerzita v Brně, Zemědělská 1, 613 00 Brno, ^c Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, T.G. Masaryka 275, 762 72 Zlín
kizek@sci.muni.cz

Plody některých ovocných dřevin se vyznačují vysokým obsahem nativních antioxidantů, zejména flavonoidů a esterů fenylkarboxylových kyselin¹. Tato práce se zabývá hodnocením fenolického profilu 18 hybridů meruněk vyšlechtěných na experimentálním pracovišti Mendelovy univerzity v Lednici. Cílem studie bylo navržení a optimalizace postupu pro chromatografickou separaci fenolických sloučenin obsažených v extraktech plodů meruněk (*Armeniaca vulgaris*).

Ke stanovení HPLC profilu jednotlivých odrůd a hybridů bylo využito spektrofotometrického a elektrochemického detektoru v tandemu. HPLC systém byl složen ze dvou chromatografických pump Model 582 ESA, chromatografické kolony s reverzní fází Zorbax SB C18. K UV detekci byl použit UV detektor Shimadzu Model 528, k elektrochemické detekci Coulochem III jako řídicí jednotka a amperometrická vysokotlaká průtoková detekční cela (ESA 520). Průtoková cela obsahovala planární elektrodu ze skelného uhlíku, hydrogen-paládiovou jako referenční a uhlíkovou jako pomocnou elektrodu. Podmínky chromatografické separace byly optimalizovány podle následujících parametrů: objem nástříků standardních směsí a reálných vzorků na kolonu byl nastaven na 15 μl , průtok mobilní fáze činil 1 ml min^{-1} , prostor chromatografické kolony byl termostátován na 30 °C. Poměr eluentů mobilní fáze sestával z A: kyseliny octové (50 mM) a B: kyseliny octové (50 mM) v čistém acetonitrilu. Elektrochemický detektor snímal odezvy při aplikovaném pracovním potenciálu 950 mV, UV detektor při 260 nm.

Na základě měření byl v plodech hybridů meruněk detekován obsahový profil 15 fenolických látek a flavonoidů. Byly identifikovány a kvantifikovány významné antioxidanty: kyselina galová, 4aminobenzoová, chlorogenová, ferulová, kávová, procatechinová, salicylová, p-coumaric, inhibitory CYP2C9 a CYP3A4 – flavonol quercetin a quercitrin, glykosid rutin, stilben resveratrol, vanilin, izomery epikatechin (–) a (+)- katechin. Nejvyšší koncentrace sledovaných nízkomolekulárních látek, v porovnání s ostatními vyšlechtěnými hybridy, byly zjištěny u extraktů plodů LE-10278 (kys. chlorogenová 121 mg/100 g, katechin 0,29 mg/100 g, rutin 25 mg/100 g) a LE-2527 (kys. chlorogenová 77 mg/100 g, katechin 0,53 mg/100 g, rutin 33 mg/100 g).

Tato práce vznikla za podpory grantu NAZV 91A032.

LITERATURA

1. Beklova M., Zitka O., Gazdik Z., Adam V., Hodek P.,

Stiborova M., Horna A., Kizek R.: Toxic. Lett. 180, 230 (2008).

3P-27

STANOVENÍ AMFOTERICINU B POMOCÍ HPLC, ZJIŠTĚNÍ FARMOKOKINETICKÉHO PROFILU A ÚČINOSTI KONJUGÁTU AMFOTERICINU B S POLYETHYLENGLYKOLY**KATEŘINA TÝČOVÁ, MILOŠ SEDLÁK, PETR JÍLEK a KAREL VENTURA**

Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
katerina.tycova@student.upce.cz

Amfotericin B (AMB) řadíme mezi polyenové antimykotika¹, které jsou užívána k léčbě systémových fungálních infekcí. Tyto invazivní infekce jsou častou příčinou onemocnění nebo úmrtí pacientů s oslabeným imunitním systémem. Amfotericin B se vyznačuje širokým spektrem antifungální aktivity, avšak jeho klinické využití je limitováno nízkou rozpustností ve vodě, nežádoucími vedlejšími účinky a hlavně nefrotoxicitou, která je závislá na dávkovaném množství².

V klinické praxi je využíváno několik formulací AMB, které zvyšují jeho rozpustnost ve vodě a snižují nežádoucí účinky (Fungizon, AmBisome, Albetec, Amphotec). Použití Fungizonu pro léčbu je však stále spojeno množstvím nežádoucích vedlejších efektů. V případě ostatních formulací došlo ke snížení nežádoucích účinků, avšak problémem v jejich případě je vysoká cena. Z těchto příčin se rozvíjí výzkum pro tvorbu nových přípravků, které by tyto nedostatky odstranily. Jednou z možností je využití polyethylenglykolů jako nosičů AMB. Tyto makromolekulární sloučeniny vykazují výborné biodistribuční a farmakokinetické chování³.

V této práci jsme se zaměřili na stanovení AMB v krevní plazmě a na porovnání farmakokinetických vlastností klinicky využívané formulace AMB (Fungizon) s konjugátem amfotericinu B s polyethylenglykoly (PEG-2AMB). V tomto konjugátu bylo pomocí GPC stanoveno 4 % volného amfotericinu B.

Stanovení AMB v krevní plazmě bylo provedeno pomocí HPLC s rifampicinem jako vnitřním standardem. Tato metoda byla validována a je lineární v rozsahu 0,06 to 2,5 $\mu\text{g ml}^{-1}$ s limitem kvantifikace 0,06 $\mu\text{g ml}^{-1}$. V další části jsme se zaměřili na farmakokinetickou studii konjugátu a klinicky používané formulace po intravenózní aplikaci potkanům. Závislost koncentrace AMB v plazmě na času odběru byly popsány pomocí biexponenciální rovnice. Při zjišťování toereticke účinnosti konjugátu PEG-2AMB byly využity imunosuprimované myši s experimentální kandidózou.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR (projekt MSM 0021627502).

LITERATURA

1. Abu-Salah K. M.: Br. J. Biomed Sci. 53, 122 (1996).
2. Brajtborg J., Powderly W. G., Kobayashi G. S., Medoff G.: Antimicrob. Agent Chemother. 34, 183 (1990).
3. Yamaoka T., Tabata Y., Ikada Y.: J. Pharm. Sci. 83, 601 (1994).

3P-28

HPLC/MS ANALÝZA ŽIVOČIŠNÝCH TUKŮ

HANA VELÍNSKÁ, MIROSLAV LÍSA a MICHAL HOLČAPEK

*Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická,
Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
hana.velinska@seznam.cz*

Živočišné tuky a oleje se z velké části skládají z rozličné směsi triacylglycerolů (TG). TG jsou nezbytnou součástí lidského organismu, jsou zdrojem ω -3 a ω -6 esenciálních mastných kyselin, lipofilních vitamínů (A, D, E a K) a dalších nepolárních látek. Zastávají důležitou roli v nutričních procesech a slouží jako zdroj energie, zásobárna tuků a mechanická ochrana životně důležitých orgánů¹. Většina přírodních tuků obsahuje složitou směs různých TG, z tohoto důvodu je nezbytné před vlastní identifikací zařadit separační krok. Pro separaci a následnou identifikaci TG v živočišných tucích byla použita metoda vysokoúčinné kapalinové chromatografie (HPLC) ve spojení s hmotnostní spektrometrií (MS). Pomocí zoptimalizovaných systémů argentační chromatografie (Ag-HPLC) a bezvodých systémů s obrácenými fázemi (NARP-HPLC) bylo analyzováno deset živočišných tuků^{2,3}, ať již vybraných z běžně se vyskytujících chovných zvířat či divoké zvěře (jako je ovce, kohout, králík, jelen, daněk, muflon, aj.), a pěti sladkovodních nebo mořských ryb (kapr, losos, makrela, aj.). Využití MS umožnilo citlivou detekci a snadnou identifikaci TG bez nutnosti použití identických standardů TG. Dva různé chromatografické systémy s odlišnou separační vlastností umožnily identifikovat maximální počet TG ve složitých přírodních směsích, jakými jsou například živočišné tuky.

Tato práce byla podporována grantovým projektem č. 203/09/0139 Grantové agentury České republiky a projektem MSM 0021627502.

LITERATURA

1. Lísa M., Holčapek M.: Chem. Listy 99, 195 (2005).
2. Lísa M., Velínská H., Holčapek M.: Anal. Chem. 57, 3903 (2009).
3. Holčapek M., Lísa M., Jandera P., Kabátová N.: J. Sep. Sci. 28, 1315 (2005).

3S-01 NOVÉ TYPY STŘÍBRNÝCH AMALGAMOVÝCH ELEKTROD A JEJICH VYUŽITÍ

ALEŠ DAÑHEL

*Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř elektrochemie životního prostředí, Hlavova 8, 128 43 Praha 2
danhel@natur.cuni.cz*

Stříbrné amalgamové elektrody poskytují široké možnosti využití při stanovení organických i anorganických elektrochemicky redukovatelných analytů^{1,2}. V tomto příspěvku budou popsány nové možnosti stříbrného amalgamu jako elektrodového materiálu použitého při konstrukci pracovních elektrod pro nové voltametrické a amperometrické metody stanovení vybraných nitrofenolů.

Smísením jemného prášku stříbrného amalgamu s vhodnou pastovací kapalinou byla připravena stříbrná tuhá amalgamová pastová elektroda (AgSA-PE) podobná uhlíkovým pastovým elektrodám. Výhodou AgSA-PE, je jednoduše obnovitelný elektrodový povrch eliminující jeho případnou pasivaci, potenciálové okno sice užší v porovnání s rtuťovou elektrodou, ale stále dostatečně široké, a dostatečná velikost a reprodukovatelnost měřeného signálu³.

Pro amperometrické stanovení směsi nitrofenolů po jejich separaci pomocí RP-HPLC byl porovnán klasický „tužkový“ typ leštěné stříbrné tuhé amalgamové elektrody (p-AgSAE) ve „wall-jet“ uspořádání s nově připravenou pracovní p-AgSAE kompatibilní s komerčně dostupným tenkovrstvým průtokovým detektorem (BAS, USA). Tenkovrstvé uspořádání poskytuje v porovnání s „wall-jet“ uspořádáním stabilnější signál s vyšší hodnotou poměru signál/šum⁴.

Zcela nově byly připraveny pracovní elektrody využívající jako elektrodový materiál krystal stříbrného amalgamu. Z něj byly připraveny mikrocyklindrické stříbrné amalgamové elektrody, vhodné pro vsádková voltametrická měření i v mikroobjemu. Krystal stříbrného amalgamu byl dále použit při konstrukci mikrocyklindrické průtokové detekční cely, která byla úspěšně použita při amperometrickém stanovení směsi nitrofenolů po jejich předchozí separaci pomocí RP-HPLC.

Tato práce vznikla za finanční podpory MŠMT ČR (LC 06035 and MSM 0021620857) a GAČR (203/07/1195) a Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (projekt SVV 261204).

LITERATURA

1. Yosypchuk B., Barek J.: Crit. Rev. Anal. Chem. 39, 189 (2009).
2. Yosypchuk B., Navratil T., Barek J., Peckova K., Fischer J., v knize: *Progress on Drinking Water Research* (LeFebvre M. H., Roux M. M., ed.), kap. 4, s. 143. Nova Science Publishers, New York 2008.
3. Barek J., Danhel A., Kadlcikova A., Kotkova Z., Obsil T., Silhan J.: Chem. Listy 103, 331 (2009).
4. Danhel A., Shiu K. K., Yosypchuk B., Barek J., Peckova K., Vyskocil V.: Electroanalysis 21, 303 (2009).

3S-02 AUTOMATIZOVANÁ ANALÝZA V SPÁJANÍ IZOTACHOFORÉZA-ZÓNOVÁ ELEKTROFORÉZA V KAPILÁRACH

MIROSLAVA HALAŠIOVÁ, RÓBERT BODOR
a DUŠAN KANIANSKY

*Univerzita Komenského v Bratislave, Přírodovedecká fakulta, Katedra analytickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava
miroslava.halasiova@fns.uniba.sk*

Práca pojednáva o automatizácii dvojdimenzionálneho (2D) režimu separácie na báze spájania kapilárnych kolón pre izotachoforézu (ITP) so zónovou elektroforézou (CZE). Toto spojenie (ITP-CZE), doplnené o použitie diskretných spacerov (DS) pridávaných do analyzovaných vzoriek, ponúka separáciu a detekciu analytov obsiahnutých v mnohozložkových zmesi látok. Súčasnou úlohou je tiež spracovať väčší počet vzoriek a pokryť pracovnú škálu pre ca. 24 hodín denne.

V našej práci bol použitý prototyp automatizovaného elektroforetického analyzátoru so separačnou jednotkou usporiadanou pre techniku spájania kolón¹. V experimentoch bola použitá aniónická modelová zmes (50 UV absorbujúcich analytov) a vzorky moču.

V 2D ITP(DS)-CZE separáciach sme študovali úlohu prostriedkov zvyšujúcich CZE rozlíšenie analytov vrátane zbytkových zložiek matrice. Ukázali sme, že pre 50 analytov bolo rozpoznávaných 35–36 analytov. Riziko takéhoto prekryvu bolo eliminované využitím 4 DS (vytvorenie 5 frakcií). Dobrá reprodukovateľnosť tohto prístupu bola opakovane preukázaná. Tento prístup, využitie 2D separácií, sa dá považovať za významný analytický nástroj pre separáciu mnohozložkových zmesí v kapilárnej elektroforéze. Prirodzene, experimenty študované pre 2D ITP(DS)-CZE separáciu vzoriek moču vykazujú možnosti, ktoré boli typické pre separácie modelových zmesí.

Z našej práce je logické konštatovať, že 2D ITP(DS)-CZE prístup je kľúčovým prostriedkom na zníženie rizika prekryvu separovaných látok (zníženie tzv. saturačného faktora, definovaného Giddingsom). Inými slovami, je to nástroj vhodný na separáciu biologických vzoriek komplexného charakteru. Dá sa poznamenať, že prístup uvedený v tejto práci nebol doteraz prezentovaný.

Práca bola podporená Slovenskou grantovou agentúrou VEGA (1/0672/09 a 1/0882/09), Slovenskou agentúrou pre výskum a vývoj (VVCE-0070-07) a Grantom Univerzity Komenského číslo UK/329/2009.

LITERATÚRA

1. Kaniansky D., Marák J., Vaváková V., Masár M., v knihe: *Automated Capillary Electrophoresis Analyzer*. Omega Info, Bratislava 2004.

3S-03

ELEKTROFORETICKÉ STANOVENIE DUSIČNANOV A DUSITANOV V MOZGOVOMIECHOVOM MOKU NA ČIPE S VODIVOSTNOU DETEKCIU**MICHAL HORČIČIAK^a, RICHARD CHUDOBA^b,
MARIÁN MASÁR^a a DUŠAN KANIANSKY^a**

^a Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra analytickej chémie, Mlynská Dolina CH-2, 842 15 Bratislava, ^bUniverzita Karlova v Praze, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a makromolekulovej chémie, Hlavova 8, 128 40 Praha 2
michal.horciciak@fns.uniba.sk

Cieľom práce bolo súčasné stanovenie dusičnanov a dusitanov, produktov oxidácie oxidu dusnatého, v mozgovomiechovom moku (CSF) metódou zónovej elektroforézy (CZE) na čipe s vodivostnou detekciou.

Elektroforetické separácie dusičnanov a dusitanov boli vykonané na polymetylmakrylátovom (PMMA) čipe so systémom spájania separačných kanálikov (CC) v hydrodynamicky uzatvorenom separačnom systéme s potlačením elektroosmózy. Separácie boli uskutočnené v nosnom elektrolyte (pH 3,8 s prídavkom dodecylidimethylammoniopropánsulfonátu, DDAPS), ktorý umožnil separáciu dusičnanov a dusitanov, a zároveň dusičnanov a chloridov, ktoré sú typickou makrozložkou v CSF. Použitím dávkovača o objeme 1 µl boli získané detekčné limity pre dusičnany a dusitany na úrovni 5–6 µg l⁻¹.

Chloridy nachádzajúce sa vo vzorkách CSF na veľmi vysokých koncentračných úrovniach (cca 4500 mg l⁻¹) znemožňovali stanovenie dusičnanov a dusitanov (prekryv píkov), preto na ich odstránenie z finálneho separačného systému pred analýzou boli zvolené dva prístupy: (1) on-line ZE predúprava na CC čipe pracujúceho v CS režime a (2) extrakčná predúprava (SPE) na báze IC-Ag mikrokolónok. Oba uvedené prístupy umožnili odstrániť cca 80 % chloridov z dávkovanej vzorky a umožnili rýchle, reprodukovateľné a citlivé stanovenie dusičnanov vo vzorkách CSF. Vzhľadom na veľmi nízke koncentračné úrovne dusitanov v CSF (jednotky µg l⁻¹) je však potrebné použiť vhodnú on-line alebo off-line prekoncentračnú techniku na ich stanovenie (napr. izotachoréza v kombinácii so zónovou elektroforézou na CC čipe).

Práca bola podporená grantovými agentúrami VEGA (č. 1/0672/09) a APVV (VVCE-0070-07).

LITERATÚRA

1. Kaniansky D., Masár M., Bodor R., Žúborová M., Ölvecská E., Jöhnck M., Stanislawski B.: *Electrophoresis* 24, 2208 (2003).

3S-04

ANALÝZA BIOLOGICÝCH VZORKŮ POMOCÍ LASEROVÉ DESORPCE ZA ÚČASTI SUBSTRÁTU VE SPOJENÍ S HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIÍ S INDUKČNĚ VÁZANÝM PLAZMATEM**PAVLA JUNGOVÁ^a, ONDŘEJ PEŠ^a, TOMÁŠ
VACULOVIČ^a, JARMILA NAVRÁTILOVÁ^b, JAN
ŠMARDA^b, VIKTOR KANICKÝ^a a JAN PREISLER^{a,b}**

^a Ústav chemie, ^b Ústav experimentální biologie, Prírodovedecká fakulta, Masarykova Univerzita, Kotlářská 267/2, 611 37 Brno
pavla.jungova@gmail.com

Laserová desorpce za účasti substrátu ve spojení s hmotnostní spektrometrií s indukčně vázaným plazmatem (substrate-assited laser desorption inductively-coupled plasma mass spectrometry, SALD ICP-MS)¹ je nová metoda umožňující stanovení stopových a ultrastopových prvků v submikrolitrových objemech biologických vzorků. Na rozdíl od běžně používané metody laserové ablace ICP-MS, SALD ICP-MS umožňuje kvantitativní analýzu kovů v kapalných vzorcích a to díky kompletní desorpci vzorků o přesně definovaném objemu (typicky 200 nl) nanesených na silně absorbující substrát a odpařených několika pulsy laserového záření o vlnové délce 213 nm při relativně nízké hustotě zářivého výkonu laseru (10–100 MW cm⁻²). Byla provedena detailní charakteristika metody na modelových vzorcích Cu a zjištěna nezávislost ICP-MS signálu na hustotě zářivého výkonu laseru, na velikosti a typu rastru, lineární rozsah přes 6 řádů a nízké limity detekce (0,1–14 fmol pro Cr, Cu, Ni, Sn a Zn).

SALD ICP-MS byla úspěšně aplikována na stanovení koncentrace měďnatých iontů, které ovlivňují cytotoxicitu disulfiramu vůči buňkám myeloidní leukémie². Správnost SALD ICP-MS byla ověřena stanovením mědi v buňkách pomocí ICP-MS se zmlžováním, tato konvenční metoda ovšem vyžadovala přípravu řádově většího množství vzorku.

Kromě toho mohou biologické vzorky jako jsou metalothioneiny být po přidání matrice analyzovány ze stejného substrátu pomocí hmotnostní spektrometrie s laserovou desorpcí/ionizací za účasti matrice (MALDI MS). Kombinace technik SALD ICP-MS a MALDI MS tak poskytne kompletní informace jak o obsahu kovu tak o hmotnosti proteinu s minimální spotřebou vzorku.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (grant č. 203/09/1025) a grantů Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy (MSM0021622411, MSM0021622412 a MSM0021622415).

LITERATURA

1. Peš O., Jungová P., Vyhnánek R., Vaculovič T., Kanický V., Preisler J.: *Anal. Chem.* 80, 8720 (2008).
2. Navrátilová J., Jungová P., Vaňhara P., Preisler J., Kanický V., Šmarda J.: *Int. J. Mol. Med.* 24, 661 (2009).

3S-05

MULTIMARKEROVÝ SCREENING TĚLNÍCH TEKUTIN PRO STANOVENÍ NEMOCÍ OXIDATIVNÍHO STRESU**ADÉLA PANKRÁCOVÁ, KAMILA SYSLOVÁ a PETR KAČER***Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6
adela.pankracova@vscht.cz*

Sledování specifických molekul, tzv. „biomarkerů“ produkovaných organismem při patologických procesech, je v dnešní době součástí moderní lékařské diagnostiky. Běžně se setkáváme s analýzou látek v krevní plazmě a moči, méně často pak v mozkomíšním moku a kondenzátu vydechaného vzduchu. Biomarkery oxidativního stresu obsažené v těchto matricích vznikají neenzymatickou peroxidací základních stavebních jedno-tek organismu reaktivními kyslíkovými částicemi (ROS – reactive oxygen species). Mezi biomarkery poškození nukleových kyselin se řadí 8-hydroxyguanosin, 8-hydroxy-2'-deoxyguanosin a 8-hydroxyguanine, poškození bílkovin signalizují *o*-tyrosin a nitrotyrosin. Biomarkery poškození fosfolipidových membrán (zejména ω -3 a ω -6 nenasycených mastných kyselin) jsou 8-isoprostan a aldehydy (malondialdehyd, 4-hydroxynonenal, 4-hydroxyhexenal a C6-C13 aldehydy).

Bylo zjištěno, že hladiny výše uvedených biomarkerů jsou oproti hladině fyziologické významně zvýšeny v souvislosti s řadou závažných chorob. Mezi ně patří např. plicní onemocnění (chronická obstrukční plicní nemoc, rakovina plic, azbestóza, silikóza), neurodegenerativní onemocnění (Alzheimerova a Parkinsonova choroba) a onemocnění kardiovaskulárního systému (infarkt myokardu a ateroskleróza). Ačkoliv byla v nedávné době vyvinuta řada metod pro stanovení biomarkerů oxidativního stresu v tělních tekutinách a byla prokázána možnost diferenciální diagnostiky oxidativního stresu, neexistuje do současnosti standardizovaný postup pro stanovení jejich koncentračních hladin a výsledky z různých pracovišť vykazují značnou nesourodost. Mezi možné zdroje chyb při analýze zmíněných biomarkerů lze zařadit jejich velice rychlou teplotní degradaci.

Cílem předkládané a zcela originální metody bylo postihnout a kvantifikovat parametry, které mohou být zdrojem v literatuře uvážených rozporuplných výsledků, a vypracovat protokol zpracování tělních tekutin pro stanovení biomarkerů oxidativního stresu. K tomu byly použity metody na bázi „stable-isotope dilution assay“ a hmotnostní spektrometrie kombinované s předseparačními metodami (SPE, případně imunoafinitní extrakce). Vyvinutou metodu multimarkerového screeningu oxidativního stresu lze charakterizovat nízkým limitem detekce a kvantifikace a vysokou přesností, správností a selektivitou. Vyvinutá metoda byla testována v klinické studii, ve které byly sledovány hladiny biomarkerů u pacientů s nemocí oxidativního stresu a kontrolní skupinou zdravých osob.

Tato práce vznikla za podpory Ministerstva zdravotnictví ČR (Grant NS 10298-3/2009).

3S-06

ANALÝZA SILIC V BYLINNÝCH NÁPOJÍCH S VYUŽITÍM TECHNIKY MIKROEXTRAKCE JEDNOU KAPKOU**PETRA PAVLÍKOVÁ*, PETR DOBIÁŠ, MARTIN ADAM a KAREL VENTURA***Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
peta.pavlikova@gmail.com*

Silice jsou složité směsi organických sloučenin obsažených v rostlinách. Vyskytují se prakticky ve všech částech (květy, plody, listy, stonky, kořeny...). Hlavní složkou silic jsou terpenové sloučeniny (monoterpeny a seskviterpeny), které ale většinou nemají velký vliv na vůni a chuť silic, protože nositelem těchto vlastností jsou hlavně kyslíkaté sloučeniny (alkoholy, aldehydy, ketony, estery atd.)^{1,2}. Silice jsou významné především pro jejich pozitivní vliv na lidský organismus. Lidé využívali mnoho druhů bylin a koření k léčení různých nemocí (např. máta pro zažívání a bolest hlavy, levandule má protizánětlivý a analgetický účinek, meduňka proti kašli, pelyněk pro zažívání, atd.)³.

Nejčastěji používanými metodami pro izolaci silic z rostlin jsou destilace s vodní parou, lisování či extrakční metody. Avšak vzhledem k tomu, že silice jsou těžké sloučeniny, je možné je analyzovat po zakoncentrování nejen přímo z roztoku (DI), ale také z plynného prostoru nad vzorkem, tzv. headspace (HS) technikou. K tomuto účelu se jako perspektivní jeví metoda mikroextrakce jednou kapkou (SDME – single-drop microextraction). SDME je proces založený na ustavování rovnováhy mezi vzorkem, headspace prostorem a kapkou vhodného extrakčního rozpouštědla. Získaný extrakt obsahující zachycené sloučeniny je pak přímo nastříknut do nástřikového prostoru plynového chromatografu bez nutnosti zařazení desorpčního kroku⁴.

Práce se zabývá nalezením vhodných extrakčních podmínek, jako jsou doba extrakce, vhodné rozpouštědlo a jeho objem, způsob vzorkování a množství vzorku, pro izolaci silic z bylinných nápojů. Pro analýzu získaných extraktů byla použita plynová chromatografie s plamenovým ionizačním detektorem. Dosažené výsledky byly porovnány s hodnotami získanými analýzou původních bylin metodou HS-SDME ve statickém uspořádání.

Projekt byl realizován díky finanční podpoře grantového projektu MŠMT ČR (projekt MSM 002162750).

LITERATURA

1. Velišek J.: *Chemie potravin 2*. Osssiss, Tábor 2002.
2. Hálková J., Rumišková M., Riedlová J.: *Analýza potravin*. vydavatel RNDr. Ivan Straka, Újezd u Brana 2000.
3. Hajhashemi V., Sadraei H., Ghannadi A. R., Mohseni M.: *J. Ethnopharmacol.* 71, 187 (2000).
4. Zhao E., Han L., Juany S., Wang Q., Zhou Z.: *J. Chromatogr., A* 1114, 269 (2006).

3S-07

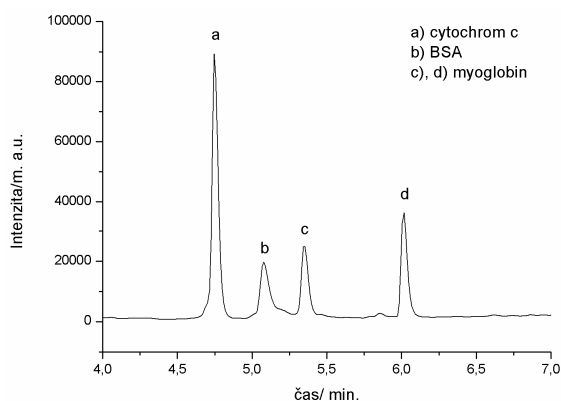
SEPARACE METALOPROTEINŮ V NATIVNÍM STAVU METODOU RP-HPLC SE STACIONÁRNÍ FÁZÍ NA BÁZI MONOLITU

**MARKÉTA PROCHÁZKOVÁ, JAN HAVLIŠ
a VIKTOR KANICKÝ**

Ústav chemie, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37
Brno
marky.prochazkova@centrum.cz

Metaloproteiny a kov vázící proteiny jsou důležitou součástí velkého množství biochemických procesů, jako jsou například transport kyslíku, fotosyntéza, respirační procesy (redoxní reakce), jsou známé jako kofaktory DNA a RNA polymeras a fungují i jako metabolické enzymy (P450)¹. Díky rozmanité struktuře a velkému množství funkcí těchto látek jsou tyto proteiny a jejich analýza stále v popředí zájmu bioanalytiky. Jednou z podmínek úspěšného studia těchto proteinů je jejich separace. Denaturace struktury během separace je většinou nežádoucí, neboť dochází k uvolňování kovové specie, a proto se stále hledají vhodné stacionární fáze. Nově se uplatňuje využití monolitických stacionárních fází².

Byla navržena metoda separace směsi metaloproteinů pomocí techniky HPLC s reverzní (RP) monolitickou (MP) stacionární fází (C8). Navrženou metodou byla úspěšně analyzována modelová směs dvou metaloproteinů (cytochrom c, myoglobin) ve směsi s kov vázícím proteinem BSA (hovězí sérový albumin). Metoda poskytuje vysokou účinnost separace jednotlivých složek směsi (viz obr.) a reprodukovatelné výsledky, na rozdíl od metod s použitím reverzní částicové stacionární fáze C8. Současně jsou prováděny pokusy pro off-line spojení této metody separace s metodou ICP-MS, sloužící k detekci kovů obsažených ve struktuře metaloproteinů. Výzkum by měl vést k navržení on-line spojení RP-HPLC(ML)-ICP-MS jako nové metodiky studia komplexů kov-protein.



LITERATURA

1. Wörle D., Pomogailo A. D.: *Metal complexes and metals in macromolecules*. Wiley, 2003.
2. Švec F., Tennikova T. B., Deyl Z.: *Monolithic materials, preparation, properties and applications*. Elsevier, 2003.

3S-08

ÚLOHA MATRICE PRI ANALÝZE ORGANICKÝCH LÁTKOV V HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRII SEKUNDÁRNYCH 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, 841 04 Bratislava
stupavska@fns.uniba.sk

Hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov (SIMS) je analytická technika používaná na určenie chemického zloženia povrchov materiálov, pričom nároky na druh a charakter týchto materiálov sú minimálne. Pôvodne bola táto technika koncipovaná pre potreby polovodičového priemyslu, avšak v súčasnej dobe možno sledovať obrovský progres SIMS aplikácií v oblasti organických a biologických materiálov. SIMS metóda je založená na procese, kde sekundárne ióny, vzniknuté pri bombardovaní povrchu pevnej látky primárnymi iónmi, sú extrahované jednotným napätím, s rovnakou kinetickou energiou a separované podľa doby letu ToF – SIMS (Time of Flight). Tvorba takýchto častíc je však zložitý proces už v prípade atomárnych sekundárnych iónov, tým viac v prípade veľkých organických sekundárnych iónov. Z tohto dôvodu predstavuje množstvo emitovaných sekundárnych iónov – iónový výťažok – kľúčový parameter SIMS analýzy. Ten závisí od viacerých faktorov, avšak najväčší vplyv má matricový efekt, čo je závislosť iónového výťažku od chemického prostredia, z ktorého sú ióny vyrábané. Tento faktor výrazne zaväzuje predovšetkým pri analýze organických a biologických materiálov, kde majú prejavy matricového efektu oveľa komplexnejší charakter ako pri polovodičových vzorkách. A práve z týchto dôvodov je matricový efekt veľmi páličivou témou, nakoľko súčasne BIO zameranie SIMS analýz (BIO-SIMS) si vyžaduje citlivú odozvu na veľké makromolekulové systémy.

Matricový efekt bude demonštrovaný na matriciach na báze uhlíka, anorganických solí a nanočastíc, pričom dôraz sa kladie na topografiu matrice – geometrický faktor a na samotnú chemickú povahu týchto látok. Matrice budú diskutované z hľadiska efektivity tvorby organických sekundárnych iónov. Optimalizácia matric z chemického a geometrického hľadiska predstavuje koncepčne nový prístup, ktorý poskytuje elegantné a komplexné riešenie otázky zvyšovania citlivosti BIO-SIMS analýz, nakoľko získané poznatky sú zúžitkované pri vývoji nového typu matrice vhodnej pre SIMS analýzy látok s vysokou molekulovou hmotnosťou.

Táto práca bola vytvorená realizáciou projektu "meta-QUTE: Centrum excelentnosti kvantových technológií", na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja a tiež grantu APVV-0491-07.

3S-09

PŘÍPRAVA MAGNETICKÝCH ČÁSTIC PRO SEPARACI BIOMARKERŮ Z TĚLNÍCH TEKUTIN**KATEŘINA ŠIMKOVÁ, KAMILA SYSLOVÁ
a PETR KAČER***Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-
technologická Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
katerina.simkova@vscht.cz*

Včasná diagnostika onemocnění hraje důležitou roli z hlediska zahájení terapie a minimalizace poškození organismu pacient. Moderní medicína využívá k diagnostice pacientů měření hladin látek, které jsou pro dané procesy charakteristické (tzv. „biomarkery“). Nejčastěji se provádí rozbor krve a moči, výjimečný není ani rozbor mozkomíšního moku. Poměrně novou vyšetřovací metodu plicních onemocnění představuje analýza kondenzátu vydechaného vzduchu (KVV), jehož složení koresponduje s ději odehrávajícími se bezprostředně v plicích a dýchacích cestách. Velkou výhodou odběru KVV je, že je zcela neinvazivní a pro pacienta nezatěžující, neboť dosavadní metody vyšetření jsou velmi často invazivní (bronchiální biopsie, bronchoalveolární laváž) nebo semi-invazivní povahy (metoda indukovaného sputa) a mohou být pro pacienta zatěžující a nepříjemné, u dětí a seniorů mohou představovat až stresovou záležitost. Princip analýzy kondenzátu vydechaného vzduchu spočívá v kvantifikaci látek specifických pro určitá konkrétní onemocnění, jejichž koncentrační hladina je v důsledku probíhajícího patologického procesu v dýchacích cestách a plicích významně zvýšena.

Předkládaná práce se zabývá vývojem diagnostické molekulární sondy, jejímž principem je magnetická nanočástice s navázanou monoklonální protilátkou proti cysteinyl-lysovaným leukotrienům (cysLTs = LTC₄, LTD₄, LTE₄). Cysteinyl-lysované leukotrieny vznikají v těle enzymatickými pochody z kyseliny arachidonové, přičemž jedinci s onemocněním Asthma bronchiale mají jejich hodnoty výrazně zvýšeny oproti jejich fyziologickým koncentračním hladinám, což umožňuje jejich využití pro účely diferenciální diagnostiky uvedeného onemocnění. Principem separace z komplexní biologické matrice (KVV, moč, krevní plazma ad.) je vysoce specifická tvorba komplexu antigen-protilátka na povrchu připravené magnetické nanočástice. Pro separaci na povrchu nanočástice vytvořeného komplexu antigen-protilátka je využito externího magnetického pole. Byl vypracován protokol přípravy, charakterizace (TEM, XRD, AFM ad.) a klinického využití magnetických nano-částic pro rychlou diagnostiku a monitoring průběhu bronchiálního záchvatu, případně pro sledování účinnosti farmakoterapie. Uvedená separační metoda byla použita v kombinaci s vysoce selektivní a citlivou metodou LC-ESI-MS/MS (MRM mód, izotopické ředění). Vyvinutá metoda je charakterizovatelná vysokou citlivostí, nízkou chybou stanovení (< 9 %) a možností vícenásobného použití připravené molekulární sondy.

Tato práce vznikla za podpory Ministerstva zdravotnictví ČR (Grant NS 10298-3/2009).

3S-10

VÝVOJ METODY UHPLC-MS/MS A MIKRO-EXTRAKCE NA TUHÉ FÁZI PRO STANOVENÍ ATORVASTATINU A JEHO DERIVÁTŮ V BIOLOGICKÉM MATERIÁLU**HANA VLČKOVÁ^a, MILAN BLÁHA^b a PETR SOLICH^a**

^a *Katedra analytické chemie, Farmaceutická fakulta, Univerzita Karlova, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové,*
^b *2. Interní klinika, Univerzita Karlova a Fakultní nemocnice, Sokolská 408, 500 05 Hradec Králové
hana.vlckova@faf.cuni.cz*

Atorvastatin patří do skupiny hypolipidemik, které se nazývají statiny. Snižují hladinu celkového cholesterolu, triglyceridů a LDL (low density lipoprotein) cholesterolu.

Cílem bylo vyvinout a validovat UHPLC-MS/MS metodu pro stanovení atorvastatinu a jeho derivátů v biologickém materiálu a zároveň nalézt optimální postup úpravy vzorků. Vyvinutá metoda bude používána pro rutinní hodnocení velkého množství vzorků, a proto jedním z hlavních požadavků je časová nenáročnost. Jako příprava vzorků byla zvolena mikroextrakce na tuhé fázi, MEPS (microextraction by packed sorbent). Jedná se o novou miniaturizovanou extrakci na tuhé fázi pomocí jehly a stříkačky. Mezi jehlou a stříkačkou je umístěn zásobník s 1–2 mg sorbentu. V současné době jsou komerčně dostupné sorbenty na základě modifikovaného silikagelu C2, C8, C18 a sorbent M1 (směs C8 a SCX).

Byly nalezeny vhodné podmínky UHPLC-MS/MS a MEPS metody přípravy vzorků pro stanovení atorvastatinu a jeho derivátů. Byla zvolena analytická kolona Acquity UPLC BEH C18 (1,7 μm, 2,1 × 100 mm), mobilní fáze směs acetonitrilu a 0,5 mM pufru octanu amonného pH 4,0 s průtokem 0,25 ml min⁻¹ a gradientovou elucí. Jako ionizační technika byla užitá ionizace elektrosprejem v pozitivním módu. Byly optimalizovány jednotlivé parametry ESI a trojitého kvadrupólu. Pro dostatečnou spolehlivost dané metody byly analyty měřeny na dvou SRM (selected reaction monitoring) přechodech. Mikroextrakce byla provedena pomocí sorbentu C8. Bylo nasáto 50 μl vzorku a eluce analytů byla provedena 100 μl směsí acetonitril: 0,1 M pufr octanu amonného pH 4,5 (95: 5, v: v). Vyvinutá metoda byla validována. Výsledky validace jsou: linearita ($r^2 > 0.9990$), přesnost (RSD= 1,43–9,78 %), správnost (87–118 %), LOD (0,03–0,19) a LOQ (0,15–0,57). Celkový čas přípravy vzorku se snížil třikrát, a to na 7 min, což už je doba srovnatelná s délkou vlastní UHPLC-MS/MS analýzy. Použitý objem vzorku byl snížen dvacetkrát a množství rozpouštědel desetkrát. Z těchto důvodů MEPS nahradila dříve používanou časově náročnou SPE metodu a jeví se jako vhodná pro úpravu biologického materiálu.

Nově vyvinutá metoda bude používána zejména pro monitorování hladin atorvastatinu a jeho derivátů u pacientů s familiární hypercholesterolemíí léčených vysokými dávkami atorvastatinu a současně pomocí extrakorporálních eliminačních procedur a budou stanoveny celkové ztráty statinu během procedury, což umožní individuální úpravu farmakoterapeutického režimu.

Poděkování IGA NR/9103-4 a MSM 0021620822.

4IL-01 CHEMISTRY AND SPECTROSCOPY WITH FREE ELECTRONS

**MICHAL ALLAN, OLIVIER MAY, DUŠAN KUBALA,
and BOGDAN C. IBANESCU**

*Département de Chimie, Université de Fribourg, chemin du
Musée 9, 1700 Fribourg, Suisse
Michael.Allan@unifr.ch*

A large majority of readers is likely to consider electron-driven chemistry as an exotic field of questionable relevance and usefulness – and it is true that it is of little use as a synthetic tool for fine chemicals. It does play a major role in a surprisingly wide range of natural and man-made environments, however. In the gas phase it is the principal channel of chemical change in plasmas, both natural such as found in the interstellar space and the upper atmospheres of planets, and technological, such as those used to provide reactive intermediates in many production steps in microelectronics.

Electron-driven chemistry is also found in condensed state. Examples are radiation damage to living tissue, important for radiation therapy, and the recent technology to produce nano-sized devices by EBID – electron-beam induced deposition. The present study is concerned with isolated molecules, but gas phase data are often used in the simulation of condensed phase. The list of examples is far from being exhaustive – electron-driven processes are important in plasma-disinfection, cleaning, modification of surface properties, toxic waste disposal, satellite propulsion, electron-beam induced polymerizations, lighting and other applications.

An interesting point is that the research field in its modern form was founded to a large degree by George Jiří Schulz, originally from Brno, who then did his research at Westinghouse and at Yale University in the United States¹. The author had the privilege to learn the techniques in Schulz's laboratory at Yale (albeit after his premature death).

The research in Fribourg continues in Schulz's spirit of evaluating the fundamental principles and mechanisms of electron-induced processes on isolated molecules and on measurement of high quality quantitative electron-molecule scattering data. Substantial progress has been achieved. The techniques have been greatly refined and a number of new phenomena were discovered or are now much better understood.

Often they involve processes at low energies (called threshold phenomena)² and/or polyatomic molecules. Measurement of experimental data extending down to low energies (about 0.1 eV), covering a wide angular range (for inelastic processes 0°–180°), and in particular measurements of quantitative, absolute cross sections are emphasized.

The theory of electron-induced processes is very strong in the Czech Republic³, emerging from the long Czech and Slovak tradition of quantum chemistry and the primarily experimental work in Fribourg has often been carried out in cooperation with one of the Prague theory groups. The talk will concentrate on these fruitful cooperations, including highly precise nonlocal resonance model calculations on diatomic molecules⁴, and the innovative theory permitting calculations even on large polyatomic molecules⁵. The interesting

case of formic acid dimer (also in focus of interest of Czech quantum chemists⁶) which represents the first step in the transition from isolated molecule to condensed phase will be mentioned⁷.

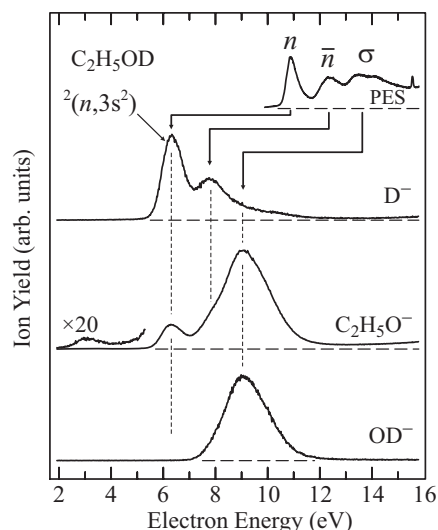


Fig. 1. Dissociative electron attachment spectra of ethanol-d₁.

Finally, a chemically interesting phenomenon often encountered in electron-induced dissociation, is state selectivity. This means, that different excited states of the intermediate negative ion resonance, prepared by electrons of different energies, show different dissociative patterns⁸. The course of the reaction can thus be influenced by selecting the proper energy of the incident electrons. An example is shown in Fig. 1 where the lowest Feshbach resonance, ²(n,3s²), is capable of breaking the O-H bond, but not the C-O bond⁹. This observation is general, found in all alcohols and ethers studied so far⁸.

This work was supported by grant 200020-113599/1 of the Swiss National Science Foundation and by COST Action CM0601

REFERENCES

- Schulz G. J.: *Rev. Mod. Phys.* **59**, 423 (1973).
- Hotop H., Ruf M.W., Allan M., Fabrikant I. I.: *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **49**, 85 (2003).
- Horáček J.: *Čs. Čas. Fyz.* **55**, 157 (2005).
- Čížek M., Horáček J., Allan M., Fabrikant I. I., Domcke W.: *J. Phys. B* **36**, 2837 (2003).
- Čurík R., Čárský P., Allan M.: *J. Phys. B* **41**, 115203 (2008).
- Chocholoušová J., Špirko V., Hobza P.: *Phys. Chem. Chem. Phys.* **6**, 37 (2003).
- Allan M.: *Phys. Rev. Lett.* **98**, 123201 (2007).
- Ibanescu B. C., Allan M.: *Phys. Chem. Chem. Phys.* **11**, 7640 (2009).
- Ibanescu B. C., Allan M.: *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10**, 5232 (2008).

4IL-02 NUCLEAR MAGNETIC DIPOLE MOMENTS FROM NMR SPECTRA

**ANDREJ ANTUŠEK^{a,*}, MICHAL JASZUNSKI^b,
and KAROL JACKOWSKI^c**

^a Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Materials Science and Technology, Institute of Materials Science, Slovakia, ^b Institute of Organic Chemistry, Polish Academy of Sciences, Poland, ^c Laboratory of NMR Spectroscopy, Faculty of Chemistry, University of Warsaw, Poland
andrej.antusek@stuba.sk

We present precise values of nuclear magnetic dipole moments obtained from combination of ab initio calculations of NMR shielding constants and corresponding experimental nuclear magnetic resonance frequencies measured in gas phase.

Widely accepted values of nuclear magnetic dipole moments¹ measured in 1960s and 1970s by NMR techniques contain systematic error which originates from rough approximation of NMR shielding constants used in derivation procedure. Order of magnitude of this error, as was showed in our work², is approximately $10^{-4} \mu_N$ for light nuclei and probably even larger for heavy nuclei.

The procedure of nuclear dipole moment re-measurement is illustrated on example of nuclear magnetic dipole moments of boron isotopes ¹⁰B and ¹¹B based on new gas-phase NMR experiment and precise ab initio calculations of NMR constants in BF₃ molecule³. Coupled cluster calculations of NMR shielding constants in BF₃ molecule are presented – including vibrational corrections, temperature corrections and relativistic corrections estimated as difference between relativistic Dirac-Hartree-Fock and corresponding non-relativistic Hartree-Fock values of NMR shielding constants. Gas-phase resonance frequencies of boron measured in BF₃ molecule were extrapolated to zero density which corresponds to single molecule and the need of theoretical description of interaction induced chemical shift was avoided.

Accurate values of nuclear magnetic dipole moments could lead to alternative standardization of NMR spectroscopy⁴ or to better comparison of hyperfine splitting experiments with QED theoretical predictions⁵.

REFERENCES

1. Raghavan P.: At. Data Nucl. Data Tables 42, 189 (1989).
2. Antušek A., Jackowski J., Jaszunski M., Wilczek M.: Chem. Phys. Lett. 411, 111 (2005).
3. Jackowski K., Makulski W., Szyprowska A., Antušek A., Jaszunski M., Juselius J.: J. Chem. Phys. 130, 044309 (2009).
4. Jackowski K., Jaszunski M., Wilczek M.: J. Phys. Chem., A 114, 2471 (2010).
5. Sunnergren P., Persson H., Salomonson S., Schneider S. M., Lindgren I., Soff G.: Phys. Rev., A 58, 1055 (1998).

4IL-03 SINGLETOVÉ ŠTĚPENÍ PRO SOLÁRNÍ ČLÁNKY

JOSEF MICHL^{a,b}

^a Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i., Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha, ^b Department of Chemistry and Biochemistry, University of Colorado, Boulder CO 80309-01
michl@eefus.colorado.edu

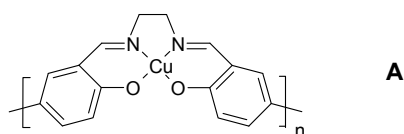
Singletové štěpení je dávno známý proces, v němž chromofor excitovaný do singletového stavu sdílí excitační energii se sousedním chromoforem v základním stavu tak, že oba skončí excitováni do stavu tripletového. Kdyby bylo možno oba excitované chromofory použít k přenosu elektronu nezávisle na sobě, mohl by tento proces být užitečný ve slunečních článcích, protože by zvýšil jejich účinnost asi o polovinu. V přednášce bude diskutován problém výběru vhodných chromoforů a jejich vzájemné interakce. V krystalu 1,3-difenyliso-benzofuranu byl pozorován kvantový výtěžek až 150 % tripletu.

4IL-04 EPR A UV-VIS-NIR SPEKTROELEKTROCHEMICKÉ ŠTÚDIE KOORDINAČNÝCH ZLÚČENÍN OBSAHUJÍCICH MEĎ, NIKEL ALEBO ZINOK V RÓZNYCH OXIDAČNÝCH STUPŇOCH

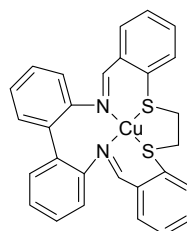
PETER RAPTA

Ústav fyzikálnej chémie a chemickej fyziky, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
peter.rapta@stuba.sk

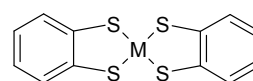
Komplexy prechodných prvkov tvoria v oblasti materiálového výskumu kľúčovú úlohu pri štúdiu aktívneho centra



A



B



C

katalyzátora, ale tiež pri modelových sústavách biologických systémov. V práci je prezentovaný prehľad niekoľkoročného výskumu štruktúry a reaktivity paramagnetických medziproduktov pre sériu komplexov prechodných prvkov s dôrazom na aplikáciu spektroskopických metód (EPR, UV-vis-NIR spektroskopie) a elektrochemických techník (cyklická voltampérometria). Významná pozornosť je venovaná prenosu náboja na komplexy prechodných prvkov a stabilite novo vzniknutých redox stavov.

Aplikácia EPR spektroskopie ako mimoriadne citlivej techniky pri elektrochemických štúdiách je vhodná hlavne pre systémy, kde sa paramagnetické častice s nespáreným elektrónom tvoria priamo v priebehu elektródových reakcií. Na druhej strane oxidačno-redukčné a optické vlastnosti koordinačných zlúčenín, ktoré sú úzko spojené s ich elektrónovou štruktúrou, môžu byť výhodne študované využitím cyklickej voltampérometrie a optickej absorpčnej spektroskopie. UV-vis-NIR spektroskopie je významnou spektroskopickou technikou, dnes široko využívanou na charakterizáciu optických vlastností ako aj reakcií koordinačných zlúčenín tak vo východnom stave, ako aj počas ich elektrochemickej oxidácie resp. redukcie.

Pri sledovaní redox dejov vodivých polysalénov typu poly(*N,N*-etylén-bis-(salicylideneiminato)Cu(II)), **A**, pomocou *in situ* EPR, UV-vis a FT-IR-ATR spektroeletrochémie, pripravených anodickou oxidáciou, sa dokázala prítomnosť antiparalelnej interakcie paramagnetického centra Cu(II) s kladne nabitým polaronickým polysalénovým reťazcom v polyméri¹. Charakteristický široký EPR signál elektroaktívneho poly(Cu(II)-salénu) zaniká pri elektrochemickej oxidácii, pričom sa súčasne pozorujú charakteristické polaronické prochody polysalénu v UV-vis spektrách.

In situ EPR/UV-vis-NIR cyklovoltampérometrické štúdie pri rôznych teplotách modelových koordinačných zlúčenín modrých proteínov, ako napr. [Cu^I(bite)]BF₄ a [Cu^{II}(bite)](BF₄)₂ (bite – bifenyldiimino ditioéter), **B**, v acetonitrile poukázali na chemicky vratné procesy, pričom relatívne komplikované voltampérometrické odozvy je možné vysvetliť aplikáciou dvojcestnej štvorcovej redox schémy. Pri spektroeletrochemických experimentoch v oblasti nízkych teplôt (77 K) sa potvrdila tvorba metastabilného pseudo-tetraedrického [Cu^{II}(bite)]²⁺ medziproduktu indikujúceho preferenčný prenos elektrónu na pseudo-tetraedrický [Cu^I(bite)]⁺ ako počiatočný krok².

Najnovšie výskumy boli zamerané na štúdium komplexov medi a niklu (MePh₃P)[M(bdt)₂] s oxidačným číslom tri pomocou voltampérometrických a spektro-elektrochemických techník so zameraním na UV-vis-NIR a EPR spektroskopiu s cieľom ozrejmiť redox reakcie týchto zlúčenín v roztoku³. V ostatných rokoch sa komplexy s *S,S*-ligandami typu ditiolátov stali veľmi zaujímavými látkami pre vedu a výskum. Dôvodom je ich potenciálne použitie v priemyselnej chémii ako supravodiče, pesticídy, živice a prepínače farby pre IČ spektroskopiu, látky s nezvyčajnými magnetickými vlastnosťami a tiež pre ich využitie ako biokatalyzátory v biochémi. Medzi takéto komplexy patria aj skúmané benzén-1,2-ditioláty (bdt), **C**, so všeobecným vzorcom R[M(bdt)₂], ktoré obsahujú rôzne amonné a fosfóniové deriváty ako kationy (R). Získala sa databáza oxidačno-redukčných potenciálov pre skúmané komplexy vzhľadom

k vnútornému štandardu ferocénu tak pre redukciu ako aj pre oxidáciu. Posúdili sme aj reverzibilitu redoxných dejov študovaných koordinačných zlúčenín v organických rozpúšťadlách. Pri *in situ* spektroeletrochemických UV-vis-NIR štúdiách sa podarilo namerať redukované formy komplexov v roztoku. Pomocou EPR spektroskopie bol analyzovaný komplex Ni^{III}, pričom sme pozorovali jednoduchý singlet bez štiepenia indikujúci delokalizáciu spinu, respektíve procesy s prenosom náboja.

Tato práca vznikla za podpory grantov APVV-0093-07 a VEGA 1/0018/09.

LITERATÚRA

1. Tarábek T., Rapta P., Kalbáč M., Dunsch L.: Anal. Chem. 76, 5918 (2004).
2. Rapta P., Kožíšek J., Breza M., Gembický M., Dunsch L.: J. Electroanal. Chem. 566, 123 (2004).
3. Machata P.: *Bakalárska práca*. Slovenská technická univerzita, Bratislava 2009.

4IL-05

ELECTRONIC STRUCTURE OF MOLECULAR SYSTEMS: A BRIDGE BETWEEN QUANTUM MONTE-CARLO AND QUANTUM CHEMISTRY

RENE DERIAN^a, MATÚŠ DUBENCKÝ^a, LUBOS MITAS^b, and IVAN ŠTICH^a

^a Center for Computational Materials Science (CCMS), Institute of Physics, Slovak Academy of Sciences, Bratislava, 27695, U.S.A.
^b Dept. of Physics, North Carolina State University, Raleigh, 27695, U.S.A.
ivan.stich@savba.sk

A well-balanced combination of quantum Monte-Carlo techniques (QMC) and medium accuracy quantum chemistry (CAS-SCF) techniques are used to obtain energies at selected points on the potential energy surfaces of a photoswitchable molecule, azobenzene, along the torsion pathway (CNNC dihedral angle), in the ground and first excited singlet states. The size of the molecule with about hundred electrons precludes use of highly correlated quantum chemistry methods. We study the excitation energies of well separable *cis*- and *trans*-conformers, and energy of transition state located at 90°. By a careful QMC optimization of the Slater-Jastrow wavefunction with a modest number of up to 500 determinants from CAS-SCF expansion, chemical accuracy is obtained. In particular, we provide radically new insights into the structure and convergence properties of fermion nodes of the trial wave function, which appear as the only practically and fundamentally important barrier in achieving absolute accuracy. The quality of obtained results is remarkably high and enables to confirm the experiments^{1,2} within chemical accuracy and, in addition, the predictions are reliable enough to identify experimental values which appear to be biased by experimental data analysis limits^{1,2}. Our results clearly outperform all the available quantum chemistry results such as CAS-SCF, CAS-PT2 (ref.³⁻⁵), as well as DFT results with proper spin symmetry taken into account (ROKS)⁶. The com-

bination of QMC, with medium accuracy quantum chemistry methods, enhanced by methods to characterize and control the convergence of the fermion nodal surfaces, provide a key to overcoming the fixed-node bias for ground and excited states in large molecular systems which are out of reach of more traditional correlated methods based on basis sets.

REFERENCES

- Hamm P., Ohline S. M., Zinth W.: *J. Chem. Phys.* 106, 519 (1997).
- Andersson J.Å., Petterson R., Tegnér L.: *J. Photochem.* 20, 17 (1982).
- Gagliardi L., Orlandi G., Bernardi F., Cembran A., Garavelli M.: *Theor. Chem. Acc.* 111, 363 (2004).
- Cembran A., Bernardi F., Garavelli M., Gagliardi M., Orlandi G.: *J. Am. Chem. Soc.* 126, 3234 (2004).
- Conti I., Garavelli M., Orlandi G.: *J. Am. Chem. Soc.* 130, 5216 (2008).
- Turanský R., Konopka M., Doltsinis N. L., Stich I., Marx D.: *ChemPhysChem* 11, 345 (2010).

4IL-06

EPR SPEKTROSKOPIA KOMPLEXU Cu(II) S PROTIRAKOVINOVÝM LIEČIVOM KAMPTOTECÍN

DANA DVORANOVÁ, VLASTA BREZOVÁ
a MARIÁN VALKO*

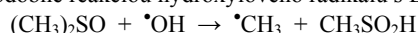
*Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
marian.valko@stuba.sk*

Fotochemická nestabilita niektorých farmaceutických prípravkov môže pri ich aplikácii viesť k vzniku nepríjemných vedľajších účinkov u pacientov a technických problémov pri manipulácii s liečivami. Na druhej strane schopnosť farmaceutických preparátov a liečiv po fotoexcitácii generovať veľmi reaktívne medziprodukty (hydroxylový radikál, superoxidový radikálový anión, singletový kyslík) sa využíva pri deštrukcii nádorových buniek fotodynamickou terapiou. Jedným z takýchto liečiv je kamptotecín (CPT), ktorý sa pôvodne získal zo stromu *Camptotheca accuminata* rastúceho v Číne, kde ho poznali aj pod menom „xi – shu“ (strom šťastia), pričom extrakty využívali najmä na liečbu nádorových chorôb zažívacieho traktu¹. Viaceré prechodné prvky majú biogénny charakter (napríklad železo, meď) a sú schopné tvoriť komplex s CPT. Je známe že, prítomnosť iónov prvkov zvyšuje efektivitu tvorby radikálov. Z toho dôvodu sme študovali mechanizmus radikálových reakcií CPT s Cu(II).

In situ fotochemické pokusy komplexu Cu(II)/CPT (1:1) v DMSO roztoku (ožarovanie systému priamo v dutine EPR spektrometra) pri monochromatickej excitácii ($\lambda = 365$ nm) ukázali, že dochádza k exponenciálnemu poklesu EPR signálu Cu(II) pri laboratórnej teplote, ktorý možno vyjadriť formálnou kinetickou rovnicou 1. poriadku a ktorý je spôsobený redukciou Cu(II) na diamagnetické ióny² Cu(I). V inertnej atmosfére možno pozorovať rýchly pokles signálu okamžite po začiatku ožarovania, avšak prítomnosť kyslíka sa prejavuje

existenciou indukčnej periódy v trvaní 3 minút. Rýchlosť poklesu EPR signálu Cu(II) je závislá od koncentrácie kyslíka v danom roztoku. Pri ožarovaní Cu(II)/CPT v prítomnosti kyslíka a DMPO (5,5-dimetyl-1-pyrrolín *N*-oxid) sa počas indukčnej periódy dokázal vznik superoxidového radikálového aniónu. Keďže excitácia systému Cu(II)/CPT viedla ku vzniku voľných organických radikálov, snažili sme sa identifikovať radikálové medziprodukty vznikajúce počas ožarovania aplikáciou EPR techniky spinových lapačov DMPO a ND (nitrózoduren).

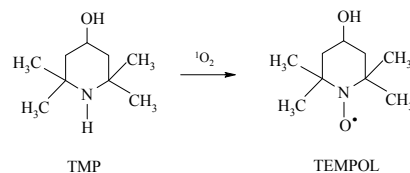
Pri ožiarení CPT v DMSO roztoku v prítomnosti spinového lapača ND sme pozorovali vznik jedného aduktu, ktorý sme priradili [•]ND-CH₃ aduktu. Metylový radikál vzniká pravdepodobne reakciou hydroxylového radikálu s DMSO:



Hydroxylový radikál je produktom fotochemickej excitácie CPT, pričom s vysokou pravdepodobnosťou pochádza z laktónového kruhu² CPT.

Ak ožiarime systém, kde je prítomný ako spinový lapač DMPO, dochádza ku vzniku komplexnejšieho spektra. Okrem naadovaného metylového radikálu (adukt [•]DMPO-CH₃) sa pozorujú ďalšie signály, ktoré možno priradiť aduktu [•]DMPO-OR, ktorý pravdepodobne patrí rozštiepenému laktónovému kruhu. Pomer aduktov [•]DMPO-CH₃/[•]DMPO-OR je približne 1:2. Okrem týchto dvoch signálov vzniká v nízkej koncentrácii tretí, uhlíkom centrováný radikál.

Pri fotochemických reakciách v prítomnosti kyslíka môže dôjsť ku tvorbe singletového kyslíka, ktorý je omnoho reaktívnejší ako kyslík v základnom stave (tripletový kyslík). Na identifikáciu ¹O₂ sa využíva selektívna reakcia s 4-hydroxy-2,2,6,6-tetrametylperidínom (TMP), ktorý sa reakciou so singletovým kyslíkom oxiduje na stabilný nitroxylý radikál 4-hydroxy-2,2,6,6-tetrametylperidín-*N*-oxyl (TEMPOL, obr. 1). EPR spektrum tohto radikálu² tvorí charakteristický triplet s pomerom intenzít 1:1:1.



Obr. 1. Vznik radikálu TEMPOL reakciou TMP a singletového kyslíka

Výsledky EPR štúdia potvrdili, že v systéme dochádza k prenosu energie z excitovaného CPT na molekulový kyslík za vzniku singletového kyslíka. Ožiarení DMSO roztoku CPT dochádza k tvorbe hydroxylového radikálu, singletového kyslíka a v prítomnosti kyslíka aj k superoxidovému radikálu. Nízkoteplotné EPR pokusy potvrdili, že medzi CPT a Cu(II) dochádza ku vzniku slabého komplexu. Pri ožarovaní Cu(II)/CPT je tvorba hydroxylového radikálu potlačená a vznikajú uhlíkom centrované radikály, pochádzajúce z rozštiepenia laktónového kruhu CPT. Získané výsledky naznačujú, že ožiarení kamptotecín je vhodným kandidátom na jeho testovanie ako potenciálneho fotosenzitizéra pre fotodynamickú terapiu nádorov.

This study was financially supported by Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic (Projects VEGA 1/0018/09, 1/0575/08) and Research and Development Agency of the Slovak Republic (contracts No. APVV 0055-07 and SK-AT-0016-08).

LITERATÚRA

1. Potmesil M., Pinedo H. (ed.): *Camptothecins: New Anti-cancer Agents*. CRC Press, Boca Raton 1995.
2. Brezová V., Valko M., Breza M., Morris H., Telser J., Dvoranova D., Kaiserova K., Varecka L., Mazur M., Leibfritz D.: *J. Phys. Chem., B* 107, 2415 (2003).

4IL-07

PROPERTIES OF MOLECULAR SYSTEMS USING LARGE-SCALE CC CALCULATIONS

PAVEL NEOGRÁDY^{a*}, MICHAL PITOŇÁK^{a,b}, MIROSLAV MELICHERČÍK^a, PAVEL HOBZA^{b,c}, and MIROSLAV URBAN^{a,d}

^a Department of Physical and Theoretical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, ^b Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, v. v. i. and Center for Biomolecules and Complex Molecular Systems, Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6, ^c Department of Physical Chemistry, Palacký University, 771 46 Olomouc, ^d Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Materials Science and Technology, Institute of Materials Science, J. Bottu 25, 917 24 Trnava
palo@fns.uniba.sk

Popular coupled clusters singles, doubles and perturbative triples (CCSD(T)) method represents one of the most trusted and routinely used methods for obtaining highly accurate energies, geometries and numerous molecular properties for ‘well-behaved’, single-reference (and single determinant) systems. Its popularity originates mostly from its exceptional accuracy/computational demands ratio. Nevertheless, its applicability is still, due of the N^7 ($N_o^3 N_v^4$, o – occupied, v – virtual orbitals) scaling with the system size, rather limited.

Two different, but compatible approximations towards the large scale CCSD(T) calculations with controlled accuracy are discussed. The first one, Cholesky decomposition (CD) of the AO integrals allows the elimination of the storage bottleneck of the CCSD(T) calculations, while the second one, optimized virtual orbital space (OVOS) method, allows reducing of the number of active virtual orbitals. To exploit fully the advantage of both approximations, a novel CCSD(T) implementation¹ in MOLCAS program package², utilizing the idea of full segmentation of the computed intermediates and massive parallelization, were introduced. As the result of this complex methodology, the limits of applicability of the CCSD(T) approach has been significantly extended to systems with up to 100–150 correlated electrons and up to 1000–1500 virtual orbitals.

This methodology was successful applied in, for instance, pair-^{3,4} and many-body⁵ noncovalent interactions of

the DNA bases and π - π stacking model systems^{6,7} or the electron affinity of the uracil molecule⁸.

This work was supported by the Slovak Grant Agency VEGA under the contract No. 1/0520/10.

REFERENCES

1. Neogrady P., Aquilante F., Noga J., Pitoňák M., Hobza P., Urban M.: in preparation.
2. Aquilante F., De Vico L., Ferre N., Malmqvist P. A., Neogrady P., Pedersen T., Pitoňák M., Reiner M., Roos B. O., Serrano-Andrés L., Urban M., Velyazov V., Lindh R.: *J. Comput. Chem.* 31, 224 (2010).
3. Pitoňák M., Riley K. E., Neogrady P., Hobza P.: *ChemPhysChem* 9, 1636 (2008).
4. Pitoňák M., Janowski T., Neogrady P., Pulay P., Hobza P.: *J. Chem. Theory Comput.* 5, 1761 (2009).
5. Pitoňák M., Neogrady P., Hobza P.: *Phys. Chem. Chem. Phys.* 12, 1369 (2010).
6. Pitoňák M., Neogrady P., Řezáč J., Jurečka P., Urban M., Hobza P.: *J. Chem. Theory Comput.* 4, 1829 (2008).
7. Dedíková P., Pitoňák M., Neogrady P., Černušák I., Urban M.: *J. Phys. Chem., A* 112, 7115 (2008).
8. Dedíková P., Demovič L., Pitoňák M., Neogrady P., Urban M.: *Chem. Phys. Lett.* 481, 107 (2009).

4L-01 MAKROMOLEKULY V KANÁLOCH A DUTINÁCH

PETER CIFRA a TOMÁŠ BLEHA

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

Počítačové simulácie sú nezastupiteľné pri molekulovej interpretácii vlastností priestorovo obmedzených (confined) polymérov. Geometrické stesnanie makromolekúl je určujúcim prvkom vo veľkom množstve technologických a biologických procesoch a materiáloch. Pri skúmaní rôznorodých systémov sme zistili, že vlastnosti makromolekúl stesnaných do malých priestorov sa významne odlišujú od ich referenčných vlastností. Tak napríklad simulácie partitionácie polymérov do štrbinových pórov sme využili na zhodnotenie mechanizmu separácie makromolekúl v gélovej chromatografii (SEC)^{1,2}. Ukázalo sa, že faktory ako kvalita rozpúšťadla, vplyv koncentrácie, vplyv adsorpcie na steny póru, zvyšujú partitionáciu makromolekúl do pórov a vedú k posunu univerzálnej kalibračnej krivky. Pre oblasť tzv. kritickej chromatografie, kde dochádza ku kompenzácii sterického vylúčenia a adsorpcie sme zistili, že kritická adsorpčná energia závisí od dĺžky molekuly. Výrazné zmeny veľkosti, tvaru a orientácie reťazcov sme našli aj v polymérnych kompozitoch v blízkosti čistočiek plniva a pri interkalácii polymérov medzi vrstvy silikátových minerálov. V prípade ďalšej skúmanej skupiny mäkkých látok, sústav typu polymér-koloid, sme na základe molekulových simulácií kvantifikovali³ tzv. deplečnú interakciu medzi koloidom a polymérom, ktorá v rozhodujúcej miere určuje stabilitu koloidných disperzií.

V poslednej dobe sú predmetom intenzívneho záujmu vlastnosti DNA stesnané v kanáloch či dutinách. Cieľom našich simulácií^{4,5} bolo modelovať vypriamanie DNA v nanokanáloch imprintovaných na čipe mikrofluidného zariadenia. Ukázalo sa, že simulácie poskytujú závislosti vypriamania DNA od šírky kanála $R(D)$ ktoré sú v dobrej kvalitatívnej zhode s mikrofluidnými meraniami. Simulácie odhalili tri oblasti na krivkách $R(D)$, ktoré sme interpretovali pomocou teórií pre geometricky obmedzené polyméry. Skúmali sme aj usporiadanie DNA a iných polotuhých reťazcov uväznených v gulovitej dutine akou je napr. kapsid uchovávajúci vírusovú DNA. Preukázali sme, že pri zvyšovaní tuhosti enkapsulovaných makromolekúl dochádza k prechodu od neusporiadanej (kvázi-globulárnej) štruktúry k toroidnej (slučkovitej) morfológii.

Táto práca vznikla za podpory APVV grantov č. APVV-0079-07 a APVV-0607-07.

LITERATÚRA

1. Cifra P., Bleha T.: *Polymer* 41, 1003 (2000).
2. Cifra P., Bleha T., Wang Y., Teraoka I.: *J. Chem. Phys.* 113, 8313 (2000).
3. Bleha T., Cifra P.: *Langmuir* 20, 764 (2004).
4. Cifra P., Benková Z., Bleha T.: *Faraday Disc.* 139, 377 (2008).
5. Cifra P., Benková Z., Bleha T.: *J. Phys. Chem., B* 113, 1843 (2009).

4L-02 VÝPOČETNÍ METODY PRO INTERPRETACI VIBRAČNÍCH SPEKTER

PETR BOUŘ

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha
bour@uochb.cas.cz

Vibrační spektra umožňují za poměrně nízkých nákladů (např. vzhledem k x-ray nebo NMR spektroskopii) studovat složení i konformaci molekul. Experimentální podmínky se dají poměrně flexibilně měnit. Na rozdíl od elektronových spekter jsou zachyceny více lokální interakce při pohybu atomů, což vede k lepšímu prostorovému rozlišení. Vibrační metody jsou samozřejmě pro mnohé případy nevýhodné, např. pro malou citlivost nebo složitý vztah mezi spektrálními křivkou a strukturou.

V každém případě nástroje výpočetní chemie podstatně usnadňují interpretaci spekter, jejich vztah ke geometrii a dynamice, a umožňují hlouběji porozumět i dalším vlastnostem studovaných systémů. Na našem pracovišti se zabýváme zejména dvěma spektroskopickými metodami využívající optickou aktivitu molekul, tj. jejich rozdílnou reakci na levo- a pravotočivě kruhově polarizované světlo, Ramanovou optickou aktivitou (ROA) a vibračním cirkulárním dichroismem (VCD). Na rozdíl od nepolarizovaných metod (infračervená absorpce, Ramanův rozptyl) mohou být v těchto případech spektrální pásy i záporné, což usnadňuje jejich přiřazení, a jsou daleko citlivější na konformaci (tvar) molekul.

V dnešní době je možné k simulacím spekter použít mnoha dostupných kvantově-chemických programů. Pro složitější systémy, jako jsou peptidy, bílkoviny nebo nukleové kyseliny, jsou přímé kvantové simulace nedostupné. I v takových případech je však možné spektra poměrně věrně simulovat. Například přenos silových polí a ostatních atomových vlastností¹ z menších molekul, kde se dají získat s vysokou přesností, umožnil osvětlit spektra i dynamiky konformační přeměny helikálních peptidů², B-Z stavový přechod³ nebo agregaci⁴ molekul DNA.

Tato práce vznikla za podpory grantů GA AVČR A400550702 a M200550902.

LITERATURA

1. Bouř P., Sopková J., Bednářová L., Maloň P., Keiderling T. A.: *J. Comput. Chem.* 18, 646 (1997).
2. Silva R. A. G. D., Kubelka J., Decatur S. M., Bouř P., Keiderling T. A.: *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 97, 8318 (2000).
3. Andrushchenko V., Wieser H., Bouř P.: *J. Phys. Chem., B* 106, 12623 (2002).
4. Andrushchenko V., Bouř P.: *J. Comput. Chem.* 29, 2693 (2008).

4L-03 SUPRAMOLEKULOVÉ SYSTÉMY ORGANICKÝCH FARBÍV V SYSTÉMECH S VRSTEVNÝMI KREMIČITANMI

JURAJ BUJDÁK^{a,b}

^a Ústav anorganické chémie SAV, 845 36 Bratislava, ^b Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie PRIF UK, Bratislava
uachjuro@savba.sk

Zvláštnym javom sú farebné zmeny kationových farbív v koloidných sústavách vrstevnatých kremičitanov. Tento jav možno interpretovať ako dôsledok vzniku supramolekulových agregátov farbív na fázovom rozhraní koloidných častíc. Vzhľadom na planárnu štruktúru heteroaromatických chromofórov dochádza v dôsledku molekulovej agregácie k silnej elektrostatickej interakcii a k štiepeniu energetických hladín. Príkladom je systém montmorillonitu (prírodného kremičitanu zo skupiny ílových minerálov) s metylénovou modrou. Okrem pásu pri 640 nm, ktorý zodpovedá energetickým prechodom neagregovaných kationov farbiva, sa objavujú aj pásy tzv. *H*- a *J*-agregátov (560 a 760 nm). Dlhé roky sa nedarilo interpretovať rozdiely agregácie farbív v koloidov rôznych ílových minerálov¹. Farbivá často dávajú rozdielne spektrá v sústavách s minerálmi rovnakého typu, s podobnou štruktúrou a zložením. Naopak, v niektorých prípadoch rozdielne typy minerálov môžu indukovať veľmi podobný stupeň agregácie. Tento rozpor sa podarilo vyriešiť na Ústave anorganickej chémie SAV pomocou série experimentov so sadami vzoriek montmorillonitu s premenlivou a dobre charakterizovanou hustotou náboja vrstiev². Zistilo sa, že hustota náboja zohráva v agregácii kationových farbív kľúčovú úlohu. Skupina minerálov tzv. smektitov sa vyznačuje veľmi veľkou variabilitou hustoty náboja vrstiev. Tá sa prejavuje v premenlivosti spektrálnych vlastností kationových farbív v hybridných sústavách.

Význam objavu má dva aspekty: Pomocou kationových farbív ako molekulových senzorov možno citlivo charakterizovať povrchové vlastnosti ílov, prípadne identifikovať zmeny po chemickej modifikácii. Metóda je veľmi rýchla a jednoduchá. Citlivosť metódy je omnoho vyššia ako doposiaľ používaných metód. Pomocou vhodnej voľby anorganického nosiča možno meniť optické vlastnosti adsorbovaných organických farbív. Posledné roky sme skúmali hybridné materiály na báze koloidných a tuhých materiálov s vlastnosťami kontrolovanej absorpcie a emisie svetla, materiálov vykazujúcich optickú anizotropiu³, fotodezinfekčných materiálov a nanohybridov aktívnych z hľadiska riadeného prenosu energie⁴.

LITERATÚRA

1. Bujdák J.: *Appl. Clay Sci.* 34, 58 (2006).
2. Bujdák J., Komadel P.: *J. Phys. Chem., B* 101, 9065 (1997).
3. Bujdák J., Iyi N., Kaneko Y., Czimerová A., Sasai R.: *Phys. Chem. Chem. Phys.* 5, 4680 (2003).
4. Bujdák J., Chorvát D., Iyi N.: *J. Phys. Chem., C* 114, 1246 (2010).

4L-04 RENTGENOVÉ LASERY V RADIÁČNÍ CHEMII A FYZICE

LIBOR JUHA

Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Na Slovance 2, 182 21 Praha 8
juha@fzu.cz

V tomto roce si připomínáme 25. výročí publikace prvního úspěšného spuštění rentgenového laseru¹. K jeho čerpání bylo třeba dvou svazků výkonového laserového systému Novette určeného především k výzkumu inerciální termojadené syntézy. Není tedy příliš překvapivé, že užití první generace rentgenových laserů se omezilo na diagnostiku horkého hustého plazmatu a pokusy o zobrazování buněk.

Ke studiu účinků extrémního ultrafialového a měkkého rentgenového záření na molekulární a kovalentní pevné látky již byly využity nové typy laserů pracujících v těchto spektrálních oborech, a to 46,9-nm laser s kapilárním výbojem v argonu jako aktivním prostředím²⁻⁴ a lasery s volnými elektrony proladitelné v širokém rozsahu vlnových délek⁵⁻⁷. Další vývoj těchto zdrojů pak směřoval jednak ke kratším vlnovým délkám a vyššímu průměrnému výkonu (opakovací frekvenci). Maximálních parametrů nyní dosahuje LCLS (Linac Coherent Light Source), jež je proladitelný od energie fotonů 800 eV (1,5 nm) do 8 keV (0,15 nm) a za jednu sekundu poskytuje až 120 pulzů délky 100 fs (cit.⁸).

V příspěvku budou prezentovány výsledky naší skupiny ukazující vliv vlnové délky, doby trvání impulzu, plošné hustoty energie, způsobu fokusace a úhlu dopadu svazku na substanciální rozklad molekulárních a kovalentních pevných látek ozářených zářením krátkovlnných laserů různých typů. Tyto zdroje nezpůsobují jen unikátní chemické přeměny ozářeného materiálu (o něž se zajímá radiační chemie), ale dosahují specifických účinků již v počáteční fázi interakce jimi poskytovaného záření s hmotou (jež jsou předmětem radiační fyziky). Zvláštní pozornost bude dále věnována jevu fotoindukované transparence Al pro 13,7-nm záření^{9,10} při intenzitách $> 10^{15}$ W cm⁻². Jev je způsoben masivní fotoionizací L slupky Al, což potvrzuje absence podobného chování Si₃N₄ ozářeného za stejných podmínek.

Závěrem budou rozebrány podmínky využití diskutovaných zdrojů pro studium velmi rychlých (< 1 ps) dějů v radiační chemii a fyzice. Nastíníme i možnosti nabízené v budoucnu sekundárními zdroji velmi vysokých parametrů a optimálního časování plánovanými v rámci projektu ELI (Extreme Light Infrastructure).

LITERATURA

1. Matthews D. L. a kol.: *Phys. Rev. Lett.* 54, 110 (1985).
2. Juha L. a kol.: *Appl. Phys. Lett.* 86, 034109 (2005).
3. Chalupský J. a kol.: *Čs. čas. fyz.* 58, 234 (2008).
4. Juha L. a kol.: *J. Appl. Phys.* 105, 093117 (2009).
5. Stojanovic N. a kol.: *Appl. Phys. Lett.* 89, 241909 (2006).
6. Juha L. a kol.: *Čs. čas. Fyz.* 56, 356 (2006).
7. Chalupský L. a kol.: *Opt. Express* 17, 208 (2009).
8. Burian T. a kol.: *Čs. čas. Fyz.* 59, 357 (2009).
9. Nelson A. a kol.: *Opt. Express* 17, 18271 (2009).
10. Nagler B. a kol.: *Nat. Physics* 5, 693 (2009).

4L-05 FÁZOVÉ PŘECHODY V MOLEKULOVÝCH KLASTRECH

ALEŠ VÍTEK^a, LENKA LIČMANOVÁ^a, IVANA
PAIDAROVÁ^b a RENÉ KALUS^a

^a Ostravská univerzita v Ostravě, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyziky, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, ^b Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8
Rene.Kalus@osu.cz

Molekulové klastry jsou pro teoretiky i přes významný pokrok ve vývoji výpočetních prostředků stále jen obtížně zvládnutou výzvou. Nadplochy potenciální energie molekulových klastrů jsou extrémně komplikované, a proto již výpočty jejich geometrické struktury při nulové termodynamické teplotě vyžadují sofistikované výpočetní algoritmy¹. Situace se dále komplikuje, obrátíme-li svou pozornost k teplotám nenulovým a k problému, jak se tato struktura s rostoucí teplotou mění (fázové přechody). Vhodným prostředkem výpočtu fyzikálně-chemických markerů fázových přechodů v klastrech (např. kalorická křivka) jsou metody Monte Carlo (MC). Vyvinuty byly účinné algoritmy významně urychlující konvergenci výpočtů (parallel-tempering²) či zvyšující efektivitu využití primárních numerických dat z nich získávaných (multiple-histogram³). Hlavní ingrediencí simulací MC je pak dostatečně přesný, leč výpočetně zvládnutelný popis interakcí. Pro systémy střední a větší velikosti jsou obvykle využívány (semi)empirické interakční modely, z metod kvantové chemie jsou užitečné metody funkcionálu hustoty (DFT). Data z přesných kvantově-chemických výpočtů je možno v rámci metody MC zahrnout technikou Boltzmann-reweighting⁴.

V tomto příspěvku se zabýváme fázovými přeměnami v jednom z nejvýznamnějších typů molekulových klastrů, v homogenních klastrech vody. Podáváme přehled výsledků simulací pro malé a střední klastry získané pomocí vybraných (semi)empirických interakčních potenciálů a analyzujeme možnosti upřesnění těchto dat pomocí přesných výpočtů pomocí metod DFT. Při výpočtech využíváme metody MC v kombinaci s algoritmy parallel-tempering a multiple-histogram. Na příkladu malých klastrů ukazujeme, jak je možno pomocí těchto metod kombinovaných s technikou Boltzmann-reweighting získat data v kvantově-chemické přesnosti.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA AV ČR IAA-401870702. Využity byly prostředky Superpočítačového centra VŠB-TU Ostrava, Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR a Centra numericky náročných výpočtů OU.

LITERATURA

1. Wales D. J., Scheraga H. A.: *Science* 285, 1368 (1999).
2. Swendsen R. H., Wang J. S.: *Phys. Rev. Lett.* 57, 2607 (1986).
3. Ferrenberg A. M., Swendsen R. H.: *Phys. Rev. Lett.* 61, 2635 (1988).
4. Allen M. P., Tildesley P. J.: *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, Oxford 1987.

4L-06 SPECTROELECTROCHEMISTRY OF CARBON NANOSTRUCTURES

LADISLAV KAVAN

J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, v.v.i., Academy of Sciences of the Czech Republic, Dolejškova 3, 182 23 Prague 8
kavan@jh-inst.cas.cz

Spectroelectrochemistry of carbon nanostructures, viz. nanotubes and fullerene peapod, provides salient inputs for deeper understanding of the charge transfer at these carbon nanostructures together with spectroscopic addressing of electronic and vibrational features. Electrochemical charging changes the electronic structure and moves the Fermi level of materials contacting the electrode. Consequently, electrochemistry and *in situ* spectroelectrochemistry provide versatile and precise tools for the investigation of fundamental effects related to electronic structure of carbon nanotubes and fullerene peapods. This approach is compatible to chemical doping, but the electrochemical charging of nanotubes allows for precise and easy control of the doping level. Another characteristic advantage of electrochemical charging consists in a broad selection of compensating counterions, which occur in media ranging from aqueous and aprotic electrolyte solutions to ionic liquids. The lecture will review studies on single- and double-walled carbon nanotubes (SWCNT and DWCNT) and fullerene (C₆₀, C₇₀) peapods in charge transfer reaction. Recent progress in the field has been highlighted by spectroelectrochemical investigation of combined chemical/electrochemical doping of carbon nanostructures and by spectroelectrochemical addressing of chirality resolved SWCNTs, both semiconducting and metallic. Practical issues are related to the development of cathode materials for Li-ion batteries. The nanotube-mediated redox wiring is based on a synergic action of adsorbed redox-active molecule, which provides the interfacial charge transfer to the surface and the single-walled carbon nanotube, which transports charge to longer distances in the cathode material.

This work was supported by Czech Ministry of Education, Youth and Sports (contract No. LC-510) and by the Academy of Sciences of the Czech Republic (contracts IAA 400400804, KAN200100801)

REFERENCES

1. Kavan L., Dunsch L.: *ChemPhysChem* 8, 974 (2007).
2. Kavan L., Dunsch L. in book: *Electrochemistry of Carbon Nanotubes* (Jorio A., Dresselhaus G., Dresselhaus M. S., ed.), Carbon Nanotubes: Advanced Topics in the Synthesis, Structure, Properties and Applications, pp. 567-603. Springer, Berlin 2008.

4L-07

INTERACTION OF POLYPHENOLS WITH LIPID MEMBRANES: A MOLECULAR DYNAMIC POINT OF VIEW**PAVLÍNA KOŠINOVÁ^a, TEREZA HERDYCHOVÁ^b, MICHAL OTYEPKA^b, PETR JUREČKA^b, JEAN-LUC DUROUX^a and PATRICK TROUILLAS^a**^a EA 4021, Faculté de Pharmacie, 2 rue du Dr. Marcland, 87025 Limoges CEDEX, ^b Department of physical chemistry of University of Palacký, 17. listopadu 12, 77146 Olomouc nu.pavlina@centrum.cz

Lipid peroxidation is an oxidative process, which is initiated by the attack of reactive oxygen species such as $\cdot\text{OH}$ free radicals. They abstract hydrogen atom from fatty acid chain and consequently lead to carbon-centred radicals ($\text{L}\cdot$). This initiating step is followed by O_2 addition which give rise to peroxy radicals ($\text{LOO}\cdot$). Afterwards, the radical propagation occurs between lipid chains. Lipid oxidation may induce serious membrane damages.

Polyphenolic compounds (ArOH) are plant antioxidants able to break the lipoperoxidation chain reaction. Their ability to interrupt this chain reaction mainly depends on two properties: (i) their capacity to release a hydrogen atom from OH groups and subsequently to scavenge free radicals, and (ii) their incorporation and orientation in biomembrane.

There exists only a few experimental studies dealing with the exact position and orientation of polyphenols in lipid bilayers. The present study aims at determining the deepness of polyphenol immersion into lipid membrane, by use of Molecular Dynamic (MD) simulations. Several polyphenols with various structures were studied (quercetin, quercetin dimer, caffeic acid, etc.). They were introduced into different regions of the membrane model (i.e. next to the surface, inside the hydrophobic region or in the water phase). MD simulations with different time scales were performed. Depending on (i) the substituents (ii) the amount of hydroxyl groups and (iii) the intramolecular interactions, molecules were more or less incorporated into the membrane (Fig. 1).

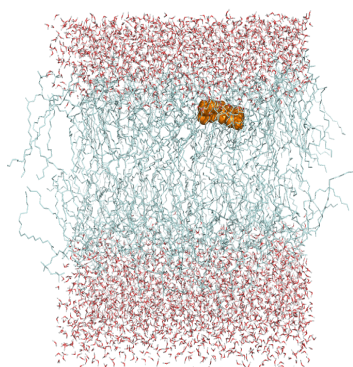


Fig. 1. Polyphenol incorporation into a membrane model

4L-08

INHIBICE HYDROLÝZY ACETYLCHOLINU POMOCÍ ENZYMU ACETYLCHOLINESTERASY**MARKÉTA KOVÁŘOVÁ^a, KAREL KOMERS^a a ŠÁRKA ŠTĚPÁNKOVÁ^b**^a Katedra fyzikální chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, ^b Katedra biologických a biochemických věd, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice kovarova-marketa@seznam.cz

Cholinesterasy jsou enzymy patřící do skupiny serinových hydrolas. U obratlovců jsou přítomny 2 typy – acetylcholinesterasa (ACHE) a butyrylcholinesterasa (BCHE). ACHE je enzym odbourávající acetylcholin v centrálním nervovém systému, zatímco na periférii převládá BCHE. Zvýšená aktivita těchto enzymů může způsobovat poruchy v přenosu nervových impulsů v cholinergním nervovém systému a je pravděpodobně také jednou z příčin rozvoje Alzheimerovy choroby. Standartní přístup při léčbě Alzheimerovy choroby představují inhibitory cholinesteras, protože zablokováním cholinesteras se zvýší množství acetylcholinu schopného vazby na cholinergní receptory¹.

Cílem této práce bylo nalézt nové vhodné inhibitory cholinesteras s větším inhibičním a menšími vedlejšími účinky než mají současné léky Alzheimerovy choroby. Jako potenciální inhibitory byly testovány karbamáty a látky s imidazolovým a imidazolinovým kruhem. Ke stanovení kinetické inhibiční konstanty byla použita HPLC a pH-statová metoda.

Bylo prokázáno, že některé z testovaných látek jsou nadějnými inhibitory cholinesteras.

Tato práce vznikla za finanční podpory Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR v rámci projektu MSM 0021627502.

LITERATURA

- Giacobini E. (ed.): *Cholinesterases and Cholinesterase Inhibitors*. Martin Dunitz Ltd., London 2000.

4L-09

STRUKTURNÍ RELAXACE A VISKOZITNÍ CHOVÁNÍ PODCHLAZENÝCH SKLOTVORNÝCH SYSTÉMŮ**JIŘÍ MÁLEK* a ROMAN SVOBODA***Katedra fyzikální chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice jiri.malek@upce.cz*

Nejběžnější způsob jakým lze získat sklovitý materiál je prudké ochlazení sklotvorné kapaliny, které musí být dostatečně rychlé, aby nedošlo ke krystalizaci. Ačkoliv tento empirický postup je znám několik tisíciletí, molekulární procesy vedoucí ke vzniku skla doposud nejsou uspokojivě objasněny^{1,2}. Při ochlazení sklotvorné kapaliny pod teplotu tání T_m dochází k výraznému zpomalení molekulární mobility, které

postupně vede k zamrznutí struktury kapaliny v rámci časové škály experimentu. K tomuto odchýlení od rovnovážného stavu dochází v relativně úzkém rozmezí teplot ($T_g \approx 2/3T_m$), kde se charakteristické molekulární relaxační časy pohybují v řádu 10^2 s.

Objem, entalpie a další makroskopické vlastnosti takto připraveného sklovitého materiálu se při teplotách pod T_g postupně mění. Tento proces se obvykle onačuje jako strukturní relaxace a jeho charakteristickou vlastností je neexponencialita, která je důsledkem distribuce relaxačních časů odpovídající dílčím molekulárním procesům. Další klíčovou vlastností je nelinearita relaxační odezvy, zahrnující závislost relaxačního času na postupně se měnící struktuře materiálu v průběhu relaxace. V současnosti existují prakticky dva alternativní postupy formulace nelinearity. První je čistě fenomenologický a vychází z rovnice, kterou formulovali Tool-Narayanaswamy a Moynihan (TNM). Druhý postup vychází z konfigurační entropie v podobě, kterou zavedli Adam-Gibbs a Scherer (AGS).

Strukturní relaxace nekystalických materiálů v oblasti skelné transformace a viskozitní chování podchlazených sklotvorných kapalin vykazují řadu podobných vlastností pro chemicky velmi rozdílné typy sklotvorných systémů. V přednášce jsou prezentovány experimentální výsledky objemové a enthalpické relaxace v oblasti skelné transformace pro vybraná složení chalkogenidových skel (Se , As_2Se_3 , As_2S_3)^{3,4} interpretované v rámci TNM a AGS modelů. Relaxační odezva těchto materiálů je diskutována též z hlediska viskozitního chování sklotvorných kapalin. Je navržena vhodná definice relaxační rychlosti³, která umožňuje kvantifikovat vliv nelinearity pro studovaná složení skel ale i pro řadu polymerních materiálů.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 104/08/1021.

LITERATURA

1. Angell C.A., Ngai K.L., McKenna G.B., McMillan P.F., Martin S.W.: *J. Appl. Phys.* 88, 3113 (2000).
2. Debenedetti P.G., Stillinger F.H.: *Nature* 410, 259 (2001).
3. Málek J.: *Macromolecules* 31, 8312 (1998).
4. Málek J., Svoboda R., Pustková P., Čičmanec P.: *J. Non-Cryst. Solids* 355, 264 (2009).

4L-10

PROBLEMS OF MOLECULAR SIMULATIONS OF FLUID MIXTURES: INTERMOLECULAR POTENTIAL MODELS AND COMBINING RULES

IVO NEZBEDA^{a,b}

^a E. Hála Lab. of Thermodyn., ICPF AS CR, 165 02 Prague,

^b Faculty of Science, J. E. Purkinje Univ., 400 96 Ústí nad Labem

IvoNez@icpf.cas.cz

With increasing general availability of powerful computers, molecular simulations have become a standard ‘theoretical’ tool for investigation and prediction of properties of condensed matter. Quality/accuracy of such predictions

rely solely on the quality of the used interaction Hamiltonians supplied by quantum chemists.

One of the most important practical goals of molecular theories of fluids is prediction of properties of fluid mixtures. Unfortunately, reliable realistic Hamiltonians are available nowadays only for pure fluids. Consequently, it means that when dealing with mixtures certain combining rules must be used for non-electrostatic interactions between unlike species, typically the Lorentz-Berthelot (LB) rule.

It has been well known that no satisfactory agreement with experiment can be achieved unless certain deviations from the LB rule are applied. Recent studies on mixtures of realistic fluid models and of the effect of the cross interactions on their properties have shown that deviations from the LB rule may even lead to a qualitative change in the behavior of the mixture. On top of this, the use of pure fluid potential models themselves for mixtures must be questioned. Consequently, properties of fluid mixtures are, in principle, unpredictable unless some *a priori* known experimental result is used.

One possibility to account more appropriately for the cross interactions is to include polarizability. Molecular simulations on polarizable models bring the results to at least qualitative agreement with experimental data but at the expense of considerably increased complexity and CPU time demands. An alternative is to maintain the pure fluid pairwise additivity and to develop certain rules for the combining rules. Nonetheless, large discrepancies between results obtained for excess properties of the same mixture using different force fields indicate that good performance for pure fluids need not be sufficient for a good description of mixtures.

Using the water-methanol mixture as a typical troublemaker, all these findings will be presented and discussed along with an attempt to identify defects in pure fluid models when applied to mixtures. A potential development in this field and short-term problems to be solved will also be outlined.

Tato práce vznikla za podpory grantů GA AV ČR IAA400720710 a IAA400720802.

4L-11

INTERPRETÁCIA HMOTNOSTNÝCH SPEKTIER CYKLODEXTRÍNOVÝCH VRSTIEV

LADISLAV RÁBARA^{a,b,c}, 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, 841 04 Bratislava 4, ^c Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava 4

ladislav.rabara@ucm.sk

Na rovinných substrátoch boli pripravené monomolekulové vrstvy (Self-Assembled Monolayers, SAM)^{1,2} z tiolovaných cykloextrínov (CD-SH). Tieto vrstvy (CD-SAM) sú obdobou SAM vytváraných z n-alkántiolov (n-SAM) na zlatom povrchu.

CD-SAM boli pripravované ponáraním komerčne dostupných, vopred vyžiháňých, sklenených substrátov pokrytých tenkou vrstvou zlata do roztoku 6-monodeoxy-6-monotio- β -cyklodextrínu o koncentrácii 10^{-3} mol dm $^{-3}$ na čas 10 s – 24 h. Hmotnostné spektrá boli merané vo vysokoprúdovom zhlukovacom režime s dodržaním statického limitu dávky primárnych iónov 10^{13} na 1 cm 2 . Ako primárne ióny boli použité klastrové ióny Au $_3^+$ a Bi $_3^+$ s energiou 25 keV.

V SIMS spektrách s pozitívnu polaritou iónov boli identifikované píky zodpovedajúce molekulovým iónom tiolovaných cyklodextrínov a ich dimérov kationizovaných sodíkom a draslíkom (1173, 1189, 2322, 2338), ako aj kationizované fragmentované aj celé molekuly cyklodextrínu spojených s jedným atómom zlata (689, 859; 1369, 1385). V spektrách s negatívnu polaritou iónov boli identifikované molekulové ióny tiolovaného cyklodextrínu a jeho diméru ukotveného na zlata (1149, 1346, 1534, 2496).

Zo závislosti intenzít týchto píkov od času prípravy CD-SAM je vysvetlený priebeh vznikajúcej cyklodextrínovej vrstvy a stanovený optimálny čas prípravy. V príspevku sú taktiež diskutované odlišnosti od meraní n-SAM 3 .

Táto publikácia bola vytvorená realizáciou projektu "meta-QUITE: Centrum excelentnosti kvantových technológií", na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja a tiež grantu APVV-0491-07.

LITERATÚRA

- Allara D. L., Nuzzo R. G.: J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom. 30, 11 (1983).
- Ulmann A.: Chem. Rev. 96, 1533 (1996).
- Schröder M., Sohn S., Arlinghaus H. F.: Appl. Surf. Sci. 231-232, 164 (2004).

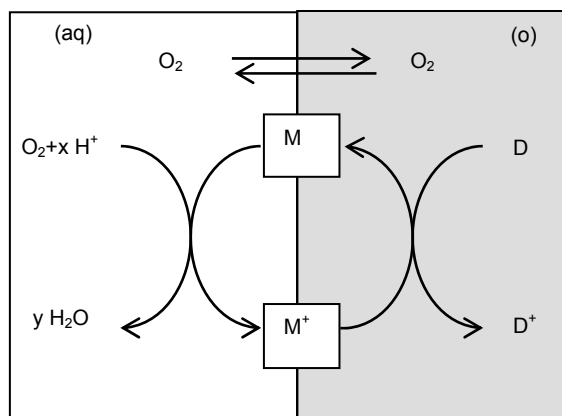
4L-12

ELEKTROKATALÝZA NA KAPALNÝCH ROZHRAŇÍCH

ZDENĚK SAMEC*, ANTONÍN TROJÁNEK a JAN LANGMAIER

Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejšková 3, 182 23 Praha 8
zdenek.samec@jh-inst.cas.cz

Rozhraní dvou nemísitelných roztoků elektrolytů (ITIES, Interface Between Two Immiscible Electrolyte Solutions) umožňuje prostorově separovat reaktanty/produkty reakcí přenosu elektronu (ET, electron transfer) v závislosti na jejich lipofilitě, zakotvit katalyzátor ET, a definovaným způsobem kontrolovat průběh ET elektrochemickou polarizací rozhraní. Polarizační děje na ITIES mají podobně jako na klasických kovových nebo polovodičových elektrodách původ v nabíjení elektrické dvojvrstvy paralelně k (faradaickým) reakcím přenosu náboje, které v případě ITIES navíc zahrnují reakce přenosu iontu 1,2 . Díky těmto vlastnostem je ITIES vhodným systémem jak pro fundamentální, tak aplikovanou elektrokatalýzu, např. pro vývoj molekulárního palivového článku.



Obr. 1. Schéma elektrokatalýzy redukce kyslíku na rozhraní dvou nemísitelných roztoků elektrolytů; aq – vodná fáze, o – organická fáze, D – donor elektronu, M – mediátor (katalyzátor) přenosu elektronu

ITIES současně nabízí jednoduchý model pro výzkum biomimetických procesů, zejména spřažených reakcí jako jsou reakce mezifázového přenosu protonu spřažené s ET, případně katalyzované molekulárním katalyzátorem zakotveným na rozhraní. Významným příkladem takové reakce schématicky znázorněné na obr. 1 je redukce molekulárního kyslíku na rozhraní voda (aq)-organické rozpouštědlo (o) za účasti protonu ve fázi (aq), donoru elektronu ve fázi (o), a mediátoru (katalyzátoru) ET případně adsorbovaného na rozhraní.

Redukce molekulárního kyslíku na ITIES byla zkoumána s použitím různých lipofilních donorů elektronu, např. dekametylferrocenu (DMFc) $^{3-7}$, redukovaného flavin mononukleotidu (FMN) 8 , tetrachlorohydrochinonu 9 , a monoaniontu fullerenu 10 . V případě DMFc, vede redukce kyslíku k produkci H $_2$ O $_2$, která byla prokázána chemickou identifikací produktů v dvoufázové reakci 7 . Byl rovněž podán důkaz katalýzy redukce kyslíku na rozhraní voda-1,2-dichlorethan (DCE) nanočásticemi Pt vytvořenými *in situ* paralelní mezifázovou reakcí 6 . Podobně jako v homogenní fázi roztoku nebo na pevné elektrodě, je redukce kyslíku na rozhraní voda-DCE katalyzována kovovými porfyriny, které zřejmě působí jako redox katalyzátory 3,4,11,12 . Vedlejším výsledkem těchto studií byl překvapující důkaz katalýzy redukce kyslíku na polarizovaném kapalném rozhraní bezkovovým porfyrinem – tetrafenylporfyrinem 13 .

Cílem tohoto příspěvku je objasnit principy elektrokatalýzy na elektrochemicky polarizovaných kapalných rozhraních, shrnout dosavadní výsledky výzkumu katalýzy redukce kyslíku kovovými nanočásticemi, kovovými porfyriny a bezkovovými porfyriny, a nastínit aplikační možnosti.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 203/07/1257.

LITERATURA

- Girault H. H. J., Schiffrin D. J., v knize: *Electroanalytical Chemistry* (Bard A.J. ed.), sv. 15, s. 1. Marcel Dekker, New York 1989.
- Samec Z.: Pure Appl Chem. 76, 2147 (2004).
- Trojánek A., Mareček V., Jančhenová H., Samec Z.:

- Electrochem. Commun. 9, 2185 (2007).
- Nia R.P., Su B., Li F., Gros C. P., Barbe J. M., Samec Z. Girault H. H.: Chem. Eur. J. 15, 2335 (2009).
 - Cunnane V. J., Geblewicz G., Schiffrin D. J.: Electrochim. Acta 40, 3005 (1995).
 - Trojánek A., Langmaier J., Samec Z.: Electrochem. Commun. 8, 475 (2006).
 - Su B., Nia R. P., Li F., Hojeij M., Prudent M. Corminboeuf C., Samec Z. Girault H. H.: Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 47, 4675 (2008).
 - Suzuki M., Matsui M., Kihara S.: J. Electroanal. Chem. 438, 147 (1997).
 - Ohde H., Maeda K., Yoshida Y., Kihara S.: J. Electroanal. Chem. 483, 108 (2000).
 - Liljeroth P., Quinn B.M., Kontturi K.: Langmuir 19, 5121 (2003).
 - Hatay I., Su B., Li F., Mendez M.A., Khoury T., Gros C. P., Barbe J. M., Ersoz E., Samec Z., Girault H. H.: J. Am. Chem. Soc. 131, 13453 (2009).
 - Su B., Hatay I., Trojánek A., Samec Z., Khoury T., Gros C. P., Barbe J. M., Daiana A., Carrupt P. A., Girault H. H.: J. Am. Chem. Soc. 132, 2655 (2010).
 - Trojánek A., Langmaier J., Su B., Girault H. H., Samec Z.: Electrochem. Commun. 11, 1940 (2009).

4L-13**QUO VADIS NMR?****VLADIMÍR SKLENÁŘ**

*Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno
sklenar@chemi.muni.cz*

Nukleární magnetická rezonance je prominentní spektroskopickou metodou s širokým uplatněním ve fyzice, chemii, biologii a medicíně. V roce 2010 uplyne 65 roků od jejího experimentálního obejvu. V přednášce je stručně rekapitulován vývoj NMR během posledního desetiletí, se zdůrazněním jejího uplatnění při studiu biochemických a biologických procesů. Na několika příkladech je demonstrován potenciál využití NMR spektroskopie při studiu prostorové struktury a dynamiky proteinů a nukleových kyselin.

Tato práce vznikla za podpory grantů MŠMT ČR MSM0021622413 a LC06030.

4L-14**QM/MM EXKURZIA DO NANOSVETA ZLATA****IGOR TVAROŠKA**

*Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta, 845 38 Bratislava
chemitsa@savba.sk*

Záujem o nanočastice zlata neustále rastie vďaka už známym ale i potenciálne novým aplikáciám v rôznych oblastiach nanotechnológií. Povrchová modifikácia môže významne rozšíriť použitie nanočastíc zlata, pričom inaktivácia

tiolátni je najpopulárnejšiou. Glyko-nanočastice zlata (GNP) sú prvkami nanosveta patriace do skupiny častíc s polomerom neprevyšujúcim 100 nm (cit.¹). Táto veľkosť ich robí zrovnateľnými s bežnými biomolekulami. GNP pozostávajú z troch zložiek: jadra tvoreného atómami zlata, linkerov a sacharidových ligandov. Sacharidy naviazané na trojrozmerné jadro zlata kopírujú sacharidové epitópy glykoproteínov na povrchu buniek. Vďaka svojim vlastnostiam môžu byť GNP použité na skúmanie biologických procesov založených na interakciách sacharidov a na cieleňú manipuláciu týchto interakcií so značným terapeutickým potenciálom². I keď pre aplikáciu GNP je kľúčovou štruktúra sacharidových ligandov, ich funkčné vlastnosti ovplyvňujú aj zostávajúce dve zložky. Pre racionálny dizajn GNP je dôležitá charakterizácia ich štruktúry. Keďže určenie štruktúr GNP nie je jednoduché, metódy molekulového modelovania sú alternatívou.

V prednáške sa budú prezentovať výsledky štúdia 38-atomového klastra zlata (Au₃₈) inaktivovaného rôznymi tiolátovými linkerami použitím DFT a QM(DFT)/MM metód s ADF programom³. Veľkosť klastra zlata Au₃₈ bola zvolená ako kompromis medzi výpočtovými možnosťami a obmedzeniami softvéru na jednej strane a cieľom modelovať reálne systémy na druhej strane. Najmenšia veľkosť izolovaných GNP zodpovedá Au₃₈jadru. Tiež tioláty naviazané na jadro zlata boli vybrané tak, aby kopirovali reálne pripravené GNP, v ktorých ligand býva hydroxylového alebo glykozylovaného typu. Študovali sme následovne typy linkerov: 3-hydroxypropan-1-tiolát, 11-hydroxyundekán-1-tiolát a 11-hydroxy-3,6,9-trioxaundekán-1-tiolát a ich glukozilyované analógy. Tento výber nám umožnil študovať vplyv dĺžky ako aj typu linkera na štruktúru inaktivovaných nanočastíc zlata. Získané výsledky budú porovnané s dostupnými experimentálnymi a teoretickými údajmi.

Tato práca vznikla za podpory grantu EC MRTN-CT-2004-005645 a grantu Agentúry pre podporu vedy a vývoja SR APVV-0607-07.

LITERATÚRA

- Sihelníková L., Tvaroška I.: Chem. Papers 61, 237 (2007).
- de la Fuente J. M., Barrientos A. G., Rojas T. C., Rojo J., Canada J., Fernandez A., Penades S.: Angew. Chem., Int. Ed. 40, 2257 (2001).
- ADF 2006.01 (ADF2006.01), SCM, Theoretical Chemistry, Vrije Universiteit, Amsterdam, The Netherlands.

4L-15**SPEKTROSKOPIE POVRCHEM ZESÍLENÉHO RAMANOVA ROZPTYLU A MOŽNOSTI DETEKCE JEDNÉ MOLEKULY****BLANKA VLČKOVÁ**

*Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Hlavova 8, 128 40 Praha 2
vlc@natur.cuni.cz*

Povrchem zesílený Ramanův rozptyl (surface-enhanced Raman scattering, SERS) má původ v současné interakci

viditelného záření s nanostrukturami silně vodivých, tzv. plasmonických kovů (zejména Ag a Au) a s molekulami lokalizovanými na jejich površích. V případě splnění rezonanční podmínky je jak dopadající, tak neelasticky rozptýleného záření zesíleno prostřednictvím rezonančního Mieova rozptylu světla nanostrukturami, např. nanočásticemi kovů. Tento proces je podstatou hlavního, tzv. elektromagnetického (EM) mechanismu SERSu. Pokud vlnová délka excitujícího záření splňuje současně s rezonanční podmínkou Mieova rozptylu také podmínku molekulární rezonance, pak mechanismus molekulární rezonance (MR) rovněž přispívá k celkovému zesílení Ramanova rozptylu.

SERS spektroskopie představuje v současné době rozvinutou spektroanalytickou metodu s řadou aplikací¹. Neobyčejnou pozornost však vzbudilo zjištění, že tato metoda umožňuje dosáhnout zesílení Ramanova rozptylu faktorem až 10^{14} a tím detekce jediné molekuly. Modelové teoretické výpočty pak prokázaly, že tohoto zesílení lze skutečně dosáhnout při současném působení EM a MR mechanismu².

Náš výzkum SERSu se je zaměřen na studium současného působení EM a MR mechanismů SERSu, na vývoj SERS spektrálních sond pro studium mechanismů dalších opticky buzených procesů (např. laserové ablace plasmonických kovů a nově i dalších povrchem zesílených procesů) a na SERS spektroskopii na úrovni jedné molekuly. Naším nejvýznamnějším příspěvkem k poslední jmenované tematice je syntéza molekulárně můstkovaných dimérů Ag nanočástic, změření a analýza časově fluktuujících SERS signálů molekulární spojky z jediného vybraného agregátu Ag nanočástic můstkovaných touto molekulární spojkou a interpretace časového vývoje signálu na základě dynamického chování jediné můstkující molekuly³. Spolu s těmito a dalšími výsledky našeho výzkumu budou rovněž diskutovány možnosti a problémy SERS spektroskopie na úrovni jedné molekuly⁴.

Tato práce vznikla za podpory grantem GA ČR P208/10/0941.

LITERATURA

1. Aroca R.: *Surface-Enhanced Vibrational Spectroscopy*, J. Wiley, Chichester 2006.
2. Johansson P., Xu H., Käll M.: *Phys. Rev.*, B 72, 035427-1-17 (2005).
3. Vlčková B., Moskovits M., Pavel I., Šisková K., Sládková M., Šlouf M.: *Chem. Phys. Lett.* 455, 131 (2008).
4. Vlčková B., Pavel I., Sládková M., Šisková K., Šlouf M.: *J. Mol. Struct.* 834, 42 (2007).

4L-16

COMBINED FTIR AND DFT STUDY OF CO/Ca-FER ADSORPTION COMPLEX

ROMAN BULÁNEK^a, IVA VOLESKÁ^{a*},
and PETR NACHTIGALL^b

^a *Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice,* ^b *Department of Physical and Macromolecular Chemistry, Faculty of science, Charles University in Prague, Hlavova 2030, 118 40 Praha*
iva.voleska@gmail.com

The extra-framework Ca^{2+} cation act as the adsorption centre and knowledge of its position in zeolite framework is important for understanding of Ca-FER zeolite adsorption and catalytic properties. The Ca^{2+} location was studied by FTIR spectroscopy of adsorbed CO probe molecule. The spectra are interpreted *via* good agreement of experimental data with periodic DFT with CC/DFT correlation calculations. The same approach was previously used for CO/Mg-FER¹.

Ca-FER zeolite with Si/Al = 8.6 was prepared from H-FER form by the standard ion-exchange procedure. The CO/Ca-FER spectra were measured during CO gradual desorption at liquid nitrogen temperature. The calculations of CO/Ca-FER were performed as periodic system within the periodic DFT model in VASP² code and the vibrational frequency of adsorbed CO was calculated by using of $\omega_{\text{CO}}/r_{\text{CO}}$ correlation³.

Five sites, where Ca^{2+} cation can be coordinated, are considered in Ca-FER structure: two types of sites on the wall of the main (M) channel, two types of sites of perpendicular (P) channel cavity, and one site on the channel intersection (I). The CO frequency and adsorption enthalpy of mono- and dicarbonyl (and tricarbonyl on channel intersection) complexes was calculated. Three bands and shoulders were distinguished in the FTIR spectra of CO adsorbed on Ca-FER and assigned to carbonyl complexes on individual Ca^{2+} cation sites. The FTIR spectra of CO/Ca-FER zeolite were interpreted on the base of good agreement between theoretical and experimental data. Obtained results are in summary presented: The most stable adsorption complex at 2197 cm^{-1} can be interpreted as monocarbonyl complex on M and I sites. Shoulder at 2193 cm^{-1} characterizes monocarbonyl complex on P sites and dicarbonyl complex on M and I site. The shoulder at 2188 cm^{-1} is assigned to dicarbonyl complex on P sites and tricarbonyl complex on I site.

This work was supported by the Grant Agency of the Czech Republic (grant No. 203/09/0143).

REFERENCES

1. Bulanek R., Voleska I., Ivanova E., Hadjiivanov K., Nachtigall P.: *J. Phys. Chem. C* 113, 11066 (2009).
2. Kresse G., Hafner J.: *Phys. Rev. B* 49, 14251 (1994).
3. Bludsky O., Silhan M., Nachtigallova D., Nachtigall P.: *J. Phys. Chem. A* 107, 10381 (2003).

4L-17

PROBLEMATIKA VÝPOČTU FÁZOVÉ A CHEMICKÉ ROVNOVÁHY HETEROGENNÍCH SYSTÉMŮ**PETR VOŇKA a KAREL ŘEHÁK**

*Ústav fyzikální chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6
petr.vonka@vscht.cz*

V této práci budeme uvažovat uzavřený, izotermní a izobarický systém, který koná nejméně objemovou práci. Pro takový systém lze z druhé věty termodynamické dokázat, že během samovolného procesu od počátečního do koncového stavu klesá hodnota Gibbsovy energie systému a v rovnovážném stavu nabývá svého absolutního minima. Tato základní vlastnosti Gibbsovy energie je využíváno při výpočtech rovnovážného stavu uvažovaného systému nejen v případě fázové rovnováhy (uvnitř fází nedochází k chemické přeměně), ale i v případě chemické rovnováhy, kdy kromě reakcí fázových přechodů mohou též probíhat chemické reakce v homogenním prostředí jednotlivých fází. Lze snadno odvodit nutné podmínky rovnovážného stavu. Omezíme-li se pro jednoduchost na fázovou rovnováhu, pak v případě heterogenního (vícefázového) systému musí být chemický potenciál každé látky ve všech fázích stejný. Lze pak dokázat, že musí být identické tečné plochy zkonstruované v rovnovážném bodě každé fáze. Z matematického hlediska je výše uvedená podmínka rovnosti chemických potenciálů (či tečných ploch) ekvivalentní podmínce stacionárního bodu, tj. bodu, ve kterém se anulují první derivace studované funkce. Takovýchto bodů (tj. systémů o daném počtu fází, tj. fázovém složení) však může být více a je nutné rozhodnout, který z nich je rovnovážný, tj. který z nich má nejnižší hodnotu Gibbsovy energie. Bude demonstrováno stabilitní někdy též nazývané tangenciální kritérium (pro případ fázové, resp. chemické rovnováhy odvozeno v literatuře^{1,2}, resp.^{3,4}), které umožní rozhodnout, zda uvažovaný systém, který splňuje (nutné) podmínky rovnovážného stavu je skutečně stavem rovnovážným či nikoliv. Geometrická interpretace tangenciálního kritéria je jednoduchá. Uvažujme heterogenní f -fázový systém, který splňuje nutné rovnovážné podmínky. Zkonstruujeme tečnou plochu, která se „zespodu“ dotýká obecně vícerozměrného grafu Gibbsovy energie v rovnovážných bodech každé fáze. Pokud takto zkonstruovaná plocha nikde neprotíná původní graf Gibbsovy energie nebo grafy Gibbsovy energie fází dosud nezařazených do výpočtu, pak je testovaný systém systémem rovnovážným. V opačném případě je nutné k uvažovanému fázovému složení přidat další fázi (a někdy též také odebrat) a výpočet opakovat. Korektní algebraické provedení tohoto algoritmu je v obecném případě nesnadná úloha¹⁻⁵. Metastabilní pokračování rovnovážných křivek bude ukázáno u systému voda + uhlovodík a též v případě zkapalňování zemního plynu, kdy je nutné rozhodnout, které z šesti fázových složení (plyn, kapalina, plyn + CO₂(s), kapalina + CO₂(s), kapalina + plyn a kapalina + plyn + CO₂(s)) je rovnovážným. Bude též ukázán vliv nedostatečně zadané množiny možných fázových složení systému⁶.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT 6046137307.

LITERATURA

1. Michelsen M. L.: Fluid Phase Equilbr. 9, 1 (1982).
2. Michelsen M. L.: Fluid Phase Equilbr. 9, 21 (1982).
3. Voňka P., Leitner J.: Calphad 19, 25 (1995).
4. Smith J. V., Missen R. W., Smith W. R.: AIChE J. 39, 707 (1993).
5. Voňka P., Leitner J.: Calphad 19, 305 (1995).
6. Leitner J., Stejskal J., Voňka P.: J. Cyst. Growth 267, 8 (2004).

4P-01

ISOTOPE EFFECT IN DISSOCIATIVE ELECTRON ATTACHMENT CROSS SECTIONS IN ACETYLENE

OLIVIER MAY^a, JURAJ FEDOR^b, and MICHAEL ALLAN^a

^a Département de Chimie, Université de Fribourg, chemin du Musée 9, 1700 Fribourg, Suisse, ^b Heyrovský Institute of Physical Chemistry, Czech Academy of Sciences, Pratur Michael.Allan@unifr.ch

Electron-driven chemistry has many applications, but, in contrast to photochemistry, we lack the theoretical tools to calculate theoretically the perhaps most important process – the dissociative electron attachment (DEA) to polyatomic molecules. The principle reason is that the potential surfaces of the intermediate negative ion, the resonance, have an imaginary component, the width Γ , which expresses the coupling of the resonance with the continuum of the detached electrons. Such potential surfaces are notoriously difficult to calculate – the standard quantum chemical codes are not applicable to them.

An important challenge in this field is thus the development of methods to calculate DEA to polyatomic molecules. An important step toward this goal was recently achieved by the group at UC Davies, and applied to the prototype case acetylene¹:



We present the experimental test and validation of their predictions, the absolute partial cross sections for dissociative electron attachment to C_2H_2 and C_2D_2 which have been measured using a new ‘quantitative’ time-of-flight ion spectrometer combined with a trochoidal electron monochromator^{2,3}.

We measured the cross section for $\text{C}_2\text{D}^-/\text{C}_2\text{D}_2$ to be 15 times smaller than that for $\text{C}_2\text{H}^-/\text{C}_2\text{H}_2$, that is, we observe a dramatic isotope effect, albeit smaller than the predicted¹ factor of 30. A later improved calculation⁴ removed the discrepancy by taking into account initial thermal excitation of the bending vibrations. The cross section is a very steeply rising function of the initial vibrational quantum number and vibrational excitation already at 60 °C is important.

This work was supported by grant 200020-113599/1 of the Swiss National Science Foundation and by COST Action CM0601.

REFERENCES

1. Chourou S. T., Orel A. E.: Phys. Rev., A 77, 042709 (2008).
2. May O., Fedor J., Ibanescu B. C., Allan, M.: Phys. Rev., A 77, 040701(R) (2008).
3. May O., Fedor J., Allan M.: Phys. Rev., A 80, 012706 (2009).
4. Chourou S. T., Orel A. E.: Phys. Rev., A 80, 034701, (2009).

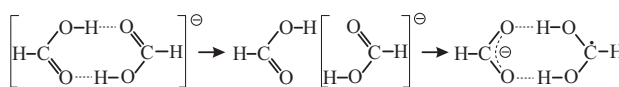
4P-02

ELECTRON COLLISIONS WITH FORMIC ACID MONOMER AND DIMER

MICHAL ALLAN

Département de Chimie, Université de Fribourg, chemin du Musée 9, 1700 Fribourg, Suisse
Michael.Allan@unifr.ch

Processes induced by the attachment of slow electrons to formic acid and its hydrogen-bonded dimer were studied¹. The elastic cross section and the cross section for the excitation of low quanta of discrete vibrations² were found to be of similar magnitude for both targets. A dramatic difference was found in the excitation of a vibrational quasicontinuum in the 1–2 eV range with the ejection of very slow electrons ($E < 0.1$ eV), which was about 20× more intense in the dimer (Fig. 1).



The association of two formic acid molecules to form a dimer thus dramatically increases the power to quasithermalize electrons arriving with energies in the 1–2 eV energy range. Rapid electron-driven intracluster proton transfer is invoked to explain the observation.

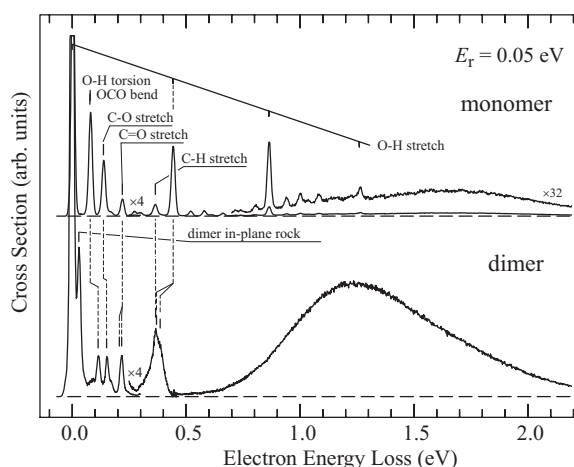


Fig. 1. Yield of slow electrons as a function of incident electron energy, from the monomer and the dimer of formic acid

This work was supported by grant 200020-113599/1 of the Swiss National Science Foundation.

REFERENCES

1. Allan M.: Phys. Rev. Lett. 98, 123201 (2007).
2. Chocholoušová J., Špirko V., Hobza P.: Phys. Chem. Chem. Phys. 6, 37 (2003).

4P-03**VLIV PŘEDÚPRAVY NA KATALYTICKOU AKTIVITU Fe-SILIKALITU V AMOXIDACI PROPANU****EVA BAĐUROVÁ a ROMAN BULÁNEK**

*Katedra fyzikální chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
eva.badurova@student.upce.cz*

V současné době je většina akrylonitrilu získávána především Sohio procesem, který je založen na amoxidaci propenu¹. Během několika posledních let, díky nedostatečné kapacitě a vysoké ceně propenu, se stále zvyšuje zájem o inovaci stávajících průmyslově užívaných procesů výroby. Jednou z možných alternativ je nahrazení alkenů levnějšími alkany. Velká pozornost je věnována přímé amoxidaci propanu na akrylonitril. Dosud žádný katalytický systém nedosáhl reakčních parametrů vhodných pro komerční aplikace². Velmi nedávno byl publikován, jako jeden z nadějných kandidátů pro přímou amoxidaci propanu, právě Fe-silikalit^{3,4}.

Katalytická aktivita tohoto systému je silně závislá na způsobu předúpravy katalyzátoru. Cílem této práce bylo prozkoumání vlivu podmínek předúpravy na katalytickou aktivitu Fe-silikalitů v amoxidaci propanu. Studie byla provedena na Fe-silikalitu s obsahem železa 5000 ppm. Detailně byl studován vliv složení plynu pro předúpravu (propan/oxid dusný/kyslík/amoniak/vodní pára) na aktivitu materiálu v přímé amoxidaci propanu. Katalytické testy byly provedeny v mikroreaktoru s navázkou katalyzátoru 80 mg, teplotou reakce 540 °C a složením reakční směsi 2,5 obj. % propanu, 5 obj. % kyslíku a 5 obj. % amoniaku v heliu.

Výsledky výzkumu lze shrnout následovně:

- 1) Působení amoniaku a propanu na Fe-silikalit výrazně zvyšuje selektivitu na akrylonitril. Tento nárůst aktivity připisujeme tzv. reduktivní nitridaci povrchu katalyzátoru.
- 2) Vysoké efektivity námi navržené metody předúpravy katalyzátoru je zřejmě dosaženo synergičtým působením jak hydrotermální extrakce iontů železa ze silikátové mřížky, tak reduktivní nitridace povrchu zeolitových kanálů a mimomřížkových oxo-komplexů železa.
- 3) Fe-silikalit aktivovaný námi navrženým postupem dosahoval selektivity na akrylonitril přes 30 %. Zároveň katalyzátor produkoval 23 % propenu, který je možné použít v dalších výrobcích či dodatečně amoxidovat již stávající technologií. Celkově lze tedy za daných podmínek převést více jak 50 % propanu na žádaný produkt.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 203/08/H032.

LITERATURA

1. Rase H.F., v knize: *Handbook of Commercial Catalysis*, kap. 4, s. 43. CRC Press, New York 2000.
2. Brazdil J.F.: *Top. Catal* 38, 289 (2006).
3. Pérez-Ramírez J., Blangenois N., Ruiz P.: *Catal. Lett.* 104, 163 (2005).
4. Bulánek R., Částek F.: *Top. Catal.* 45, 233 (2007).

4P-04**AKTIVITNÍ KOEFICIENTY VODNÝCH ROZTOKŮ PEROXODISÍRANŮ A SÍRANŮ V ROZMEZÍ 0–50 °C****JAN BALEJ**

*Heřmanova 35, 170 00 Praha
balejan@seznam.cz*

Aktivitní koeficienty vodných nasycených roztoků peroxidisíranu a síranu sodného, draselného a amonného při 0–50 °C byly odvozeny na základě termodynamické podmínky rovnováhy mezi tuhou látkou a jejím nasyceným roztokem. Pro závislost aktivitních koeficientů nasycených roztoků na teplotě a složení byly odvozeny vhodné vztahy. Pro zjištění aktivitních koeficientů zředěných roztoků peroxidisíranů byla pro méně rozpustnou draselnou sůl použita jednoparametrová metoda podle Bromleye¹, pro dobře rozpustnou sodnou a amonnou sůl byla použita grafická metoda podle Meissnera^{2–4}. Aktivitní koeficienty odpovídajících síranů v celém uvažovaném oboru teplot a koncentrací byly zjištěny kombinací dílčích publikovaných dat a Bromleyovy metody¹ pro draselnou sůl a Meissnerovy metody^{2–4} pro sodnou a amonnou sůl.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury ČR (grant. č. 203/09/1343).

LITERATURA

1. Bromley L. A.: *AICHE J.* 19, 313 (1973).
2. Meissner H. P., Tester J. W.: *Ind. Eng. Process Des. Develop.* 11, 128 (1972).
3. Meissner H. P., Kusik C. L., Tester J. W.: *AICHE J.* 17, 661 (1972).
4. Messner H. P., Manning M. P., v knize: *Chemical Engineering Thermodynamics*, s. 339. Ann Arbor Sci., 1983.

4P-05**PHOTOCHEMICAL AND PHOTOBIOLOGICAL STUDIES ON SELENADIAZOLOQUINOLONES****ZUZANA BARBIERIKOVÁ, MAROŠ BELLA, VIKTOR MILATA, SOŇA JANTOVÁ, and VLASTA BREZOVÁ**

*Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
zuzana.barbierikova@stuba.sk*

Quinolone drugs, especially fluoroquinolones, are one of the most successful classes of antibiotics. These antimicrobial agents are considered to be well tolerated and have limited adverse effects during the therapy. Although their most significant side effect, the phototoxicity, has recently attracted a lot of attention to these compounds, the detailed mechanisms underlying the phototoxic reactions induced by quinolones are still unknown. Hence a great effort is made to understand structure-phototoxicity relationship of quinolones.

As the selenium-containing heterocyclic compounds may exhibit interesting properties, our study is focused on UV/vis spectroscopical characterization of novel 7-R-6-oxo-6,9-dihydro[1,2,5]selenadiazolo[3,4-*h*]quinoline (SeQ1–

SeQ6) and 8-R-9-oxo-6,9-dihydro[1,2,5]selenadiazolo[3,4-f]quinoline derivatives (SeQ1N–SeQ5N), where R = H, COOC₂H₅, COOCH₃, COOH, COCH₃ and CN. The ability of selenadiazoloquinolones to produce paramagnetic intermediates and singlet oxygen upon the photoexcitation by medium pressure metal halide lamp ($\lambda > 300$ nm) was studied by means of EPR spectroscopy. The cytotoxic/photocytotoxic effects of SeQ5 (R = COCH₃) were studied using murine and human cancer cell lines.

The generation of paramagnetic species upon photoexcitation of selenadiazoloquinolones was investigated in dimethylsulfoxide solutions by *in situ* EPR spin trapping technique. All investigated selenadiazoloquinolones revealed the ability to photoactivate molecular oxygen *via* electron transfer mechanism producing super oxide radical anion, and this process was quantified in our study by the evaluation of quantum efficiency of corresponding spin adduct formation.

The photoinduced generation of singlet oxygen upon continuous irradiation of acetonitrile solutions of selenadiazoloquinolone derivatives was monitored *via* the oxidation of 4-hydroxy-2,2,6,6-tetramethylpiperidine to the corresponding nitroxyl radical characterized with three-line EPR signal ($a_N = 1.575$ mT; $g = 2.0060$).

EPR investigations evidenced that selenadiazoloquinolones behave as photosensitizers, producing super oxide radical anions and singlet oxygen *via* quenching excited states by molecular oxygen. These photogenerated species may react with selenadiazoloquinolones by various mechanisms, which resulted in the degradation of selenadiazoloquinolones.

This study was financially supported by Scientific Grant Agency (VEGA Projects 1/0225/08, 1/0018/09) and Research and Development Agency (contract No. APVV-0055-07).

4P-06

ANALYSIS OF Fe SPECIES ACTIVE IN ODH OF ETHANE / PROPANE OVER Fe-ZEOLITES WITH N₂O

ŠÁRKA BOTKOVÁ^a, LUCIE SMOLÁKOVÁ^a, LIBOR ČAPEK^a, TOMÁŠ GRYGAR^b, and ROMAN BULÁNEK^a

^a Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice,

^b Institute of Inorganic Chemistry AS CR, 250 68 Řež
s.botkova@seznam.cz

Oxidative dehydrogenation (ODH) of ethane and propane offers an attractive alternative to the traditional processes of ethene productions¹.

Nitrous oxide, a waste by-product generated in many industrial processes, has been shown to be an excellent oxidant for performing some oxidation processes. It should be mentioned that N₂O is effective oxidation agent mainly with iron modified zeolites for a lot of reactions such as ODH of ethane², ODH of propane³, oxidation of benzene to phenol, partial oxidation of methane to formaldehyde. Utilization of Fe-zeolites using N₂O as the oxidant results in ODH of light alkanes decreases the reaction temperature at around 200–300 °C.

The aim of the contribution is contribute to the under-

standing the active iron species in the ODH of ethane and propane. The information about the active sites in the ODH of light hydrocarbons can also be useful in other reactions catalyzed by Fe-zeolites.

Structure analysis of Fe-zeolites was performed with DR UV-Vis spectroscopy (GBS Cintra 303), FTIR (Nicolet), EPR (Bruker-Biospin), Mössbauer, voltammetry of microparticles and XRF (Elva X). ODH was carried out in a quartz through-flow micro-reactor at reaction temperature 350 °C and atmospheric pressure. The reaction mixture consisted of 8.0 vol.% C₂H₆ or 5 vol. % C₃H₈, 10 vol.% N₂O and a rest of He (W/F 0.12 g_{cat} s ml⁻¹). Concentration of reactants and products were provided by an on-line connected gas chromatograph Shimadzu GC 17A.

Fe-MFI and Fe-FER catalysts were prepared by Fe(III) ion exchange and impregnation of FeCl₃ in acetylacetone. The catalysts were tested in ODH of ethane and propane at iso-conversion conditions. Comparing the TOF values, the same TOF values were obtained for Fe-FERs containing isolated Fe ions and oligomeric Fe species.

The authors gratefully thank to the Grant Agency of Czech Republic for financial support (Projects No. P106/10/0196 and 203/08/H032) and Ministry of Education, Youth and Sports (No. MSM 0021627501).

REFERENCES

1. Cavani F., Ballarini N., Cericola A.: *Catal. Today* 127, 113 (2007).
2. Nowinska K., Waclaw A., Izbinska A.: *Appl. Catal., A*, 243, 225 (2003).
3. Pérez-Ramírez J., Gallardo-Llamas A.: *Appl. Catal., A*, 729, 117 (2005).

4P-07

NĚKTERÉ DŮLEŽITÉ KORELACE PO ETHANOLÝZE ŘEPKOVÉHO OLEJE

MICHAL ČERNOCH, FRANTIŠEK SKOPAL a MARTIN HÁJEK

Katedra fyzikální chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
michal.cernoch@student.upce.cz

Bionafta je alternativní palivo pro vznětové motory. Mezi její hlavní výhody patří mnohem lepší biologická odbouratelnost a nižší emise nebezpečných látek ve výfukových plynech v porovnání s používáním klasické (fosilní) motorové nafty. Mezi nevýhody patří zejména vyšší výrobní náklady a nemožnost plně nahradit spotřebu fosilní motorové nafty.

Bionafta se v našich zeměpisných podmínkách vyrábí nejčastěji transesterifikací řepkového oleje methanolem (methanolýza) za alkalické katalýzy. Možná je však náhrada methanolu ethanolem, tedy ethanolýza řepkového oleje. Výhodou použití ethanolu při transesterifikaci je, že jeho původ je v biomase, že výsledný ethylester řepkového oleje má mírně vyšší výhřevnost než analogický methylester a že lze dosáhnout vyššího teoretického výtěžku bionafty (pokud uvažujeme řepkový olej jako klíčovou složku). Nevýhodou je složi-

tější reakční proces.

Evropská norma pro methylestery rostlinných olejů (EN 14214:2003) udává více než 25 kvalitativních parametrů, jež musí být u bionafty splněny. Ačkoliv norma pro ethylestery ještě není zavedena, budou pro ni pravděpodobně platit obdobná kritéria. Parametry často nejsou nezávislé a existují mezi nimi vztahy.

Tato práce se zabývá několika korelacemi, např. závislosti bodu vzplanutí ethylesteru řepkového oleje na obsahu reziduálního ethanolu, korelací obsahu draselných iontů s glycerolem a karbonizačním zbytkem, korelací obsahu jednotlivých reziduálních glyceridů (mono-, di-, tri-) či vlivem teploty a některých nečistot na kinematickou viskozitu ethylesteru řepkového oleje.

Tato práce vznikla jakou součástí výzkumného záměru Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy MSM0021627502.

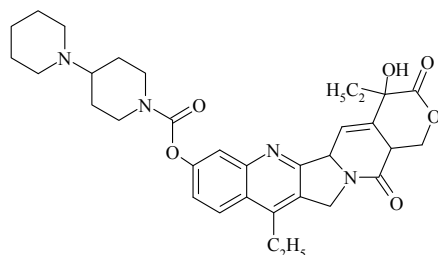
4P-08

PHOTOCHEMICAL TRANSFORMATIONS OF IRINOTECAN IN THE PRESENCE OF TRANSITION METAL IONS

DANA DVORANOVÁ, MIROSLAVA BOBENIČOVÁ, VLASTA BREZOVÁ, LUKÁŠ BUČINSKÝ, and MARIÁN VALKO

Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava dana.dvoranova@stuba.sk

The camptothecin family of anticancer medicines reveals a unique mechanism of action directed to the inhibition of Topoisomerase I. Watersoluble camptothecin analogue applied today in cancer treatment, irinotecan (CPT-11; Scheme 1), is a pro-drug, converted *in vivo* to its active metabolite. The presence of transition metal ions, as well as UVA exposure, could enhance the activity of several anticancer drugs, most probably *via* free radical mechanisms. CPT-11 photoactivated by UVA irradiation may behave as photosensitizer producing reactive oxygen species participating in anticancer action.



Scheme 1. Structure of irinotecan (CPT-11)

Our investigation was focused on photochemical transformation of CPT-11 in aqueous and nonaqueous media (dimethylsulfoxide, acetonitrile, methanol) and on its photo-

activation in the presence of equimolar amounts of Cu(II), Fe(III) or Co(II) ions. The deoxygenated as well as aerated solutions of CPT-11 without/with transition metal ions were irradiated by UVA, and the photoinduced changes in systems were monitored using EPR and UV/Vis spectroscopy. The EPR spin trapping technique applying different types of spin trapping agents were performed in order to identify radical intermediates produced.

This study was financially supported by Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic (Projects VEGA 1/0018/09) and Research and Development Agency of the Slovak Republic (contracts No. APVV 0055-07 and SK-AT-0016-08).

4P-09

ŠTÚDIUM INTERAKCIÍ DVOJMOCNÝCH KATIÓNOV S ACETONITRILOM METÓDOU SIMS

SOŇA HALÁSZOVÁ^{a*}, MONIKA ARANYOSIOVÁ^{a,b}, OĽGA VOLLÁROVÁ^a a JÁN BENKO^a

^a Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, ^b Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava sona.halaszova@gmail.com

Cieľom práce je štúdium solvátácie iónov Sr²⁺, Ba²⁺ a Pd²⁺ v zmesi voda-acetonitril hmotnostnou spektrometriou sekundárnych iónov – SIMS.

V tejto práci sa technika SIMS použila na analýzu zmrazenej kvapalnej vzorky, čo patrí medzi málo preskúmané oblasti. Na meranie boli použité roztoky Ba(ClO₄)₂ a SrCl₂ s koncentráciou 10⁻³ mol dm⁻³ v zmesi voda-acetonitril s mólovým zlomkom acetonitrilu x = 0,1. Práca nadväzuje na štúdium interakcií jednomocných katiónov s acetonitrilom¹, avšak dôraz sa kladie na dvojmocné katióny Sr²⁺, Ba²⁺ a Pd²⁺. Vzhľadom na význam a uplatnenie solvátácie pri skúmaní chemickej kinetiky, chemickej rovnováhy a bioaktivity molekúl, je prirodzené, že tento jav sa intenzívne skúma.

Na základe rozpustnosti a z nej vypočítanej prenosovej Gibbsovej energie ΔG_t⁰ týchto látok v zmesnom rozpúšťadle voda-acetonitril možno povedať, že ión Sr²⁺ je pri skúmanej koncentrácii acetonitrilu (x = 0,1) stabilizovaný a ión Ba²⁺ je destabilizovaný. Túto skutočnosť potvrdili aj namerané hmotnostné spektrá, keďže v hmotnostnom spektre SrCl₂ boli identifikované píky Sr(CH₃CN)₂⁺ a Sr(CH₃CN)₃⁺. V hmotnostnom spektre Ba(ClO₄)₂ neboli píky, ktoré by zodpovedali solvátácii Ba²⁺ s viacerými molekulami acetonitrilu identifikované. V oboch spektrách boli identifikované aj píky BaOH⁺, BaH₂O⁺, SrOH⁺, SrOH+H₂O⁺, ktoré sú pravdepodobne výsledkom solvátácie Ba²⁺ a Sr²⁺ s molekulami vody.

Najlepšia solvátácia acetonitrilom z vybraných iónov sa predpokladá pre ión Pd²⁺ s voľnými d-orbitálmi, podobne ako u Ag⁺, kde sa stabilizácia v acetonitrile prejavila na ΔG_t⁰ a aj v SIMS spektrách¹. Štúdium Pd²⁺ iónu je významné z hľadiska jeho využiteľnosti pri syntézach vitamínov a hormónov, keďže je vhodným katalyzátorom.

Táto publikácia bola vytvorená realizáciou projektu „meta-QUTE: Centrum excelentnosti kvantových technológií“, na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja a tiež grantu APVV-0491-07.

LITERATÚRA

1. Cernusak, I., Aranyosiova, M., Vollarova, O., Velic D., Kirdajova O., Benko J.: *Int. J. Quant. Chem.* 109, 2365 (2009).

4P-10

COMPUTER SIMULATION OF Cu(II) EPR SPECTRA OF POWDERS, FLUID AND FROZEN SOLUTIONS

LUCIA HUSÁRIKOVÁ, ZUZANA REPICKÁ, LADISLAV MARTIŠKA, DUŠAN VALIGURA, MARIÁN VALKO, and MILAN MAZÚR*

*Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
milan.mazur@stuba.sk*

Traditionally, Cu(II) EPR spectra belong to the most frequently measured EPR spectra in our laboratory. In the case of solid samples with randomly oriented paramagnetic centers (polycrystalline samples, powders, glasses, frozen solutions) it is necessary to provide computer simulations of EPR spectra to obtain the relevant values of the spin hamiltonian parameters. The situation is more complicated when various paramagnetic centers are present in the same sample. Then a computer decomposition of the EPR spectra into individual subspectra is needed. When the solid samples are dissolved in non-viscous solutions, the paramagnetic centres are tumbling so rapidly that the anisotropic interactions are averaged. Then the EPR spectra can be characterised with isotropic values of spin hamiltonian parameters. However, when the tumbling is not sufficiently fast to completely average the anisotropic interactions, this incomplete averaging results into polynomial dependence of the EPR spectra linewidths.

This contribution presents an analysis of experimental Cu(II) EPR spectra of copper complexes with biologically active ligands by computer simulations. The following cases are discussed: (i) powder samples, with EPR spectra measured at room temperature and at 98 K, (ii) copper complexes dissolved in various non-viscous solutions, and their EPR spectra were collected at room temperature, and finally (iii) identical experimental situation with (ii), however, EPR spectra were measured in frozen solutions at 98 K. The illustrative Cu(II) EPR spectra of copper complexes were measured on Bruker EMX spectrometer. Original Bruker programs WinEPR¹ and SimFonia² were used for post-processing manipulations and simulations of EPR spectra.

In conclusion, using computer simulations, the hyperfine interactions of ^{63,65}Cu isotopes (I = 3/2) and superhyperfine interactions of ¹⁴N isotopes (I = 1) were studied. Obtained and simulated spectra are compared and discussed.

This work was supported by Science and Technology Assistance Agency under the contact No. APVV-0055-07 and by

Slovak Grant Agency for Science (VEGA 1/0018/09 and VEGA 1/0575/08).

REFERENCES

1. Thiele H., Etsling J., Such P., Hofer P.: WIN-EPR, Bruker Analytic GmbH, Germany 1992.
2. Weber R. T.: WIN-EPR SimFonia, EPR Division, Bruker Instruments Inc., Billerica, USA 1995.

4P-11

FLUORESCENČNÁ SPEKTROSKOPIA SYSTÉMU KUMARÍN/ β-CYKLODEXTRÍN/ MICELA

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

*^a Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, ^b Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava
eduardj1@azet.sk*

Naším cieľom bolo sledovať solvatačnú dynamiku vody v systéme kumarín/ β-cyklohextrín/ reverzná micela. Tieto systémy sme sledovali statickou a časovo rozlíšenou fluorescenčnou spektroskopiou. Ako fluorescenčnú sondu sme použili kumarín s označením C522, ktorého sumárny vzorec je C₁₄H₁₂NO₂F₃. Zaujímavou vlastnosťou β-cyklohextrínu je hydrofilný povrch a hydrofóbná kavita. V reverzných micelách bol povrchovo aktívnou AOT (1,4-bis(2-etylhexyl) sulfosukcinát sodný, polárnou fázou bola voda, nepolárnou fázou bol *n*-heptán. Množstvom pridávanej vody môžeme regulovať veľkosť micely¹.

Ako prvý systém bol meraný kumarín v *n*-heptáne. Emisné maximum sa nachádzalo pri 440 nm. Následne bol meraný aj supermolekulový komplex (kumarín/ β-cyklohextrín/ reverzná micela). Emisné maximá sa nachádzali pri 440 nm, čo predstavuje kumarín, ktorý bol solvatovaný *n*-heptánom a pri 520 nm, čo zodpovedá vlnovej dĺžke emisného maxima systému kumarín/ β-cyklohextrín. Micela s malým objemom vodnej fázy vykazuje vyššiu fluorescenčnú intenzitu pri 520 nm ako veľké micely. Tento intenzitný rozdiel môže byť spôsobený, že malé micely vytvoria komplex iba s jedným kumarínom, preto nenastáva samozhášanie. Ďalej bol nameraný aj systém kumarín/ reverzná micela. Namerané spektra boli takmer totožné. Preto je pravdepodobné, že kumarín sa nevytvoril supermolekulový komplex s β-cyklohextrínom, ale sa umiestnil na rozhraní polárnej a nepolárnej fázy v micelle. Tento predpoklad potvrdzujú a časovo rozlíšené fluorescenčné merania. Na rozhraní sa nachádza voda z nízkou permitivitou, preto sa čas solvatačnej relaxácie výrazne predlžuje. Kým vo voľnej vode je čas relaxácie nižší ako 1 ps¹ v našom systéme boli namerané časy rádo vo 10 ps.

Táto publikácia bola vytvorená realizáciou projektu „meta-QUTE: Centrum excelentnosti kvantových technológií“, na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja a tiež grantu APVV-0491-07.

LITERATÚRA

1. Hirai M., Kawai-Hirai R., Sanada M., Iwase H., Mitsuya S.: *J. Phys. Chem., B* 103, 9658 (1999).
2. Jimenez R., Fleming G. R., Kumar P. V., Maroncelli M.: *Nature* 369, 471 (1994).

4P-12

KOALESCENČNÍ ČAS U ELIPSOIDNÍCH
VISKÓZNÍCH ČÁSTIC

**JOSEF JÚZA, IVAN FORTELNÝ*, BOJAN DIMZOSKI
a MIROSLAV ŠLOUF**

*Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského
nám. 2, 162 06 Praha 6
fortelny@imc.cas.cz*

V dřívějších pracích byla studována koalescence (splývání) kulových částic viskozni kapaliny ve viskozním prostředí¹, v poslední práci² pak růst koaleskujících částic elipsoidního tvaru. Zde rozvádíme dílčí problém vlivu zploštění částic a vlastností materiálů na koalescenční čas.

Uvažujeme systém rotačních elipsoidů umístěných v mřížce. Jejich hlavní poloosa je $a = cR$, kde R je poloměr ekvivalentní koule. Růst kapek s časem t popisuje rovnice $dR/dt = R/3t_c$, v níž t_c označuje koalescenční čas. Za ten považujeme dobu poklesu střední vzdálenosti mezi povrchy sousedních částic $\langle h \rangle$ na kritickou hodnotu h_c . Střední vzdálenost anisometrické kapky od nejbližšího souseda je menší než pro kulové kapky. Její časový průběh je v modelu určen jednak van der Waalovými silami, jednak relaxací částic do kulového tvaru charakterizovanou relaxačním časem τ (cit.³⁻⁵). Rychlost změny lze popsat² rovnicí

$$\frac{d\langle h \rangle}{dt} = -v_f(A, \eta_d, \eta_m, R, h) + v_R(R, c_0, t, \tau(\eta_d, \eta_m, R, \varphi, \sigma))$$

v níž nezáporné v_f je rychlost přibližování středů částic a nezáporné v_R rychlost vzdalování povrchů relaxací tvaru, φ je objemový zlomek částic, A Hamakerova konstanta, η_d a η_m viskozity kapek a matrice, σ mezifázové napětí, c_0 počáteční c .

Průběh přibližování částic se mění s většinou charakteristik materiálů uniformně; vymyká se závislost na relaxačním čase (tím i na mezifázovém napětí), na objemovém zlomku a protaženosti kapek. Konkurence mezi příspěvkem relaxace tvaru a přitahování se kapek van der Waalovými silami vede pro kratší relaxační časy k nemonotónní závislosti vzdálenosti kapek na čase. Převáží-li na počátku být mírně relaxační člen, proces relaxace rychle převáží a přibližování se výrazně prodlouží. U reálných systémů částice zrelaxují do kulového tvaru dříve, než se stačí vliv jejich deformace projevit na koalescenčním procesu. Koalescenční čas roste poměrně výrazně s klesajícím relaxačním časem, nepřesáhne však čas pro kulové částice o stejném objemu a koncentraci, které však mají větší počáteční vzdálenost.

*Tato práce vznikla za podpory grantu GA AV ČR
IAA200500903.*

LITERATURA

1. Fortelný I., Živný A.: *Polymer* 39, 2669 (1998).
2. Fortelný I., Jůza J., Šlouf M.: *Polymer*, submitted 2010.
3. Zhang X., Davis R. H.: *J. Fluid. Mech.* 230, 479 (1991).
4. Tucker C. L., Moldenaers P.: *Annu. Rev. Fluid. Mech.* 34, 177 (2002).
5. Palieme J. F.: *Rheol. Acta* 29, 204 (1990).

4P-13

CHEMICKÉ PROJEVY PLAZMATU VYTVOŘENÉHO
NA POVRCHU MOLEKULÁRNÍCH LEDŮ PULZNÍM
VÝKONOVÝM LASEREM

**MICHAL KAMAS^{a,b,c}, DAGMAR NOVOTNÁ^c, EVA
TESAŘOVÁ^b, IRENA MATULKOVÁ^c, HANA
TURČIČOVÁ^a, JAROSLAV HUYNH^a, ONDŘEJ
NOVÁK^a, VIOLETTA SHESTIVSKÁ^c, MIROSLAV
POLÁŠEK^c, JAROSLAV CIHELKA^{a,c}, SVATOPLUK
CIVIŠ^c a LIBOR JUHA^{a*}**

*^a Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Na Slovance 2, 182 21 Praha 8, ^b KFMCH PFF UK v Praze, Hlavova 8, 128 40 Praha 2, ^c Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, v.v.i., Dolejškova 3, 2155/3, 182 23 Praha 8
juha@fzu.cz*

Chemické změny spojené s generací plazmatu pulzním laserovým svazkem fokusovaným do různých molekulárních soustav¹ jsou nyní studovány především jako efektivní způsob laboratorní simulace procesů o vysoké hustotě energie (blesky, vysokorychlostní dopady vesmírných těles) přirozeně probíhajících v prostředí různých planet, ať již v historickém nebo současném.

Výskyt molekulárních ledů na povrchu různých těles (většinou měsíců vzdálenějších planet) sluneční soustavy a jejich zastoupení v prachových částicích putujících mezihvězdným prostorem je číni, kromě homogenních plynů a aerosolů, předmětem astrobiologicky motivovaného laserového plazmochemického zkoumání².

V kryogenní kyvetě temperované vhodným chladicím médiem (např. kapalným dusíkem, ochlazeným ethanolem, atp.) jsme vytvořili ledy z kapalně vody, methanolu, formamidu, 1-methoxy-2-propanolu, 2-amino-1-butanolu a řady dalších modelových a zájmových sloučenin. Plazma je na povrchu ledu vytvářeno fokusovaným svazkem výkonového laserového systému SOFIA (vlnová délka: 1,3 μm ; energie a doba trvání laserového impulzu: 25 J ve 2 ns; podrobnosti viz cit.³) na intenzitách dosahujících úrovně až 10^{13} W cm^{-2} .

Optická emisní spektroskopie (OES) nám poskytuje informace o složení a parametrech laserového plazmatu. Chemická analýza produktů odčerpávaných z kyvety je prováděna pomocí plynové (GC) a kapalinové (HPLC) chromatografie. Popsané experimentální uspořádání a zmíněné metody nám umožní zjistit, které produkty vznikají z plazmového výtrysku a které následkem interakce laserového impulzu přímo v ledu, především působením rázové vlny.

Práce byla finančně podpořena granty MŠMT ČR (LC510, LC528 a ME10046), GAČR (P208/10/2302) a AV ČR (IAAX00100903).

LITERATURA

1. Juha L., Civiš S., v knize: *Lasers in Chemistry*, Vol. 2, kap. 31, s. 899. WILEY-VCH, Weinheim 2008.
2. Nna-Mvondo D., Khare B., Ishihara T., McKay C. P.: *Icarus* 194, 816 (2008).
3. Dostál J., Turcicova H., Kralikova B., Kral L., Huynh J.: *Appl. Phys.*, B 97, 687 (2009).

4P-14

MULTIREFERENCE R12 COUPLED CLUSTER THEORY

STANISLAV KEDŽUCH^a, ONDŘEJ DEMEL^b, JIŘÍ PITTNER^b, and JOZEF NOGA^{a,c}

^a *Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, 845 36 Bratislava*, ^b *J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, 182 23 Prague 8*, ^c *Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, 842 15 Bratislava*
 uachksta@savba.sk

In order to account for static correlation, the explicitly correlated coupled cluster theory based on the R12 Ansatz is formulated with respect to a multideterminantal reference using the Brillouin-Wigner approach. Though the latter avoids appearance of the intruder states, one pays for this desired feature by the loss of size extensivity. However, to some extent this can be remedied by an a posteriori correction. Since the BWCC method offers simplest form of amplitude equations among Hilbert space MRCC ones, we have chosen it as the first step when developing MRCC-R12 approaches. It is shown that introducing of the basis set incompleteness correction via an explicit inclusion of the correlation factor into the wave function, separately for each reference, is easily realizable. Test calculations for the H4 model using an R12 optimized 9s6p4d3f basis and its subsets with increasing highest angular momentum show the potential of the MR-CC-R12 approach. R12 results with mere s functions are very close to values obtained by using a conventional approach and the full 9s6p4d3f basis set.

This work has been supported by the Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic and Slovak Academy of Sciences (VEGA project No. 2/0079/09) and by the Slovak Research and Development Agency (APVV-20-018405), as well as by the Grant Agency of the Czech Republic (GACR Project No. 203/07/0070). Also, this work has benefitted from the Centers of Excellence program of the Slovak Academy of Sciences (COMCHEM, Contract no. II/1/2007).

4P-15

MODELOVÁNÍ CHEMICKO-TECHNOLOGICKÝCH PROCESŮ POMOCÍ SOFTWARE ANSYS-FLUENT

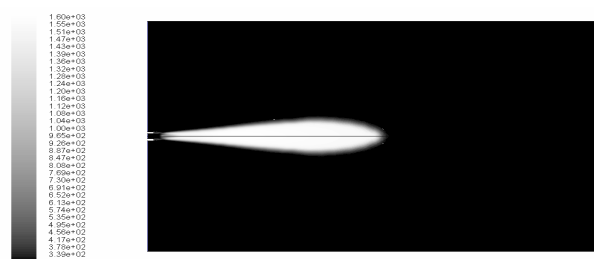
ERVÍN KOZUBEK^a, MILADA KOZUBKOVÁ^b, MARIAN BOJKO^b a STANISLAV BARTUSEK^a

^a *FMMI, VŠB - Technická univerzita*, ^b *FS, VŠB - Technická univerzita, tř. 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava-Poruba*
 ervin.kozubek@vsb.cz

Modelování různých technologických procesů, při kterých dochází k přenosu hmoty a energie včetně současně probíhající chemických reakcí je možno řešit numericky metodou konečných objemů pomocí komerčních software, např. Ansys-Fluent¹.

V příspěvku je prezentován problém hoření methanu dle chemické rovnice $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 = \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$ ve dvou variantách vstupu methanu do vzduchu (mezikružím a středovým prostorem) do válcového reaktoru o délce 1,8 a průměru 0,45 m. V laminárním režimu (dáno rychlostí proudění) je proces hoření popsán Navier-Stokesovými rovnicemi pomocí finite rate modelu a rychlost chemické reakce je řízena Arrheniovým vztahem (aktivační energií a předexponenciálním faktorem)². Při turbulentním proudění je použit standardní nebo RNG $k - \epsilon$ model turbulence a rychlost reakce závisí na turbulentních veličinách, tj. rychlosti disipace turbulentní kinetické energie (eddy-dissipation model). Výše popsané postupy jsou základem výpočtů při změně parametrů proudění a chemické reakce.

Výsledky je možno znázornit barevnými konturami koncentrace reaktantů a produktů, hustoty, rychlosti reakce, rychlosti proudění reagujících plynů, teploty atd. (obr. 1).



Obr. 1. Rozložení teplot v plamenu methanu (300–1600 K)

Závěrem lze konstatovat, že uvedenou metodou lze modelovat i podstatně složitější chemicko-technologické procesy, jako je spalování vyšších uhlovodíků, uhlého prachu a modelování složitých pyrolyzních procesů včetně probíhající chemických reakcí a pohybu materiálu.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 105/08/1414.

LITERATURA

1. Fluent 12 - User's guide, Fluent Inc. VŠB-TU, Ostrava 2007. <URL: <http://spc.vsb.cz/portal/cz/documentation/manual/>>
2. Dobrego K. V., Gnesdilov N. N., Lee S. H., Choi H. K.: *Chem. Eng. J.* 144, 83 (2008).

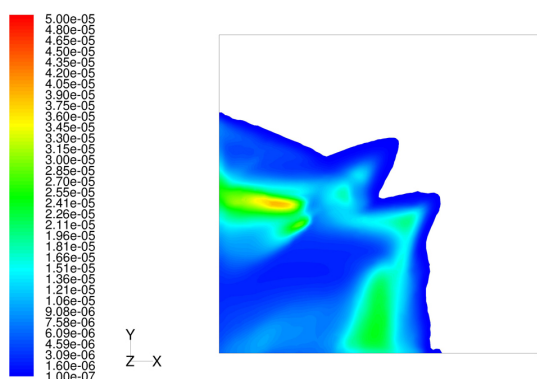
4P-16

DYNAMICKÉ MODELOVÁNÍ DISTRIBUCE
POLUTANTŮ S VYUŽITÍM LETOVÝCH MĚŘENÍPAVEL PLATOŠ^{a*}, STANISLAV BARTUSEK^a,
ERVÍN KOZUBEK^a a MILADA KOZUBKOVÁ^b^a FMMI, VŠB - Technická univerzita, ^b FS, VŠB - Technická
univerzita, tř. 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava-Poruba
pavel.platos@vsb.cz

Dynamický model šíření polutantu NO byl aplikován na území v oblasti sídla společnosti ArcelorMittal Ostrava a.s. (100 km²), kde bylo dne 29. 4. 2008 prováděno letové měření koncentrací NO, NO₂, NO_x a SO₂. Základní parametry modelu: třída stability: indiferentní teplotní zvrstvení, rychlost větru u_{10} : 5 m s⁻¹, teplota t_0 : 15 °C, atmosférický tlak p_0 : 101 325 Pa. Dynamický model neuvvažoval interakci NO s okolím.

Pro vytvoření geometrie terénu se použilo propojení prostředků GIS s programem GAMBIT. Výpočet šíření polutantu byl proveden v programu FLUENT 6.3. (cit.^{1,2}). Testováním se osvědčila výpočetní síť tvořená buňkami šestistěnu. Z hlediska udržení stratifikace rychlosti, měrné hmotnosti a statické teploty a absolutního tlaku se nejlépe osvědčil statistický turbulentní model RNG k-ε.

Vizualizace výsledků výpočtů byla provedena programem FLUENT (obr. 1).



Obr. 1. Hmotnostní zlomek NO ve výšce 100 m nad terénem

Popisovanou metodikou lze dynamicky modelovat havarijní úniky škodlivých látek v oblasti chemického a metalurgického průmyslu.

LITERATURA

1. Kozubková M.: *Numerické modelování proudění, FLUENT I*. VŠB – TU Ostrava, Ostrava 2008.
2. Fluent 6.3 - User's guide, Fluent Inc. VŠB-TU, Ostrava 2006. <URL: <http://spc.vsb.cz/portal/cz/documentation/manual/>>.

4P-17

VLIV DEMETHANOLIZACE NA SLOŽENÍ REAKČNÍ
SMĚSI PO VÝROBĚ METHYLESTERŮ
Z ŘEPKOVÉHO OLEJEJIŘÍ KWIECIEN, FRANTIŠEK SKOPAL a MARTIN
HÁJEKKatedra fyzikální chemie, Fakulta chemicko-technologická,
Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
jiri.kwiecien@post.cz

Bionafta jako alternativní palivo pro vznětové motory se nejčastěji vyrábí katalytickou methanolýzou rostlinných olejů, případně živočišných tuků. Jelikož se jedná o reakci rovnovážnou, používá se k posunu rovnováhy a zvýšení reakční rychlosti přebytek reakčního činidla, methanolu. Aby reakcí získaný produkt byl uznán jako palivo, musí splňovat požadavky stanovené normou EN 14214:2003, v které je mimo jiné zakotveno maximální množství obsaženého methanolu na nízké úrovni 0,2 hm.%. Tento požadavek může být splněn pouze za předpokladu odstranění přítomného přebyteku, například destilací. Protože je reakce vratná, je nutné k udržení dosažené konverze deaktivovat přítomný katalyzátor v reakční směsi, v našem případě jím je KOH. Námí používaná patentovaná technologie¹ neutralizuje KOH plynným CO₂ na KHCO₃ a K₂CO₃. Avšak i K₂CO₃ je v literatuře také popisován jako možný katalyzátor transesterifikačních reakcí² a budí tím skepsi vůči této technologii v očích odborníků.

Byla proto provedena studie zabývající se účinkem jednak původního katalyzátoru, tedy KOH a potenciálního katalyzátoru K₂CO₃ na demethanolizaci v používané technologii. Byly sledovány časové průběhy změn koncentrací reakčních produktů a meziproductů a množství přítomného katalyzátoru. Množství methanolu bylo charakterizováno parametrem bodu vzplanutí, který je s obsahem methanolu záměnný.

Výsledkem je fakt, že i K₂CO₃ je schopný katalyzovat transesterifikační reakci. Jeho koncentrace však narůstá až s dobou demethanolizace. V okamžiku, kdy se jeho katalytické vlastnosti projeví, splňuje již produkt parametr bodu vzplanutí normou požadovanou hodnotu.

Autoři děkují za finanční podporu ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy v rámci výzkumného projektu MSM 0021627502.

LITERATURA

1. Skopal F., Komers K., Machek J., Koropecký I.: Způsob výroby bionafty z rostlinných olejů, zejména z řepkového oleje. Patent č. CZ 289417, 20.11.2001.
2. Arzamendi G., Arguiñarena E., Campo I., Zabala S., Gandia L. M.: *Catal. Today* 133-135, 305 (2008).

4P-18

DFT A EMPIRICKÉ MODELY INTERAKCÍ V MONTE CARLO SIMULACÍCH KLASTRŮ MOLEKUL VODY

LENKA LIČMANOVÁ^a, ALEŠ VÍTEK^a, IVANA PAIDAROVÁ^b a RENÉ KALUS^a

^a Ostravská univerzita v Ostravě, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyziky, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, ^b Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8
lenkalicmanova@seznam.cz

Klastry molekul vody hrají velmi důležitou roli v mnoha oblastech vědy a v současnosti patří k velmi intenzivně zkoumaným systémům. Ukázalo se, že jednoduché empirické potenciály, běžně používané v mnoha teoretických výpočtech a částicových simulacích, mohou selhat a pouze modelování mezimolekulových interakcí založené na kvantově-chemických výpočtech elektronové struktury systému může přinést realistická data. Kvantově-chemické metody jsou díky své enormní časové náročnosti obvykle využívány pouze pro výpočet energie jedné konkrétní konfigurace, pro strukturní optimalizace nebo pro vibrační analýzu systému (nejčastěji v harmonické aproximaci). Doposud nebyly použity v termodynamických simulacích, které vyžadují velké množství opakovaných výpočtů energie v různých konfiguracích (řádově statisíce až milióny).

Naše práce je zaměřena na simulace klastřů vody metodou Monte Carlo s upravenými empirickými modely interakcí, které jsou kombinovány s kvantově-chemickými výpočty založenými na metodě funkcionálu hustoty prostřednictvím algoritmu *Boltzmann-reweighting*¹, s cílem získat pro tyto klastry termodynamická data v kvantově-chemické přesnosti. Za tímto účelem jsme vyvinuli novou metodu kombinující algoritmy *Boltzmann-reweighting* a *multiple histogram*² s metodou Monte Carlo ve variantě *parallel-tempering*³, která umožňuje snížit celkový počet kvantově-chemických výpočtů nutných pro dosažení konvergence na přijatelné množství. Použití této metody ilustrujeme na speciálních příkladech čtyř- a šestimolekulového klastřů vody, stručně analyzujeme i nutnost použití empirických korekcí pro zahrnutí van der Waalových interakcí^{4,5}.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA AV ČR IAA-401870702. Využity byly prostředky Superpočítačového centra VŠB-TU Ostrava, Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR a Centra numericky náročných výpočtů OU.

LITERATURA

1. Hansen J. P., MacDonald I. R.: *Theory of Simple Liquids*. Academic, London 1986.
2. Tsai C. J., Jordan K. D.: *J. Chem. Phys.* 99, 6957 (1993).
3. Zeyer C. J., in: *Computing Science and Statistics: Proceedings of the 23rd Symposium on the Interface*, American Statistical Association, New York, 1991.
4. Silvestrelli P. L.: *Chem. Phys. Lett.* 475 (2009).
5. Grimme S.: *J. Comp. Chem.* 27, 1787 (2006).

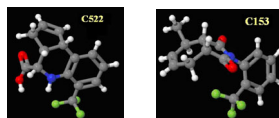
4P-19

FLUORESCENCIA KUMARÍNU V PROSTŘEDÍ HYDRATOVANÝCH SOLÍ NaCl A LiCl

MARCEL LOFAJ^a, IGNÁC BUGÁR^b a DUŠAN VELIČ^{a,b}

^a Univerzita Komenského, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikální a teoretické chemie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, ^b Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, Bratislava
lofaj@fns.uniba.sk

Kumaríny sa bežne využívajú ako fluorescenčné farbiva, ktoré sú potrebné pre rôzne typy anorganických, či organických štúdií fotoluminescenčných vplyvov sústavy. Podstatou merania emisných spektier, ktoré boli namerané časovo rozlíšenou fluorescenciou, je snaha o objasnenie dynamiky solvatacie v systéme kumarínu ($C522$ o $c = 1 \cdot 10^{-5} \text{ mol dm}^{-3}$, $C153$ o $c = 1 \cdot 10^{-5} \text{ mol dm}^{-3}$) – kovové ióny alkalických zemín (LiCl, NaCl) – rozpúšťadlo (H_2O).



Okolo hydratovaných iónov dochádza k vzniku hydratačného obalu. Teda ide o elektrostatické pôsobenie dipólov, ktoré sú priestorovo usporiadané vo vodnom roztoku. Hydratačné obaly stabilizujú hydratované ióny a nedochádza k spätnému zlučovaniu. Tento jav má pozitívny vplyv na zhášanie, čo spôsobuje výrazný pokles kvantového výťažku a teda má celkový negatívny dopad na fluorescenciu skúmanej sústavy. O tomto fakte nás presvedčili namerané hodnoty excitačných a emisných spektier z merania jednotlivých typov v uvedených systémoch pri zadefinovanej koncentračnej škále (od 1 mol dm^{-3} až po $1 \cdot 10^{-9} \text{ mol dm}^{-3}$). Hodnota maximálnej intenzity kumarínu $C153$ ($1 \cdot 10^{-5} \text{ mol dm}^{-3}$) pri excitačnom spektre je $I_{\text{max}} 243228,06 \text{ cps}$, ktorá po pridaní roztoku NaCl ($1 \cdot 10^{-1} \text{ mol dm}^{-3}$) a následnom zmiešaní v pomere 1:1 sa maximálna meraná intenzita emisného spektra viditeľne znížila na hodnotu $I_{\text{max}} 206473,08 \text{ cps}$. Kontinuálne klesanie maximálnej intenzity sme namerali aj pri roztoku NaCl ($1 \cdot 10^{-8} \text{ mol dm}^{-3}$), kden je $I_{\text{max}} 151949,9 \text{ cps}$. Totožné správanie sme zaznamenali aj pri nameranom emisnom spektre, ktorého hodnota maximálnej intenzity kumarínu $C153$ ($1 \cdot 10^{-5} \text{ mol dm}^{-3}$) je $I_{\text{max}} 633089,94 \text{ cps}$. Postupovali sme rovnakým spôsobom aj pri pridaní roztoku NaCl ($1 \cdot 10^{-1} \text{ mol dm}^{-3}$), kde som nameril $I_{\text{max}} 576135,06 \text{ cps}$ a sledoval kontinuálne klesanie pri znižovaní koncentrácie roztokov solí. Pre roztok NaCl ($1 \cdot 10^{-9} \text{ mol dm}^{-3}$), je v emisnom spektre $I_{\text{max}} 473559,4 \text{ cps}$.

LITERATÚRA

1. Arzhanster S., Ito N., Hertz M., Maroncelli M.: *Chem. Phys. Lett.* 381, 278 (2003).
2. Chapman F.C., Maroncelli M.: *J. Phys. Chem.* 95, 23 (1991).
3. Zitan M., Stoce V., Janek M., Bugár I., Bdzoch J., Palaszegi T., Link G., Velic D.: *Langmuir* 25, 6800 (2009).

4P-20

IN SITU ESR AND UV-VIS SPECTROELECTRO-CHEMISTRY OF DIKETO-PYRROLO-PYRROLE DERIVATIVES

KAROL LUŠPAI^{a*}, PETER RAPTA^a, ANDREA VARGOVÁ^a, STANISLAV LUŇÁK Jr.^b, JAN VYŇUCHAL^d, LUKÁŠ HAVEL^b, RADIM HRDINA^b, MARTIN VALA^c, and MARTIN WEITER^c

^a Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ^b Department of Technology of Organic Compounds, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice, ^c Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118, 612 00 Brno, ^d Research Institute of Organic Syntheses, Rybitví 296, 533 54 Rybitví
karol.luspai@stuba.sk

Derivatives of 3,6-diphenyl-2,5-dihydro-pyrrolo[3,4-c]pyrrole-1,4-dione exhibit outstanding chemical, heat, light, and weather fastness. Their physical properties are exceptional in view of the low molecular weight relative to pigment standards. Due to the interesting properties, there is wide range of possible applications covering pigments, charge generating materials for laser printers and information storage systems, solid-state dye lasers or gas detectors^{1,2}. During oxidation of new synthesized diketo-pyrrolo-pyrrole (DPP) derivatives the corresponding ion radicals were formed in the region of the first oxidation peak^{3,4}. The unpaired spin density is delocalized along the phenyl-pyrrole-pyrrole-phenyl axis. Because of delocalized spin, EPR spectra exhibit singlet pattern without a hyperfine structure. First oxidation potential significantly depends on the substitution of the phenyl ring, but only partially on the substitution of hydrogen atoms in –NH– groups. However, the substitution of these hydrogens can significantly influence the solubility of these compounds in non-polar organic solvents what has strong impact to the applications of these new materials in optoelectronics (deposition of thin films from solutions). The substitution of hydrogen atoms in –NH– groups with bulky substituent probably leads also to the improvement of the ion radical stability. In this case protonation and deprotonation reactions as well as dimerization processes are suppressed.

This work was supported by of SGA VEGA by the Slovak Scientific Grant Agency (Project No. 1/0018/09).

REFERENCES

1. Luňák S. Jr., Vyňuchal J., Vala M., Havel L., Hrdina R.: *Dyes Pigments* 82, 102 (2009).
2. Vala M., Weiter M., Vyňuchal J., Toman P., Luňák S. Jr.: *J. Fluoresc.* 18, 1181 (2008).
3. Lušpai K.: *Thesis*. Slovak University of Technology, Bratislava 2009.
4. Vargová A.: *Ph.D. Thesis*. Slovak University of Technology, Bratislava 2009.

4P-21

CHARACTERIZATION OF Ni AND Mo SPECIES IN NiMo-ALUMINA CATALYSTS FOR HYDRODEOXYGENATION OF RAPESEED OIL

PETER PRIECEL^{a*}, LIBOR ČAPEK^a, and DAVID KUBIČKA^b

^a University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice

^b Research Institute for Inorganic Chemistry, Záluží 1, Litvínov
peter.priecel@student.upce.cz

Negative prognoses for availability of fossil fuels and global warming problems place increasing emphasis upon developing and using biofuels. Hydrodeoxygenation (HDO) is a possible way to produce diesel-like fuels from vegetable oils. It offers an alternative to the transesterification producing FAME type biodiesel. Dual NiMo, CoMo or NiW supported on γ -alumina, primarily used as hydrodesulfurization catalysts, are typical catalysts proposed to be employed in hydrodeoxygenation¹. Still, there is no final agreement on the description of the active species in these catalysts. Therefore, further attention is needed upon characterization of these catalysts.

The aim of this work was to contribute to the understanding of the description of the active Ni and Mo species in the NiMo-alumina catalysts. The attention was focused on the characterization of these catalysts and on the correlation between structural analysis of Ni and Mo species and activity of NiMo-alumina catalysts in the hydrodeoxygenation of rapeseed oil.

The structural analysis of the catalysts was performed by: X-Ray Diffraction to identify crystallinity of the catalysts phases, X-Ray Fluorescence Spectrometry to determine active phase concentration, Scanning Electron Microscopy with EDX attachment to detect active phase surface dispersion, N₂-physisorption experiments to measure the specific surface area of the catalysts, UV-Vis Diffuse Reflectance Spectroscopy and H₂ Temperature Programmed Reduction to ascertain the changes in Ni and Mo distribution.

HDO reaction was performed under 3.5 MPa of H₂ pressure, in the 240–280 °C temperature range and 1–6 h⁻¹ WHSV range. Desired products of the reaction were C₁₇ and C₁₈ alkanes and oxygenated hydrocarbons were observed as intermediates. All reaction products were analyzed by Shimadzu GC-2010 gas chromatograph equipped with AOC-20i on-column auto injector.

The authors gratefully thank to the Ministry of Industry and Trade of the Czech Republic (project FT-TA3/074) and Ministry of Education, Youth and Sports (No. MSM 0021627501).

REFERENCE

1. Furimsky E., Massoth F.E.: *Appl. Catal.* 52, 381 (1999).

4P-22
DEGRADÁCIA CHOLESTEROLU
NA FOTOKATALYZÁTORE TiO₂: SIMS – ŠTÚDIA

**MICHAL PROCHÁZKA^{*a}, MONIKA STUPAVSKÁ^{a,b},
 MONIKA ARANYOSIOVÁ^{a,b} 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, 812 19 Bratislava
 missoprochazka@gmail.com

Oxid titaničitý TiO₂ je polovodičový fotokatalyzátor, na ktorého povrchu pôsobením UV svetla, s vlnovou dĺžkou menej ako 387,5 nm, vznikajú z naadsorbovanej vody a kyselika veľmi reaktívne častice, ·OH radikály a superkyslík ·O₂⁻. Tieto radikály následne zabezpečujú rozkladanie organických molekúl na povrchu. V našej práci sme sledovali degradáciu cholesterolu. Tento rozpadový mechanizmus sme sledovali hmotnostným spektrometrom sekundárnych iónov – SIMS. Táto technika je vhodná práve na analýzu zloženia povrchov tuhých materiálov.

V práci sme používali vzorky cholesterolu nanosené na sklenom substráte, na sklenom substráte s tenkým filmom nanokryštalického TiO₂ bez ožiarenia, s ožiarением 1 hodinu a 8 hodín. Rozdiely v spektrách cholesterolu nanosenom na tenkom filme TiO₂ pred a po ožiarení UV svetlom boli pozorované hlavne na intenzite signálu celej molekuly a v zmenách fragmentačného radu molekuly. Kým pri neožiarenom povrchu bolo množstvo nedegradovaného cholesterolu väčšie, po 8 hod. ožiarení sa zmenšilo na polovicu. To je možné vysvetliť reakciami s reaktívnymi časticami, ktoré rozkladajú najmä alifatický reťazec cholesterolu. Tento rozklad sme sledovali v zmenách fragmentačného radu, kde sme videli zvýšenú intenzitu niektorých iónov ako [M-C₅H₁₀]⁺, [M-C₇H₁₄]⁺ a hlavne [M-C₇H₁₄OH]⁺, ktorý bol výrazný aj po 8 h ožiarení. Pri dostatočne dlhom ožarovaní by sa celá molekula mala rozložiť na najjednoduchšie látky, ako sú základné uhľovodíky, CO₂ a H₂O.

Táto publikácia bola vytvorená realizáciou projektu „meta-QUTE: Centrum excelentnosti kvantových technológií“, na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja a tiež grantu APVV-0491-07.

LITERATURA

1. Fujishima A., Zhang X.: Cr. Chim. 9, 750 (2006).
2. Gnaser H., Orendorz A., Ziegler C., Rowlett E., Bock W.: Appl. Surf. Sci. 252, 6996 (2006).
3. Meissner M.: *Diplomová práca*. Západočeská univerzita v Plzni, Plzeň 2007.
4. Aranyosiová M.: ChemZi 2/2, 52 (2006).

4P-23
SPECIATION OF Fe(III) IN Fe-ZEOLITES

LUCIE SMOLÁKOVÁ^{*a}, TOMÁŠ GRYGAR^b, LIBOR ČAPEK^a, and RADEK ZBOŘIL^c

^a University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice,
^b Institute of Inorganic Chemistry ASCR, v.v.i., 250 68 Řež,
^c Palacký University, 771 46 Olomouc
 luciesmolakova@seznam.cz

Fe(III) modified aluminosilicates belong to arsenal of chemical materials of the last two decades. Thus, the analysis of Fe species in Fe modified aluminosilicates is a significant problem that solution can bring a light to a lot of catalytic reactions.

This work contributed to the analysis of the synthesis specimens. Structure and crystallinity of zeolites were verified by X-ray diffraction and scanning electron microscopy. The Fe-zeolites catalysts were analysed by XRF to get total Fe and by DR UV-Vis spectroscopy, voltammetry of microparticles, ⁵⁷Fe Mössbauer spectroscopy, EPR and FTIR to describe main Fe species. Aim was to specify the number of species present in the catalysts. In order to determine the various activities of the individual Fe species, the catalysts were tested in the oxidative dehydrogenation (ODH) of ethane to ethene by nitrous oxide as an oxidant agent at 350 °C.

Fe-FER and Fe-MFI zeolite were prepared by four impregnation methods (by conventional Fe ion exchange using (i) ferric nitrate or (ii) ferrous sulphate, impregnation of (iii) ferric acetylacetonate in ethanol or (iv) anhydrous ferric chloride in acetyl acetone) followed by calcination in the temperature range 500–800 °C. The ODH reaction was carried out in the mixture consisted of 8.0 vol. % C₂H₆, 10 vol. % N₂O and a rest of He was kept at a total flow of 100 ml min⁻¹ (W/F 0.12 g_{cat} s ml⁻¹). Concentrations of CO₂, CO, O₂, and hydrocarbons were provided by an on-line connected gas chromatograph Shimadzu GC 17A.

The prepared catalysts achieved a different distribution of iron species: (i) isolated monomeric units with octahedral or tetrahedral coordination, (ii) oligonuclear complexes or oxidic nanoclusters and (iii) Fe(III) oxides. Monomeric or dimeric Fe ions had only UV absorption bands and some of them evolved voltammetrically identifiable [Fe(OH)_x]^{3-x} ions in contact with acetic acid-sodium acetate buffer. Fe oxidic nanoclusters characterised by UV band at about 28 000 cm⁻¹ are not detected by voltammetry. The presence of ferrihydrite was found in non-calcined iron-modified zeolites, while amorphous, nanocrystalline and crystalline Fe (III) oxides were distinguished in calcined catalysts.

The species with best selectivity were monomeric to low-condensed oligomeric Fe(III) ions. Ferric oxides were indifferent in the catalytic reaction and did not decrease reaction selectivity.

The authors gratefully thank to the Grant Agency of Czech Republic for financial support (Projects No. P106/10/0196 and No. 203-08/H032) and Ministry of Education Youth and Sports (No. MSM0021627501).

4P-24

IONIZAČNÍ POTENCIÁLY KLASTRŮ VZÁCNÝCH PLYNŮ

PAVLA SVRČKOVÁ, ALEŠ VÍTEK a RENÉ KALUS

Ostravská univerzita v Ostravě, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyziky, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava
pavla.svrckova@centrum.cz

Vlastnosti a interakce vzácných plynů jsou oproti klastřům ostatních prvků odlišné, jsou jednodušší. Interakce mezi atomy těchto prvků poměrně snadno popsat s vysokou přesností. Této jednoduchosti využíváme při teoretickém studiu těchto klastřů.

Klastry můžeme zkoumat teoreticky i experimentálně. Teoretický výzkum se provádí obvykle pomocí počítačových simulací. Existují dvě základní simulační metody využívané při studiu klastřů, metoda molekulární dynamiky a metoda Monte Carlo. V této práci byly veškeré výsledky získány metodou "parallel-tempering" Monte Carlo¹. Základní charakteristikou získávanou z experimentů založených na srážkové ionizaci elektrony je pak tzv. "ion appearance energy", tj. minimální energie dopadajících elektronů nutná k ionizaci neutrálního klastru, která je vždy větší nebo rovna adiabatickému ionizačnímu potenciálu, a předpokládáme, že bude při ionizaci urychlenými elektrony i větší nebo rovna vertikálnímu ionizačnímu potenciálu. Experimenty provedené Olofem Echtem a spol.² pro klastry helia a argonu ale naznačují, že za jistých okolností můž být "ion appearance energy" menší než vertikální ionizační limita. Pro velikosti klastřů menší než 10 atomů byly experimentální hodnoty menší než teoretické hodnoty vertikálního ionizačního potenciálu jak pro helium, tak i pro argon. V současnosti je možné řešení tohoto jevu otevřeným problémem.

V této práci prověřujeme hypotézu, že se jedná o projev termálních excitací v „experimentálních“ klastrech. Naším cílem je nalezení teplotních závislostí vertikálních ionizačních potenciálů prostřednictvím simulací metodou "parallel-tempering" Monte Carlo. Toto provádíme pro velikosti od 4 do 19 atomů v klastru při použití čtyř interakčních modelů, kdy k nejjednoduššímu modelu "diatomics-in-molecule" postupně přidáváme spin-orbitální interakci, trojčásticové interakce indukovaných dipólů a trojčásticové disperzní interakce.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury AV ČR, grant IAA401870702. Využity byly prostředky Centra numericky náročných výpočtů OU a Superpočítačového centra VŠB-TU Ostrava.

LITERATURA

1. Swendsen R. H., Wang J. S.: Phys. Rev. Lett. 57, 2607 (1986).
2. Echt O., Fiegele T., Rummele M.: J. Chem. Phys. 123, 084313 (2005).

4P-25

DYNAMIKA FLUORESCENCIE TENKÝCH FILMOV OLIGOTIOFÉNOV A JEJ ZÁVISLOST OD MORFOLÓGIE

JÁN ŠEPELÁK^a, IGNÁC BUGÁR^b, DANIEL HAŠKO^b, GABRIEL ČÍK^c, DUŠAN LORENC^{b,d} a DUŠAN VELIČ^{a,b}

^a Univerzita Komenského, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava 4, ^b Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava 4, ^c Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ^d Vienna University of Technology, Wien
sepelak@fns.uniba.sk

Oligo a polytiofény sú lacnejšou alternatívou polovodičov, veľký záujem o nich pramení z ich potenciálneho využitia v zariadeniach ako sú svetlo emitujúce diódy, fotovoltaické zariadenia¹, solárne články a iné elektronické zariadenia, kde je dôležitá vysoká vodivosť, prenos náboja a environmentálna stabilita². Skúmaný blokovaný kopolymér je veľmi dobre rozpustný v bežných organických rozpúšťadlách, v tuhom stave vytvára doposiaľ neobjasnené štruktúrne organizované klastry, v závislosti od procesu deponovania vzorky.

Práca sa zaoberá charakterizáciou oligomérnych reťazcov tioféno v kvapalnej a tuhej fáze predovšetkým pomocou ultra-rýchlej časovo-rozlišenej laserovej spektroskopie, statickej fluorescence a atómovej silovej mikroskopie.

Pozornosť sa upiera na prípravu tuhých filmov metódami deponovania na SiO₂ a následného odparenia rozpúšťadla, metódou spin-coating, čo sleduje súčasný trend využitia týchto organických polovodičov vo forme tenkých filmov, dokonca monovrstiev, hlavne pre ich elektroluminiscenčné a fotoluminiscenčné vlastnosti. Časovo-rozlišené spektrá boli merané v rozsahu 490–600 nm, v rozsahu 20 ps, pričom relaxačné časy τ oligotiofénu sa pohybovali v rozmedzí 5–10 ps. Analýzou ultrarýchlych procesov prebiehajúcich v rámci a medzi reťazcami molekuly oligotiofénu a následnou charakterizáciou morfológie tuhého filmu je možné optimalizovať proces prípravy, rozlíšiť prechody elektrón-dierového páru, objasniť zháňajúce efekty fotoluminiscencie resp. potvrdiť schopnosť týchto látok samousparadúvať sa v tuhom stave.

Táto publikácia bola vytvorená realizáciou projektu "meta-QUTE: Centrum excelentnosti kvantových technológií", na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja a tiež grantu APVV-0491-07.

LITERATÚRA

1. Harrison M. G., Friend R. H.: Electronic Materials: The Oligomer Approach (Mullen K., Wegner G., ed.), pp. 515–558. Wiley-VCH, Weinheim 1998.
2. Allard D., Allard S., Brehmer M., Conrad L., Zentel R., Stromberg C., Schultze J.W.: Electrochim. Acta 48, 3137 (2003).

4P-26

**APLIKACE DOSY NMR SPEKTROSKOPIE
NA STUDIUM HYDRODYNAMICKÉHO CHOVÁNÍ
NATIVNÍHO A MODIFIKOVANÉHO
HYALURONANU**

**DANIELA ŠMEJKALOVÁ^{*}, MARTINA
HERMANNOVÁ, TEREZA EHLOVÁ a VLADIMÍR
VELEBNÝ**

*Contipro C, Dolní Dobrouč 401, 561 02 Dolní Dobrouč
smejkalova@centrum.cz*

Hyaluronan (HA) je vysoce hydratovaný polyanion, skládající se z opakujících se disacharidových jednotek – kyseliny D-glukuronové a N-acetyl-D-glukosaminu. HA tvoří jednu z hlavních složek extracelulární matrix u obratlovců a kromě pojivových, epiteliálních a nervových tkání je rovněž součástí očního sklivce, kůže a synoviální tekutiny. Transport a biochemické vlastnosti tkání jsou výrazně ovlivněny hydrodynamickými vlastnostmi HA^{1,2}.

Hydrodynamické chování HA v nativní a modifikované formě bylo studováno pomocí DOSY (Diffusion Ordred Spectroscopy) NMR spektroskopie. Difúzní koeficienty byly porovnávány jak ve vodném roztoku tak v pufovaném prostředí o definovaném pH (pH 7,5) a iontové síle ($I = 0,1$ M). V případě nízkomolekulárního HA (10–70 kDa) bylo zjištěno, že s rostoucí iontovou silou dochází k výrazné kontrakci molekulární domény HA. Podobný efekt byl zaznamenán i při modifikaci COOH skupiny kyseliny D-glukuronové funkční skupinou, která se nepodílí na tvorbě H vazeb. Opačný případ – molekulární expanze – nastal při acylaci HA v poloze 6 na N-acetyl-D-glukosaminu. Zvětšení hydrodynamického objemu HA řetězců bylo vysvětleno přidavnou stabilizací HA hydrofóbními interakcemi, které se vytvářely mezi nepolárními alkylovými řetězci. Přítomnost takovýchto hydrofóbních interakcí mezi polysacharidovými řetězci v nemodifikovaném HA nebyla detegována.

LITERATURA

1. Laurent T. C., v knize: *Interstitial, Connective Tissue and Lymphatics*, kap. 1, s. 1-12. Portland Press, London 1998.
2. Lapcik L. Jr., Lapcik L., De Smedt S., Demeester J., Chabracek P.: *Chem. Rev.* 98, 2663 (1998).

4P-27

**FLUORESCENCIA SYSTÉMOV KUMARÍN C153/
β-CYKLODEXTRÍN, KUMARÍN C153/SILYLOVANÝ
β-CYKLODEXTRÍN a KUMARÍN C153/TIOLOVANÝ
β-CYKLODEXTRÍN**

**MARIANNA TRENČANOVÁ^a, EDUARD JÁNÉ^a
a DUŠAN VELIČ^{a,b}**

*^a Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, 845 45 Bratislava, ^b Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava
trecanka@gmail.com*

Cieľom našej práce bolo zistiť, či modifikácia cyklodextrínu vo forme Heptakis(6-*O*-*t*-butyldimetylsilyl)-2,3-di-*O*-acetyl)-β-cyklodextrín alebo 6-deoxy-6-monothio-β-cyklodextrín ovplyvní tvorbu supramolekulových komplexov medzi kumarínom a cyklodextrínmi. Tento vplyv bol dokumentovaný fluorescenčnými spektrami. Motiváciou je v budúcnosti z daných cyklodextrínov vytvoriť povrchové supramolekulové štruktúry.

Kumarín C153 je organická látka so schopnosťou fluorescencie v dôsledku konjugovaných násobných väzieb a pevného skeletu molekuly³. Cyklodextríny sú sacharidy zložené zo 6 až 8 glukózových jednotiek kužeľovitého tvaru s hydrofílnym povrchom molekuly a hydrofóbnou kavitou. Tu bol použitý β-cyklodextrín, ktorý obsahuje 7 glukózových jednotiek a jeho modifikácie: Heptakis (6-*O*-*t*-butyldimetylsilyl)-2,3-di-*O*-acetyl)-β-cyklodextrín, nazývaný Silylovaný β-cyklodextrín a 6-deoxy-6-monothio-β-cyklodextrín, nazývaný Tiolovaný β-cyklodextrín⁴.

Fluorescencia kumarínu 153 bola meraná vo vodných roztokoch troch cyklodextrínov, β-cyklodextrín vlnová dĺžka maximá fluorescencie 540 nm. Silylovaný β-cyklodextrín vlnová dĺžka maximá fluorescencie je 520 nm. Tiolovaný β-cyklodextrín má dve maximá 480 nm a 535 nm. Rozdiely v maximách vlnových dĺžok jasne dokumentujú solvatačné podmienky pre kumarín C153 v závislosti od modifikácie cyklodextrínu.

Táto publikácia bola vytvorená realizáciou projektu „meta-QUTE: Centrum excelentnosti kvantových technológií“, na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja a tiež grantu APVV-0491-07.

LITERATURA

1. Lakowicz R. J. v knize: *Principles of Fluorescence Spectroscopy*, s. 25. Kluwer Academic Plenum publishers, New York 1995.
2. Moore J. H., Spencer N. D.: *Encyclopedia of Chemical Physics and Physical Chemistry*. Institute of Physics, 2001.
3. Atkins P. W.: *Fyzikálna chémia*. STU Bratislava, Bratislava 1999.
4. Sen P., Roy D., Mondal S. K., Sahu K., Ghosh S., Bhattacharyya K.: *J. F. Chem.*, A 109, 9716 (2005).

4P-28

ELECTRIC AND SPECTROSCOPIC PROPERTIES OF LOW-LYING EXCITED STATES OF ACETONE

LUKÁŠ F. PAŠTEKA^a and MIROSLAV URBAN^{a,b*}

^a Department of Physical and Theoretical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, ^b Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Materials Science and Technology, Institute of Materials Science, J. Bottu 25, 917 24 Trnava urban@fns.uniba.sk

We present ab initio calculations of electric and spectroscopic properties of the ground state and especially low-lying excited states (${}^1,3n-\pi^*$, ${}^1,3\pi-\pi^*$, ${}^1,3\sigma-\pi^*$) of acetone using the CASSCF and CASPT2 methods.

Geometry optimization was performed with the aug-cc-pVTZ basis set. Molecule undergoes significant change in geometry upon the excitation.

Vertical and adiabatic excitation energies were computed using the series of augmented Dunning basis sets aug-cc-pVXZ (X = D, T, Q).

To determine the electric properties, the Finite-Field approach was used with the 3–11-points central differentiation formulae with equidistant steps with external fields 0.001 a.u., 0.002 a.u., and 0.005 a.u. We also used a polynomial fit through the obtained points.

First four derivatives of the energy with respect to all three coordinates (i.e. the dipole moment, polarizability, and the first two hyperpolarizabilities) and first two derivatives of the expectation values (only for CASSCF method) of the dipole moment were determined. The latter allowed us to obtain some of the off-diagonal terms of the electric properties tensors. The results obtained with aug-cc-pVDZ and aug-cc-pVTZ basis sets were very close to each other, i.e. the energy was converged in terms of the basis set size. Accuracy of the obtained values decreases significantly with the order of the derivation.

In some states there is a considerable change of molecular properties upon excitation. For example, the dipole moment in the ground state, 1.16 a.u., diminishes to 0.71 a.u. and 0.64, respectively, in the excited singlet (triplet) $n-\pi^*$ state. The mean dipole polarizability undergoes much smaller change (ground state value is 41.7 a.u., the ${}^1n-\pi^*$ and ${}^3n-\pi^*$ polarizability is 43.5 and 43.3 a.u., respectively), but the anisotropy lowers by a factor of two due to the $n-\pi^*$ excitation (ground state value is 24.2 a.u., ${}^1n-\pi^*$ 11.1 a.u., and the ${}^3n-\pi^*$ state value is 10.8 a.u.).

Alterations of electric properties result from the geometry change in the ground state and in the excited state (C_{2v} and C_s symmetry, respectively) and from the change of the molecular electronic structure. Both effects are discussed and analyzed.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency, contract No. APVV-LPP-0155-09, and the Slovak Grant Agency VEGA under the contract No. 1/0520/10.

4P-29

PRÍPRAVA NOVÝCH NANO – MATERIÁLOV S FLUORESCENČNÝMI VLASTNOSTAMI NA BÁZE INTERKALOVANÉHO KAOLINITU

TOMÁŠ ZACHER^{a*} a MARIÁN JANEK^{a,b}

^a Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina CH1, 842 15 Bratislava 4, ^b Technologický inštitút SAV, Dúbravská cesta 9, 845 13 Bratislava zacher@fns.uniba.sk

V predkladanej práci sa venujem príprave organických derivátov minerálu kaolinitu. Organické deriváty minerálov sú zaujímavé najmä pre vznik štruktúry s novými fyzikálnymi a chemickými vlastnosťami oproti pôvodnému anorganickému materiálu¹. Kaolinit napriek jeho širokému zastúpeniu v prírode a zaujímavými interkalačnými vlastnosťami je menej študovaný ako prekursor na báze minerálu pre nové materiály „minerál – organická molekula“ v porovnaní s ostatnými ílovými minerálmi napr. smektitom čo je ovplyvnené prakticky nie celkom jednoduchou expandovateľnosťou medzivrstvia kaolinitu oproti ostatným expandovateľným vrstevnatým silikátom².

Kaolinity sú prítomné v našom každodennom živote, od keramických materiálov po medicínu, od papiera a náterových farieb po časti katalyzátorov v autách.

Predložená práca rieši problematiku prípravy organických derivátov kaolinitu s fluorescenčnými farbivami kumarínovej rady, ktoré doposiaľ ešte neboli študované. Cieľom chemickej modifikácie prírodných nano – materiálov môžeme pripraviť funkcionalizovaný hybridný nano – materiál s požadovanými vlastnosťami pre konkrétne použitie³. Tieto funkcionalizované systémy majú potenciál byť „inteligentné“ materiály⁴. Nový typ anorganicko – organického nanokompozitu, by mohol byť použitý pri príprave antiseptických systémov (napr. náterové farby, textilné vlákna a pod.), nakoľko tieto systémy majú potenciál produkovať singletový kyslík, ktorý má antiseptické a dezinfekčné účinky.

Táto práca vznikla za podpory grantu UK/144/2009, VEGA 1/4457/07 a APVV-0491-07.

LITERATÚRA

1. Rausell – Colom J. A., Serratos J. M.: *In Chemistry of Clays and Clay Minerals*, p. 371 (Newman A. C. D. ed.). Mineralogical Society, London 1987.
2. Okada A., Usuki A., Kurauchi T., Kamigaito O.: *In Hybrid Organic – Inorganic Composites*, p. 55 (Mark J. E., Lee C. Y. C., Bianconi P. A., ed.). American Chemical Society, Washington DC 1995.
3. Gómez – Romero P., Sanchez C.: *Functional Hybrid Materials*, p. 33. Wiley-VCH, Weinheim 2004.
4. Ruiz – Hitzky E.: *Chem. Rec.* 3, 88 (2003).

4P-30

**ŠTÚDIUM JEDNODUCHÝCH ZLÚČENÍN POMOCOU
TERAHERZOVEJ SPEKTROSKOPIE V ĎALEKEJ
INFRAČERVEJ OBLASTI****DANIEL ZICH^{a*}, IVAN ČERNUŠÁK^a, MARIÁN
MATEJDES^a, IGNÁC BUGÁR^b a MARIAN JANEK^{a,c}**

^a Univerzita Komenského prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, ^b Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava, ^c Slovenská akadémia vied, technologický inštitút, Dúbravská cesta 9, 845 13 Bratislava
daniel.zich@gmail.com

Cieľom práce bolo porovnanie teoretických a experimentálnych spektier vybraných plynov v blízkej a ďalekej IČ oblasti. Ako vybrané plyny boli použité H₂O, NH₃, CH₄, N₂O, CO₂. Predpokladom práce boli malé posuny v polohe maxima pri porovnaní teoretických a experimentálnych spektier. Ďalším predpokladom experimentu bolo testovanie metód výpočtu poskytujúcich modelové spektrá podobné spektrám experimentálnym. Tieto sme porovnali s publikovanými údajmi z literatúry.

Štúdium malo dva parciálne ciele a to zistenie optimálnej metódy výpočtu a voľba vhodnej bázy atómových orbitálov. Na výpočet bol použitý program Gaussian 98 a na štúdium báz boli použité bázy 3-21G, 6-31G*, 6-311G**. Pre každú molekulu sme zoptimalizovali geometriu na úrovni Hartreeho–Fockovej aproximácie (s každou bázou atómových orbitálov) a vypočítali modelové infračervené spektrum v harmonickom priblížení.

Druhým cieľom bolo experimentálne stanovenie spektra vybraných plynov v THz oblasti. Voda bola meraná vo forme vodných pár. Namerané THz spektrá vody boli porovnané s vypočítanými spektrami a spektrami publikovanými v literatúre uvádzajúcich spektrá vybraných plynov^{1–5}. Zo zistených experimentálnych ako i vypočítaných spektier boli zistené frekvencie absorpčných pásov, ktoré budú využité pri výskume vybraných ílovitých minerálov modifikovaných molekulami obsahujúcimi študované väzby.

Tato práca vznikla za podpory grantu APVV-0491-07 a VEGA 1/4457/07.

LITERATÚRA

1. Plusquellic D. F., Korter T. M., Fraser G. T., Lavrich R. J., Benck E. C., Bucher C. R., Domench J.: *World Scientific* 13, 385 (2003).
2. NIST Chemistry Webbook
<http://webbook.nist.gov/chemistry>, 2010.
3. van Exter M., Fattinger Ch., Grischkowsky D.: *Optics Letters* 14, 20 (1989).
4. Cheville R. A., Grischkowsky D.: *J. Opt. Soc. Am. B* 16, 317 (1998).
5. Podobedov V. B., Plusquellic D. F., Fraser G. T.: *J. Quant. Spectrosc. Ra.* 91, 287 (2004).

SIL-01 ANORGANICKÉ, KOMPOZITNÉ A POLYMÉRNE BIOMATERIÁLY PRE TKANIVOVÉ INŽINIERSTVO

DUŠAN BAKOŠ

*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, STU
v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
dusan.bakos@stuba.sk*

Biomateriály sú materiály (syntetické a prírodné; kovové, anorganické, kompozitné a polymérne, tuhé, gély...), ktoré sa používajú v medicínskych aplikáciách obyčajne v kontakte s biologickými systémami. Biomateriály predstavujú vednú oblasť, ktorá má už takmer pol storočia progresívny rast, ktorá je interdisciplinárna a využíva poznatky z medicíny, biológie, chémie, materiálovej vedy a inžinierstva. Oblasť aplikácií biomateriálov v medicíne je veľmi široká a zahŕňa pomocné implantačné materiály, systémy dávkovania liečiv, až po tkanivové inžinierstvo.

Pre tkanivové inžinierstvo sa prijala všeobecná definícia, ktorá ho špecifikuje ako vývoj biologických náhrad pre implantáciu do tela a/alebo podpora regenerácie tkanív a rekonštrukcie za účelom náhrady, obnovy, záchrany alebo zlepšenia ich funkcie. Inžinierstvo živých tkanív predstavuje prepojenie biotechnológie a tradičného priemyslu medicínskych implantátov. Nie je to vývoj v existujúcej technológii ale technologický skok, ktorý revolucionizuje priemysel medicínskych implantátov.

Cieľom tkanivového inžinierstva je reparácia, regenerácia alebo náhrada poškodených alebo chorých tkanív na ich pôvodný stav a funkciu a vytváranie prirodzených tkanív v dostatočnom množstve a požadovaného tvaru, ktoré sú štruktúrne a funkčne rovnaké (ak nie lepšie) pripravenému tkanivu aplikovaného na defekt.

Všeobecná schéma tkanivového inžinierstva predpokladá, že bunky rastú *in vitro* a sú vysiate na vyhovujúcu biodegradovateľnú maticu, ktorá je implantovaná pacientovi aby naštartovala regeneráciu tkaniva.

Všetky biomateriály sa používajú tak, aby sa zachovala rovnováha medzi mechanickými vlastnosťami nahradených tkanív a biochemickými účinkami materiálu na tkanivá. Obe oblasti majú veľký význam a sú kľúčom k úspechu materiálu v klinike. Vo všetkých biologických systémoch sa vyžaduje celá škála vlastností: biologická aktivita, mechanická pevnosť, chemická stálosť a pod. Klinické potreby preto spĺňajú materiály vyznačujúce sa komplexnou kombináciou vlastností. Využitie technológií kompozitov umožnilo výskumníkom z oblasti biomateriálov vyvinúť širokú škálu nových, na mieru pripravených materiálov „biokompozitov“, ktorá sľubujú značný progres v tejto oblasti.

Veľa typov materiálov používaných napríklad v ortopédii sa v tele neresorbujú. Na druhej strane namiesto náhrady kosti kostným analógom, narastá v klinickej praxi potreba materiálov pre augmentáciu kostí. Augmentácia kosti vyžaduje vrastanie kostných buniek do materiálu a rekonštrukciu materiálu, čím kosť nadobudne nielen pôvodnú mechanickú, ale aj biologickú funkčnosť. Pre tento typ klinických aplikácií je vhodných iba málo materiálov. Najväčší progres v tejto medicínskej oblasti dosiahli technológie prípravy biokeramiky a ukazuje sa, že riešením sú hlavne kom-

pozity so zlepšenými vlastnosťami. Vyvinutých bolo množstvo biokompozitov, ktoré majú resorbovateľné matrice, pričom často je resorbovateľná aj spevňujúca zložka ktorou je plnivo. Ako bioaktívne plnivo sa s resorbovateľnou maticou často používa hydroxyapatit. Takýto kompozit sa vyznačuje osteokonduktívnymi povrchovo-aktívnymi vlastnosťami, ktoré stimulujú rast kosti.

Pre rekonštrukciu mäkkých tkanív sa používajú biorezorbovateľné polymérne materiály, ktoré po skončení svojej podpornej funkcie pre trojrozmerný rast buniek v tele degradujú. Použiteľné materiály obyčajne degradujú na bežné metabolity. Medzi také patria napríklad kolagén, polyaktid, polyglykolid, estery kyseliny hyalurónovej a pod.

Pre ideálnu maticu (scaffold) existuje množstvo kritérií. Pri konštruovaní matrice pre tkanivové inžinierstvo je dôležité napodobniť štruktúru tak verne ako je možné. Pre aplikáciu je dôležitý výber špecifického materiálu, pričom ideálny maticový materiál by mal byť „šitý na mieru“ presne podľa potreby individuálneho pacienta. Bunky budú ovplyvnené zložením materiálu, zakrivením, povrchovou chémiou a drsnosťou povrchu. Optimalizované musia byť tiež podmienky kultivácie.

Keďže tkanivové inžinierstvo využíva rôzne typy biomateriálov vyžaduje interdisciplinárny prístup, možno ho rozdeliť na tri základné oblasti.

1. Konštrukčná technológia. Konštrukcia trojrozmernej architektúry (3D) a funkčnosti, ktorá napodobňuje pôvodné tkanivo je doménou chémie a materiálov. Je to použitie prírodných alebo syntetických materiálov pre bunky vysiate na polymérnu maticu s vhodnými mechanickými vlastnosťami, pričom sa obyčajne jedná o biodegradovateľný materiál alebo materiál s kontrolovaným uvoľňovaním. Dôležité je použitie rastových faktorov alebo chemotaktických faktorov pre iniciáciu potrebnej bunkovej aktivity. Kritickým prvkom je proces výroby a hlavne zabezpečenie veľkoškálovej výrobnéj technológie.
2. Technológia bunky. Je to doména biológie a zameriava sa na vývoj náhrad, ktoré sú schopné adaptovať sa aktuálne aj trvalo k meniacemu sa prostrediu. Pre úspešný vývoj je kritickým výber zdroja buniek. Prednosť majú autológne bunky, pri ktorých nehrozí imunitné odvrhnutie, no na druhej strane je značne obmedzená dostupnosť pre výrobu a skladovanie. Použitie alogénnych buniek si vyžaduje aplikáciu inžinierstva imunitnej akceptácie. Do popredia sa dostáva aj génové inžinierstvo, ktoré dokáže pozmeniť genetický program buniek. Dnes je už bežné použitie kmeňových buniek, napr. mezenchymálnych „materských“ buniek pre sval, kosť a chrupavku s využitím ich diferenciácie na špecifické tkanivové bunky.
3. Integrácia do živého systému. Je to doména biológie, kde sa v predklinických testoch štúdiu zameriava na výber a vhodnosť zvieracích modelov a kde sa kvantitatívne hodnotia predklinické a klinické testy. Dôležitou oblasťou štúdia je biokompatibilita a procesy na fázovom rozhraní biomateriálu a tkaniva. Častokrát sa využíva sa aj inžinierstvo imunitnej odozvy (aplikácia výsledkov z transplantačnej imunológie). Veľmi progresívny a mimoriadne potrebný je vývoj zobrazovacích technológií potrebných na určenie viability náhrad po implantácii, čo je doménou biofyziky.

5IL-02 VÝPOČTY TERMODYNAMICKÝCH VLASTNOSTÍ PEVNÝCH LÁTEK Z PRVNÍCH PRINCIPŮ

DAVID SEDMIDUBSKÝ

Ústav anorganické chemie, Vysoká škola chemicko-
technologická Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
sedmidub@vscht.cz

Při studiu anorganických materiálů a optimalizaci podmínek jejich přípravy s ohledem na požadované vlastnosti hrají významnou roli rovnovážné termodynamické výpočty. Umožňují nejen interpretovat experimentální výsledky, ale i efektivně plánovat další experimenty a redukovat jejich počet. Pro termodynamické modelování je přitom zásadní znalost termodynamických dat všech zúčastněných látek včetně popisu chování nestechiometrických fází.

Termodynamická data jsou obecně získávána buď přímými experimentálními metodami kalorimetrie a termické analýzy, nebo metodou CALPHAD¹ využívající optimalizace parametrů modelových závislostí s využitím rovnovážných experimentálních dat. Vedle toho jsou aplikovány různé empirické metody odhadu termodynamických veličin. Ty jsou však v poslední době stále častěji nahrazovány přímými výpočty z prvních principů (metody *ab-initio*).

K vyhodnocení slučovací entalpií ideálních stechiometrických fází lze využít celkových energií získaných z kvantově-mechanických výpočtů na základě teorie funkcionálu elektronové hustoty (DFT). Jelikož celkové energie jsou vztaženy k referenčnímu stavu volných elektronů a jader (nebo volných valenčních elektronů a odpovídajících kationtových zbytků) musíme příslušný výpočet provést nejen pro danou sloučeninu, ale i pro její konstituenty – obvykle prvky v jejich stabilních modifikacích nebo, například v případě směsných oxidů, jednoduché binární oxidy.

Zmíněný postup je demonstrován na několika příkladech z oblasti materiálů pro elektroniku (nitridy prvků 13. skupiny a oxidy a nitridy přechodných kovů) a pro jaderné aplikace (nitridy a oxidy aktinoidů). Vlastní výpočty elektronové struktury byly prováděny metodou LAPW (báze navýšených rovinných vln) v rámci aproximace GGA pro výměnný a korelační potenciál, které jsou implementovány v programu WIEN2k². Použitá metoda je považována za jednu z nejpřesnějších, neboť uvažuje kompletní krystalový potenciál a k jeho výpočtu využívá elektronové hustoty všech elektronů. Jako hlavní limitující faktor se z hlediska predikce energií jeví použitá aproximace GGA, a to především pro systémy obsahující přechodné a vnitřně přechodné prvky se silně korelovanými valenčními elektrony. Tyto korelace lze zohlednit při aplikaci funkcionálu GGA+U, který však obsahuje dodatečný volný parametr vzájemné repulze elektronů U, takže tuto metodu nelze považovat za postup *ab-initio* v čistém smyslu slova. V případě lantanoidů a aktinoidů je navíc nezbytné uvažovat spin-orbitální interakci, která však z hlediska svého vlivu na výslednou kohezni energii často kompenzuje vliv coulombických elektronových korelací.

Druhou významnou termodynamickou vlastností je entropie, která má sice pro čisté látky podle třetího termodynamického zákona nulovou hodnotu při teplotě 0 K, v chemické termodynamice se však z praktických důvodů používá její

hodnota při referenční teplotě 298 K. K jejímu vyhodnocení je tedy potřebná znalost nízkoteplotní tepelné kapacity, jejímž majoritním příspěvkem je vibrační energie atomů. Pro popis fononového příspěvku k tepelné kapacitě krystalických látek můžeme opět aplikovat postupy vycházející z prvních principů. Východiskem je kvantově mechanický (DFT) výpočet Hellman-Feynmanových (HF) sil, které působí na jednotlivé atomy při vychýlení jednoho atomu z jeho rovnovážné polohy (metoda zamrzlého fononu). Jelikož tento druh výpočtu vyžaduje vytvoření dostatečně velké superbuňky, tak aby HF síly limitovaly k nule na jejím okraji, je časově i kapacitně relativně náročný. Proto byla v tomto případě použita rychlejší metoda na bázi pseudopotenciálů implementovaná v programu VASP³. Vlastní fononové spektrum a z něho vyplývající teplotní závislosti tepelné kapacity a entropie byly spočteny v rámci harmonické aproximace přímou metodou pomocí programu Phonon⁴. Spočtené HF síly přitom vstupují do maticových elementů dynamické matice, jejíž diagonalizací se získají vlastní hodnoty frekvencí jednotlivých vibračních módů.

Popsaná metoda je opět demonstrována na několika příkladech nitridových, oxidových a kovových materiálů (polovodiče A^{III}N, perovskity přechodných kovů, intermetalické sloučeniny AnAl_n). Mimo jiné je na příkladech zirkoničtanů kovů alkalických zemin s perovskitovou strukturou ukázáno, proč slučovací entropie ternárních směsných oxidů z jednoduchých oxidů binárních (D_{ox}²⁹⁸) nabývá ve většině případů kladných hodnot a proč tudíž nelze aplikovat aditivní Neumannovo-Koppovo pravidlo pro tepelnou kapacitu za nízkých teplot⁵. Zatímco tento efekt lze uspokojivě interpretovat pomocí výše zmíněné harmonické aproximace, odchylky od Neumannova-Koppova pravidla za vysokých teplot jsou způsobeny anharmonickými efekty spojenými s teplotní roztažností⁵, které lze částečně postihnout v rámci tzv. kvaziharmonické aproximace. Přesto se pro stanovení vysokoteplotní tepelné kapacity stále dává přednost spíše experimentálním kalorimetrickým metodám.

Věřohodnost termodynamických dat získaných výše popsanými teoretickými postupy byla testována při modelování fázových rovnováh a konstrukci fázových diagramů v několika vícesložkových systémech (Ga-Mn-N, Zn-Mn-O, Bi-Sr-Mn-O, An-Al).

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru MŠMT ČR 6046137302 a grantů GAČR 104/09/0621 a 203/09/1036.

LITERATURA

- Lucas H. L., Fries S. G., Sundman B.: *Computational Thermodynamics, the Calphad Metod*. Cambridge University Press, 2007.
- Blaha P., Schwarz K., Madsen G. K. H., Kvasnicka D., Luitz J.: WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Techn. Universität Wien, Austria (2001).
- Kresse G., Furthmüller J.: Phys. Rev. B 54, 11169 (1996).
- Parlinski K.: Software Phonon (2006).
- Leitner J., Voňka P., Sedmidubský D., Svoboda P.: Thermochim. Acta 497, 7 (2010).

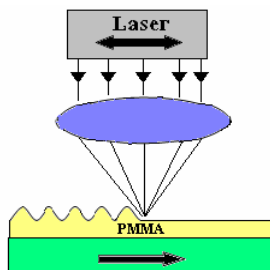
5IL-03

PŘÍPRAVA Au NANO-STRUKTUR NA SKLE
A POLYMERUVÁCLAV ŠVORČÍK^a, JAKUB SIEGEL^a, PETR
SLEPIČKA^a, OLEKSIJ LYUTAKOV^a
a ZDEŇKA KOLSKÁ^b^a Ústav inženýrství pevných látek, VŠCHT, Technická 5,
166 28 Praha 6, ^b Katedra chemie, Univerzita J. E. Purkyně,
České mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem
vaclav.svorcik@vscht.czPráce byla podporována GA ČR projekty 106/09/0125,
106/09/P046 a 108/10/1106, GA AV ČR projekty KAN
200100801 a KAN400480701 a MŠMT ČR projekt LC 06041.

Nano-strukturované a metalizované polymerní filmy jsou v dnešní době široce využívány v řadě aplikací, např. pro výrobu kompaktních disků, reflektorů v automobilech, fólií v potravinářském průmyslu, biosenzorů. Systémy kov-polymer jsou základem pro konstrukci diod s negativním diferenciálním odporem nebo světlo emitujících diod. Metalizované polymerní folie jsou základním materiálem pro přípravu aktivních prvků pro mikrovlnný ohřev v potravinářském průmyslu. Struktury kov-polymer jsou intenzivně studovány jako základní materiál pro konstrukci senzorů vlhkosti a optických přepínačů. Polymery (např. PET, PTFE) jsou využívány v kardiovaskulárních a cévních implantátech díky svým excelentním mechanickým parametrům, chemické stabilitě a biokompatibilitě. Metalizované polymery nacházejí uplatnění aplikací v MEMS strukturách a také v oblasti optických zařízení pro difrakci. PET se využívá ve vícevrstevných strukturách, kdy charakter rozhraní kov-polymer ovlivňuje mechanické, elektrické a chemické parametry celého systému.

Mechanické, optické a elektrické vlastnosti vrstev kovů na polymeru jsou ovlivněny technikou depozice vrstvy, reaktivitou kovu a strukturou rozhraní kov-polymer. Metalické vrstvy na polymerech jsou připravovány napařováním, napařováním a elektrochemickými metodami. Tvorba kovových vrstev je řízena množstvím nukleačních procesů, které stále nejsou zcela objasněny. Významný vliv na vlastnosti kovových struktur má i struktura polymerních substrátů.

Byla studována modifikace polymeru s cílem připravit struktury pro aplikace v optoelektronice. Struktury byly připraveny z PMMA při zvýšené teplotě a současném působení elektrického pole. Práce se zabývá přípravou polymerních submikronových struktur na povrchu polymeru a následnou depozicí Au nanovrstev.



Obr. 1. Schematický popis experimentálního uspořádání: PMMA byl nanesen na podložku, jeho povrch byl dotován porphyrinem a poté byl povrch skenován fokusovaným laserovým svazkem za současného posunu vzorku

5L-01 FOSFAZENY

MILAN ALBERTI^{a*}, JIŘÍ PŘÍHODA^b, ZBYNĚK VORÁČ^a, IVAN KOTEK^c, VLADIMÍR ŠPAČEK^c, MARTIN KAŠKA^c, FRANTIŠEK SOCHA^c a LENKA DASTYCHOVÁ^d

^a Ústav fyzikální elektroniky, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Kotlářská 2, 611 37 Brno, ^b Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Kotlářská 2, 611 37 Brno, ^c Synpo, a.s., S.K. Neumanna 1316, 532 07 Pardubice, ^d Ústav chemie, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, nám T.G.M. 275, 762 72 Zlín
alberti@chemi.muni.cz

V případě fosfazenů se jedná o sloučeniny, jež obsahují vazebné uskupení – N = PX₂, X = halogen nebo R, RNH, RO. Syntetizovány byly poprvé v malém množství již v roce 1834 chemiky Liebigem a Wöhlerem¹, kteří připravili malá množství cyklického trimeru – hexachloro-cyklo-trifosfazenu, P₃N₃Cl₆.

Z hlediska svých chemických a fyzikálních vlastností představují fosfazenové hraniční oblast mezi anorganickou a organickou chemií. Značný rozvoj prodělala chemie těchto látek v druhé polovině 60. let 20. stol. Pozornost se soustředila na syntézu organoderivátů cyklofosfazenů, především náhradou atomů chlóru v molekule prekurzoru P₃N₃Cl₆ různými substituenty^{2,3}. Bylo zjištěno, že snadno probíhá amonolýza, většina aminolýz, reakce s alkokidy probíhají poněkud pomaleji.

Polymerní fosfazenové deriváty byly připraveny obdobně jako deriváty cyklických fosfazenů substitucí atomů chlóru v termicko polymeraci z hexachloro-cyklo-trifosfazenu vzniklého lineárního polymeru, -(N=PCL₂)_n-, n = cca 15 000, jenž je rozpustný v organických rozpouštědlech. Potenciální aplikovatelnost fosfazenových sloučenin je impozantní, díky zmíněné snadné nahraditelnosti atomů halogenů v molekulách jejich prekurzorů. Lze je využít pro přípravu hybridních cyklolineárních a cyklomatrixových polymerů, extenderů polymerních řetězců, jako jader dendrimerních struktur, modifikátory polymerů, nosičů protirakovinných léčiv, retardérů hoření, nanokompozitů, nanovláken, adheziva, apod.

V současné době jsou studovány na pracovištích, prezentujících příspěvek, možnosti příprav nových technických polymerů pro síťovatelné kompozity na bázi zmíněných anorganických polymerů a jejich prekurzorů s vybranými klasickými polymery, jako jsou například polyurethany, polyester, epoxidy, polymethakryláty, polyamidy a dalšími, rovněž i s vybranými silikony a silazany.

Tato práce vznikla za podpory projektů MPO ČR FR-TII/413 a MŠMT 0021622411.

LITERATURA

1. Allcock H. R.: *Chemistry and Applications of Polyphosphazenes*. J. Wiley, Hoboken, New Jersey 2003.
2. Gleria M., De Jaeger R.: *Phosphazenes a Worldwide Insight*. Nova Science Publishers, Inc. Hauppauge, New York 2004.
3. De Jaeger R., Gleria M.: *Inorganic Polymers*. Nova Science Publishers, Inc. Hauppauge, New York 2007.

5L-02 ENHANCED ELECTROCHEMICAL PROPERTIES OF LiFePO₄ CATHODE MATERIAL BY PPY/PEG COATING

ANDREA FEDORKOVÁ^{a*}, RENÁTA ORIŇÁKOVÁ^b, ANDREJ ORIŇÁK^b, ANDREAS HEILE^c, DUŠAN KANIANSKY^a, and HEINRICH F. ARLINGHAUS^c

^a Department of Analytical Chemistry, Faculty of Science, Comenius University, Mlynská Dolina, 842 15 Bratislava 4, ^b Department of Physical Chemistry, Faculty of Science, P.J. Šafárik University, Moyzešova 11, 041 54 Košice, ^c Institute of Physics, Westfälische Wilhelms University, Wilhelm-Klemm-Str. 10, DE-481 49 Münster
fedorkova@fns.uniba.sk

Rechargeable lithium batteries are now used extensively for a wide variety of applications, from portable electronic devices to hybrid and electric vehicles. During the past few years, LiFePO₄ has received growing attention as a promising cathode material for lithium ion batteries. Bare LiFePO₄ is an insulator with electrical conductivity of about ~10⁻¹¹ S cm⁻¹. One of the approaches to increase electrical conductivity of LiFePO₄ is coating with conducting polymers¹. Polypyrrole (PPy) is a conducting polymer which also acts as a host material for Li⁺-ion insertion/extraction². In this work, polyethylene-glycole (PEG) is introduced into PPy film coated on LiFePO₄ powder particles to promote the properties of cathode material for Li-ion batteries. The enhancement of the electrochemical activity by the substitution of carbon with electrochemically active polymer is investigated. The electrochemical performance of PPy-LiFePO₄ electrodes was greatly improved by introduction of PEG into the PPy films³. Charge/discharge measurements confirmed the increase in capacity when applying PEG in PPy. The morphology and particle sizes of the prepared cathode powder material were investigated by scanning electron microscopy (SEM) and particle size analysis (PSA). Distribution of PPy and PPy/PEG films onto the LiFePO₄ particles surface was studied by time of flight secondary ion mass spectrometry (TOF-SIMS). TOF-SIMS measurements and SEM images confirmed that thickness of polypyrrole coating on LiFePO₄ particles is about 100 nm.

The authors wish to thank Slovak Grant Agency VEGA grant No. 1/0043/08 and No. 1/0134/10.

REFERENCES

1. Wang G. X., Yang L., Chen Y., Wang J. Z., Bewlay S., Liu H. K.: *Electrochim. Acta* 50, 4649 (2005).
2. Osaka T., Momma T., Nishimura K., Kakuda S., Ishii T.: *J. Electrochem. Soc.* 141, 1994 (1994).
3. Fedorková A., Oriňáková R., Oriňák A., Talian I., Heile A., Wiemhöfer H. D., Kaniansky D., Arlinghaus H. F.: *J. Power Sources* 195, 3907 (2010).

5L-03

FÁZOVÉ PŘECHODY AMORFNÍCH LÁTEK
VE SKELNÉM A KAPALNÉM STAVUBOŘIVOJ HLAVÁČEK, ANDREA KALEDOVÁ
a DAVID VESELÝ

Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
borivoj.hlavacek@upce.cz

Fázové přechody týkající se přeměny pevná látka–kapalina, budou probrány v širokém rozsahu teplot a tlaků a to vzhledem k nelineárním vibracím jednotlivých molekul a předpokládané vznikající heterogenitě amorfní fáze^{1–3}.

Vibrace jednotlivých molekul či atomů a dalších alternativních subjednotek budou uvažovány jako nelineární oscilátory podléhající pravidlům platícím pro vibrační pohyby, které se řídí pravidly určovanými a převzatými z teorie chaosu^{4–6}. V této souvislosti budou probrány obecné principy neurčitosti pohybu nelineárních oscilátorů a pomocí nich následně zodpovězeny základní otázky vzniku amorfní fáze a jejího přechodu do kapaliny či tuhé fáze pomocí zániku či nárůstu střížného modulu. Pro vyšší teploty a vyšší fázové přechody, jako je bod varu či kritická teplota, předložená teorie vibrací zahrnuje heuristicky uvažované trojrozměrné modelové představy základních stavových rovnic jako je rovnice Peng-Robinsonova, rovnice Dietericiho či Van der Waalsova. Plyn v kontrastu vůči kapalině pak vychází jako heterogenní látka vyplněná jednotlivými molekulami, které se pohybují bez vibračních ohnisek. Tento jev případně kapaliny neplatí, a je charakterizován vysokým počtem vibračních ohnisek rovnajících se přibližně počtu molekul. U nízkých teplot předvedeme molekulární modely přechodu kapalina–pevná látka a následně bude pro okolí teploty nástupu skelného stavu T_g vysvětlen vznik volného objemu nad teplotou T_g , a to vlivem nespojitosti vibračních amplitud. V celkovém přístupu bude zejména zdůrazněna nerovnováha fyzikálního děje zeskelnění a nezbytnost vytvoření nepravidelné a nerovnovážné struktury nelineárními oscilacemi.

LITERATURA

1. Angel C. A.: *Science* 267, 1615 (1995).
2. Novikov V. N., Ding Y., Sokolov A. P.: *Phys. Rev. E* 71, 1 (2005).
3. Malinovsky V. K., Surovtsev N. V.: *Glass Phys. Chem.* 26, 217 (2000).
4. Hlaváček B., Šesták J. in book: *Some Thermodynamic, Structural and Behavioral Aspects of Materials Accentuating Noncrystalline States*, chap. 18, p. 388. OPS Nymburk, Plzeň 2009.
5. Hlaváček B., Mareš J.: *Fyzika struktur amorfních a krystalických materiálů*, Universita Pardubice, Fyzikální Ústav AV ČR. Pardubice 2007.
6. Pain H.J.: *The Physics of Vibrations and Waves*. Wiley, New York 1993.

5L-04

PŘÍPRAVA A VLASTNOSTI UMĚLÝCH PÍSKOVců
NA BÁZI GEOPOLYMERNÍCH POJIVPETR KOUTNÍK^a, OLEG BORTNOVSKY^a, PETR
ANTOŠ^a a PAVEL ROUBÍČEK^b

^a Výzkumný ústav anorganické chemie, a. s., Revoluční 1521/84, 400 01 Ústí nad Labem, ^b České lupkové závody, a. s., 171 01 Nové Strašecí
petr.koutnik@vuanch.cz

Příprava a zkoumání vlastností umělých pískovců byly prováděny v rámci rozsáhlého výzkumu zaměřeného na vývoj a aplikace materiálů vhodných pro restaurování historických památek. Pro opravy pískovcových artefaktů se zpravidla používají pojiva obsahující cement či dokonce pojiva na organické bázi. Umělé pískovce pojené těmito typy pojiv pak mají výrazně jiné chemické složení a fyzikální vlastnosti ve srovnání s pískovci přírodními. Možnou alternativou se jeví použití geopolymerních pojiv, které vznikají alkalickou aktivací hlinitokřemičitanů hydroxidem sodným či draselným za přítomnosti kapalných alkalických křemičitanů. Reakcí vzniká třídímní struktura, která je svým chemickým složením podobná zeolitům, avšak na rozdíl od nich je amorfní. Pokud použita hlinitokřemičitá surovina není zcela přeměněna na gelovou fázi, nebo pokud jsou přidána nerozpustná plniva, pak nerozpuštěné částice a částice plniva zůstávají pevně zachycené v pojivu. Této vlastnosti geopolymerního pojiva lze přídavkem vhodného plniva využít k modifikaci vzhledu geopolymerního pojiva, který tedy může být velice podobný vzhledu restaurovaného prvku.

Postup přípravy umělých pískovců spočíval v mísení geopolymerního pojiva s křemenným pískem a dusáním vzniklé směsi do formy. Po cca jednom měsíci byla ze zatvrdlého výdusku vyřezána zkušební tělesa a určeny základní fyzikální vlastnosti (pevnosti, nasákavost, objemová hmotnost atd.). Celkem byly připraveny tři umělé pískovce, které se lišily druhem pojiva a zrnitostí i obsahem plniva. Pískovce měly vzhled odpovídající svým přírodním analogům a významně se vzájemně lišily v pevnostech, nasákavosti, součiniteli nasákavosti a řadě dalších vlastností. Bylo prokázáno, že na bázi geopolymerních pojiv lze připravit umělé pískovce pokrývající v širokém rozsahu vlastnosti pískovců přírodních.

Tato práce vznikla při řešení projektu „Pokročilé materiály a technologie pro rekonstrukce historických budov“ ev. č. FT-TA4/070, který byl realizován za finanční podpory ze státních prostředků prostřednictvím Ministerstva průmyslu a obchodu.

5L-05

KONTINUÁLNÍ SLEDOVÁNÍ KONDUKTIVITY PŘI REAKCI MEZI KŘEMIČITANEM A HYDROXOHLINITANEM VE VODNÉM ROZTOKU**JAROSLAV MELAR*, VRATISLAV BEDNAŘÍK a MILAN VONDRUŠKA**

Ústav inženýrství ochrany životního prostředí, Fakulta technologická, Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, nám. TGM 275, 762 72 Zlín
melar@ft.utb.cz

Polykondenzační reakce křemičitanu SiO_3^{2-} s hydroxohlinitanem $[\text{Al}(\text{OH})_4]^-$ je pravděpodobným mechanismem vzniku geopolymerů – amorfních hlinitokřemičitých materiálů, poprvé blíže studovaných Gluchovskim¹ a poté podrobně zkoumaných Davidovitsem². Uvedená reakce je v tomto případě vzhledem k lepší reprodukovatelnosti měření zkoumána ve vodném alkalickém prostředí. Jak ukazují výsledky předchozích prací^{3,4}, je rychlost této reakce závislá na koncentraci výchozích složek, jejich vzájemném poměru, teplotě, pH a také způsobu provedení. Právě způsob provedení reakce se ukazuje být velmi důležitým faktorem pro rychlost reakce⁵. Existují dvě možnosti provedení reakce lišící ve způsobu přidávání vodního skla do reakce. Oba tyto způsoby byly důkladně zkoumány. Jednou z měřených veličin byla konduktivita, kdy se zjišťovalo, jak se její hodnoty v průběhu reakce mění pro různé reakční podmínky. Bylo zjištěno, že se průběh závislosti konduktivity na čase pro oba způsoby provádění reakce výrazně liší. V předešlých publikacích⁶ bylo rovněž diskutováno, jakým způsobem se mění vodní sklo po přidání určitého množství roztoku hydroxidu. Při porovnání výsledků měření konduktivity při obou pracovních postupech s výsledky studie chování vodního skla v silně alkalickém prostředí pak vyplývá, že právě změny ve strukturním složení vodního skla mají vliv na rozdílný průběh závislosti konduktivity na čase.

Tato práce vznikla za podpory interního grantu UTB ve Zlíně č. IGA/8/FT/10/D financovaného z prostředků specifického vysokoškolského výzkumu.

LITERATURA

1. Gluchovskij V. D., v knize: *Gruntosilikaty*, kap. III, s. 56. Gosstrojizdat, Kyjev 1959.
2. Davidovits J., v knize: *Geopolymer Chemistry & Applications*, kap. II, s. 59. Institut Géopolymère, Saint-Quentin 2008.
3. Bednařík V., Vondruška M., Slavík R., Melar J.: In. *Chem. Mech.* 6, 75 (2008).
4. Bednařík V., Vondruška M., Slavík R.: In. *Chem. Mech.* 6, 327 (2008).
5. Melar J., Bednařík V., Vondruška M.: *18. konference Aprozem. Milovy*, 20.-22.4.2009.
6. Iler R. K., v knize: *The Chemistry of Silica*, kap. 2, s. 116. John Wiley, New York 1979.

5L-06

KLÍČOVÁ ROLE VODY V CHYTRÝCH BIOAKTIVNÍCH POLYMERNÍCH SYSTÉMECH TERMO-RESPONZIVNÍHO CHARAKTERU**MILOSLAV MILICHOVSKÝ**

Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Oddělení dřeva, celulózy a papíru, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice
miloslav.milichovsky@upce.cz

Stimuli-responzivní polymerní látky přitahují v současné době značnou pozornost. Jedná se o hydratované systémy retikulárního charakteru (HRS), jejichž společnou vlastností je tepelná odezva resp. citlivost na teplotu. Obvykle čirý roztok polymeru při jeho zahřívání po překročení teploty tzv. LCST (Lower-Critical Solution Temperature) přejde do gelového stavu¹. V případě hydratovaných zesíťovaných polymerů dochází k jejich odbotnání², k synerezi. Tyto procesy jsou zcela reversibilní a mírně endotermní. Vedle takovýchto HRS s LCST odezvou však existují i systémy s opačnou tepelnou odezvou – UCST (Upper-Critical Solution Temperature)³. Sem též patří již delší dobu známé hydratované submicro-retikulární systémy se slabým vazebným systémem, které z tohoto důvodu ředěním koacervují – kvasi-hydrogelové systémy na bázi UF předkondenzátů⁴. Obdobně se též chovají i HRS tvořené vlákny celulóзовého charakteru, které se vyznačují specifickou vlastností při sedimentaci tzv. rheosedimentací⁵. Tyto pak ředěním flokulují, ale logicky nevykazují tepelnou odezvu na rozdíl od samotných vláken hydrogelové povahy, které vykazují LCST aktivitu.

Prezentované vysvětlení chování těchto systémů je založeno na důležité roli vody v jejich chování prostřednictvím relativně slabých hydratačních sil a vycházející z tzv. SCHL teorie⁶. Hydratační síly jsou silně závislé na teplotě, přičemž s jejím růstem klesají. Repulsivní hydratační síly tak udržují v napjatém stavu přirozenou spirálovitou strukturu polymerního řetězce při teplotě pod LCST zatímco nad LCST již na to nestačí. U UCST systému je tomu naopak. Přirozená cca lineární struktura polymerního řetězce je zde naopak ztlačována působením atraktivních hydratačních sil při teplotě pod UCST, zatímco nad touto teplotou dojde vlivem jejich oslabení k jejímu uvolnění. Porušení rovnováhy působením přitažlivých a odpudivých sil v kvasi-hydrogelových systémech jejich ředěním, je pak klasickým příkladem uplatnění a fluktuace hydratačních sil⁴ v závislosti na teplotě.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR 0021627501.

LITERATURA

1. Mano J. F.: *Adv. Eng. Materials* 10, 515 (2008).
2. Zhang X., Wang F., Chu Ch.: *J. Mat. Sci.: Materials in Medicine* 14, 451 (2003).
3. Xin-Cai Xiao, Liang-Yin Chu, Sen-Mei Chen, Jia-Hua Zhu: *Polymer* 46, 3199 (2005).
4. Milichovský M.: *Cell. Chem. Technol.* 26, 607 (1992).
5. Milichovský M., Češek Bř.: *Cell. Chem. Technol.* 38, 385 (2004).

6. Milichovský M.: Sci. Pap. Univ. Pardubice 56, 123 (1992/93).

5L-07**ANTIBACTERIAL POLYVINYL CHLORIDE PRE-TREATED BY BARRIER DISCHARGE PLASMA**

IGOR NOVÁK, AHMAD ASADINEZHAD, MARIAN LEHOCKÝ, IVAN CHODÁK, MARIAN ŠTEVIAR, ANTION POPELKA, and ANGELA KLEINOVÁ

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

Polyvinyl chloride was surface modified to improve bacterial adhesion prevention properties¹⁻⁴. This was fulfilled by surface activation by surface barrier discharge plasma followed by radical graft copolymerization of acrylic acid. Three known antibacterial agents, bronopol, benzalkonium chloride, and chlorhexidine, were then individually coated onto functionalized surface to induce biological properties. Various modern surface probe techniques were employed to explore the effects of the modification steps. *In vitro* bacterial adhesion and biofilm formation assay was performed.

The bacterial adhesion phenomenon is a dynamic process, but the results are evaluated herein after 24 h incubation for a better assessment of the biofilm formation. Regarding the adherence degree of *Staphylococcus aureus* onto the samples, no decrease is observed in the number of viable colonies adhered onto the surface of some samples compared to the control sample implying the inefficiency of the modifications in reducing the adherence of *Staphylococcus aureus* onto the surface. However, an inhibition in antibacterial test suggests the capability of antibacterial compound in hampering adhesion of gram-positive strain. Two factors seem determining in the adhesion degree trend, i.e. wettability and surface topography. The adhesion degree is found to correlate with the hydrophilicity, and roughness of the samples.

Escherichia coli strain was found to be more susceptible to modifications rather than *Staphylococcus aureus* as up to 85% reduction in adherence degree of the former was observed upon treating with above antibacterial agents, while only chlorhexidine could retard the adhesion of the latter by 50%. Also, plasma treated and graft copolymerized polyvinyl chloride was markedly effective to diminish the adherence of *Escherichia coli*.

Táto práca vznikla za podpory grantu MŠ SR a SAV, projekt VEGA, č. 2/7103/2.

REFERENCES

- Lehocký M., Drnovská H., Lapčíková B., Barros-Timmons A. M., Trindade T., Zembala M., Lapčík L. Jr.: Coll. Surf., A 222, 125 (2003).
- Novák I., Pollák V., Chodák I.: Plasma Proces. Polym. 3, 355 (2006).
- Speranza G., Gottardi G., Pederzoli C., Lunelli L., Canteri R., Pasquardini L., Carli E., Lui A., Maniglio D., Brugnara M., Anderle M.: Biomaterials 25, 2029 (2004).

4. Triandafillu K., Balazs D. J., Aronsson B.O., Descouts P., Quo P. T., van Delden C., Mathieu H. J., Harms H.: Biomaterials 24, 1507 (2003).

5L-08**VYUŽITÍ TEPLÁRENSKÉ STRUSKY A KALU Z LEŠTĚNÍ A BROUŠENÍ SKLA PŘI PŘÍPRAVĚ GEOPOLYMERŮ**

JANA OPRAVILOVÁ, ROMAN SLAVÍK*, VRATISLAV BEDNAŘÍK a MILAN VONDRUŠKA

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta technologická, Ústav inženýrství ochrany životního prostředí, Náměstí T.G.M. 275, 762 72 Zlín
slavik@ft.utb.cz

V posledních letech lze pozorovat rostoucí zájem o oblast anorganických polymerních hliníkokřemičitanových materiálů, které jsou připravovány polykondenzační reakcí v zásaditěm prostředí za normální teploty a tlaku. Vzniklý materiál je označován jako geopolymery. Pro jejich přípravu jsou nejčastěji využívány přírodní vrstevnaté hliníkokřemičitan (fylosilikáty) ale i různé vedlejší produkty a odpady¹⁻³.

Práce se zabývá možností využití teplárenské strusky a kalu z leštění a broušení skla při přípravě geopolymery buď jako plniva nebo jako hlavní suroviny. S ohledem na příznivé chemické složení obou materiálů lze předpokládat, že je bude možné použít při přípravě technicky aplikovatelných materiálů.

Kaly z leštění a broušení skla, vznikající například při výrobě zrcadel a opracování skla, jsou produkovány prakticky celosvětově. Potenciální obsah organických látek (brusné oleje), olova (opracování olovnatého skla), případně dalších kovů vede k jejich ukládání na skládky odpadů.

Při spalování uhlí v elektrárnách a teplárnách je produkována řada vedlejších produktů (například v ČR asi 14 milionů tun/rok)⁴, z nichž je celosvětově využíváno pouze asi 20–30 % (cit.^{5,6}). Zuzítkování těchto odpadů by přineslo významné snížení environmentální zátěže a při jejich použití jako druhotných surovin lze dosáhnout výrazného snížení nákladů například při výrobě stavebních hmot.

Výsledky práce nasvědčují, že teplárenskou strusku lze použít jako základní reakční surovinu, avšak kal z leštění a broušení skla jen jako plnivo. Vzhledem k vysoké alkalitě kalu byla studována i možnost jeho použití jako náhrady části alkalického křemičitanového roztoku nebo reaktivní suroviny.

Tato práce vznikla za podpory interního grantu UTB ve Zlíně č. IGA/2/FT/10/D financovaného z prostředků specifického vysokoškolského výzkumu.

LITERATURA

- Hardjito D., Rangan B.V.: Vijaya (2005), http://espace.lis.curtin.edu.au/archive/00000623/01/Research_Report_GC1-2005.pdf, staženo 7.1.2007.
- Asokan P., Saxena M., Asolekar S. R.: Res., Cons. and Rec. 43, 239 (2005).
- Slavík R., Bednařík V., Vondruška M., Němec A.: J. Mater. Process. Tech. 200, 265 (2008).
- http://www.cideas.cz/free/okno/technicke_listy/1uvt/2323.pdf, staženo 5.2.2009

5. Fernández-Jiménez P., Palomo A.: *Fuel* 82, 2259 (2003).
6. Slavík R., Bednářik V., Vondruška M.: *Odpady* 2006, 19.

5L-09**THE POSSIBLE APPLICATIONS OF OPTICAL SPECTROSCOPY AND PHOTOACOUSTICS FOR EVALUATION OF PRINTED CONDUCTIVE THIN LAYERS**

**NIKOLA PEŘINKA, MARKĚTA DRŽKOVÁ,
and JIRÍ KLÍMA**

*Katedra polygrafie a fotofyziky, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice
nikola.perinka@hotmail.com*

In 2000, the Nobel Prize in Chemistry was awarded for the revolutionary discovery and development of conductive polymers. Since the conductive polymers can be dispersed in liquid coating systems, the new field of electronic (functional) applications was enabled. This area of development is nowadays concerned as printed electronics, because the printing is the main technology which makes the conductive polymers applicable.

In the current time, the printed functionalities are still becoming more on their significance. For these reasons, different approaches for the evaluation of properties of printed layers need to be taken into account. For obtaining a good functionality of the printed thin layers and consequently devices reliability, the physical properties of the layers and transitions between the layers must be observed. As an example of parameters, which may determine the resulting properties of the printed functionality, the thickness and the surface morphology of the printed layers can be mentioned. These characteristics of the thin printed layers can be evaluated by means of different methods; for instance using the mechanical or laser profilometers. By using these methods various difficulties can be faced during the measurements. Good example is the fact that the unevenness of the substrate could easily affect the result of the measurement. This could be possibly eliminated by applying methods sensitive to suitable properties of conductive layers themselves.

This work investigates possible applications of two optical methods, optical UV-VIS spectroscopy and the photoacoustics, for the evaluation of the properties of printed conductive layer. The examined materials are represented by the conductive ink on the base of PEDOT:PSS and the Ag-based conducting past, which were deposited on commercially available PET substrates.

In this work, it has been shown that both methods, the UV-VIS spectroscopy and the photoacoustics, can be applied for the assessment of the thickness of PEDOT:PSS based conductive layers. However, the UV-VIS spectroscopy can be sometimes easily affected by the interference of substrate. The photoacoustics, in contrast to the UV-VIS does not handle with such difficulties as the interference. Also the Ag-based ink can be evaluated by using the photoacoustics, but here, the research is now still opened to be continued.

Tato práce vznikla za podpory MSM0021627501.

5L-10**OPTICKÉ A ELEKTRICKÉ VLASTNOSTI KOMPOZITŮ POLOVODIVÝCH POLYMERŮ S PLASMONOVÝMI NANOČÁSTICEMI**

JIRÍ PFLEGER, KLÁRA HALAŠOVÁ, ONDŘEJ DAMMER, SAMRANA KAZIM a AHMED SHARF

*Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6
pfleger@imc.cas.cz*

Nanočástice některých drahých kovů (Au, Ag) vykazují lokální zesílení optických polí způsobené rezonančními interakcemi povrchových plasmonů (kolektivních oscilací volných elektronů) s dopadajícím světlem. Tyto rezonanční procesy mohou zesílit různé fotofyzikální procesy v molekulách sorbovaných na povrchu nanočástic, např. fotochromní konverzi nebo fotoindukovaný přenos náboje, lokálně zesílovat nebo zhasět fluorescenci. Kompozitní polymerní materiály s plasmonovými nanočásticemi jsou využitelné v celé řadě optoelektronických aplikací, ve kterých je požadována lokalizace optického pole: např. u fotochromních paměťových elementů, Ramanovských spektrálních sond a apod. Plasmonové nanočástice výrazně ovlivňují přenos náboje na rozhraní donoru a akceptoru a mohou lokálně zvýšit optickou absorpci ve funkčních molekulárních centrech v blízkosti nanočástice. Zvláště velkého zesílení lze docílit na molekulách umístěných ve fraktálních agregátech nanočástic nebo uvnitř dimerů vázaných nanočástic. V případě polymerních fotovoltaických článků přispívají nanočástice k "fotonovému managementu", který zajistí efektivní využití absorbovaných fotonů při konverzi na elektrickou energii.

Tento příspěvek se zabývá různými způsoby přípravy kompozitů p-konjugovaných polymerů s plasmonovými nanočásticemi a jejich optickými a elektrickými vlastnostmi. Byly připraveny kompozity Au a Ag nanočástic s polovodivými polymery na bázi poly[2-methoxy-5-(2-ethylhexyloxy)-1,4-fenylenevinylenu], MEH-PPV, poly(3-hexylthiofenu), P3HT, a poly(3-oktylthiofenu), P3OT, s objemovou koncentrací nanočástic v intervalu 0,1–20 %.

Pomocí SERS měření bylo prokázáno, že thiofenová skupina polymeru má dostatečnou afinitu k povrchu Au nanočástic a v kompozitu dochází k náhradě původního amoniového stabilizátoru polymerem. U polythiofenů derivatizovaných imidazoliovými a pyridiniovými skupinami byla pozorována tvorba agregátů s velmi vysokým zesílením Ramanova rozptylu. Přítomnost nanočástic zvyšuje stabilitu elektrické vodivosti při vyšších teplotách.

Byly připraveny dva typy fotovoltaických článků: se Schottkyho bariérou a objemovým donor-akceptorovým heteropřechodem na bázi rozpustných derivátů polythiofenu a fullerenu s Au nanočásticemi. Ve druhém typu článků bylo pozorováno zvýšení vnější fotoelektrické účinnosti fotoelektrické konverze absorbovaných fotonů.

Tato práce vznikla za podpory projektu č. KAN100500652 programu výzkumu a vývoje "Nanotechnologie pro společnost".

5L-11

EFFECTS OF SOME RADIATION ENERGIES ON POLYAMIDE 6 AND GLASS FIBER-REINFORCED POLYAMIDE 6**MÁRIA PORUBSKÁ^a, ONDREJ SZÖLLŐS^b, DRAGAN BABIĆ^c, IVICA JANIGOVÁ^d, KLAUDIA JOMOVÁ^a, and IVAN CHODÁK^d**

^a Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Constantine The Philosopher University in Nitra, Tr. A. Hlinku 1, 949 01 Nitra, ^b Biont, a.s., Karloveská 63, 842 29 Bratislava, ^c Institute of Nuclear sciences "Vinca", PO Box 522, 11001 Belgrade, ^d Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava
mporubska@ukf.sk

Development of radiation technologies has allowed chemical modification of polymers also in solid state, what is advantageous particularly for polymers of high melting temperature. Initiation of crosslinking is one of the favorite modification procedures applying irradiation of various types. From this point of view, engineering plastics should be considered since stability of strength, impact, dimensional and other properties are required and can be considerably improved by network formation. Polyamides (PA) are typical examples of this group of materials; nevertheless crosslinking of polyamides is rarely described in scientific literature, especially if dealing with reinforced PA with e.g. glass fibers.

Therefore, the goal of this work consists in a comparison of the effect of various modes of irradiation on properties of glass-fiber reinforced PA-6 with different glass fiber lubrication, while also neat PA-6 was investigated. Electron beam, gamma rays and proton beam have been used for initiation of crosslinking at ambient temperature. Determining mechanical properties, crosslinked gel portion, thermal characteristics, and infra-red spectroscopy, variation of structure due to irradiation was estimated. It was concluded that generally crosslinking has similar effect regardless on the way of initiation, but different parameters vary considering the absorbed dose. Thus, the ultimate properties depend on the mode of irradiation as well as irradiation dose while the presence or absence of the reinforcing filler is also important.

This work was sponsored by the Slovak Research and Development Agency under Grant APVV-51-010405.

5L-12

VYTĚŠŇOVACÍ PRANÍ SULFÁTOVÉ BUNIČINY**FRANTIŠEK POTŮČEK^a, SHELLY ARORA^b a JOZEF MIKLÍK^a**

^a Univerzita Pardubice, FChT, ÚChTML, 532 10 Pardubice,

^b Punjabi University, Department of Mathematics, Patiala 147002, Punjab, India
frantisek.potucek@upce.cz

Statická vrstva nebělené sulfátové buničiny představuje poměrně komplikovaný systém sestávající z polydisperzních,

stlačitelných vláken s vnitřní dutinou, tzv. lumenem. Navíc zvláště v alkalickém prostředí vlákna bobtnají a anorganické látky, ale i lignin se tak nacházejí ve stěně vláken. Vytěšňování výluhu tedy nelze redukovat pouze na náhradu výluhu z prostoru mezi vlákny prací vodou, nýbrž je třeba uvažovat i vyluhování látek z vláknenných stěn, což je velice pomalý děj.

Informace o průběhu vytěšňovacího praní se získají pomocí metody vzruchu a odezvy¹, kdy do vrstvy se zavede skokový vstupní signál. Odezvou je tzv. prací křivka, což je časová závislost koncentrace sledované látky, např. ligninu, v proudu vystupujícím z vrstvy buničiny.

Vytěšňovací praní tedy představuje neustálený děj. Řešením materiálové bilance sledované látky lze odvodit bezrozměrné Péceletovo kritérium, jež charakterizuje tvar prací křivky. Detailnější matematický model však navíc zahrnuje i sorpční jevy a sdílení hmoty ve stěnách vláken².

Průběh prací křivky není ovlivněn pouze geometrickými vlastnostmi vrstvy (např. tvar vláken a jejich měrný povrch, mezerovitost), ale také vlastnostmi prací kapaliny. Ke zvýšení účinnosti praní přispěla přítomnost polymeru v prací vodě v malém množství, řádově v jednotkách g v m³, což vedlo ke změně mobility prací kapaliny³. Rovněž i přidavek jiných látek, jako například močoviny, do prací vody vedl ke zvýšení účinnosti praní, neboť se snížila tloušťka vrstvy kapaliny imobilizované na povrchu vláken, a tím vzrostla průměrná efektivní mezerovitost vrstvy a více výluhu tak bylo odstraněno mechanismem vytěšnění⁴. Vedle toho byly také pozorovány výrazné rozdíly při praní buničiny uvařené z jehličnanů, nebo z listnáčů, kdy vlákna se lišila nejen svou velikostí, ale také morfologickými vlastnostmi a chemickým složením.

Tato práce vznikla za podpory MŠMT ČR v rámci výzkumného záměru MSM 0021627501.

LITERATURA

1. Levenspiel O.: *Teorie a výpočty reaktorů*. SNTL, Praha 1967.
2. Arora S., Potůček F.: *Braz. J. Chem. Eng.* 26, 385 (2009).
3. Potůček F., Marhanová M.: *Cellul. Chem. Technol.* 36, 527 (2002).
4. Potůček F., Pulcer M.: *Chem. Pap.* 60, 365 (2006).

5L-13

IONTOVÉ KAPALINY – ELEKTROLYTY PRO BEZPEČNÉ LITHNO-IONTOVÉ BATERIE**JAKUB REITER^{a*}, MARTINA NÁDHERNÁ^a a ROBERT DOMINKO^b**

^a Ústav anorganické chemie AV ČR, v. v. i., 250 68 Řež,

^b National Institute of Chemistry, Ljubljana
reiter@iic.cas.cz

Komerčně dostupné lithno-iontové baterie obvykle obsahují elektrolyt s těkavými a hořlavými organickými rozpouštědly a jedovatý LiPF₆. Vzhledem k vysoké koncentraci energie v baterii a vysokému riziku vzplanutí nebo explozi při nesprávném používání je vysoce aktuálním tématem hledání bezpečnějších komponent. Cílem našeho výzkumu je sestave-

ni bezpečné 3 V Li-ion baterie s potenciálem použití v hybridních vozidlech (HEV) a elektromobilech (EV). Nahrazení organických rozpouštědel iontovými kapalinami na bázi imidazolia, pyrrolidinia a piperidinia je jedním z řešení. Zvolené iontové kapaliny jsou vysoce tepelně stabilní (do 400 °C), nehořlavé, elektrochemicky stálé a přátelské vůči životnímu prostředí¹.

Náš současný výzkum se zaměřil na přípravu a testování iontových kapalin s $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$, který je perspektivním materiálem kladné elektrody² díky nízké ceně a pracovnímu potenciálu 3,5 V. Nevýhodou je nízká vodivost, která vyžaduje operační teplotu 60 °C. Jako anodový materiál byl použit grafit pro vhodnou pracovní napětí a dobrou kapacitu.

Připravené iontové kapaliny bis(trifluoromethansulfonyl)imid 1-butyl-2,3-dimethylimidazolia BMMI TFSI a 1-butyl-1-methylpyrrolidinia $\text{PYR}_{14}\text{TFSI}$ jsou elektrochemicky stálé do 5 V vs. Li/Li^+ a při 60 °C mají vodivost a viskozitu srovnatelnou s elektrolyty na bázi organických rozpouštědel³.

Galvanostatické testy³ s $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$ ukázaly vysokou stabilitu během procesu nabíjení a vybíjení a kapacitu 110 až 130 mAh g^{-1} . U grafitu⁴ v současné době řešíme otázku stability organického kationtu při potenciálu blízkého 0 V vs. Li/Li^+ . Použité iontové kapaliny jsou chemicky stálé ve styku s lithiem i lithiovaným grafitem, ale při potenciálech 0–0,5 V dochází k reverzibilní ko-interkalaci kationtů PYR_{14}^+ a BMMI^+ do struktury grafitu. Řešením je použití speciálních aditiv, které tento nežádoucí jev potlačuje⁵ a které jsou kompatibilní s $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$.

Tato práce vznikla za podpory Akademie věd ČR (AV0Z40320502) a MŠMT ČR (LC 523).

LITERATURA

- Ohno H. (Ed.): *Electrochemical Aspects of Ionic Liquids*, Wiley-Interscience, New York 2005.
- Dominko R.: *J. Power Sources* 184, 462 (2008).
- Nádherná M., Dominko R., Hanzel D., Reiter J., Gabersček M.: *J. Electrochem. Soc.* 156, 619 (2009).
- Nádherná M., Dominko R., Gabersček M., Reiter J.: *216th ECS Meeting, Vídeň, Rakousko, 4.–9.10.2009*, abstrakt 519.
- Nádherná M., Reiter J., Dominko R.: *J. Power Sources*, připravováno.

5L-14

MODIFICATION OF FIBRE-FORMING POLYMERS FOR PREPARATION SPECIAL COMPOSITE MATERIALS

EVA RUŽINSKÁ

*Technical University in Zvolen, Študentská 26, 960 53 Zvolen
evaruzin@vlsd.tuzvo.sk*

Prognoses of chemical fibres development indicate that the rate of fibre forming polymers with specific properties increases, e.g. ultra-fine fibres utilizable in composite materials or in connection with wooden materials for developing special wood products (uphstery, supporting material)^{1,3}.

Polymers suitable form preparation of fibre-forming mixtures (PP/PA6) are thermodynamic intolerant systems preventing formation of homogenous system. Thus they cause phase interface as a result of enthalpy system increment in polymer mixing. Stability of created phase morphology depends extensively on interfacial agent addition securing improved dispersability and increased components adhesion on the phase interface, and thereby also improvement of physical-mechanical properties of polymer system^{2,3}.

The aim of the paper is a study of interfacial agent influence (PP-MAH) added to the polymer system (polypropylene-polyamide 6) and the assessment of their fibre-forming properties (by Ostwald de Wael rheological two-parameter model and Carreau three-parameter model)⁴. Rheological properties of fibre-forming mixtures were assessed from the point of view of components representation influence and interfacial agent content (0–5 % wt.) at changing content of PP and PA6 components⁵. At the same time morphological structure (used methods: REM, SALS, FT-IR, röntgenography) and chosen physical-mechanical properties of prepared mixture fibres was studied^{6,7}. Experimentally it was demonstrated, that interfacial addition (4 % wt.) improves the level of disperse and adhesion on phase interface, whereby it prevents porous formation and enables the production of fibrous materials with matrix-fibrous structure, applicable also for special composite wooden materials¹.

Research was supported of Slovak Ministry of Education, No. 1/0841/08.

REFERENCES

- Ružinská E.: *Proc. 2nd Int. Symp.- Furniture 2002*, Technical University Zvolen, 2002.
- Berger W., Fischer P.: *Textiltechn.* 35, 6 (1985).
- Tokita N.: *Rubber Chem. Techn.* 50 (1977).
- Favis B. D., Califoux J. P.: *Polym.* 29 (1988).
- Chin H. B., Chan C. D.: *J. Rheology* 13 (1979).
- Lunden B., Schmel F.: *J. Coat. Fabr.* 14 (1984).
- Lipatov J. S., Nesterov A. E., Ignatova T. D.: *Vysokomol. sojed.* 3 (1982).

5L-15

SKLA SYSTÉMU $\text{Ga}_2\text{O}_3 - \text{PbO} - \text{P}_2\text{O}_5$

JIŘÍ SCHWARZ a HELENA TICHÁ

*Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
jiri.schwarz@upce.cz*

Fosfátová skla jsou známa svými unikátními termickými a optickými vlastnostmi^{1,2}. Nižší chemická odolnost fosfátových skel se odstraňuje použitím vhodných modifikátorů (Bi_2O_3 , Fe_2O_3 , PbO , BaO), jejichž nevýhodou bývá posunutí krátkovlnné absorpční hrany do vyšších vlnových délek. Oxid gallitů vyniká vysokou stabilizací skloviny a zároveň nemá tak veliký vliv na oblast optické propustnosti skel^{3,4}. Proto je vhodným kandidátem na substituci s oxidem olovnatým za účelem zvýšení optické propustnosti směrem k ultrafialové

oblasti spektra a zároveň zachování stability skla.

V rámci studia systému $\text{Ga}_2\text{O}_3 - \text{PbO} - \text{P}_2\text{O}_5$ bylo připraveno a studováno celkem 29 vzorků v sedmi řadách (0; 10; 20; 30; 40; 50 a 60 mol.% P_2O_5). Syntéza byla provedena přímou tavbou v platinových a korundových kelímcích. Teplota syntéz se pohybovala v rozmezí 970–1440 °C v závislosti na chemickém složení. Získané vzorky vykazují skelný až krystalický stav. Připravené materiály byly charakterizovány hustotou (3,4–8,2 g cm⁻³), molárním objemem (26,5–48,5 cm³ mol⁻¹), termickými vlastnostmi (teplotou skelné transformace: 206–535 °C; deformační teplotou: 361–672 °C; koeficientem teplotní roztažnosti: 5–16 ppm/°C) a optickými vlastnostmi (optická šířka zakázaného pásu: 4–5 eV; index lomu: 1,7–2,1; Ramanova a infračervená spektroskopie).

Ze získaných výsledků byla stanovena oblast sklotvornosti studovaného systému. Kompoziční závislosti jednotlivých veličin ukazují na modifikační působení oxidu gallitého a olovnatého ve skle. Ramanova i infračervená spektra prokázala fragmentaci fosfátové sítě. S poklesem koncentrace P_2O_5 pozorujeme vstup Ga_2O_3 do strukturní sítě ve formě GaO_4 jednotek.

Studium systému $\text{Ga}_2\text{O}_3 - \text{PbO} - \text{P}_2\text{O}_5$ nám potvrdilo stabilizační funkci Ga_2O_3 , při relativně malém posunu optické propustnosti k vyšším vlnovým délkám v porovnání s běžně užívanými modifikátory. Relativně velká oblast sklotvornosti, nám umožňuje u tohoto systému připravit skelné materiály v relativně široké oblasti materiálových vlastností (koeficient teplotní roztažnosti, index lomu, optická propustnost).

Tato práce vznikla za podpory grantu GA38P199 a MSM0021627501.

LITERATURA

1. Wilder J. A.: J. Non-Cryst. Solids 879, 38/39 (1980).
2. Weber M. J.: J. Non-Cryst. Solids 208, 123 (1990).
3. Dumbaugh W. H., Tyndell B. P.: U.S. Pat. No. 4 456 692, June 26 (1984).
4. Dumbaugh W. H., Tyndell B. P.: U.S. Pat. No. 4 483 931, Nov. 20 (1984).

5L-16

PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE POLYIMIDOVÝCH PĚN

PETR SYSEL^{a*}, JAKUB HRIB^a, MARIE FRYČOVÁ^b a EVGENIA MINKO^a

^a Ústav polymerů, ^b Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6 Petr.Sysel@vscht.cz

Polyimidy jsou polymery, které vykazují celkovou odolnost v širokém teplotním intervalu, přibližně od –150 do 200 °C. Jsou využívány nejčastěji v podobě tenkých vrstev (filmů, vláken), zejména v (mikro)elektronice, leteckém průmyslu a jako membrány¹. Ve všech uvedených oblastech má své opodstatnění uvažovat vedle tradičního využití v podobě neporézních materiálů i (potenciální) aplikace ve formě (nano)pěn. Pěnu lze získat napěněním pomocí činidla přítomného nebo přidaného do reakční směsi (plynu, nížeovroucí

kapaliny), nanopěny pak zejména dodatečným kontrolovaným odstraněním labilního podílu z blokového kopolymeru obsahujícího části lišící se svou termickou stabilitou. Poměrně značným problémem však zůstává příprava pěnových polyimidů s definovanou strukturou, především požadovanou relací mezi zastoupením otevřených a uzavřených pórů. V této práci byl sledován vliv reakčních podmínek, zejména chemického složení polyimidu a teplotně-časového režimu napěňování, na konečný charakter produktu připraveného postupem, při kterém byl jako napěňovací činidlo použit tetrahydrofuran².

Ve směsném rozpouštědle methanol/tetrahydrofuran byly připraveny polyimidové prekurzory, polyamidkarboxylové kyseliny, na bázi 4,4'-oxydifthalanhydridu nebo 3,3',4,4'-benzofenontetrakarboxyldianhydridu a 4,4'-oxydianilinu nebo 3,4'-oxydianilinu. Po cílené úpravě zastoupení pevného podílu ve směsi bylo za zvýšené teploty generováno napěnění a poté při 230 °C dokončena transformace polyamidkarboxylové kyseliny na polyimid. Úplnost transformace byla monitorována IČ spektroskopii. Objemová hmotnost pěn (od 0,04 g cm⁻³ pro některé produkty na bázi 3,3',4,4'-benzofenontetrakarboxyldianhydridu až po 0,12 g cm⁻³ na bázi 4,4'-oxydifthalanhydridu) korelovala se zastoupením uzavřených pórů (přibližně 10–35 %). Žádný z připravených produktů nevykazoval výraznější hmotnostní úbytek při teplotách do 300 °C (termogravimetrická analýza, gradient 10 °C min⁻¹, atmosféra dusíku). Pěny odolávají velmi dobře běžným rozpouštědlům (např. hexanu, acetonu) a zároveň v nich (včetně vody) vykazují nasákavost až stovky procent.

Tato práce vznikla za podpory projektu MSM 6046137302 a GA ČR 104/09/1357. Autoři též děkují RNDr. Z. Pientkovi, CSc. z Ústavu makromolekulární chemie AV ČR v.v.i., Praha za pomoc při stanovení zastoupení uzavřených pórů v pěnách metodou plynové pyknometrie.

LITERATURA

1. Hergenrother P. M.: High Perform. Polym. 15, 3 (2003).
2. Cano C. I., Weiser E. S., Kyu T., Pipes R. B.: Polymer 46, 9296 (2005).

5L-17

HODNOCENÍ MECHANICKÉ ODOLNOSTI PIGMENTOVANÝCH NÁTĚRŮ V DEFINOVANÉM DEFORMAČNÍM POLI

EVA SCHMIDOVÁ^a, PAVEL ŠVANDA^a, DAVID VESELÝ^b a ANDREA KALEDOVÁ^b

^a Katedra dopravních prostředků, Dopravní fakulta Jana Pernera, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice, ^b Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice eva.schmidova@upce.cz

Předmětem prezentované práce je návrh a ověření nové metodiky testování mechanické odolnosti a přilnavosti pigmentovaných alkydových pryskyřic. Cílem bylo navrhnout metodiku zkoušení, která by umožnila kvantitativní hodnoce-

ni stability nátěrů při přesně definovaných podmínkách zatěžování. Standardně aplikované testy vnášejí do zatěžovaného materiálu i nátěru komplexní prostorovou napjatost a zároveň nerovnoměrný vliv tření na rozhraní identor-nátěr. Tato kombinace prakticky znemožňuje korektní identifikaci působících složek zatížení a tedy vyhodnocení mechanické odolnosti nátěrů. To motivovalo výzkum chování nátěru v závislosti na daném napětově-deformačním stavu podkladového materiálu. Provedené studium metodicky vycházelo z mechanických zkoušek při jednoosém zatěžování vzorků s nátěrem v různých koncentracích antikoročních pigmentů. Tvar a rozměry vzorků umožnily vyhodnocení lokálních změn deformačního přetvoření při rozdílu 1-osé vs. 2-osé napjatosti, případně plastické anizotropii pokladové oceli. Měření deformace povrchu bylo provedeno pomocí optického systému Aramis 4M, kt. umožňuje prostřednictvím dvou kamer vyhodnotit 3D deformace formou deformačních map. Mapy byly následně konfrontovány s vyvolaným poškozením nátěrů, tj. vytvořen záznam deformace vs. poškození. V současné době jsou obdobné systémy používány pro hodnocení napětových stavů materiálů bez povlaku¹. Uvažovaná metodika hodnocení otevírá rovněž možnosti studia vlivu fundamentálních mechanismů, probíhajících v podkladovém materiálu. Jako jeden z podstatných efektů lze hodnotit vlivy spojené s masivní produkcí a pohybem dislokací v základním materiálu směrem k rozhraní s aplikovaným nátěrem. Kumulace dislokací na volném povrchu vzorků tvoří na rozhraní s nátěrem specifický reliéf, a to zejména v etapě dosažení plastické nestability vzorku. Výsledky vstupní série experimentů ukázaly vypovídací schopnosti optického systému hodnocení, konkrétně pro stanovení mezní deformace do porušení soudržnosti nátěru. Z analýz rovněž vyplynuly možnosti hodnocení v kombinaci s korozním zatěžováním nátěrů.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR č. 1M0519.

LITERATURA

1. Geiger M., Merklein M.: CIRP Ann. 52, 213 (2003).

5L-18 TECHNOLOGIE INKJET TISKU NA KATEDŘE POLYGRAFIE A FOTOFYZIKY

MIROSLAV TEJKL

*Katedra polygrafie a fotofyziky, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice
mirek.miroslav@gmail.com*

Oblasti využití inkjet technologie sahají daleko za hranice grafického tisku, pro který byla původně vyvinuta. Svě uplatnění si nachází i v produkční výrobě, kde je třeba nanášet tenké vrstvy kapaliny nebo vytvářet obrazce s velkou prostorovou i objemovou přesností. Materiálový a technologický vývoj činí tuto technologii levnější a dostupnější. Pro úspěšnou aplikaci této technologie je důležité rozumět jejím principům a omezením, ze kterých vyplývají požadavky na vlastnosti tiskového inkoustu či kapaliny. Neméně důležité jsou vlastnosti související s interakcí s tiskovým substrátem.

Studiem této problematiky se zabýváme na KPF již několik let. Cíle dosažené za poslední 4 roky budou představeny v tomto příspěvku. Problematika přípravy pigmentových preparací pro vodu ředitelné i UV zářením tvrditelné akrylátové inkousty byla řešena ve spolupráci s firmou Synthesia. Pigmentové preparace byly připraveny mletím za mokra pomocí skleněné balotiny v laboratorním mlýnu značky Dynomill. Problematika formulace inkoustů byla řešena za využití metod plánování experimentu, které umožnily sledovat vliv jednotlivých složek inkoustu na jeho vlastnosti. Podařilo se naformulovat CMYK sadu vodu ředitelných inkoustů, azurový UV zářením tvrditelný radikálově polymerující akrylátový inkoust a průhledný UV zářením tvrditelný kationtově polymerující tiskový lak. Další studie se zabývaly interakcí inkoustu s tiskovým substrátem, kdy byly pozorovány tvary tiskových bodů v souvislosti s různými vlastnostmi potiskovaných materiálů. Většina tiskových testů byla realizována na KPF pomocí upravené stolní tiskárny Epson pro vodu ředitelné inkousty a na nátiskovém zařízení vlastní konstrukce vybaveným průmyslovou tiskovou hlavou Xaar pro nevodné a UV zářením tvrditelné inkousty. Perspektivní aplikaci představuje využití této technologie pro přípravu tenkých vodičových polymerních vrstev.

5L-19 ACRYLIC MONOMERS EMITTED BY COATING FILMS OF WATER BORNE LACQUERS AND PAINTS

**DANIELA TESAŘOVÁ, PETR ČECH, and ALENA
ANSORGOVÁ**

*Mendel University of Brno, Zemědělská 1, 613 00 Brno
tesar@mendelu.cz*

This paper investigates the problematic of VOC emissions especially the part of acrylate emitted by water borne coating films and water borne paints and lacquers during finishing wood based materials by them. There were monitored emissions of acrylates such as wood and wood based materials and their behavior in time. Different types of wooden based materials, particle board and medium density fiberboard have been chosen as tested samples for comparing in view of emitted acrylates by coating materials. The new method for measuring of emitted acrylates for testing by GC-MS was developed. The results of measuring were evaluated quantitatively and qualitatively. Quantitative difference of all emitted organic compound showed the measured values of TVOC. Repeating of measurements showed the dependency of amount of emissions on time. The results of testing residual acrylic monomers in finish coating films and substrate are investigated in this article too. All results were compared with limits mandated in the standard of Ministry of Health of the Czech Republic.

5L-20 CHALKOGENIDOVÁ SKLA – MATERIÁLY PRO FOTONIKU

MIROSLAV VLČEK

Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice

miroslav.vlcek@upce.cz

Chalkogenidová skla je velice široká skupina anorganických materiálů, kterou lze označit jako analogy oxidových skel, ve kterých je atom kyslíku nahrazen některým z těžších prvků 16. skupiny periodické tabulky prvků. Jejich elektropozitivnějším partnerem v základní skelné matici pak jsou zpravidla prvky 14. a 15. skupiny periodické tabulky prvků (typickými jsou As nebo Ge), případně je složení modifikováno i dalšími atomy (např. Cu, Zn, Ag). Velká variabilita ve složení chalkogenidových skel dává možnost připravit binární, ternární i multikomponentní amorfni materiály se zcela specifickými vlastnostmi potřebnými pro konkrétní aplikaci.

V předkládané práci jsou shrnuty výsledky našeho studia vlastností tenkých vrstev chalkogenidů As a Ge a možností jejich modifikace s ohledem na možné využití těchto materiálů v oblasti fotoniky ve viditelné i infračervené části spektra. Je zde věnována pozornost studiu vlivu složení vrstev a podmínek expozice na fotocitlivost vrstev (vrstvy expozicí vhodným zářením mění signifikantně svůj index lomu a optickou šířku zakázaného pásu), na fotoindukované změny chemické reaktivity (vrstvy lze po lokální expozici selektivně leptat a přenášet tak obraz předlohy do těchto vrstev, případně jich využít jako fotorezistů s vysokým rozlišením pro přenos obrazu předlohy do podložky). Speciální pozornost je věnována i možnostem přímé korugace povrchu intenzivním laserovým paprskem. Tato metoda umožňuje tvorbu 3D struktur submikronových motivů bez jakékoliv doplňkové operace.

V práci je věnována pozornost i možné rozlišovací schopnosti při tvorbě mikro- a nanostruktur ve vrstvách chalkogenidů různými technikami. Je ukázáno, že vzhledem k amorfni charakteru vrstev a jejich citlivosti i na expozici svazkem elektronů lze v těchto vrstvách vytvářet skutečné nanostruktury (šířka motivů desítky nanometrů). Možnost tvorby takto jemných motivů v chalkogenidových sklech, které se vyznačují obecně vysokou hodnotou indexu lomu (2 až 3,2), vysokou hodnotou nelineárního indexu lomu (až 500× vyšší než SiO₂), transparentností v IČ oblasti (až do 10–20 μm dle volby chalkogenu), je předurčuje pro tvorbu celé řady fotonických prvků.

V závěru práce jsou proto uvedeny konkrétní příklady současných i potenciálních aplikací chalkogenidových skel ve fotonice.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR 0021627501.

5L-21 VRSTEVNATÉ ORGANOFOSFONÁTY KOVŮ: NOVÉ PERSPEKTIVNÍ ANORGANICKO-ORGANICKÉ HYBRIDNÍ MATERIÁLY

VÍTĚZSLAV ZIMA^{a*}, JAN SVOBODA^a, KLÁRA MELÁNOVÁ^a, LUDVÍK BENEŠ^b, MIROSLAVA TRCHOVÁ^c a JIŘÍ BRUS^c

^a Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského náměstí 2, 162 06 Praha 6 – Břevnov, současná adresa: Společná laboratoř chemie pevných látek, ÚMCh AV ČR, v.v.i. a Univerzity Pardubice, Studentská 84, 532 10 Pardubice,

^b Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 573, 532 10 Pardubice, ^c Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského náměstí 2, 162 06 Praha 6 – Břevnov

vitezslav.zima@upce.cz

Byla připravena a charakterizována řada nových dosud nepopsaných fenylfosfonátů a karboxyfenylfosfonátů kovů alkalických zemin a přechodných kovů. U tří karboxyfenylfosfonátů alkalických kovů s obecným vzorcem Me(HOOC₆H₄PO₃) (Me = Ca, Sr, Ba) byla určena jejich struktura z práškových rentgenových difraktogramů pomocí ab initio programu FOX. Hydrotermální syntézou byl připraven karboxyfenylfosfonát mědi, Cu(HOOC₆H₄PO₃), a z dat monokrystalové difrakce určena jeho struktura. Anorganická část této struktury je prvním případem sloučeniny mědi, v němž je uspořádání atomů kovu a atomů kyslíku analogické gibbsitickému dioktaedrálnímu uspořádání známému z některých typů jilu. Všechny uvedené sloučeniny se obecně skládají z anorganických vrstev, z nichž do mezivrstevního prostoru vyčnívá organická část.

Nově připravené fenylfosfonáty kovů s obecným vzorcem MeC₆H₅PO₃ · y H₂O (Me = Ca, Sr, Ba) se ukázaly být vhodnými hostitelskými materiály pro interkalaci reakce. Konkrétně se podařilo do těchto materiálů interkalovat homologickou řadu alifatických aminů a v některých případech i alkoholy. Dalším vhodným hostitelským materiálem je dosud nepopsaný methylfosfonát stroncia, jehož anorganická část je strukturně analogická fenylfosfonátu stroncia SrC₆H₅PO₃ · 2 H₂O. Tento materiál je schopen tvořit interkalaci sloučeniny s aminy, alkoholy a některými polymerními látkami.

Ze skupiny funkcionalizovaných fosfonátů kovů, patří mezi nejzajímavější látky obsahující sulfonylovou skupinu vázanou na benzenové v para poloze vůči fosfonové skupině. Tak bylo připraveno a charakterizováno několik nových 4-sulfofenylfosfonátů čtyřmocných kovů s obecným vzorcem Me(RPO₃)_x(HO₃SC₆H₄PO₃)_{2-x} · y H₂O (Me = Zr, Ce, Ti; R = C₆H₅, CH₃, OH; x = 0–1; y = 0–3). Díky silně kyselým sulfonové skupině v para poloze benzenového jádra jsou tyto sloučeniny schopny tvořit velmi stabilní interkaláty s látkami obsahujícími bazické funkční skupiny, zvláště s aminoskupinou, nebo mohou sloužit jako iontoměniče. Pomocí impedanční spektroskopie byla u těchto látek zjištěna zvýšená protonová vodivost.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 203/08/0208.

5P-01**DERIVATIZATION AND ANALYSIS OF CARBON NANOTUBES**

MAREK ELIAS^b, LENKA ZAJÍČKOVÁ^b, PETR SYNEK^b, ONDŘEJ JAŠEK^b, NAGENDER REDDY PANYALA^a, GRACIAN TEJRAL^a, MILAN ALBERTI^{a,b}, JOSEF HAVEL^{a,b}, and MILOŠ KLÍMA^b

^a Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, 611 37 Brno, ^b Department of Physical Electronics, Faculty of Science, Masaryk University, 611 37 Brno
alberti@chemi.muni.cz

Derivatization of carbon nanotubes (CNTs) attained significant interest in the field of electronics, chemistry, biology and medicine¹. Modification of CNTs by carboxylic groups and the others has been reported^{2,3}. In this work the functionalization of multi-walled CNTs in O₂/Ar and H₂O/Ar low pressure capacitive discharges was studied by XPS and FT-IR. Successful plasma functionalization was confirmed by changes in atomic composition and chemical shift of the XPS atomic signals. One hour functionalization in H₂O/Ar and O₂/Ar capacitive coupled discharge increased the oxygen concentration in CNT powder to 13.5 and 17.0 at.%, respectively. It was more than twice the amount of oxygen in commercial CNTs-COOH but oxygen was probably incorporated also in the walls of CNTs. The functionalization was indicated also by the shift of IR absorption peaks corresponding to the motion of carbon skeleton, especially the peak at about 1 560 cm⁻¹. The presence of carbonyl was confirmed by IR absorption peak at 1 723 cm⁻¹ only for O₂/Ar plasma. Significant changes has been detected by application of the atmospheric plasma discharge, generated by means of plasma pencil on the suspensions of CNTs in distilled water or hydrogen peroxide.

Laser desorption-ionization time of flight (LDI-TOF) mass spectrometry of CNTs has been reported⁴. The laser desorption ionization time of flight (LDI-TOF) mass spectrometry with 337 nm nitrogen laser was also used to characterize functionalized carbon nano-tubes (CNTs) measuring LDI mass spectra. Functionalized CNTs, namely derivatized with hydroxyl (CNT-OH), carboxylic (CNT-COOH) or amino groups (CNT-NH₂) were analyzed. The spectra in positive or negative ion linear detection modes and the comparison with mass spectra of non-functionalized CNTs show that mostly the positive and negative charged carbon clusters are observed.

C_n-COOH⁺ (*n* = 1–8), C_nN⁺ (*n* = 3–10) clusters were detected in CNT-COOH and CNT-NH₂ mass spectra. C_n-COOH⁻ (*n* = 1–4), C_nOH⁻ clusters (*n* = 2–9), C_nN⁻ (*n* = 1–9) were detected in CNT-COOH, CNT-OH and CNT-NH₂ mass spectra respectively. Trace impurities like Li⁺, Fe⁺, H⁺ ions were observed. LDI TOF mass spectrometry was found suitable to get fast characteristics of non- and derivatized CNTs. Advantages and limitations of the approach are discussed.

This work was supported by the contracts and the grants MSM 0021622411, 104/09/H080, MSM 0021622411, P205/10/1374 and MI&T of CR FR-TI1/413.

REFERENCES

1. Duclaux L.: Carbon 40, 1751 (2002).
2. Kirikova M. N., Ivanov A. S., Savilov V. V., Lunin V. V.: Russ. Chem. Bull. 57, 298 (2008).
3. Zajíčková L., Kučerová Z., Buršíková V., Eliáš M., Houdková J., Synek P., Maršíková H., Jašek O.: Plasma Processes Polym. 6, 5864 (2009).
4. Šedo O., Alberti M., Janča J., Havel J.: Carbon 44, 840 (2005).

5P-02**STUDY OF PHYSICAL-MECHANICAL PROPERTIES OF RUBBER COMPOUND WITH ADDITION OF MONOIONS FORMS OF CLINOPTILOLITE**

TATIANA BAZYLÁKOVÁ*, DARINA ONDRUŠOVÁ, MARIANA PAJTAŠOVÁ, SLÁVKA ĽALÍKOVÁ, MILAN OLŠOVSKÝ, and PETER POČAROVSKÝ

Faculty of Industrial Technologies, TnU AD, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov
bazylakova@ipt.tnuni.sk

The present work deals with the preparation and study of physical and mechanical properties modified rubber compounds. In a function of filler was used natural zeolite (clinoptilolite) and his monoions forms. The zeolite is from a group of hydrated aluminosilicates. The prepared modified polymer compounds were characterized by physical-mechanical properties of vulcanizates^{1,2}.

Rheological and vulcanization performances (*M_L*, *M_H*, *t_S*, *t₉₀*, *R_V*) of prepared rubber compounds with the addition of natural zeolite and his monoions forms were tested.

For determination of physical-mechanical properties of vulcanized newprepared modified rubber – stress-strain properties (tensile strength, modulus 300, tensibility) was made by instrument INSTRON at the temperature 23 ± 2 °C by STN 62 1436 (ISO 37)³. Hardness was measured by hardness tester IRHD by STN 62 1431 at the temperature⁴ 23 ± 2 °C.

The found values were compared with the values of commercially used polymer materials with the original filler carbon black.

The authors wish to thank the AV grant No. 4/2014/08 for financial support.

REFERENCES

1. Jesenák K.: Chem. Listy 101, 657 (2007).
2. Ducháček V.: *Polymery - výroba, vlastnosti, zpracování, použití*, s. 154, 2. vyd. VŠCHT v Praze, Praha 2006.
3. Stanovenie ťahových vlastností STN 62 1436 (ISO 37).
4. Stanovenie tvrdosti STN 62 1431.

5P-03**ANTIKOROZNÍ PIGMENTY TYPU CORE-SHELL
Me_xZn_{1-x}Fe₂O₄/Zn V ORGANICKÝCH POVLACÍCH****PETR BENDA a ANDRÉA KALEDOVÁ***Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
petrbenda@email.cz*

Příspěvek pojednává o antikoročních pigmentech na bázi feritů. Konkrétně pak o možnostech přípravy a aplikace jádrových feritových pigmentů typu Me_xZn_{1-x}Fe₂O₄/Zn, které využívají výhod své struktury, kdy jsou feritové částice naneseny na zinkovém jádře, čímž vytváří zcela nový typ pigmentů. Výsledný antikoroční pigment je tedy tvořen třemi hlavními složkami: jádro tvořené lamelárními částicemi zinku, 1. vrstva jádra (mezivrstva) je tvořená částicemi oxidu zinečnatého – částečně naoxidovaná jádra a 2. vrstva jádra, (obal) tvořená feritem se spinelovou strukturou. Pigment spojuje výhody aktivního antikoročního účinku feritů, bariérový efekt i výrazné elektrochemické antikoroční působení jádrového zinku.

Obecně můžeme jako ferity označit skupinu spinelů reprezentující pigmenty s trojvaznými feritovými kationty, přítomnými v základní buňce v kombinaci s vhodnými dvojjazynými kationty s parametry pro formování elementární kubické mřížky¹. Kationty Zn²⁺ a Mg²⁺ jsou optimální díky svému atomovému poloměru pro vytvoření spinelové mřížky a tvorbu směsných oxidů².

Jestliže je použit zinkový prach jako výchozí látka, povrch Zn částic snadno podléhá oxidaci na ZnO. Toho je využito při přípravě pigmentu. Vezmeme-li v úvahu, že teplota tání zinku se pohybuje okolo 419,5 °C a je požadováno pouze částečné naoxidování částic zinku z reakční směsi, je jako jeden z možných způsobů přípravy provedení krátkého výpalu při 400 °C.

Z výsledků antikoročních zkoušek můžeme konstatovat, že všechny připravené pigmenty významně zvyšují antikoroční účinnost systému pigment-pojivo. Pigmenty s jádrovým zinkem lamelárního tvaru dosahují lepších antikorozní vlastností než pigmenty s izometrickými částicemi. Jádro tvořené Zn zvýší antikorozní vlastnosti. Nejvyšší antikorozní účinnosti dosáhly pigmenty se složením Mg_{0,2}Zn_{0,8}Fe₂O₄/Zn a Ca_{0,2}Zn_{0,8}Fe₂O₄/Zn. Antikorozní účinek jádrových feritů lze označit jako komplexní. Bylo dosaženo velmi dobrých výsledků proti všem testovaným činitelům koroze. Výše uvedené hodnocení se vztahuje k systému, kde bylo jako pojivo použito epoxyesteru.

LITERATURA

1. Kalendová A., Šňupárek J., Kalenda P.: *ACS Symposium on Corrosion Control by Coatings*, New Orleans LA, 1987.
2. Krupička S.: *Fyzika feritů a příbuzných magnetických kyslíčků*. Akademia, Praha 1969.

5P-04**VLIV PROSTŘEDÍ NA REDUKCI KYPOVÝCH
BARVIV PRO BARVENÍ CELULOSOVÝCH
MATERIÁLŮ****ZDEŇKA BLECHOVÁ, MICHAL ČERNÝ a LADISLAV
BURGERT***Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
zdenka.blechova@student.upce.cz*

Tato práce je zaměřena na vliv modifikace kypových barviv pro barvení celulosových vláken. Jelikož je pigment kypového barviva ve vodě nerozpustný a z tohoto důvodu nemá dostatečnou afinitu k celulosovému vláknu, zredukuje se pigment barviva pomocí dithioničitanu sodného na rozpustnou tzv. leukosloučeninu s velmi dobrou afinitou. Reoxidací leukoformy barviva na vlákně dojde k vytvoření původního pigmentu barviva. Důležitými parametry při hodnocení kypových barviv jsou rychlost a míra redukce. Byl studován vliv teploty (40, 60 a 90 °C) a alkalického prostředí (louh sodný, uhličitán sodný) na rychlost a míru redukce kypového barviva. Výše uvedené vlastnosti kypových barviv byly studovány na následujících komerčních barvivech založených na antrachinonovém typu: C.I. Vat Red 10, C.I. Vat Red 13, C.I. Vat Red 14, C.I. Vat Red 32.

U výše uvedených kypových barviv byly sledovány hodnoty leukopotenciálů potenciometricky a kinetika redukce kypového barviva optickou metodou. Míra redukce (hodnota leukopotenciálu) je charakterizována oxidačně-redukčním potenciálem kypového barviva, který se stanovil potenciometrickou titrací Ferrikyanidem draselným K₃[Fe(CN)₆]. Z titrační křivky byla určena hodnota leukopotenciálu E_A. Pro stanovení rychlosti redukce byla použita optická metoda využívající vlastnosti kypových barviv, tzn. odlišnou barevnost roztoku leukoformy od původního dispergovaného pigmentu barviva. Pro jednotlivá barviva byl zvolen odpovídající postup jejich redukce pomocí dithioničitanu sodného.

Z naměřených výsledků je zřejmé, že u barviva C.I. Vat Red 13 se hodnota leukopotenciálu se vzrůstající teplotou zvyšovala. Barviva C.I. Vat Red 10, C.I. Vat Red 14 a C.I. Vat Red 32 dosahují, dle tvaru titrační křivky, nízkého zatížení a tvorby agregací, na rozdíl od barviva C.I. Vat Red 13, kde je velký předpoklad tvorby agregovaných molekul a vedlejších vazeb. Grafické závislosti u poločasu rozpadu dokazují, že se vzrůstající teplotou dochází ke zrychlení a zlepšení redukce pigmentu kypového barviva. Výjimkou je opět barvivo C.I. Vat Red 13, kde byla kinetika redukce za vyšších teplot pomalejší.

*Tato práce vznikla za podpory grantu MSM 0021627501.***LITERATURA**

1. Hladík V.: *Textilní barviřství*, s. 70, 142. SNTL, Praha 1982.
2. Kogan J. M.: *Chemie barviv*, s. 445. SNTL, Praha 1960.
3. Peters R. H.: *Textile chemistry III.*, s. 473-493. Elsevier scientific publishing company, 1975.

5P-05

VÝVOJ HYDROGELŮ NA BÁZI HUMINOVÝCH KYSELIN

ZDENĚK CIHLÁŘ*, JAN DAVID a JIŘÍ KUČERÍK

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

Huminové kyseliny (HK) a jejich modifikované deriváty představují unikátní materiál s aplikačním potenciálem v mnoha oborech lidské činnosti jako je zemědělství, průmysl a ekologie. Cílem této práce je zmapovat možnosti zesíťování lignitických huminových kyselin s ohledem na zvýšení jejich retenční kapacity vody.

HK použité v této práci byly vyextrahovány z jihomoravského lignitu (Mikulčice) standardní alkalickou extrakcí. Získaný vzorek HK byl následně oxidován buď HNO_3 nebo H_2O_2 . Oxidované huminové kyseliny byly dále modifikovány pomocí formaldehydu. Během modifikace se předpokládá reakční mechanismus podobný mechanismu vzniku fenol-formaldehydových oligomerů vedoucí k zesíťování supramolekulové struktury huminových kyselin a tím vzniku hydrogelu. Afinita a retence vody v připravených vzorcích byla studována pomocí dvou metod termické analýzy: diferenční kompenzační kalorimetrie (DSC) a termogravimetrické analýzy (TGA). Ke studiu obou parametrů bylo použito dvou odlišných způsobů hydratace vzorků HK. První přístup představoval sorpci vody na HK při třech kontrolovaných vzdušných vlhkostech, k jehož popisu bylo využito TGA. Druhý přístup byla kinetická studie založená na sledování množství pevně vázané vody strukturou HK; v principu, pomocí DSC lze studovat tzv. volnou vodu, tzn. vodu, která není v přímém kontaktu s povrchem HK. Výsledky získané z TGA vzorků HK umístěných v prostředí s definovanou relativní vzdušnou vlhkostí naznačují zvyšující se sorbční schopnost s rostoucí relativní vzdušnou vlhkostí okolní atmosféry. Také bylo potvrzeno, že modifikace HK vedla k zvýšení jejich adsorpčního potenciálu. V případě tohoto experimentálního uspořádání se zdá, že voda se vázala pouze na povrchu HK a její prostup strukturou byl limitován.

Na základě hodnot získaných z DSC měření v hermeticky uzavřených vzorkovnicích bylo patrné, že pronikání vody strukturou HK je komplikovaný proces a jeho kinetika je závislá na mnoha faktorech, systém dosáhl rovnováhy po 21 dnech. Zjednodušeně řečeno, vnitřní struktura HK, charakteristická svým velkým vnitřním povrchem, byla postupně hydratována, docházelo ke vzniku pevných vodíkových můstků mezi vodou a povrchem a tím i imobilizaci molekul vody, kterou již nelze pomocí DSC monitorovat.

Všechny upravené vzorky HK (oxidované i modifikované a modifikované pomocí formaldehydu) vykazovaly vyšší retenci vody v porovnání s nemodifikovaným vzorkem, což potvrdilo původní předpoklad o možnosti tvorby hydrogelů na bázi huminových kyselin.

Tato práce vznikla za podpory projektu MŠMT 0021630501.

5P-06

VYUŽITIE EKOLOGICKÝCH ZMÄKČOVADIEL V GUMÁRENSKEJ PRAXI A SLEDOVANIE ICH VPLYVVU NA FYZIKÁLNO-MECHANICKÉ VLASTNOSTI VULKANIZÁTOV

JANA ĎURFINOVÁ, IGNÁC CAPEK, IGOR NOVÁK, JANKA JURČIOVÁ, MICHAL LACKO a RÓBERT JURÍK

Ústav polymérnych materiálov, FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
 janka.durfinka@centrum.sk

Pôsobenie zmäkčovadiel v zmesiach má aj difúzny charakter. Mäkčenie kaučuku a jeho zmesi je výsledkom procesu napučievania kaučuku zmäkčovadlom. Kaučuk sa tak stáva mäkkým, znižuje sa jeho modul elastickej aj viskozity¹. Hlavnou príčinou týchto zmien je ovplyvňovanie medzimolekulových síl zmäkčovadlom. Jeho molekuly v procese napučievania difundujú do hmoty kaučuku medzi jeho jednotlivé makromolekuly, oddeľujú ich a tým znižujú medzimolekulové, vnútramolekulové príťažlivé sily. Zároveň sa tvorí nové medzimolekulové pôsobenie medzi kaučukom a zmäkčovadlom. Výsledkom je zníženie počtu fyzikálnych väzieb, tým zvýšenie pohyblivosti segmentov polymérnych molekúl čo sa prejaví zvýšením elastickej, mäkkosti a lepšej spracovateľnosti zmesi².

Naším prioritným zámerom bolo použiť v gumárnskych zmesiach ekologické zmäkčovadlo, ktorým sa snažíme nahradiť dlho používaný avšak škodlivý vysokoaromatický Gumodex. Pri koncentračnom zastúpení 1 až 5 % kyseliny olejovej sme namerali fyzikálno-mechanické vlastnosti zapísané v tabuľke I. Vidno zvýšenie pevnosti v ťahu hlavne pri obsahu 5 % kyseliny olejovej. Možno pozorovať menšiu ťažnosť kyseliny olejovej v porovnaní so štandardom Gumodex. V M300 sme postrehli rozdiely na vyšších hodnotách u kyseliny olejovej. Predĺženie je porovnateľné s Gumodexom, najvyššiu hodnotu sme dosiahli u kyseliny olejovej pri obsahu 3 %. Tvrdość u kyseliny olejovej dosiahli o niečo vyššie hodnoty.

Venovali sme pozornosť vplyvu zmäkčovadiel na pevnosť v ťahu, ťažnosť, predĺženie, M300 a tvrdość. Použitie ekologického typu zmäkčovadla, konkrétne kyseliny olejovej, ukázalo zlepšenie fyzikálno-mechanických vlastností gumárnskych zmesí. Z nameraných výsledkov možno konštatovať

Tabuľka I

Porovnanie vlastností zmäkčovadla a štandardu. ko-kyselina olejová

Zmes	Pevnosť [Mpa]	Ťažnosť [%]	M300 [Mpa]	Predĺženie [mm]	Tvrdość [ShA]
1% ko	17,00	355	14,35	115	63
2% ko	21,07	368	17,20	258	70
3% ko	22,00	406	16,30	283	70
4% ko	22,30	400	16,70	149	65
5% ko	22,60	420	16,14	189	68
Gumodex	16,89	500	10,13	200	59

vať, že sledované zmäkčovadlo je vhodnou náhradou za škodlivý Gumodex.

LITERATÚRA

1. Doroškin M., Chusajnova R. M., Minigaliv T. G.: Využitie gum. drvinny so zmäkčovadlom. *Kaučuk i Rezina* (2003).
2. Kovářová M.: *PZP v gum. průmyslu*. SPUR a.s., Zlín 1999.

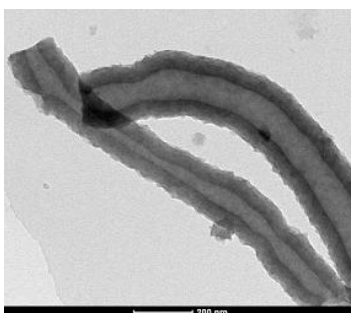
5P-07

NOVÉ MATERIÁLY NA BÁZI KARBONIZACE POLYANILINU

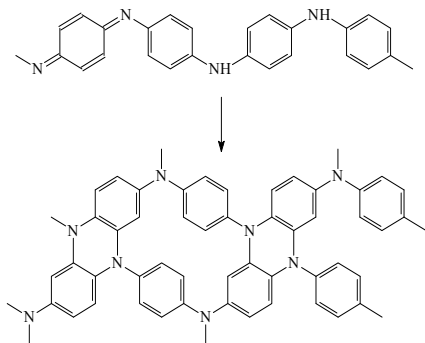
MILENA EXNEROVÁ, ZUZANA ROZLÍVKOVÁ, MIROSLAVA TRCHOVÁ a JAROSLAV STEJSKAL

Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6-Břevnov
exnerova@imc.cas.cz

Polyanilin je jedním z velmi studovaných vodivých polymerů. Kromě vodivosti je polyanilin zajímavý různou morfologií vznikající v závislosti na polymeračních podmínkách. Standardní polymerace anilinu v silně kyselém prostředí poskytuje granulární strukturu. Pokud však polymeraci anilinu provedeme ve vodě nebo v mírně kyselém prostředí kyseliny octové, získáme v produktu podstatný podíl polyanilinových nanotrubeček (obr. 1). Jejich vnější průměr je 100–200



Obr. 1. Polyanilinové nanotrubečky po karbonizaci



Obr. 2. Karbonizační přeměna polyanilinového řetězce

nm, otvor uvnitř nanotrubeček až 100 nm a délka dosahuje až několik mikrometrů (obr. 1). Na každém povrchu ponořeném do polymerační směsi vznikají dále tenké polyanilinové filmy.

Polyanilin se dá karbonizovat při teplotách nad 600 °C v inertní atmosféře za vzniku uhlíkových struktur obohacených dusíkem (obr. 2). Nanotubulární morfologie přitom zůstává zachována (obr. 1). Vznikají tak materiály podobné komerčním mnohostěnným uhlíkovým nanotrubečkám.

5P-08

PŘÍPRAVA A VLASTNOSTI ZRÁŽANÉHO HYDROXIDU HOREČNATÉHO

EVA SMRČKOVÁ, LADISLAV PACH, JANA GABČOVÁ a PAVEL FELLNER

Ústav anorganické chémie, technológie a materiálov, FCHPT, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
jana.gabcova@stuba.sk

Pri priemyselnej výrobe $Mg(OH)_2$ sa v prvom stupni pridáva do roztoku dusičnanu horečnatého (DH) za miešania prebytok čpavkovej vody (ČV), pričom prebieha nukleácia a rast kryštálov. Nukleácia je pravdepodobne v tomto stupni syntézy ukončená, ale rast kryštálov sa z kinetických dôvodov zastaví pravdepodobne na nižšej úrovni, ako je rovnovážna. V druhom stupni, za hydrotermálnych podmienok, sa rovnováha reakcie výrazne posunie doprava. Dobehe rast kryštálov, zúži sa rozsah veľkosti kryštálov, zníži sa objemová a povrchová poruchovosť kryštálov.

Oddelenie procesu nukleácie a rastu zín možno dosiahnuť rôznym spôsobom, napr. určitým vnášaním zložiek do reaktora, rôznym tvarom reaktora a rôznym spôsobom miešania reagujúceho roztoku. Jednou z takýchto možností je kontinuálny reaktor. Je to jednoduché zmiešavacie zariadenie, v ktorom vo výstupnej časti prebieha nukleácia a v pripojenom reaktore rast kryštálov. Reaktory s touto funkciou prispievajú k štandardizácii procesov a reprodukovateľnosti výsledkov.

V experimentálnej časti sa sleduje vplyv zmiešavania reaktantov a hydrotermálneho spracovania na vybrané reologické vlastnosti reakčných suspenzií, ktoré významnou mierou ovplyvňujú technologický proces. Použili sa dva spôsoby zrážania: vsádzkový (B) a kontinuálny (C), do ktorých sa dávkovali reaktanty v molárnom pomere ČV / DH od 2,7 do 6,9. V práci sa diskutujú výsledky sledovania sedimentácie a dynamickej viskozity v závislosti od experimentálnych podmienok.

Rýchlosť sedimentácie a sedimentačný objem úzko súvisia s veľkosťou častíc, koncentráciou a vzájomným silovým pôsobením medzi zložkami suspenzie. Ich sledovaním a vzájomným porovnaním hodnôt pre suspenzie pred a po hydrotermálnom spracovaní sa získali informácie o zmenách, ku ktorým počas zrenia v suspenziách dochádza. Sedimentácia všetkých vzoriek po 48 h jednoznačne ukazuje na to, že suspenzie rovnakého zloženia sedimentujú viac, ak sú pripravené v C-reaktore ako v B-reaktore. Hydrotermálnym spracovaním sa sedimentácia v oboch prípadoch urýchli.

Viskozita suspenzií ovplyvňuje transportné vlastnosti a filtrovateľnosť suspenzií. Závisí od obsahu tuhej fázy, kto-

rou je v tomto prípade $Mg(OH)_2$, ale aj od iónovej sily disperzného prostredia a teda od prebytku čpavkovej vody ako aj od prítomnosti dusičnanu amónneho, ktorý je vedľajším produktom prebiehajúcej reakcie.

Takmer všetky reologické závislosti vykazujú časovú závislosť. Suspenzie majú v klude istú súdržnosť a tečú až po prekonaní určitého šmykového napätia. Šmykové napätie vzoriek z B-reaktora je väčšie ako z C-reaktora a všeobecne klesá s presýtením. S presýtením však klesá aj obsah $Mg(OH)_2$ v systéme, preto priradiť efekt jednému parametru nie je možné.

Práca vznikla v rámci projektu APVV-0203-07.

5P-09

VLIV SLOŽENÍ OXIDOVANÉ CELULOSY NA JEJÍ HOUŽEVNATOSTI

VENDULA HEJLOVÁ a MILOSLAV MILICHOVSKÝ

*Ústav chemie a technológie makromolekulárných látok, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice
vendula.hejlova@seznam.cz*

V této práci byly vybrány vzorky oxidovaných celulosy podrobeny mechanickému působení týkající se zejména mletí na poloprovozním mlýně se šikmým onožením. Termín mletí vyjadřuje mechanickou úpravu vláken v mlecím zařízení, při které nastávají změny rozměru a morfologické struktury vláken spojené s hydratací¹. Dále byly určovány jejich změny vlastností před a po stanovení. Byla vypracována metodika pro hodnocení stavů mletých a nemletých oxycelulos.

Mechanické úpravy vláken se dosáhne účinkem funkčních prvků mlecího zařízení na vlákna suspendovaná ve vodě. Protože mletí na zařízení MŠO vyžaduje vzorek tekutý, aby bez problémů cirkuloval zařízením, bylo na začátku postupováno mletím krátkým. Tím byl vzorek nasekán na drobné částice a „ztekucen“. Když mletý vzorek dosáhl dostatečné tekutosti, bylo dále postupováno mletím fibrilačním, kde byly vláknité částice roztrženy, čímž byl vytvořen větší vazebný povrch částic².

Pro hodnocení vlastností před a po mletí oxycelulos byly použity tyto metody – stanovení hodnoty WRV, středního polymeračního stupně, obsahu krystalických složek RGT analýzou a stanovení mechanických vlastností mletých celulos.

Bylo zjištěno, že se vzrůstajícím stupněm oxidace vzorků oxycelulos vznikaly tužší gely, které reverzibilně nevyučovaly vodu. Tyto vzorky lze mlet při vyšší konzistenci než vzorky o nižším stupni oxidace. Se vzrůstajícím stupněm oxidace vzorků oxycelulosy vzrůstá i množství látek a degradačních produktů, které tvoří výplň gelu. Dále bylo zjištěno, že pro některé vzorky o vysokém stupni oxidace platí, že z hlediska úspory času a energie je výhodnější jejich mletí krátkým postupem. Ostatní vzorky vyžadují mletí kombinované, složené z krátkého a fibrilačního postupu². Stanovení hodnoty WRV mletých vzorků s vyšším stupněm oxidace bylo obtížné, jelikož při zahušťování dostatečně neprocházela suspenze přes filtrační zařízení³.

LITERATURA

1. Vaněrek A.: *Diplomová práce*. Univerzita Pardubice, Pardubice 1992.
2. Lapišová M.: *Diplomová práce*. Univerzita Pardubice, Pardubice 1995.
3. Strnad L.: *Diplomová práce*. Univerzita Pardubice, Pardubice 2007.

5P-10

VÝVOJ SAMOSEKVESTRUJÍCÍCH TENZIDŮ A HODNOCENÍ JEJICH VLASTNOSTÍ

MONIKA HORÁKOVÁ, JITKA KUNSTOVÁ, ALENA HYBNEROVÁ a LADISLAV BURGERT

*Ústav chemie a technológie makromolekulárných látok, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
monika.horakova@student.upce.cz*

V současné době se nejvíce zabýváme problematikou týkající se tenzidů se sekvestračním účinkem na polymerní bázi. Specifické vlastnosti tenzidů jsou dané chemickou strukturou jejich molekul, které mají asymetrický dipolární charakter s významným dipólovým momentem. Vždy obsahují dvě části, hydrofobní (alkyl C12–C18) a hydrofilní (–COONa skupiny zaručující dobrou rozpustnost)¹.

Cílem naší práce je testování některých vlastností tzv. samosekvestrujících tenzidů, kde spojovacím můstkem mezi polární částí (sekvestrující částí) a nepolární částí molekuly může být vazba amidová nebo esterová. U těchto vzorků byla hodnocena povrchová aktivita a sekvestrační kapacita.

Povrchová aktivita byla hodnocena na základě schopnosti sloučeniny snižovat povrchové napětí jejich vodných roztoků různé koncentrace při laboratorní teplotě a hodnotě pH 9. Povrchové napětí bylo stanoveno stalagmometricky.

Dále byly stanoveny hodnoty sekvestrační kapacity. Schopnost sekvestračních prostředků přirozeně vázat kationt kovu se hodnotí jako vazná schopnost (sekvestrační kapacita) a udává se v miligramech vápenatého iontu vázaného jedním gramem sekvestrantu za daných podmínek, tj. při dané teplotě a pH. Stanovení této hodnoty se provádí srážecí zákalovou titrací zvanou Hampshirský test^{2,3}. Hodnoty byly měřeny při absorpční 650 nm, principem byl vznik zákalu po překročení sekvestrační kapacity vzorku (titrováno odměrným roztokem $CaCl_2$). Sekvestrační kapacita byla proměřována při dvou teplotách, a to 20 °C a 98 °C, a různých hodnotách pH.

Při výzkumu byly více méně potvrzeny vlastnosti studovaných vzorků. Sloučeniny s dostatečným obsahem karboxylových skupin vykazují sekvestrační kapacitu, která roste s hodnotou pH prostředí. Je také závislá na teplotě. Se vzrůstající teplotou docházelo k poklesu sekvestrační kapacity, zřejmě v důsledku závislosti stability vznikajícího komplexu.

Bylo stanoveno povrchové napětí vodných roztoků tenzidů. Přítomnost dostatečně vysokého alkyly ve sloučenině dává předpoklad, že se bude kopolymer chovat jako látka povrchově aktivní. Povrchová aktivita je srovnatelná s vlastnostmi komerčního prostředku dodecylsulfátu sodného.

Tato práce vznikla za podpory grantu MSM 0021627501.

LITERATURA

1. Blažej A., Hodul P., Markušovská E., Novák L., Paulovič M., Vyskočil M.: *Tenzidy* 15, 19, SNTL, Praha 1977.
2. DE 1 904 941 (B01j), 1.2.1969
3. DE 1 904 941 (C08f), 1.2.1969

5P-11

VLIV VELIKOSTI ČÁSTIC JÍLU NA FUNKČNÍ VLASTNOSTI SKLOVITÝCH SMALTOVÝCH POVLAKŮ

JITKA PODJUKLOVÁ^a, KAMILA HRABOVSKÁ^b, KATEŘINA PELIKÁNOVÁ^a, LENKA DOBROVODSKÁ^a, TOMÁŠ LANÍK^a a VRATISLAV BÁRTEK^a

^a Katedra mechanické technologie, Fakulta strojní, VŠB-TU Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava - Poruba, ^b Institut fyziky, VŠB -TU Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava - Poruba
kamila.hrabovska@vsb.cz

Sklovité smalty jsou skelné povlaky vytvářené na kovovém podkladu vypalováním při teplotě nad 800 °C. Tento povlak můžeme využít v různých oborech strojírenství. Vytvoření celistvého smaltového povlaku (bez vad a trhlin) je základním předpokladem pro využití jeho funkčních vlastností. Výsledné křehkolomové vlastnosti povlaku jsou závislé na jeho struktuře, textuře a chemickém složení. Nejdůležitějšími anorganickými komponenty při výrobě tohoto povlaku jsou jíl a sklovitá fritá. Užití různých velikostí těchto komponent má vliv na finální kvalitu povlaku. Hlavním cílem této práce bylo srovnání křehkolomových vlastností sklovitých smaltových povlaků vytvořených užitím částic jílu v běžné velikosti a částic jílu jemně mletých.

5P-12

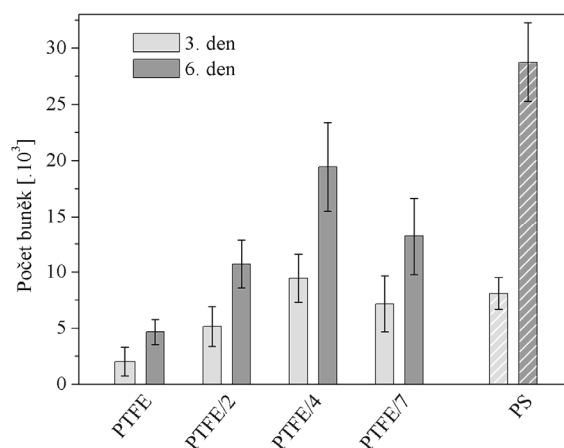
BIOKOMPATIBILITA NAPAŘENÝCH UHLÍKOVÝCH VRSTEV NA POLYMERNÍM SUBSTRÁTU

TOMÁŠ HUBÁČEK*, KATARÍNA ŠUPOVÁ, ALENA ŘEZNÍČKOVÁ, JAKUB SIEGEL a VÁCLAV ŠVORČÍK

Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha
hubacekt@vscht.cz

Napařené uhlíkové vrstvy mohou mít široké využití např. vrstvy, pro elektronovou mikroskopii jako tenké vodivé vrstvy, nebo i v tkáňovém inženýrství. Tato různorodost je zapříčiněna vysokou homogenitou a spojitostí vrstvy při její „malé“ tloušťce¹. Pro tkáňové inženýrství jsou tyto vrstvy výhodné z hlediska zvýšení atraktivitu materiálu pro růst a proliferaci buněk². Tuto vlastnost je možné využít pro substráty vhodné ke kultivaci buněk při ztrátě kožního krytu.

Tato práce se zabývá studiem adheze a růstu buněčných kultur na polymerních fóliích modifikovaných uhlíkovou vrstvou. Jako výchozí polymerní fólie byl použit PTFE. Jako srovnávací materiál byl použit tkáňový polystyren. Proměn-



Obr. 1. Počet buněk při proliferaci 3. a 6. den od nasazení na různě napařeném PTFE a tkáňovém PS

nou při modifikaci polymerů byla tloušťka nanesené vrstvy, která se významně ovlivňuje hodnotu kontaktního úhlu (snášivost). Pro adhezi a proliferaci byly použity LEP kultury. Jak při adhezi, tak při růstu byla stanovena optimální tloušťka nanesené uhlíkové vrstvy a s ní související vlastnosti.

Tato práce vznikla za podpory A1 FCHT 2010 001, A2 FCHT 2010 062.

LITERATURA

1. Švorčík V., Hubáček T., Slepíčka P., Siegel J., Kolská Z., Bláhová O., Macková A., Hnatowicz V.: *Carbon* 1770, 47 (2009).
2. Rodil S. E., Olivares R., Arzate H., Muhl S.: *Diam. Relat. Mater.* 931, 12 (2003).

5P-13

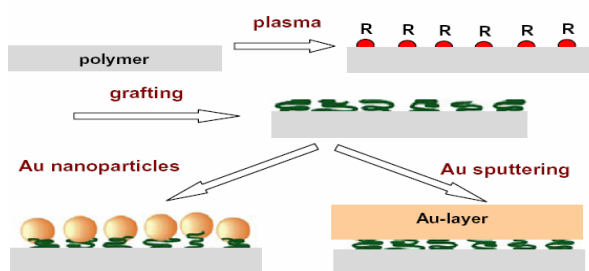
ROUBOVÁNÍ Au NANOČÁSTIC NA POLYMERY

ALEŠ CHALOUPKA*, ANNA VASINA, ALENA ŘEZNÍČKOVÁ a TOMÁŠ HUBÁČEK

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

Roubování je známé jako způsob zušlechťování především ovocných stromů. Spočívá v přenesení části rostliny na jinou rostlinu a jejich funkčním spojení. Obdobně se u polymerů snažíme roubováním docílit chemického spojení dvou nebo více odlišných materiálů, které jinak neumíme spojit^{1,2}. Rychlý vývoj technologií vyžaduje neustále nové materiály s lepšími vlastnostmi. Modifikace polymerů roubováním je cestou, kterou toho můžeme dosáhnout levně a bez nutnosti vyvíjet nové materiály.

Příkladem takto roubovaného polymeru může být vysokohustotní polyethylen (HDPE). Povrch HDPE byl modifikován působením argonového plazmatu. Následně byl takto akti-



Obr. 1. Schéma modifikace polymeru plazmatickým výbojem (R-radikály), roubování molekulami dithiolu a následným nanesením Au nanočástic nebo naprášená Au nanovrstva

vovaný povrch roubován molekulami s funkčními thiolovými skupinami (-SH) a nakonec na takto připravený vzorek byly naneseny Au nanočástice nebo naprášena Au nanovrstva. Vlastnosti těchto vrstev byly studovány metodami XPS, AFM a nanoindentací.

Auori děkují za finanční podporu grantům A1 FCHT 2010 001 a GA ČR č. 106/09/P046.

LITERATURA

1. Yun J. M., Jung Ch., Kim D. K., Hwang I. T., Choi J. H., Ganesan R., Kim J. B.: *J. Mater. Chem.* 20, 2007 (2010).
2. Švorčík V., Chaloupka A., Záruba K., Král V., Bláhová O., Macková A., Hnatowicz V.: *Nucl. Instrum. Meth., B* 267, 2484 (2009)

5P-14

ANTIKOROZNÍ VLASTNOSTI NÁTĚROVÝCH HMOT S OBSAHEM PIGMENTŮ NA BÁZI MODIFIKOVANÝCH FOSFOREČNANŮ

VERONIKA JAŠKOVÁ, DAVID VESELÝ a ANDRÉA KALEDOVÁ

*Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
veronika.jaskova@student.upce.cz*

Nejrozšířenějším způsobem ochrany kovových materiálů před korozi je nanášení organických povlaků. Ochranný mechanismus se skládá z bariérového efektu spolu s mechanismem antikoročních pigmentů¹. Mezi v minulosti nejvíce používané antikoroční pigmenty patřily sloučeniny na bázi olova a šestimocného chromu, které jsou velmi vhodné jako složka antikoročních nátěrů pro ocelové podklady, ovšem z důvodu toxicity nepoužitelné. Proto je nutné najít vhodnější pigmenty srovnatelné, nebo vyšší kvality, zejména pak šetrnější k lidskému zdraví. Vhodným pigmentem se zdá být fosforečnan zinečnatý, od něž se odvíjí i další výzkum a snaha najít vhodnější antikoroční pigmenty, například na bázi směsných sloučenin, u nichž by bylo možno dosáhnout ještě lepších vlastností, než u dosavadních nátěrových hmot^{2,3}. Tato práce se zabývá přípravou a porovnáním účinností různých typů pigmentů na bázi fosforečnanů s obsahem kationtů

Mn, Zn, Al, Cr, Mo, Ca, které byly dispergovány v epoxidovém pojivu a formulovány na OKP 10%, při OKP/KOKP=26. Pigmenty byly připraveny třemi různými postupy. U pigmentů byly stanoveny fyzikálně-chemické vlastnosti, které přímo souvisí s antikoroční ochranou. Ochranná účinnost byla vyhodnocena podle norem ASTM. K porovnání všech výsledků byl zvolen komerčně dostupný fosforečnan zinečnatý (ZP10). Nejlepší vlastnosti vykazoval pigment $\text{AlPO}_4/\text{Al}(\text{PO}_3)_3$, což je způsobeno pasivací oceli fosforečnanem Al a Fe. Antikoroční vlastnosti nátěrových filmů obsahující syntetizované pigmenty lze až na výjimky hodnotit jako velmi dobré, co se týče stupně puchýřovatění a koroze podkladu i jako vynikající. Odolnost nátěrových filmů obsahujících připravené fosforečnany vůči agresivnímu korozi prostředí se lišila v podstatě v rezistenci koroze v místě mechanického poškození organického povlaku. Bylo zjištěno, že pigmenty obsahující fáze bohaté na Mo přispívají k celkové antikoroční odolnosti epoxidových povlaků.

LITERATURA

1. Zubielewicz M., Gnot W.: *Prog. Org. Coat.* 49, 358 (2004).
2. De Lima-Neto P., De Araújo A. P.: *Prog. Org. Coat.* 62, 344 (2008).
3. Poledno M., Kalendová A.: *CHEMagazin* 12, 10 (2002).

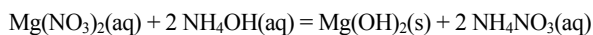
5P-15

PRÍPRAVA HYDROXIDU HOREČNATÉHO AKO PLNIVA DO POLYMÉROV

PAVEL FELLNER, JÁN HÍVEŠ, JANA JURISOVÁ a LADISLAV PACH

*Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, FCHPT, STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
jana.jurisova@stuba.sk*

Výskum a výroba $\text{Mg}(\text{OH})_2$ má v súčasnosti progresívny trend vďaka rozšíreným aplikáciám v priemysle plastov, liečiv, kozmetiky, krmív a žiaruvzdorných materiálov. V plastoch je účinným retardérom horenia a zložkou funkčných polymérnych kompozitov. Cieľom našej práce bolo preštudovať prípravu $\text{Mg}(\text{OH})_2$ z roztoku dusičnanov za použitia vodného roztoku NH_3 ako zásadotvorného činidla. Chemický proces je popísaný nasledujúcou rovnicou.



Výber surovín, spôsob miešania zložiek, reakčná teplota, rýchlosť miešania reakčných zmesí a ich stechiometrický pomer, to všetko sú parametre, ktoré vplyvajú na zmenu pH a následne na rýchlosť kryštalizácie a sedimentácie výsledného produktu $\text{Mg}(\text{OH})_2$. Častice $\text{Mg}(\text{OH})_2$ požadovanej veľkosti a tvaru sa získajú hydrotermálnym spracovaním suspenzie pri teplote 120–150 °C.

Rýchlosť zrážania a nukleácie sa študovala meraním elektrickej vodivosti a pH reakčného systému. V prvej sérii experimentov sa použili čisté zložky, kým v druhej sérii bol systém očkovaný kryštálmi $\text{Mg}(\text{OH})_2$. S pridávaním reakčnej zložky sa zaznamenal vzrast vodivosti a pri určitom presýtení pokles, súvisiaci s tvorbou nukleí. Očkovanie systému sa

prejavilo len zvýšením kinetiky precipitácie $Mg(OH)_2$.

Spracovaním zmesi v tlakovom reaktore pri teplote $135\text{ }^\circ\text{C}$ sa agregáty sformujú do hexagonálnych platničiek typických pre brucit. Ich veľkosť a tvar ovplyvňuje pH, teplota a čas hydrotermálneho spracovania.

Táto práca bola podporovaná „Agentúrou na podporu výskumu a vývoja“ na základe zmluvy APVV-0203-07 „Výskum technológií spracovania dolomitu a magnezitu na hydroxid horečnatý, oxid horečnatý a uhličitan vápenatý“, zmluva so spolufinancovateľom Duslo a.s.: SBU-A 67/2008. Obom vyjadrujú autori poďakovanie.

5P-16

Vliv nanočásteček na biokompatibilitu polymerů

NIKOLA SLEPIČKOVÁ KASÁLKOVÁ^a, MARTIN PAŘÍZEK^b, PETR SLEPIČKA^c, PAVEL ŘEZANKA^c, SILVIE RIMPELOVÁ^d, LUCIE BAČÁKOVÁ^b a VÁCLAV ŠVORČÍK^a

^a Ústav inženýrství pevných látek, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha, ^b Fyziologický ústav AV ČR, Vídeňská 1083, 142 20 Praha, ^c Ústav analytické chemie, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha, ^d Ústav biochemie a mikrobiologie VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha
nikola.kasalkova@vscht.cz

Kůže – jedná se o krycí systém pokrývající celé tělo. Rozsáhlé ztráty kožního krytu způsobené např. popáleninami představují stále velký terapeutický problém a často je nutné přistoupit k implantaci kožních náhrad. Polymery jsou jedním z možných materiálů, který se využívá pro tvorbu vhodných substrátů (nosičů) těchto náhrad.

V této práci byla studována biokompatibilita polyethylenových fólií (PE), na jejichž povrch byly navázány zlaté nanočástice. Povrch PE byl nejprve ošetřen Ar^+ plazmatem. Na takto upravené vzorky byly z roztoku citronanu chemicky navázány zlaté nanočástice. Změna povrchové morfologie a drsnosti byla stanovena mikroskopii atomárních sil (AFM). Změny polarit byly zjišťovány metodou goniometrickou. Biokompatibilita – adheze a proliferace hladkých svalových buněk (VSMC) na modifikovaném PE byla studována metodou *in vitro*.

Bylo zjištěno, že modifikací povrchu PE dochází k výrazným změnám povrchové morfologie a drsnosti. Navázáním zlatých nanočástic dochází k velkým změnám v polaritě povrchu modifikovaných vzorků. Z testů biokompatibilit VSMC buněk bylo patrné, že modifikace povrchu zvyšuje počet i homogenitu adherentních a proliferovaných buněk.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 21/2010).

5P-17

REAKTIVNÍ IMPREGNACE PLAZMOVĚ DEPONOVANÉ KERAMIKY

JAROSLAV KOCÍK^a, PAVEL CTIBOR^b a VLASTIMIL BROŽEK^{b,c}

^a Universita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, ^b Ústav fyziky plazmatu AVČR v.v.i., Praha, ^c Vysoká škola chemicko-technologická v Praze
vlastimil.brozek@vscht.cz

Cordieritová keramika má významné použití v elektro-technice, v jiných oborech se uplatňuje zejména pro vysokou odolnost proti teplotním šokům. Složitější tvary, ochranné povlaky nebo skořepinové součásti s vysokou geometrickou přesností se s výhodou připravují žárovými, potažmo plazmovými nástřiky. Materiály s vysokými body tání připravené plazmovou depozicí jsou z principu porézní, což nepříznivě ovlivňuje jejich mechanické vlastnosti. Impregnace pórů v cordieritové keramice anorganickými složkami vylepší její mechanické vlastnosti, ale zároveň změni chemické chování.

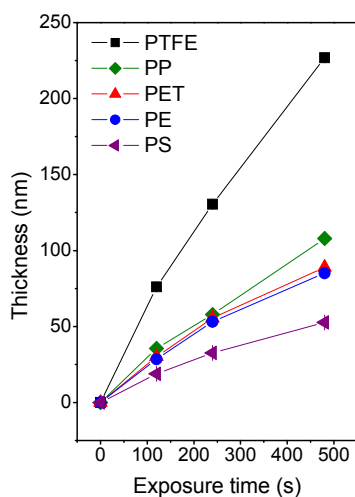
Porézní keramika na bázi cordieritu byla připravena z práškové směsi získané od fy. Steatit v.o.s. roztavením ve vodou stabilizovaném nízkoteplotním plazmatu z generátoru WSP® s následnou depozicí na dočasné podložky. Reprodukovatelnou změnou depozičních podmínek byly získány materiály s pórovitostí 5 ± 1 obj.% a 20 ± 3 obj.%. Při plazmové depozici došlo k částečnému rozkladu cordieritové struktury za vzniku amorfni fáze a volného korundu. Vzorky byly impregnovány nasycenými roztoky dichromanu a vanadičnanu amonného, které po vysušení a vyžihání na $1400\text{ }^\circ\text{C}$ jako oxidy chromu a vanadu zreagovaly s oxidem hlinitým jednak na tuhé roztoky, jednak ovlivnily přeměnu v soustavě $Al_2O_3-SiO_2$ především ve prospěch mullitu. Tyto změny se příznivě projeví na zlepšení mechanických vlastností, především ohybové pevnosti a Youngova modulu. Jejich hodnoty se v případě impregnace oxidem chromitým, resp. jeho tuhým roztokem v oxidu hlinitém s obsahem 0,63 % Cr zlepšily ze $4,80 \pm 0,2$ MPa na $7,08 \pm 0,3$ MPa, t.j. o 147 % u vzorků s minimální pórovitostí. U vzorků vysoce porézních s reaktivně impregnovaným obsahem 4,62 % Cr došlo k nárůstu ze $2,43 \pm 0,1$ MPa na $7,37 \pm 0,3$ MPa, tedy o cca 300 %. Při reaktivní impregnaci oxidu vanadu se ohybová pevnost zvýšila až na $8,51 \pm 0,4$ MPa. Množství impregnovaného V_2O_5 přitom dosáhlo pouze 0,31 % i přesto, že povrchové napětí impregnačního roztoku bylo nižší než v případě chromitých sloučenin a byla tedy pravděpodobnost hlubší penetrace. Jedním z možných důvodů je pokles obsahu amorfni fáze další rekrytalizací, při které se může uplatňovat vliv vznikající fáze $AlVO_4$. Výsledky byly zpracovány na základě analytických údajů rtuťové porozimetrie, rtg. fázové analýzy, stanovení obsahu impregnujících prvků, metalografie a měření povrchového napětí impregnujících roztoků.

5P-18 CHARAKTERIZACE POVRCHŮ POLYMERŮ MODIFIKOVANÝCH PLAZMOU

ZDENKA KOLSKÁ^a, ALENA ŘEZNÍČKOVÁ^b
a VÁCLAV ŠVORČÍK^b

^a Katedra chemie, Univerzita J. E. Purkyně, České mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem, ^b Ústav inženýrství pevných látek, VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha 6
zdenka.kolska@ujep.cz

Vzorky polymerů ve formě tenkých folií (polypropylen (PP), polyethylentereftalát (PET), polystyren (PS), polyethylen (PE), polytetrafluorethylen (PTFE)) byly vystaveny Ar plazmě. Byly studovány změny povrchových vlastností nemodifikovaných a modifikovaných polymerů různými technikami. Smáčivost povrchů a stárnutí polymerů po modifikaci byly určovány pomocí kontaktního úhlu měřeného standardní goniometrií. Elektrokinetický potenciál (Zeta-potenciál; ζ) nemodifikovaných i modifikovaných polymerů byl studován analyzátozem SurPASS (Anton Paar). Stanovení kontaktních úhlů i zeta-potenciálu byly použity jako techniky pro charakterizaci chemie povrchů polymerů. Taktéž slouží ke sledování stárnutí povrchů polymerů po modifikaci plazmou. Povrchová morfologie a drsnost byly určeny pomocí AFM. Hodnoty kontaktního úhlu modifikovaných polymerů závisí na době expozice. S časem expozice hodnoty kontaktních úhlů vzrůstají. Opačný vliv na hodnoty kontaktních úhlů má stárnutí (doba od expozice). Modifikace plazmou má vliv na dramatické změny v morfologii i drsnosti všech studovaných polymerů. Stanovení zeta-potenciálu ukázalo významné změny mezi hodnotami modifikovaných a nemodifikovaných polymerů. Nárůst hodnot zeta-potenciálu po ablaci indikuje vznik hydrofilnějších povrchů v porovnání s nemodifikovanými polymery. Tyto výsledky jsou ve shodě s výsledky vyplývajícími z měření kontaktních úhlů.



Obr. 1. Závislost tloušťky ablatované povrchové vrstvy u studovaných polymerů (PET, PS, PTFE, PE, PP) na době jejich expozice v plazmě

Práce byla podporována GA ČR projekty č. 106/09/0125 a 108/10/1106, GA AV ČR projekty KAN 200100801 a KAN 400480701.

5P-19 SLEDOVANIE PRIEBEHU VODIVOSTI POČAS JEDNOOSEJ MECHANICKEJ DEFORMÁCIE A NÁSLEDNEJ RELAXÁCIE VODIVEJ POLYMÉRNEJ ZMESI

JURAJ KRAJČI^a, JANKA JURČIOVÁ^b
a IVAN CHODÁK^a

^a Ústav polymérov Slovenskej akadémie vied, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, ^b Trenčianska Univerzita Alexandra Dubčeka, Fakulta priemyselných technológií, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov
upolkraj@savba.sk

Vodivé polymérne zmesi sú už dlhšie študované pre ich možné aplikácie v rôznych priemyselných sférach. V našej práci sme sa zamerali na štúdium vplyvu prídavku vodivých sadzí na prúd pretekajúci vzorkou zmesi pri konštantnom vloženom napätí. Ako matricu sme použili v gumárskej praxi bežne používaný kaučuk Kralex 1502. Kaučuk spolu s vodivými sadzami, ďalšími prísadami i vulkanizačným systémom bol po zamiešaní a následnom skalandrovaní lisovaný pri teplote 150 °C a tlaku 20 MPa, po dobu potrebnú na dosiahnutie optima fyzikálno-mechanických vlastností. Pripravili sme paletu koncentrácií vodivých sadzí, avšak dostatočná vodivosť zmesi sa dosiahla až pri vyššom obsahu plniva. Následne po vylisovaní sme stanovili fyzikálno-mechanické charakteristiky ako pevnosť v ťahu, modul pružnosti a predĺženie pri pretrhnutí.

Po stanovení fyzikálno-mechanických vlastností sme pripravili vzorky na meranie prúdu prechádzajúceho vzorkou. Indikovali sme zmeny prúdu vo vzorke počas dĺženia, následnej relaxácie i zotavovania. Prúd bol meraný online pomocou multimetra, vzorky boli podrobené takému stupňu deformácie, aby nedošlo k ich pretrhnutiu. Zaznamenávali sme zmeny prúdu počas predĺženia o 300 %, následnej relaxácie pri danom predĺžení, ako i zotavovaní po uvoľnení pôsobiacieho napätia.

Výhodou kaučukovej zmesi je jej schopnosť vratnej deformácie, čiže je možné i viacnásobné podrobenie vzoriek cyklu namáhania, relaxácie i zotavovania. Napriek tomu, že sme predpokladali pokles hodnôt pretekajúceho prúdu s rastom deformácie, vo viacerých prípadoch boli závislosti podstatne zložitejšie, keď sme pozorovali zmeny prúdu počas jednoosého mechanického namáhania. Tieto priebehy do istej miery korelovali s ťahovými krivkami, pričom na začiatku namáhania pri malom predĺžení vzorky sme zaznamenali pokles hodnôt pretekajúceho prúdu, následne pri vyššom predĺžení nárast hodnôt prúdu, a opäť pokles pretekajúceho prúdu vzorkou. Výsledky sa interpretujú na základe rozpadu a regenerácie elektrovodivých ciest, tvorených reťazcami vodivého plniva. Tieto procesy prebiehajú nielen počas deformácie, ale aj v priebehu relaxácie a zotavenia. Čo je zapríčinené postupným rozrušovaním vodivých ciest, a teda obme-

dzenie transportu elektronův, a tŕm i znŕizenŕ hodnoty prŕdu prechŕzajŕceho vzorkou.

Tento projekt bol podporenŕ z APVV-51-010405 a VEGA 2/0185/10.

5P-20

Vliv povrchovŕ ŕpravy pigmentŕ vodivŕmi polymery na koroznŕ – inhibiĎnŕ vlastnosti pŕi aplikaci v nŕtŕrovŕch hmotŕch

**HELENA KUKAĎKOVŕ^a, JAROSLAV STEJSKAL^b
a ANDRŕEA KALEDOVŕ^a**

^a Ŕstav chemie a technologie makromolekulŕrnŕch lŕtek, Fakulta chemicko-technologickŕ, Univerzita Pardubice, Studentskŕ 573, 532 10 Pardubice, ^b Ŕstav makromolekulŕrnŕ chemie AV ĆR, Heyrovskŕho nŕm. 2, 162 06 Praha 6
helen.a.kukackova@student.upce.cz

Vŕzkumy v poslednŕch letech smŕřuji k využitŕi vodivŕch polymerŕ (napŕ. polyanilin, polypyrrol) jako inhibitorŕ korozie ve formulaci ekologickŕch nŕtŕrovŕch hmot¹. Vodivŕ polymery lze je považovat za mořnou alternativu pro nahrazení slouĎenin obsahujŕcŕ tŕěžkŕ kovy a snížit tak pouřivŕnŕ chromanovŕch inhibitorŕ korozie²⁻⁴. Polypyrrol a polyanilin jsou jedni z mnoha pŕedstavitelŕ vodivŕch polymerŕ, kterŕm je vŕnována pozornost v pŕŕpravŕ kompozitnŕch materiŕlŕ vodivŕch polymerŕ a anorganickŕch nanoĎastŕcŕ^{4,5}.

Cŕlem pŕace bylo studium antikorozi nŕ ŕinnosti nŕtŕrovŕch hmot obsahujŕcŕ Ďastice upravenŕ vodivŕmi polymery. Pro povrchovou modifikaci byly zvoleny pigmenty rŕznŕho chemickŕho slořenŕ i tvaru Ďastic, resp. pigmenty na bŕzi grafitu a kŕemiĎitanŕ a pigmenty na bŕzi oxidŕ ŕeleza a smŕsnŕch oxidŕ kovŕ. Ŕĕinnost pigmentovanŕch nŕtŕrŕ byla hodnocena na zŕkladŕ fyzikŕlnŕ-mechanickŕch zkoušek a zrychlenŕch koroznŕch zkoušek v prostŕedŕi kondenzovanŕ vody (ĆSN 03 8131), v prostŕedŕi neutrŕlnŕ solnŕ mlhy (ĆSN ISO 9227) a prostŕedŕi kondenzovanŕ vody s obsahem oxidu siŕiĎitŕho (ĆSN ISO 6988).

Po expozici v jednotlivŕch koroznŕch prostŕedŕch bylo zjiřtŕno zvyřeni celkovŕ antikorozi nŕ ŕinnosti ve srovnŕnŕi s pŕvodnŕmi neupravenŕmi vzorky pro tyto pigmenty: lamelŕrnŕ Fe₂O₃ (PANI i Ppy), grafit (PANI), Fe₃O₄ (PANI i Ppy) v prostŕedŕi kondenzovanŕ vody. Pro prostŕedŕi NaCl vykazovaly vyřřŕ antikorozi nŕ ŕinnost grafit, mastek (PANI), CaTiO₃ a Mg-Zn ferrit (PANI i Ppy), SrTiO₃ (Ppy). V prostŕedŕi SO₂ vykazovaly antikorozi nŕ ŕinnost grafit Fe₃O₄ a Mg-Zn ferrit (PANI). Na zŕkladŕ vŕsledkŕ jednotlivŕch zkoušek lze tedy usuzovat, ŕe kompozity tvořenŕ kombinaci vodivŕch polymerŕ s anorganickŕmi Ďasticemi by mohly nalŕzt uplatnŕnŕi v oblasti antikorozi nŕ ŕinnostŕch hmot.

LITERATURA

1. Truong V. T., Lai P. K., Moore B. T., Muscat R. F.: *Synth. Met.* 110, 7 (2000).
2. Kowalski D., Ueda M., Ohtsuka T.: *Corr. Sci.* 49, 1635 (2007).
3. Tuken T.: *Surf. Coat. Technol.* 200, 4713 (2006).

4. Rahman S. U., Abul-Hamayel M. A.: *Surf. Coat. Technol.* 200, 2948 (2006).
5. Brezoi D. V., Ion R. M.: *Sens. Actuators, B* 109, 171 (2005).

5P-21

K OTŕZCE BIODEGRABILITY SAMOSEKVESTRUJŕCŕCH TENZIDŕ

JITKA KUNSTOVŕ, MONIKA HORŕKOVŕ, LUCIA KRŕSTOFŕKOVŕ a LADISLAV BURGERT

*Ŕstav chemie a technologie makromolekulŕrnŕch lŕtek, Fakulta chemicko-technologickŕ, Univerzita Pardubice, Studentskŕ 573, 532 10 Pardubice
jitka.kunstova@student.upce.cz*

V současnosti je vyvŕjen rostouĎŕ tlak v oblasti ekologie na Ďistotu odpadnŕch vod, a proto je velmi dŕležitŕ vyuřivŕnŕ biologicky rozlořitelnŕch slořek, kterŕ jsou souĎastŕ pracŕch prostŕedkŕ. Cŕlem nařŕ pŕace je zabŕvat se problematikou tŕkajŕcŕ se samosekvestrujŕcŕch tenzidŕ, kterŕ jsou nedŕlnou souĎastŕ detergentŕ.

U nŕmi zkoumanŕch vzorkŕ je studovŕna biologickŕ odbouratelnost, sekvestraĎnŕ kapacita, povrchovŕ aktivita a nŕkolikanŕsobnŕ prŕnŕ za modelovŕch podmŕnek¹.

Biodegradabilita nepatŕŕ mezi zŕkladnŕ vlastnosti sekvestraĎnŕch prostŕedkŕ, je vřak vyřadovŕna s ohledem na dopad vŕĕi ŕivotnŕmu prostŕedŕi. Je to schopnost slouĎeniny nebo danŕho materiŕlu podlŕhat biologickŕmu rozkladu pŕsobenŕm mikroorganismŕ. O ŕplnŕm biologickŕm rozkladu lze hovoŕit tehdy, kdyř je danŕ slouĎenina zcela rozlořena pomocŕ mikroorganismŕ za vzniku CO₂, vody, minerŕlnŕch lŕtek a novŕ biomasy².

Preferujŕ se zkoušky zalořenŕ na produkci CO₂ a na BSK. Biologickŕ rozlořitelnost kařdŕho typu tenzidu musŕ pŕedstavovat pŕi BSK₂₈ nejmŕnŕ 60 % TSK nebo množství uvolnŕnŕho CO₂ musŕ odpovŕdat nejmŕnŕ 60 % ThCO₂ (cit.³).

Pŕipravenŕ vzorky byly dŕle testovŕny pŕi prŕnŕ za modelovŕch podmŕnek. Bylo provedeno 20tŕ nŕsobnŕ prŕnŕ bavlnŕnŕ tkaniny ve vodŕ o tvrdosti 22°dH. Vŕsledky modelovŕho prŕnŕ byly hodnoceny na zŕkladŕ stanovenŕ obsahu popela a obsahu Ca na vzorcŕch po prŕnŕ.

Z vŕsledkŕ je patrnŕ, ŕe pŕi prŕnŕ s komerĎnŕmi sekvestraĎnŕmi prostŕedky (Sokalany) dochŕzŕ k poklesu obsahu popela i vŕpnŕku, zatŕmco u bŕěžnŕ pouřivŕnŕch komerĎnŕch pracŕch prostŕedkŕ dořlo ke zvyřeni obsahu popela, takŕ se zvyřily ŕsady vŕpnŕku na prŕnŕm materiŕlu a dořlo ke zhorřenŕ omaku. Ŕsady jsou nejspŕe zpŕsobeny zeolity pouřivŕnŕmi jako mŕnŕĕe iontŕ.

Biologickŕ odbouratelnost tŕchto vzorkŕ se sniřuje s rostouĎŕm poĎtem zabudovanŕch jednotek kyseliny akrylovŕ.

Tato pŕace vznikla za podpory grantu MSM 0021627501.

LITERATURA

1. Hybnerovŕ A., Bayerovŕ P., Burgert L.: Biodegradable surfactants with sequestate effect. *Magic World of Textiles, Dubrovnik, Croatia, 8.-11.10.2006*, Abstrakt 281.

2. Slejška A.: Testování biodegradability, časopis BIOM, 1997.
3. Směrnice Ministerstva životního prostředí ČR, č. 07-2006.

5P-22
TEPELNĚ NAMÁHANÉ TENKÉ VRSTVY Au
NA SKLE

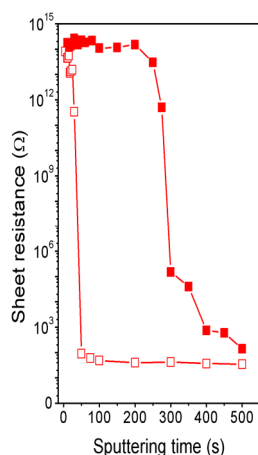
ONDŘEJ KVÍTEK, VÁCLAV ŠVORČÍK, JAKUB SIEGEL, OLEKSIJ LYUTAKOV a PETR SLEPIČKA

Ústav inženýrství pevných látek, VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha 6
 kviteko@vscht.cz

Naprašování tenkých kovových vrstev na substrátu má dlouhou tradici výroby elektronických komponentů, tvorby vodivých kontaktů na deskách plošných spojů a podobně. Zlato je zejména vhodné díky své dobré elektrické vodivosti, vysoké chemické odolnosti a trvanlivosti kvalitních elektrických kontaktů. Možnosti ovlivňování nanostruktury značně rozšiřují spektrum možných aplikací užitečných materiálů a tvorbu nových, dříve nerealizovatelných prvků a systémů.

Studium počáteční fáze tvorby tenkých Au vrstev má velký význam v identifikaci možných vlivů působících na kvalitu a vlastnosti vznikající funkční vrstvy. Teplotním namáháním vrstev dochází k dramatické změně optických i elektrických vlastností a ke změnám povrchové morfologie, čehož může být využito při konstrukci moderních součástek s novými vlastnostmi.

V obr. 1 řada s prázdnými značkami popisuje vzorky připravované za pokojové teploty, řada s plnými značkami popisuje vzorky teplotně namáhané na 300 °C. Z grafu je patrné výrazné navýšení odporu teplotně namáhaných vrstev. Mez, kdy se vrstva stává vodivou, se posunuje k větším tloušťkám.



Obr. 1. Odpor nanovrstev Au pro různé tloušťky vrstev podle doby naprašování (od 5 s do 500 s)

Vzorky různých tlouštěk připravované naprašováním po různě dlouhou dobu byly teplotně namáhány a následně byly sledovány změny vlastností pomocí UV-VIS spektrometrie a měřením povrchové elektrické rezistance. Metodou AFM byly vyhodnoceny změny morfologie povrchu.

Tato práce vznikla za podpory grantů A1 FCHT 2010 001 a A2 FCHT 2010 059.

5P-23
INVESTIGATION OF NATURAL RUBBER
COMPOSITES WITH
ORGANOMONTMORILLONITE FILLER
AS A SUBSTITUTE OF CARBON BLACK

SLÁVKA ĽALÍKOVÁ, MARIANA PAJTÁŠOVÁ,
DARINA ONDRUŠOVÁ, TATIANA BAZYLÁKOVÁ,
MILAN OLŠOVSKÝ, and PETER POČAROVSKÝ

Department of Inorganic Materials and Environmental Engineering, Faculty of Industrial Technologies, University of Trenčín, 020 01 Púchov
 lalikova@fpt.tnuni.sk

Present paper investigates the properties of natural rubber composites with addition of organomontmorillonite filler. Organomontmorillonites were synthesized by treating Na-, Ca-, Cu-, Co- montmorillonite with benzothiazole adduct using ion exchange method. Characteristics of the samples of original and modified composition were studied by Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR), thermogravimetry (TG), X-ray diffraction analysis (XRD).

The prepared organomontmorillonites were used as a substitute of carbon black at the preparation of natural rubber composites, which were submitted to measurements of physical-mechanical properties (tensile strength, modulus at 300 elongation - M_{300} , tensibility, hardness) and vulcanization characteristics (M_L , M_H , t_s , t_{90} , R_v).

The authors sincerely thank the Slovak Grant AV 4/2014/08 for the financial support.

REFERENCES

1. Ľalíková S., Pajtášová M., Ondrušová D., Bazyláková T., Olšovský M., Jóna E., Mojumdar S. C.: J. Therm. Anal. Calorim. (2009), in press.
2. Jóna E., Rudinská E., Sapietová M., Pajtášová M., Ondrušová D., Jorík V., Mojumdar S. C.: Res. J. Chem. Environ. 9, 41 (2005).
3. Fajnor V. Š., Jesenák K.: J. Therm. Anal. Calorim. 46, 489 (1996).
4. Hrachová J., Chodák I., Komadel P.: Chemical Papers 63, 55 (2009).

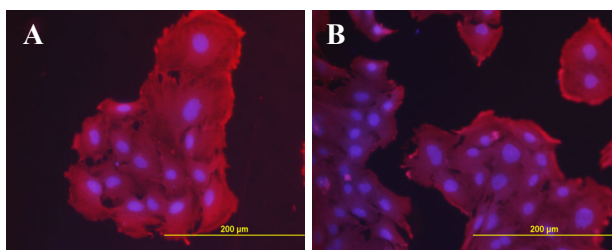
5P-24

STUDIUM POVRCHOVÝCH VLASTNOSTÍ
A BIOKOMPATIBILITY POLYMERU
ROUBOVANÉHO PEGZUZANA MAKAJOVÁ^a, NIKOLA SLEPIČKOVÁ-
KASÁLKOVÁ^a, LUCIE BAČÁKOVÁ^b a VÁCLAV
ŠVORČÍK^a^a Ústav inženýrství pevných látek, VŠCHT, Technická 5,
166 28 Praha 6, ^b Fyziologický ústav AV ČR, Vídeňská 1083,
142 20 Praha 4
zuzana.makajova@vscht.cz

V dnešní době se v medicíně používají biomateriály, které musí splňovat přísné normy snášenlivosti s lidským organismem a musí splňovat specifické materiálové vlastnosti. Důležitým faktorem biomateriálu je i cenová dostupnost či dobrý výsledný vzhled a další. V medicínské praxi se stále častěji využívají polymery pro svou velkou variabilitu mechanických a biologických vlastností.

Práce se zabývá studiem fyzikálně-chemických vlastností modifikovaného polymeru. Studovaným materiálem byl polystyren (PS), který byl modifikován různou dobu (50, 100 s) Ar⁺ ionty při dvou výkonech (3 a 8 W). Následně na něj byl naroubován poly(ethylenglykol) (PEG) s různou molekulovou hmotností (300, 6000, 20 000 g mol⁻¹). Pro studium fyzikálně-chemických vlastností bylo použito metody goniometrického měření kontaktního úhlu a mikroskopie atomárních sil (AFM). Metodou kultivace *in vitro* byla zjištěna adheze a proliferace hladkých svalových buněk z aorty potkana (VSCM).

Bylo zjištěno, že modifikací a následným roubováním dochází ke změně povrchové morfologie a kontaktního úhlu. Z testů *in vitro* vyplývá, že modifikace a roubování zvyšují počet adhezaních a proliferujících VSCM buněk.



Obr. 1. Morfologie VSCM buněk po 3 dnech na PS; A) nemodifikovaném B) modifikovaném plasmatem po dobu 100 s

Tato práce vznikla za podpory grantu A1 FCHT 2010 001 a A2 FCHT 2010 058.

5P-25

PŘÍPRAVA JÁDROVÝCH ANTIKOROZNÍCH
PIGMENTŮ S OBSAHEM Mo A W PRO NÁTĚROVÉ
HMOTYEVA MATĚJKOVÁ, ŠTĚPÁN OBRDLÍK, ANDRÉA
KALENDOVÁ a DAVID VESELÝÚstav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fa-
kulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Student-
ská 573, 532 10 Pardubice
ematej@centrum.cz

Ochrana kovů před korozi je složitý a velmi drahý problém. Záměrem průmyslu nátěrových hmot je snížit cenu antikorozi ochrany. Pigmenty jsou vedle filmotvorných látek základní surovinou pro výrobu antikorozi nátěrových hmot¹. Lístková plniva jako kaolín se podílejí na bariérovém mechanismu ochrany kovů. Kombinace těchto pigmentů či plniv s inhibičně resp. elektrochemicky působícími pigmenty dává příležitost formulovat nátěrové hmoty s lepší antikorozi ochranou². Povrchově upravené pigmenty jsou lépe dispergovatelné a poskytují nátěrovým filmům vyšší pevnost a lesk v porovnání s pigmenty povrchově neupravenými³.

Povrchově upravené kaolínové antikorozi vrstvou jsou jádrové pigmenty, kde na jádře kaolínu je nanášena vrstva wolframanu či molybdenanu. Důležitým měřítkem při výběru pigmentů je fakt, že molybdenové a wolframanové pigmenty patří do skupiny netoxických pigmentů. Vedle jádrových pigmentů byly pro porovnání antikorozi účinnosti připraveny i nejádrové molybdenové a wolframanové pigmenty. Jádrové pigmenty jsou tvořeny jádrem, které zajišťuje především tvar pigmentu, a obalem tvořeným příslušným MoO₄²⁻ ev. WO₄²⁻ pigmentem. K přípravě pigmentů, jejichž strukturální vzorec je Me^{II}(MoO₄) resp. Me^{II}(WO₄), byl použit MoO₃ (v případě wolframanů WO₃) a ZnO. Dále byly laboratorně připraveny jádrové pigmenty Me^{II}(MoO₄)/kaolín a Me^{II}(WO₄)/kaolín.

Pro syntézu byla zvolena kalcinace homogenizované směsi výchozích látek. Jádrové pigmenty byly připraveny tak, aby na 90 hm.% kaolínu jako jádrové matrice přicházelo 10 hm.% pigmentu. Výchozí látky byly vneseny do žíhacích kelímků z glazované keramiky a ponechány první kalcinaci, která probíhala při 900 °C 120 min s náběhem teploty 5 °C/min. Po vychladnutí byly směsi homogenizovány a následovala druhá kalcinace stejnou dobu při 1000 °C s náběhem teploty 5 °C/min. Pro zmenšení velikosti částic a rozrušení agregátů částic byly pigmenty rozemlety za mokra na planetárním mlýnu. Následně byly připraveny nátěrové hmoty na bázi rozpouštědlové alkydové pryskyřice, které se lišily různým objemovým zastoupením jednotlivých pigmentů.

LITERATURA

1. Kalendova A., Vesely D., Kalenda P.: *Pig. Res. Tech.* 35, 83 (2006).
2. Buxbaum G., v knize: *Industrial inorganic chemie*, s. 190. Wiley-WCH, 1998.
3. Tracton A. A., v knize: *Coatings Technology Handbook*, s. 76. CRC Press, 2005.

5P-26**VLIIV DERIVÁTŮ FERROCENU
A ANORGANICKÝCH PIGMENTŮ NA ZASYCHÁNÍ
VYSOKOSUŠINOVÉHO ALKYDOVÉHO POJIVA****PAVEL MENC a DAVID VESELÝ**

Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
pavel.menc@student.upce.cz

Publikovaná práce se zabývá studiem vlivu anorganických pigmentů na oxypolymeračně zasychající nátěrové hmoty. Byl zkoumán vliv vybraných anorganických pigmentů v kombinaci komerčního kobalt-nátého sikativa a metallocenových komplexů na bázi derivátů ferrocenu na zasychání nátěrových hmot oxypolymeračním mechanismem. Deriváty ferrocenu jsou zkoumány jako možná alternativa k ekologicky problematickým sikativům na bázi kobaltu. Pro přípravu nátěrových filmů bylo pro nízký obsah těkavých látek vybráno vysokosušinnové alkydové pojivo CHS-ALKYD TI 870. Oxidy přechodných kovů mohou ovlivňovat reakci při tvorbě filmu oxypolymeračním mechanismem podobně jako sušidla, jejichž základem jsou přechodné kovy. Dále mohou mít vliv na rychlost zasychání a výslednou tvrdost nátěrů¹.

Byly sledovány katalytické vlastnosti derivátů ferrocenu a vybraných oxidů přechodných kovů při zasychání oxidačně zasychajících pojiv. Byly použity tři deriváty ferrocenu monoacetylferrocen, 1,1'-diacetylferrocen, 1,1'-dibenzoyl-ferrocen² a sedm oxidů přechodných kovů Co₂O₃, Co₃O₄ (CoO.Co₂O₃), MnO₂ (burel), TiO₂ (rutilové a anatasové formy), CaTiO₃ (perovskit) a ZrO₂. Ke srovnání vlastností bylo použito komerčního kobaltnatého sikativa. Účinnost jednotlivých sikativních systémů byla sledována na modelové sloučenině ethyllinoleátu měřením peroxidového čísla³. Dále byly deriváty ferrocenu a studované pigmenty v kombinaci s kobaltnatým sikativem a deriváty ferrocenu aplikovány do oxidačně zasychajícího pojiva, kde byl sledován jejich vliv na rychlost zasychání, tvrdost a vzhled nátěrových filmů. Výsledky měření byly srovnány s komerčním kobaltnatým sikativem.

Z experimentů je patrné, že přidavek zkoumaných pigmentů do sikativované vysokosušinnové alkydové pryskyřice vykázal ve všech případech inhibiční charakter⁴. Povrchová tvrdost u systémů obsahujících kobaltnaté sikativum, deriváty ferrocenu a jejich kombinacemi byla vždy vyšší než u nesikativovaného pojiva.

LITERATURA

1. van Gorkum R., Bouwman E.: *Coord. Chem. Rev.* 249, 1709 (2005).
2. Kalenda P., Holeček J., Veselý D., Erben M.: *Prog. Org. Coat.* 56, 111 (2006).
3. Bieleman J. H.: *Additives for Coatings*, s. 372. Wiley-VCH, Weinheim 2000.
4. Kalendová A., Kalenda P.: *Technologie nátěrových hmot 1-Pojiva rozpouštědla a aditiva pro výrobu NH*, Univerzita Pardubice, Pardubice 2004.

5P-27**VYTESŇOVANIE ČIERNEHO LÚHU Z VRSTVY
VLÁKIEN BUNIČINY****JOZEF MIKLÍK a FRANTIŠEK POTŮČEK**

Ústav chémie a technológie makromolekulárných látok, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice
jozefmiklik@gmail.com

Práca sa zaoberá chemicko-inžinierskym popisom prania vlákien buničiny, kde je sledovaná látka vytesňovaná vodou zo statickej vrstvy buničiny. Pokusy boli uskutočnené v laboratórnej pracovnej cele, v ktorej bola formovaná vrstva zo zriedenej suspenzie nemletej, nebielenej buničiny s čiernym lúhom. Buničina bola uvarená z bukoveho dreva sulfátovým varným spôsobom. Várka bola vedená diskontinuálne. Získaná buničina bola charakterizovaná stupňom mletia, kappa číslom, dĺžkou vlákien a merným objemom a povrchom. Chemické zloženie buničiny bolo stanovené podľa noriem TAPPI¹.

Priebeh prania bol zaznamenaný pracími krivkami pre alkalický lignín, ktorého koncentrácia vo vystupujúcom prúde výluhu bola meraná spektrofotometricky pri vlnovej dĺžke 295 nm. Matematické spracovanie prací kriviek, ktoré boli získané ako odozva na skokový vstupný signál, poskytlo bezrozmerné Péceletovo číslo, ktoré charakterizuje vytesňovanie lignínu z vrstvy vlákien. Detailnejším spracovaním prací kriviek bol vypočítaný konvenčný prací výtazok, koeficient axiálnej disperzie, stredná doba zdržania lignínu a doba zdržania práce kvapaliny vo vrstve vlákien.

Výsledky získané pre sulfátovú buničinu uvarenú z bukoveho dreva boli porovnané s predošlými výsledkami publikovanými pre buničinu uvarenú zo zmesi borovice a smreku². Rozdielne morfológické vlastnosti spolu s rôznou veľkosťou vlákien z bukoveho dreva a zo zmesi ihličnatých drevín sa premietli do účinnosti operácie³. Tá bola jednoznačne väčšia pri praní bukoveho vlákien, k čomu prispela zrejme aj nižšia koncentrácia lignínu v čiernom lúhu v porovnaní s lúhom produkovaným pri sulfátovej várke ihličnatých drevín.

Táto práca vznikla za podpory MŠMT ČR v rámci výskumného zámeru MSM 0021627501.

LITERATÚRA

1. *Tappi Test Methods*. Tappi Press Atlanta, Georgia 2004.
2. Potůček F., Pulcer M.: *Chem. Pap.* 58, 377 (2004).
3. Potůček F., Miklík J.: *Chem. Pap.* 64, 147 (2010).

5P-28

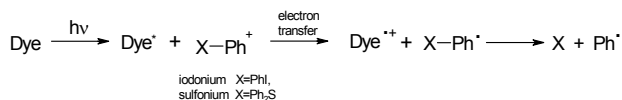
NOVEL DYES DERIVATIVES OF 12-PHENYLQUINOXALINO[2,3-B][1,4]BENZOTHAZINE AS PHOTOINITIATORS OF CATIONIC POLYMERIZATION

JOANNA NAREWSKA, RAFAŁ STRZELCZYK, RADOSŁAW PODSIADŁY, and JOLANTA SOKOŁOWSKA*

*Institute of Polymer and Dye Technology, Technical University of Lodz, Stefanowskiego 12/16, 90-924 Lodz
jolanta.sokolowska@p.lodz.pl*

Photoinitiated cationic polymerization, in contrast to commonly used free radical polymerization, is not inhibited by oxygen. Over the past decade, the most commonly used photoinitiators have been diaryliodonium and triarylsulfonium salts. The most significant photoinitiators of the past decade have been compounds with more efficient long-wavelength absorbance. This is significant for two reasons: first, the development of efficient, long-wavelength UV and visible emitting light sources has created an increasing demand for an initiator system that is effective in the 400–500-nm spectral region; second, durable photopolymers, the key has been the development of photoinitiators that absorb outside of the UV absorption curve of traditional UV absorbers used to protect organic coatings from the harmful rays of the Sun.

Our study aimed to extend the absorption of onium salt initiator systems and subsequently to improve the curing rate and monomer conversion. The dyes were used as photosensitizers. The most efficient and generally applicable mechanism of the photosensitization of diaryliodonium and triarylsulfonium salts is the photo-induced intermolecular electron transfer process. The photo-excited sensitizer (Dye*) is oxidized by the onium salt (X–Ph⁺) to form the corresponding radical cation (Dye^{•+}) and onium salt radical (X–Ph[•]). This radical then undergoes cleavage as depicted in Scheme 1. The radical cation, Dye^{•+}, may itself initiate cationic polymerization. Alternatively, it may interact with solvents or monomers, resulting in the release of a strong protic acid. This acid may then initiate cationic polymerization.



Scheme 1.

REFERENCES

1. Fouassier J. P., Rabek J.: *Radiation Curing in Polymer Science and Technology*, Vol. 1, p. 49-113. Elsevier, London 1993.
2. Decker C., Nguyen T. V. T., Hon P. T.: *Polym. Int.* 50, 986 (2001).
3. Selvaraju C., Sivakumar A., Ramamurthy P.: *J. Photochem. Photobiol., A* 138, 213 (2001).

5P-29

VLIV *N,N*-DIMETHYLANILINU A JEHO DERIVÁTŮ NA VYTVRZOVÁNÍ NENASYCENÉ POLYESTEROVÉ PRYSKYŘICEMONIKA NEŠETRÍLOVÁ^a, ZDENĚK ČERNOŠEK^b a PETR KALENDA^a

^a Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek,
^b Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
m.nesetrilova@seznam.cz

Tato práce se zabývá studiem vlivu *N,N*-dimethylanilinu a jeho derivátů na rychlost vytvrzovacích reakcí nenasyčené polyesterové pryskyřice (UP). UP pryskyřice byla vytvrzována při pokojové teplotě systémem obsahujícím iniciátor (organický peroxid) v kombinaci s terciárními aminy.

Pod pojmem nenasyčené polyesterové pryskyřice se v praxi označují roztoky lineárních nenasyčených polyesterů v monomerech, které polymerují řetězovým mechanismem, obvykle ve styrenu, méně často např. v methylmetakrylátu, vinyltoluenu nebo dialkylftalátu. Vlastnosti vytvrzené pryskyřice závisí jak na jejím složení, tak na stupni jejího vytvrzení.

Ke studiu vytvrzovacích reakcí byla v laboroři syntetizována UP pryskyřice na bázi maleinanhydridu, ftalanhydridu a ethylenglykolu obsahující 25 hm.% styrenu. Jako iniciátor byla použita pasta dibenzoylperoxidu v dimethylftalátu a jako urychlovače byly použity *N,N*-dimethylanilin, 4-*N,N*-trimethylanilin, 4-brom-*N,N*-dimethylanilin a ethyl-4-(dimethylamino)benzoát. Pomocí termočlánku byla zaznamenávána maximální teplota a doba, za kterou došlo k vytvrzení jednotlivých vzorků.

Experimentálně zaznamenané vytvrzovací charakteristiky *N,N*-dimethylanilinu, 4-*N,N*-trimethylanilinu a 4-brom-*N,N*-dimethylanilinu jsou si velmi podobné. Ethyl-4-(dimethylamino)benzoát byl ze všech testovaných urychlovačů nejméně účinný.

LITERATURA

1. Mleziva J., Šňupárek J.: *Polymer – výroba, struktura, vlastnosti a použití*. Sobotáles, Praha 2000.
2. Kalenda P.: *Eur. Polym. J.* 31, 1099 (1995).
3. Al-Muaikel N. S.: *Eur. Polym. J.* 39, 1025 (2003).
4. Eisenberg P., Lucas J. C., Williams R. J. J.: *J. Appl. Pol. Sci.* 65 (1997).

5P-30

STUDIUM ANTIKOROZNÍCH VLASTNOSTÍ
PIGMENTŮ S PEROVSKITOVOU STRUKTUROUŠTĚPÁN OBRDLÍK, EVA MATĚJKOVÁ a ANDRÉA
KALEDOVÁ

Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
stepan.obrdlik@student.upce.cz

Nejpoužívanějším způsobem ochrany kovových materiálů proti korozním dějům je aplikace organických povlaků. Jednou z rozhodujících součástí antikoročních nátěrových hmot jsou korozně-inhibiční pigmenty, které svými vlastnostmi poskytují prodloužení životnosti kovového podkladu. Dříve používané pigmenty na bázi šestimocného chromu jsou dnes pro svou toxicitu zakázány a jsou nahrazovány jinými typy pigmentů. Jednou z variant je využití sloučenin na bázi směsných oxidů kovů.

Jako náhrada toxických antikoročních pigmentů se ukazují ferity spinelového typu, respektive spinely na bázi směsných oxidů kovů¹. Další významnou skupinou jsou látky perovskitového typu (ABO₃) tvořící širokou třídu sloučenin s různými fyzikálními a elektrickými vlastnostmi a různými druhy krystalických struktur². Hlavním chemickým požadavkem pro ideální perovskitovou strukturu³ je součet mocností obsazených kationtů VI.

Pigmenty s perovskitovou strukturou byly připraveny vysokoteplotní syntézou založenou na reakci příslušného oxidu kovu (Ca, Sr) s oxidem titaničitým za vzniku perovskitu a tausonitu. Pro stanovení vlastností syntetizovaných pigmentů byly připraveny modelové nátěrové hmoty na bázi vodouředitelné epoxidové emulze a styrenakrylátové disperze.

Testované nátěrové filmy byly vystaveny koroznímu prostředí s povšechnou kondenzací vody, koroznímu prostředí obsahující neutrální solnou mlhu a koroznímu prostředí s obsahem SO₂. Z metod pro hodnocení stupně koroze v ploše podkladu, hodnocení koroze v řezu a hodnocení stupně tvorby puchýřků v nátěru byla stanovena celková antikoroční účinnost pro jednotlivé nátěrové filmy exponované v daném prostředí. Doba expozice nátěrových filmů v korozním prostředí činila 1650 hodin.

LITERATURA

1. Kalendová A.: *Sborník referátů přednesených na XXVII. mezinárodní konferenci o nátěrových hmotách, Pardubice, 1996*, str. 217.
2. Javed S. G., Khan A., Majid A., Mirza A. M., Bashir J.: *Com. Mat. Sci.* 3, 627 (2007).
3. Choudhary V. R., Banerjee S., Uphade B. S.: *Appl. Catal.* 2, 183 (2000).

5P-31

STUDIUM VLASTNOSTÍ ZPĚŇOVATELNÝCH
NÁTĚROVÝCH HMOTROMAN OTÁHAL^a, PETR KALENDA^a a VÍTĚZSLAV
ZIMA^b

^a Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, ^b Společná laboratoř chemie pevných látek UMCh AV ČR a UPA, Studentská 84, 532 10 Pardubice
otahal.r@seznam.cz

Zpěňovatelné nátěrové hmoty patří do důležité třídy pasivní protipožární ochrany. Jsou připraveny tak, aby zajistily celistvost oceli po dobu 1–3 hodin, při teplotě okolí 1100 °C. Zpěňovací systém je tvořen třemi aktivními složkami, které jsou spolu vázány pojivem. Obvykle to bývá zdroj kyseliny, zdroj uhlíkového zbytku a nadouvadlo¹. Nátěry obsahující zpěňovací systém působením tepla vytváří zpěňováním expandující vrstvu, která tvoří tepelnou bariéru. Mechanismus zpěňování je vysvětlován následovně²: nejdříve se rozloží polyfosforečnan amonný za vzniku minerální kyseliny, která se účastní dehydratace pentaerytritolu za vzniku uhlíkového zbytku. Melamin se rozkládá za vývinu nehořlavých plynů, které pak tento uhlíkový zbytek nadouvají.

Tato práce je zaměřena na studium vlastností zpěňovatelných nátěrových hmot na bázi epoxy-siloxanu a kopolymerní disperze vinylacetát-vinylester kys. versatikové. V připravených nátěrových hmotách byl rovněž studován vliv plniv na tvorbu zpěněné vrstvy a na jejich protipožární vlastnosti. Pro studium byla použita slída, minerální vlákna, wolastonit, boritan zinečnatý a expandovatelný grafit.

Protipožární vlastnosti připravených zpěňovatelných nátěrových hmot byly testovány pomocí testu ohnivzdornosti. Degradací procesy byly studovány pomocí termogravimetrické analýzy a vzniklá zpěněná vrstva byla analyzována pomocí rentgenové fluorescenční spektrometrie.

Použitá plniva vylepšila protipožární vlastnosti zpěňovatelných nátěrových hmot. S rostoucí koncentrací plniv však docházelo k poklesu tloušťky zpěněné vrstvy a k následnému zhoršení protipožárních vlastností. Tepelnou degradací zpěňovatelné nátěrové hmoty na bázi epoxy-siloxanu vznikala zpěněná vrstva o větším hmotnostním zbytku než v případě zpěňovatelné nátěrové hmoty na bázi vinylacetát-vinylester kys.versatikové. Rozdíl byl způsoben oxidy křemíku, které vznikaly z epoxy-siloxanu. Tyto oxidy tvořily na povrchu zpěněné vrstvy, tenkou, oxidickou vrstvu, která vylepšila její tepelně-izolační vlastnosti.

Tato práce vznikla za podpory Ministerstva průmyslu a obchodu (FT-TA4/064).

LITERATURA

1. Duquesne S., Magnet S., Jama C., Delobel R.: *Surf. Coat. Technol.* 180-181, 302 (2004).
2. M. Lewin, v knize: *Fire Retardancy of Polymers: The Use of Intumescence*, s. 3. The Royal Chemical Society, Cambridge 1998.

5P-32

ROZDÍLY VE SLOŽENÍ TENKÝCH VRSTEV
A VÝCHOZÍHO MATERIÁLU PŘI VAKUOVÉM
NAPAŘOVÁNÍ GeSe₂HANA PŘIBYLOVÁ*, KAREL PÁLKA
a MIROSLAV VLČEK*Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-
technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10
Pardubice
hpribylova@gmail.com*

Chalkogenidová skla jsou neoxidová skla, v jejichž struktuře je atom kyslíku nahrazen jiným atomem chalkogenu, tj. S, Se nebo Te. To má za následek významné změny v jejich fyzikálně chemických vlastnostech. Díky menší kompaktnosti struktury mají výrazně nižší hodnoty T_g a řada z nich je fotocitlivá, tj. jejich fyzikálně chemické vlastnosti mohou být modifikovány expozicí zářením o vhodné vlnové délce a intenzitě. Náhrada lehčího atomu O některým z těžších chalkogenů má za následek i vyšší hodnoty indexu lomu oproti oxidovým sklům a posun dlouhovlnné absorpční hrany směrem do IČ oblasti. Pro sulfidická skla se dlouhovlnná absorpční hrana obvykle nachází mezi 10–12 μm , pro selenidová 15–16 μm a pro teluridová kolem 20 μm . Díky těmto vlastnostem nachází chalkogenidová skla mnohá uplatnění jako materiály pro optické členy pro VIS a IČ oblast.

V praktických aplikacích se chalkogenidová skla často používají v podobě tenkých vrstev. Vlastnosti tenkých vrstev se od vlastností objemových skel obecně liší, např. vykazují volnější strukturu s řadou defektů a z toho plynoucí vyšší fotocitlivost. Existuje celá řada metod přípravy tenkých vrstev. Nejrozšířenější je metoda vakuového napařování. Vrstvy připravené touto metodou se vyznačují vysokou čistotou a homogenitou tloušťky i při napařování na rozměrnější substráty. Avšak v některých případech může docházet k tvorbě vrstev nehomogenních ve složení s rostoucí tloušťkou. Je-li některá složka skla odpařována přednostně, dochází ke tvorbě koncentračního gradientu v tloušťce vrstvy.

V této práci jsme se zaměřili na přípravu tenkých vrstev z objemového skla o složení GeSe₂. Metodou EDAX a Ramanovou spektroskopií byla sledována závislost složení a struktury tenkých vrstev po odpaření určité procentuální části výchozího stechiometrického materiálu.

Tato práce vznikla za podpory grantu SG300001 a grantu MŠMT ČR 0021627501.

5P-33

STRUKTURA A VLASTNOSTI OBJEMOVÝCH SKEL
SYSTÉMU GeS₂-SbSIVÁCLAV PARCHANSKI^a a BOŽENA FRUMAROVÁ^b^a Výzkumné centrum LC 523 Univerzity Pardubice a ÚAnCh AV ČR, v.v.i., ^b ÚMCh AV ČR, v.v.i., Praha
Vaclav.Parchanski@upce.cz

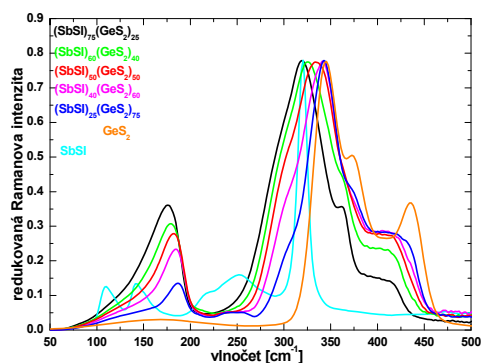
Byla připravena objemová skla systému (GeS₂)_{100-x}(SbSI)_x (x = 0, 25, 40, 50, 60, 75, 100). Skelný stav byl potvr-

zen elektronovou mikroskopií a rgt difrakční analýzou.

Byly studovány termické vlastnosti metodou termomechanické analýzy a byly stanoveny teploty skelného přechodu, dilatační teplota měknutí a lineární koeficient teplotní roztažnosti. Teplota skelného přechodu T_g a dilatační teplota měknutí T_s s rostoucím obsahem SbSI klesají.

Optické vlastnosti objemových skel byly studovány ve viditelné oblasti a v blízké a střední infračervené oblasti spektra elektromagnetického záření, tj. v oblasti krátkovlnné i dlouhovlnné absorpční hrany. Krátkovlnná absorpční hrana skel leží mezi 500 nm a 650 nm (resp. mezi 2,1 a 2,4 eV) v závislosti na složení a s rostoucím obsahem SbSI se posouvá do oblasti delších vlnových délek. Dlouhovlnná absorpční hrana příslušící vibracím GeS₂ leží u 12 μm . Optická propustnost nabývá v celé oblasti propustnosti hodnot 60–70 %.

Struktura objemových skel byla studována Ramanovou spektroskopií. Spektra byla redukována Gammon-Shukerovou redukcí pro odstranění teplotních vlivů v blízkosti Rayleighovy linie, normována na velikost intenzity hlavního pásu mezi 320 cm⁻¹ a 340 cm⁻¹ a rozložena na jednotlivé subpásky. V Ramanových spektrech skel (obr. 1) lze pozorovat zdánlivý posun hlavního pásu od hodnot 340 cm⁻¹ pro sklo GeS₂ k hodnotám 320 cm⁻¹ pro skla s vyšším obsahem SbSI, resp. pro krystalický SbSI. Ten lze vysvětlit poklesem intenzity pásu 340 cm⁻¹ odpovídajícího vibracím tetraedrů GeS₄ a růstem intenzity pásu 320 cm⁻¹, který přísluší vibracím pyramid SbS₃, s rostoucím obsahem SbSI na úkor GeS₂.



Obr. 1. Redukovaná Ramanova spektra objemových skel systému (GeS₂)_{100-x}(SbSI)_x

Výzkum byl podpořen grantem GA ČR 203/09/0827, projektem AV ČR AV0Z 40500505 a výzkumným centrem LC523.

5P-34

**ÚČINOK POVRCHOVO-AKTÍVNYCH LÁTOK
V ELASTOMERNEJ ZMESI NA FYZIKÁLNO-
MECHANICKÉ VLASTNOSTI VULKANIZÁTOV**
**PETER POČAROVSKÝ, IG NÁC CAPEK, IGOR
NOVÁK, JANKA JURČIOVÁ, JANKA KRŠKOVÁ,
SLÁVKA ĽALÍKOVÁ a TATIANA BAZYLÁKOVÁ**

*Katedra plastov a kaučuku, Fakulta chemickej
a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita
v Bratislave, 812 37 Bratislava 1
pocarovsky@fpt.tnuni.sk*

V práci bolo sledované chovanie povrchovo-aktívnych látok rôznych typov v kaučukovej zmesi, kde ako matrica bola zvolená kombinácia prírodného kaučuku SMR 20 a plniva sadzi N660. Triton 405, Tween 40 a Malein anhydrid boli vybrané ako povrchovo-aktívne látky, ktoré boli rozdispergované v gumárenskej zmesi hneď po plnive a boli pridávané od 0,5–4 hm.%. Po zamiešaní gumárenských zmesí boli stanovené vulkanizačné charakteristiky, a potom boli lisované pri teplote 150 °C, tlaku 2 MPa a čase t_{90} , ktorý bol pre každú zmes iný.

Následne boli stanovené fyzikálno-mechanické vlastnosti vulkanizátov (tvrdosť ShA, pevnosť, ťažnosť a moduly 100, 200 a 300.).

Z nameraných hodnôt vyplýva, že pri zmesiach s postupným pridávaním Malein anhydridu nastáva pokles hodnôt všetkých sledovaných vlastností, čo je pre využitie Malein anhydridu pre tento účel nevhodné. Zmesi s Tritonom 405 a Tweenom 40 majú veľmi podobné priebehy kriviek z čoho sa domnievame, že pôsobia na nami stanovenú matricu veľmi podobne.

Autori ďakujú Slovenskému grantu VEGA 2/0037/10 za finančnú podporu.

LITERATURA

1. Blažej A., Hudul P., Markušovská E., Novák L., Paulovič M., Vyskočil I.: *Tenzidy*, s. 15-21. ALFA, Bratislava 1977.
2. Měřinská D.: *Plasty a kaučuk* 42, 3 (2005).
3. Hrachová J., Chodák I., Komadel P.: *Chem. Papers* 63, 55 (2009).
4. Coveney V. A., Johnson D. E.: *Rubber Chem. Technol.* 73, 563 (2000).
5. STN 62 1436 (ISO 37): A determination of tensile properties.

5P-35

**POVRCHOVÁ ÚPRAVA NÍZKOHUSTOTNÉHO
POLYETYLÉNU POLY(2-ETYL-2-OXAZOLÍNOM)
S VYUŽITÍM VYSOKOTLAKEJ PLAZMY**
**ANTON POPELKA, IGOR NOVÁK, JURAJ KRONEK,
ANGELA KLEINOVÁ, MARIÁN ŠTEVIAR a IVAN
CHODÁK**

*Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská ces-
ta 9, 842 36 Bratislava
anton.popelka@savba.sk*

Nízkohustotný polyetylén (LDPE) vyniká objemovými vlastnosťami vhodnými pre mnohé aplikácie. Jeho voľná povrchová energia však dosahuje nízke hodnoty, ktoré sa prejavujú nízkou hydrofilnosťou. Táto vlastnosť súvisí s hydrofóbnym a chemicky inertným povrchom LDPE, pričom nastávajú ťažkosti pri jeho ďalšom spracovaní, ako napr. pri farbení, potlačí a lepení (nízka adhézia). Tieto ťažkosti môžu byť odstránené povrchovou modifikáciou LDPE¹.

V tejto práci bol preskúmaný vplyv poly(2-etyl-2-oxazolínu) (PETOX) naviazaného na LDPE s využitím nízko-
teplotnej plazmy generovanej difúznym koplánrným povrchovým bariérovým výbojom (DCSBD)², pri ktorom sa vytvára makroskopicky homogénna plazma bez priameho kontaktu s elektródami, v dôsledku čoho sa zabraňuje opotrebeniu elektród. PETOX ($n = 100$) bol pripravený kationovou polymerizáciou 2-etyl-2-oxazolínu (Schéma 1)³. Pripravený polymér obsahuje polárne amidové skupiny a patrí do skupiny biokompatibilných materiálov⁴.

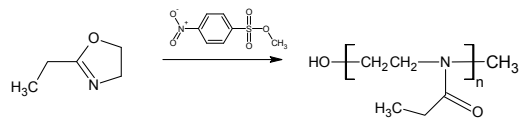


Schéma 1. Kationová polymerizácia 2-etyl-2-oxazolínu

Povrchové vlastnosti upraveného LDPE boli skúmané stanovením voľnej povrchovej energie prostredníctvom merania kontaktných uhlov sady testovacích kvapalín See Systémom (Surface Energy Evaluation System), ktoré potvrdili výrazný nárast voľnej povrchovej energie a jej polárnej zložky s rastúcim obsahom PETOX. Prítomnosť naviazanej amidovej skupiny PETOX bola stanovená z FT-IR-ATR meraní.

Táto práca vznikla za podpory grantu MŠ SR a SAV, projekt VEGA, č. 2/7103/2.

LITERATÚRA

1. Novák I., Števiar M., Chodák I., Krupa I., Nedelčev T., Špírková M., Chehimi M. M., Mosnáček J., Kleinová A.: *Polym. Adv. Technol.* 18, 97 (2007).
2. Šimor M., Ráhel J., Vojtek P., Černák M., Brablec A.: *Appl. Phys. Lett.* 81, 2716 (2002).
3. Kobayashi S.: *Prog. Polym. Sci.* 15, 751 (1990).
4. Adams N., Schubert U. S.: *Adv. Drug Delivery Rev.* 59, 1504 (2007).

5P-36
PŘÍMÝ ZÁPIS LASEREM DO TENKÝCH VRSTEV
SYSTÉMU As-Ge-Se

HANA PŘIBYLOVÁ^a, MIROSLAV VLČEK^{a*},
SIEGMUND SCHROETER^b a RUEDIGER
POEHLMANN^b

^a *Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice,* ^b *IPHT Jena, Albert-Einstein-Straße 9, 07745 Jena*
 miroslav.vlcek@upce.cz

Chalkogenidová skla patří do skupiny speciálních neoxidových skel, ve kterých je atom kyslíku nahrazen atomem chalkogenu (S, Se nebo Te). Tato skla mají řadu zajímavých fyzikálně-chemických vlastností. Je pro ně charakteristická vysoká propustnost v IČ oblasti, vysoké hodnoty indexu lomu ($n = 1,8\text{--}3,4$) a mnohem nižší T_g než je běžné u skel oxidových. Jejich vlastnosti, zejména jsou-li připraveny ve formě tenkých vrstev, lze navíc měnit u mnohých složení expozicí vhodným zářením (VIS, UV, RTG) nebo působením svazkem elektronů. Expozicí intenzivním laserovým paprskem se mohou měnit nejen optické parametry (optická propustnost T , optická šířka zakázaného pásu E_g^{opt} atd.), ale může docházet i k lokální modifikaci povrchu tenkých vrstev. Díky těmto vlastnostem a jejich snadné přípravě nacházejí uplatnění v mnoha aplikacích, např. v elektronice (paměťové prvky s vysokou hustotou zápisu), optoelektronice (spínací a paměťové prvky, optické mřížky, mikroočky, slučovače resp. děliče paprsků pracující v infračervené oblasti), v kopírovací a tiskařské technice.

V této práci se zabýváme studiem vlivu různých rychlostí zápisu a intenzit He-Cd laseru ($\lambda = 442$ nm) na strukturu optických mřížek zapsaných do tenkých vrstev. Složení tenkých vrstev bylo v řadě $\text{GeSe}_2\text{-As}_4\text{Se}_3$ a jejich tloušťka řádově 1000 nm. Tenké vrstvy byly exponovány He-Cd laserem, který je částí optického litografu DWL 66 (Kimmon Koha Co.). Pro expozici byly použity různé rychlosti zápisu ($V = 30\text{--}80$ mm s⁻¹) a různá energie laseru ($P = 360\text{--}1200$ μW). Průměr expozičního paprsku byl konstantní ($R_{\text{spot}} = 1,6$ μm). S použitím výše uvedených parametrů byly spočítány expoziční dávky dle rovnice:

$$D_{\text{exp}} = \frac{2P}{\pi \cdot V \cdot R_{\text{spot}}}$$

Struktura a kvalita zapsaných mřížek byla studována pomocí AFM. Byly nalezeny závislosti hloubky korugace na expoziční dávce.

Tato práce vznikla za finanční podpory grantu SG300001 a grantu MŠMT ČR 0021627501.

5P-37
HODNOCENÍ FUNGICIDNÍCH
A ANTIMIKROBIÁLNÍCH ÚPRAV CELULOSOVÝCH
MATERIÁLŮ

HANA PŘICHYSTATOVÁ, JARMILA VYTRÁSOVÁ,
RADIM HRDINA a LADISLAV BURGERT

Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
 Prichystalova.H@seznam.cz

Publikovaná práce se zabývá studiem možností fungicidních a antimikrobiálních úprav celulosových materiálů vhodnými účinnými látkami a způsobem testování účinnosti těchto úprav. Jako fungicidní prostředek byl testován komerční produkt na bázi tributylcín maleátu aplikovaný na bavlněné tkanině v koncentracích 0,2–5 % z hmotnosti tkaniny. Účinná úprava se prokázala již při nejnižší testované koncentraci. Byl proveden difuzní test a prokázána účinnost vůči plísním *Penicillium chrysogenum*, *Aspergillus flavus* a *Fusarium poae*.

Obdobný účinek vykazovala při koncentraci 1% ekologicky únosnější kyselina salicylová (nižší koncentrace nebyla testována). Vysokou účinnost vůči jmenovaným plísním vykazuje i kationický tenzid – dodecylbenzyltrimethylammonium chlorid a to již od koncentrací 0,5–2 % (dle druhu plísně).

Dále byla testována účinnost úprav na bázi chitosanu a jeho komplexů s vhodnými ionty. Byl připraven i komplex měďnatého iontu, jako analogie ke komplexu stříbra¹. Účinnost úprav těmito syntetizovanými sloučeninami byla ověřována na těchto kmenech bakterií a plísní: *Penicillium chrysogenum*, *Aspergillus niger*, *Fusarium poae*, *Bacillus subtilis*, *Bacillus licheniformis* a *Escherichia coli* (jako srovnávací mikroorganismus).

Tato práce vznikla za podpory grantu MSM 0021627501.

LITERATURA

- Hrdina R., Hrdinová M., Burgert L., Bureš V., Lewandowski H., Šuláková R.: CZ 300772B6.

5P-38
NANOSTRUKTURNÍ OXID MANGANIČITÝ
PRO PALIVOVÉ ČLÁNKY

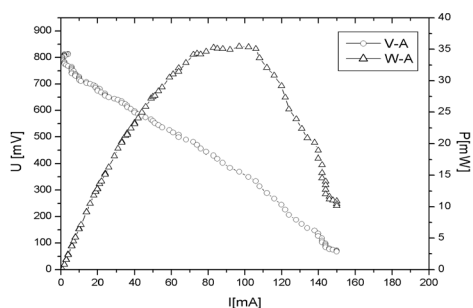
TEREZA UHLÍŘOVÁ, PETER BARATH
a JAKUB REITER*

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

Vysoce organizované prostředí lyotropních kapalných krystalů (LLC) umožňuje přípravu různých nanomateriálů (kovů i oxidů) pomocí chemických i elektrochemických metod. V současné době se náš výzkum zabývá přípravou nanostrukturního oxidu manganičitého, který je perspektivním materiálem pro palivové články, kde slouží jako katalyzátor redukce kyslíku.

MnO₂ byl potenciostaticky vylučován z binárního systému surfaktantu Brij 56 (poly(ethylenglykol)-hexadecyl ether) s vodou (50:50 hm.%), kde LLC má hexagonální strukturu. Byly zkoumány různé možnosti depozice MnO₂ na elektrody z inertního materiálu (skelný uhlík, zlato, platina) a byl nalezen vhodný vodný roztok pro jeho přípravu (0,1M Na₂SO₄ + 0,1M (CH₃COO)₂Mn). Optimalizací postupu se podařilo připravit uniformní vrstvu látky na elektrodě. Měření redukce kyslíku v 1M KOH na rotační diskové elektrodě MnO₂ ukázalo značnou katalytickou aktivitu.

V dalším výzkumu byl MnO₂ deponován na grafitový papír (kladná elektroda) a spolu se zápornou elektrodou s katalyzátorem na bázi platiny (záporná elektroda) byl zalisován na polymerní iontoměničovou membránu alkalického typu Fumatech. Měření při 60 °C ukázalo, že připravený katalyzátor je funkční pro redukci kyslíku v kyslíko-vodíkovém palivovém článku s maximálním výkonem 35 mW (obr. 1).



Obr. 1. Volt-ampérová a výkon-ampérová charakteristika palivového článku zapojeného do digitální zátěže

Tato práce vznikla za podpory Akademie věd ČR (AV0Z40320502), MŠMT ČR (LC 523) a Grantové agentury AV ČR (KJB200320801).

LITERATURA

1. Elliot J. M.: J. New Mat. Electrochem. Syst. 2, 239 (1999).
2. Barath P., Uhlířová T., Reiter J.: 10th ABAF, 30.8.-2.9.2009, Brno, s. 186-188, Book of Abstracts, Brno 2009.
3. Uhlířová T., Barath P., Reiter J.: J. Power Sources, připravováno.

5P-39

STUDIUM FOSFÁTOVÝCH SKEL OLOVNATÝCH DOTOVANÝCH OXIDEM MOLYBDENOVÝM

IVANA RÖSSLEROVÁ, LADISLAV KOUDELKA a JANA HOLUBOVÁ

Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 573, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice
st26053@student.upce.cz

Byla připravena a studována fosfátová skla z ternárního systému PbO-P₂O₅-MoO₃. Skla byla syntetizována při teplotách 800–1000 °C v platinových kelímcích a po homogenizaci skloviny při této teplotě byla odlita do grafitové formy a chlazená volně na vzduchu. Skla byla studována ve třech koncentračních řadách (100-x)[0.5PbO-0.5P₂O₅]-xMoO₃ (A), (50-y)PbO-yMoO₃-50P₂O₅ (B) a v řadě 50PbO-zMoO₃-(50-z)P₂O₅ (C). Struktura skel byla studována pomocí Ramanovy spektroskopie a MAS NMR spektroskopie jader ³¹P.

V kompoziční řadě (100-x)[0.5PbO-0.5P₂O₅]-xMoO₃ se podařilo připravit homogenní skla s obsahem 0–70 mol.% MoO₃. Jejich teplota skelného přechodu (T_g) nejprve vzrůstá s obsahem MoO₃ a dosahuje maxima u skla s obsahem 50 mol.% MoO₃, s jeho dalšími přídávky pak T_g klesá. Skla řady A byla zbarvena modrozeleně, což lze připisat přítomnosti části atomů Mo v oxidačním stavu 5+. Měření ESR spekter se podařilo stanovit poměr Mo^V/Mo^{VI} ve studovaných sklech, který je ve všech připravených sklech nižší než 1 % a klesá s růstem obsahu MoO₃ ve sklech.

MAS NMR spektra jader ³¹P odrážejí postupnou depolymerizaci fosfátových řetězců při zabudování molybdatových strukturálních celků do strukturální sítě skel. Jejich dekompozicí byly získány koncentrační závislosti fosfátových strukturálních celků Q², Q¹ a Q⁰ na složení skel.

Na Ramanových spektrech skel ve sklech řady A se vestavování molybdatových celků do struktury skel projevuje přítomností dvou výrazných vibračních pásů s maximy při 930 cm⁻¹ a 900–830 cm⁻¹. Prve uvedený pás je dominantní ve sklech s nízkým obsahem MoO₃, zatímco druhý pás je dominantní ve spektrech s vysokým obsahem MoO₃ a jeho poloha se posouvá směrem k nižším vlnovým číslům. Zatímco první pás je přiřazován vibracím oktaedru MoO₆, druhý pás souvisí s vibracemi můstkových atomů kyslíku ve vazbách Mo-O-Mo. Nárůst intenzity tohoto pásu s růstem obsahu MoO₃ svědčí o vytváření molybdatových klastřů ve strukturální síti těchto skel vzájemným propojováním celků MoO₆.

Všechna studovaná skla byla též podrobena krystalizaci při teplotách nad T_g . Rentgenová difrakční analýza zjistila, že ve sklech řady A dochází ke vzniku krystalického molybdatofosforečnanu olovnatého Pb(MoO₂)₂(PO₄)₂ a při obsazích MoO₃ nad 50 mol.% vzniká též krystalický MoO₃. Naproti tomu v řadě C dochází u skel s vyšším obsahem MoO₃ ke vzniku molybdenanu olovnatého PbMoO₄.

Autoři práce děkují za finanční podporu grantu Grantové agentury ČR č. P106/10/0283/ a grantu SG 300001.

5P-40

MODIFICATION OF LIGNINS FROM KRAFT BLACK LIQUORS FOR PREPARATION OF PERSPECTIVE WOOD COMPOSITE MATERIALS

EVA RUŽINSKÁ* and ANNA DANIHELOVÁ

Technical University in Zvolen, Študentská 26, 960 53 Zvolen
evaruzin@vlsd.tuzvo.sk

Synthetic polycondensate adhesives (e.g. phenol-formaldehyde resins - PF) were widely applied as the technological adhesives in manufacturing of composite wooden materials. The development was aimed to the compensation of toxic component, respectively substitution of

phenol in PF adhesives by natural polyphenols, above all of technical lignins which is possible isolated as secondary raw materials from pulp and paper industry^{1,2}.

Kraft lignin has low content of free phenolic hydroxylic groups and relatively low degree of crosslinking rank among the most reactive technical available lignins. It has relatively reactivity to formaldehyde. The origin kraft black liquor (concentrate) was obtained from sulphate method of the product of pulp. Their insufficient implementation to polymeric matrix of mixture lignin-phenolformaldehyde polycondensate could be modified, by reactions as methylation², hydroxymethylation³, demethylation⁴, by the aim of reactivity increase of lignin prepartates during crosslinking reaction of prepared adhesive mixtures^{5,6}.

It is very significant that the conditions of crosslinking of prepared adhesive mixtures are the same as at commercial wooden composite materials binding only origin PF adhesive. Prepared adhesive mixtures (reciprocal substitution PF by modified lignin prepartates range 10–40 wt.%) were applied for laboratory preparation of wooden composite materials: three-layers plywood and particle boards with comparable physical and mechanical properties as standard manufactured wooden composite materials, but with expressive economic saving.

Research was supported of Slovak Ministry of Education, No. 1/0841/08.

REFERENCES

1. Ružinská E.: *W. Research* 48, 1/2 (2003).
2. Dolenko A. J., Clarke M. J.: *For. Prod. J.* 28, 8 (1978).
3. Shimatani K., Sano Y.: *Holforsch.* 49, 4 (1995).
4. Xinnan A., Schroeder H. A., Thompson G. E.: *Chem. Ind. For. Prod.* 15, 3 (1995).
5. Shen K. C., Calvé L.: *Adhesive Age* 1980, 23.
6. Vasquez G., Gonzales J., Freire S., Antorrena G.: *Biores. Technol.* 60, 3 (1997).
7. Wooten A. L., Sellers T. Jr., Tahir P. M.: *For. Prod. J.* 38, 6 (1988).

5P-41

POVRCHOVÉ VLASTNOSTI POLYMERŮ MODIFIKOVANÝCH Ar PLAZMATEM

ALENA ŘEZNÍČKOVÁ^{a,*}, ANNA VASINA^a, PETR SAJDL^b, ZDEŇKA KOLSKÁ^c a VÁCLAV ŠVORČÍK^a

^a Ústav inženýrství pevných látek, ^b Ústav energetiky, Vysoká škola chemicko-technologická Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, ^c Katedra chemie, Univerzita J. E. Purkyně, České mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem
reznicka@vscht.cz

Polymery jsou v současné době aplikovány v oblasti biomateriálů, ochranných povlaků, oděvního ale i elektronického průmyslu. Obecně však vlastnosti povrchu polymerních materiálu nedosahují požadované kvality pro další zpracování. V mnoha aplikacích jsou požadovány speciální povrchové úpravy co do chemického složení, schopnosti smáčct, drsnosti, vodivosti konkrétního zpracovávaného polymeru. Z tohoto

důvodu se používají metody povrchové modifikace, které mohou přetvořit tyto levné materiály ve vysoce hodnotné produkty^{1,2}.

Tato práce se zabývá charakterizací modifikovaného povrchu polyethylenu (PE), polytetrafluorethylenu (PTFE), polystyrenu (PS), polyethylentereftalátu (PET) a polypropylenu (PP). Ablace substrátů modifikovaných Ar plazmatem byla stanovena gravimetricky. Dále práce studuje povrchovou polaritu a stárnutí polymerů v závislosti na době expozice v plazmatu. Změna povrchové polaritu a stárnutí byla stanovena goniometricky. Povrchová morfologie modifikovaných vzorků byla studována metodou AFM (Atomic force microscopy). Chemická struktura modifikovaných polymerů byla charakterizována pomocí metod XPS (X-ray photoelectron spectroscopy), EPR (electron paramagnetic resonance) a RBS (Rutherford Backscattering Spectroscopy). Chemie povrchu studována pomocí ζ -potenciálu. Množství ablatované vrstvy narůstá s dobou modifikace. Kontaktní úhel klesá s rostoucí dobou modifikace, naopak v průběhu stárnutí roste. Pomocí XPS spekter byla zjištěna oxidace degradovaného polymerního řetězce. Metodou AFM bylo zjištěno, že v průběhu modifikace se výrazně mění povrchová morfologie. Přítomnost kyslíku v povrchové vrstvě modifikovaných substrátů, do hloubky 60 nm, byla studována metodou RBS. Koncentrace kyslíku v povrchové vrstvě je klesající funkcí hloubky. Ke zjištění počtu radikálů v modifikovaná vrstvě a k vysvětlení vlivu plazmatu byla použita metoda EPR.

Tato práce vznikla za podpory grantů A2 FCHT 2010 062 a A1 FCHT 2010 001.

LITERATURA

1. Chan C. M., Ko T. M., Hiraoka H.: *Surf. Sci. Rep.* 24, 3 (1996).
2. Grace J. M., Grenser J. L.: *J. Dispers. Sci. Technol.* 24, 305 (2003).

5P-42

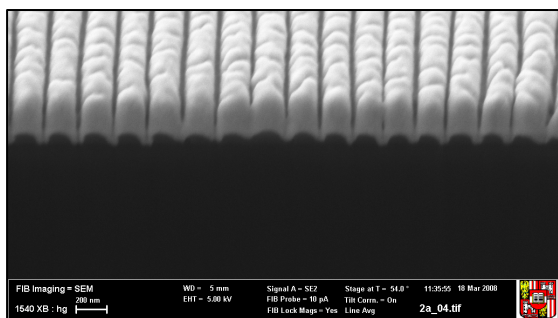
Au VRSTVY NA NANO-STRUKTUROVANÉM PET

JAKUB SIEGEL^{a,*}, PETR SLEPIČKA a VÁCLAV ŠVORČÍK

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

Nanostrukturované polymery mohou být využity k výrobě polovodičů a izolátorů na flexibilním polymerním nosiči, které se uplatňují při konstrukci polymerních polem řízených tranzistorů (PFETs)¹. Vymezením pravidelných nanostruktur na polymerním povrchu je možné zlepšit parametry elektronických polymerních pamětí². Tvarování povrchu využitím laserového záření se také uplatňuje při přípravě superhydrofóbních povrchů³. Nanostrukturovaný polymer může být prekurzorem pro přípravu kovových nanodrátů⁴.

V této práci jsme ozařovali povrch polyethylentereftalátu (PET) lineárně polarizovaným svazkem excimerového 248 nm KrF laseru. V intervalu laserových toků (4,2–18,2 mJ cm⁻²) docházelo k tvorbě koherentních lineárních struktur



Obr. 1. SEM snímek rozhraní kov-polymer s tloušťkou naprášené Au vrstvy 200 nm (PET modifikován KrF laserem při toku $6,6 \text{ mJ cm}^{-2}$ a úhlem dopadu laserového svazku 0°)

na povrchu modifikovaného polymeru. Na takto strukturovaný povrch jsme následně deponovali Au vrstvy metodami katodového naprašování a vakuového napařování. Ačkoli depozice 200 nm tlusté Au vrstvy způsobila pokles povrchové drsnosti vzorku, předdepoziční povrchová struktura polymeru zůstala zachována (obr. 1). Další studium morfologie Au vrstev navíc prokázalo tvorbu nanodrátků při přípravě Au vrstev metodou katodového naprašování.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT č. 21/2010.

LITERATURA

- Schrodner M., Stohn R. I., Schultheis K., Sensfuss S., Roth H. K.: *Org. Electron.* 161, 6 (2005).
- Ling Q. D., Liaw D. J., Zhu Ch., Chan D. S. H., Kang K. G., Neoh K. G.: *Proc. Polym. Sci.* 917, 33 (2003).
- Berendsen Ch. W. J., Škereň M., Najdek D., Černý F.: *Appl. Surf. Sci.* 9305, 255 (2009).
- Siegel J., Slepíčka P., Heitz J., Kolská Z., Sajdl P., Švorčík V.: *Appl. Surf. Sci.* 2205, 256 (2010).

5P-43

PERIODICKÉ STRUKTURY NA POVRCHU PET

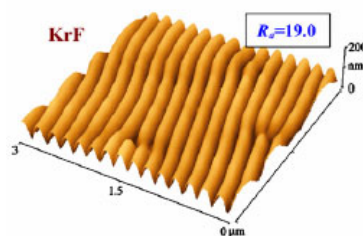
PETR SLEPIČKA*, JAKUB SIEGEL a VÁCLAV ŠVORČÍK

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

Povrchově modifikovaný PET excimerovým laserem nalézá uplatnění např. v medicíně¹. Nanostrukturované materiály mohou být použity při přípravě tzv. nanodrátků (nanowires)² a modifikovaných metalických vrstev³. V této práci byl povrch PET ozařován lineárně polarizovaným pulzním excimerovým KrF laserem. Povrch PET byl charakterizován mikroskopii atomárních sil, byla rovněž měřena drsnost povrchu (Ra).

Pro experiment byl použit biaxiálně orientovaný PET o tloušťce 50 mikronů ($T_m \sim 260^\circ\text{C}$, $T_g \sim 80^\circ\text{C}$, Goodfellow

Ltd.). Pro ozařování byl použit KrF laser (Lambda Physik Compex, 248 nm, délka pulzu 20–40 ns). Paprsek byl polarizován lineárně, křemenným polarizátorem. Vzorek byl ozařen 6000 pulzy (pro homogenní ozaření byla použita apertura $10 \times 5 \text{ mm}$). Povrchová morfologie PET byla studována mikroskopii atomárních sil Veeco CP II v módu tapping.



Obr. 1. Povrchová morfologie PET ozářeného kryptonfluorovým laserem o energii $6,60 \text{ mJ cm}^{-2}$ (drsnot Ra je v nm)

Interakce PET s KrF laserem má za následek vytvoření periodických struktur v intervalu energií 4,2 až $18,8 \text{ mJ cm}^{-2}$. Největší změna v povrchové morfologii byla pozorována pro energii $6,60 \text{ mJ cm}^{-2}$. Při této energii došlo k největší změně povrchové morfologie, vytvořily se periodické struktury se šířkou 208 nm a výškou ca 100 nm (kolmý dopad lineárně polarizovaného laserového svazku).

Tato práce vznikla za podpory grantů A1 FCHT 2010 001, A2 FCHT 2010 059 a GA ČR č. 106/09/P046.

LITERATURA

- Mayer G., Blanchemain N., Dupas-Bruzek C., Miri V., Traisnel M., Gengembre L., Derozier D., Hildebrand H. F.: *Biomaterials* 27, 553 (2006).
- Siegel J., Slepíčka P., Hertz J., Kolská Z., Zajel P., Švorčík V.: *Appl. Surf. Sci.* 256, 2205 (2010).
- Slepíčka P., Rebolgar E., Hertz J., Švorčík V.: *App. Surf. Sci.* 254, 3585 (2008).

5P-44

VLIV FYZIKÁLNÍCH PARAMETRŮ POJIVA NA ANTIKOROZNÍ VLASTNOSTI ORGANICKÉHO POVLAKU

PAVLÍNA SLIVKOVÁ, JAN HYRŠL, PETR KALENDA a ANDRÉA KALENOVÁ

Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
pavlina.slivkova@gmail.com

Tato práce se zabývá vlivem a vzájemnou souvislostí teploty skelného přechodu, hustoty sítě a difúzního koeficientu alkydových a epoxidových pojiv na jejich korozní odolnosti. Pro hodnocení byla vybrána tuzemská alkydová a epoxidová pojiva tak, aby pokrývala různé olejové délky a modifikace. U každého pojiva byly hodnoceny fyzikální a lakařské

vlastnosti. Byl stanoven difúzní koeficient, hustota sítě a teplota skelného přechodu. Dále byly naformulovány a vyhodnoceny modelové nátěrové hmoty o OKP = 20 obj.%, u kterých byly hodnoceny fyzikální a lakařské vlastnosti. Byl posouzen vliv difúzního koeficientu, teploty skelného přechodu a hustoty sítě pojiva na celkovou antikorozi účinnost v emailech a antikorozi nátěrových hmotách.

Propustnost vody nebo páry nátěrovým filmem, je dána rozpustností a difúzí. Difúzní koeficient (D) je definován I. Fickovým zákonem^{1,2}. Experimentálně stanovený koeficient propustnosti je v mnoha případech závislý na vlhkosti při experimentu. Teplota skelného přechodu je definována jako teplota, kdy dochází ke skokové změně termodynamických a viskoelastických vlastností^{3,4}.

Z experimentů plyne, že pokud budeme znát dva a více parametrů pojiva, můžeme usuzovat, jaké vlastnosti bude mít nátěrová hmota nebo antikorozi nátěrová hmota. Můžeme také doporučit typ vhodného pigmentu a plniva pro výrobu nátěrové hmoty a také jaké formulační parametry by měla nátěrová hmota dosahovat, aby obstála v požadované aplikaci. Tyto znalosti mají význam pro výrobce pojiv i pro výrobce nátěrových hmot. Výrobce pojiv může doporučit svým zákazníkům, výrobcům nátěrových hmot, nejvhodnější pojivo dle požadavků zákazníka. Současně tyto informace mohou významně ovlivňovat ekonomickou efektivnost výroby nátěrových hmot.

LITERATURA

1. Fox T. G., Flory P. J.: *J. Appl. Phys.* 21, 581 (1950).
2. Kalenda P.: *3. Appl. Pol. Sci.* 45, 2235 (1992).
3. Meissner B., Zilvar V.: *Fyzika polymerů*. SNTL, Praha 1987.
4. Simon F. E.: *Ergebn. Exact. Naturwiss.* 9, 244 (1930).

5P-45

SYNTEZA A STRUKTURA NOVÝCH ARYLFOSFONÁTŮ MĚDI S AUXILIÁRNÍMI LIGANDY

JAN SVOBODA^{a*}, VÍTĚZSLAV ZIMA^{a*}, KLÁRA MELÁNOVÁ^{a*}, LUDVÍK BENEŠ^{b*}, YA-CHING YANG^c a SUE-LEIN WANG^c

^a Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského náměstí 2, 162 06 Praha 6 – Břevnov, ^b Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 573, 532 10 Pardubice, ^c National Tsing Hua University, Department of Chemistry, 101 Kuang Fu Rd., Hsinchu, Taiwan
jan.svoboda@upce.cz

Hydrotermální syntézou byly připraveny nové hybridní anorganicko-organické látky o složení $\text{Cu}(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)(\text{O}_3\text{SC}_6\text{H}_4\text{PO}_3\text{H}) \cdot \text{H}_2\text{O}$ (**I**) a $\text{Cu}(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)(\text{O}_3\text{PC}_6\text{H}_4\text{COOH}) \cdot \text{H}_2\text{O}$ (**2**). Struktura těchto látek byla určena monokystalovou rentgenovou difrakcí.

V obou případech je měď koordinována do tvaru tetraedronu, a to třemi atomy kyslíku ze sulfonfylfosfonátových ligandů a v ekvatoriálních polohách dvěma atomy dusíku z fenantrolinu.

V případě látky **I** pocházejí oba atomy kyslíku koordinované v ekvatoriálních polohách z fosfonátových skupin dvou 4-sulfofenylfosfonátových ligandů, apikální poloha je obsazena atomem kyslíku sulfonátové skupiny. Každá fosfonátová skupina je takto vázána ke dvěma atomům mědi dvěma kyslíky skupiny PO_3H a působí tedy jako bidentátní můstkový ligand. Třetí kyslík fosfonátové skupiny je terminální a je na něj navázán vodík.

V případě látky **2** náleží jeden atom kyslíku v ekvatoriální poloze k fosfonátové skupině, druhý ekvatoriální atom kyslíku pochází z karboxylátové skupiny. V tomto případě je fosfonátová skupina vázána k mědi pouze jedním atomem kyslíku, zbylé dva atomy kyslíku jsou terminální. Atom vodíku není vázán ke kyslíku fosfonátové skupiny, ale skupiny karboxylátové. Poslední, apikální poloha je doplněna atomem kyslíku vody.

Rozdíly ve strukturách obou látek jsou způsobeny především rozdílnou aciditou skupin vázaných na benzenovém jádře v para poloze vůči fosfonátové skupině. Ve svém důsledku tento rozdíl způsobuje i rozdílnou dimenzionalitu takto vytvořených pevných látek. Struktura látky **I**, odvozená od 4-sulfofenylfosfonové kyseliny, je vrstevnatá, kdežto látka **2** tvoří jedno-dimenzionální strukturu se spirálovitým uspořádáním jednotlivých řetězců.

V současné době pokračuje příprava dalších funkcionalizovaných fosfonátů s auxiliárními ligandy 2,2'-bipyridinem a 1,10-fenanthrolinem.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 203/08/0208.

5P-46

NUKLEAČNÍ MODEL VZNIKU PORTLANDITU V RANÉM STÁDIU HYDRATACE PORTLANDSKÉHO CEMENTU

PETRA TICHÁ^{*}, ALEXEJ SVESHNIKOV, PAVEL DEMO, ŠÁRKA HOŠKOVÁ a DAVID LADMAN

Katedra fyziky, Fakulta stavební, České vysoké učení technické v Praze, Tháškova 7, 166 29 Praha 6
petra.ticha@fsv.cvut.cz

Cementové materiály se hojně využívají nejen ve stavebnictví, přesto nebyly dosud pomocí fyzikálních i chemických přístupů objasněny některé zásadní otázky kolem hydratace cementových materiálů. Mezi takové problematiky patří také vznik portlanditu v raných stádiích hydratace portlandského cementu.

Námi aplikovaný nukleační model vychází z optického pozorování cementové pasty v raném stádiu hydratace, kdy úvodní chemické reakce způsobí vznik krystalické fáze hydroxidu vápenatého, tzv. portlanditu, náležejícího svou strukturou do hexagonální soustavy. Zároveň se s pokračující hydratací vytváří CSH gel a to jak v amorfni, tak také v polykrystalické fázi a také roste koncentrace portlanditu až k hodnotám přesycení roztoku. Parametr přesycení lze považovat za hybnou sílu fázového přechodu prvního druhu v přesyceném roztoku. V prvních okamžicích fázového přechodu vznikají mikroskopické domény nové fáze procesem nukleace.

Krystaly portlanditu mají nejčastěji podobu hexagonálních destiček, které jsou v modelu charakterizovány dvěma

rozměry: longitudiálním rádiusem r a transversálním parametrem h . Tvorba takového klastru z molekul $\text{Ca}(\text{OH})_2$ je energeticky náročná a dochází ke spotřebování jistého množství Gibbsovy energie ΔG , která se obecně skládá ze dvou částí. První, objemová ΔG_V , je spojena se strukturálním přetvořením molekul $\text{Ca}(\text{OH})_2$ tak, aby vznikly hexagonální krystaly portlanditu; další část tvoří povrchová Gibbsova energie ΔG_S , která je nezbytná ke stabilizaci nově vytvořeného klastru portlanditu v metastabilním prostředí.

Na základě analýzy termodynamiky i kinetiky zvoleného nukleačního modelu lze určit kritické rozměry růstu schopného klastru portlanditu, která dosahuje několika nanometrů. Hodnota nukleační bariéry je podle aktuální hodnoty poměru w/c několik elektronvoltů. Nukleační rychlost je silně závislá na aktuální hodnotě w/c poměru, dramaticky se zvyšuje s klesající hodnotou w/c .

Tato práce vznikla za podpory grantu Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR číslo CEZ MSM 6840770003.

LITERATURA

1. Demo P., Kožíšek Z.: *Thermochim. Acta* 280-281, 101 (1996).
2. Taylor H. F. W.: *Cement Chemistry*, 2. vyd. Thomas Telford, 2004.
3. Gartner E. M., Young J. F., Damidot D. A., Jawed I., v knize: *Structure and Performance of Cements* (Bensted J., Barnes P., ed.), chap. 3. Spon Press, 2001.

5P-47

MĚŘENÍ ELEKTRICKÉ VODIVOSTI CEMENTOVÝCH MALT V POČÁTCÍCH TUHNUTÍ

DAVID LADMAN*, PETRA TICHÁ, PAVEL DEMO a PETR SEMERÁK

*Katedra fyziky, Fakulta stavební, České vysoké učení technické v Praze, Tháškova 7, 166 29 Praha 6
david.ladman@fsv.cvut.cz*

Elektrická vodivost cementových malt je úzce spjata se stupněm hydratace cementu. Vyvinutí vhodné metody měření a vyhodnocení naměřených dat umožňuje přesné popsání průběhu hydratace a to jak z mezoskopického, tak makroskopického hlediska. V důsledku exotermních chemických reakcí se systém postupně nasycuje zejména vápenatými ionty Ca^{2+} a ionty hydroxylové skupiny OH- tyto částice pak tvoří základní stavební kameny pro vytváření oblastí nové, pevné fáze na subnanoskopické úrovni (na počátku se jedná především o nukleaci zárodků portlanditu, hydroxidu vápenatého). Z makroskopického hlediska se tyto procesy projeví i netriviální časovou závislostí elektrické vodivosti systému a konzistence malty.

Z chemického hlediska dochází přidáním záměsové vody k cementu k disociaci alkalických solí a hydroxidu vápenatého obsaženého v cementu a tím ke vzniku elektrolytu. Přenos elektrického náboje je tedy zprostředkován disociovanými ionty (především vápenatými ionty Ca^{2+} a ionty hydroxylové skupiny OH-) a elektrická vodivost daného prostředí je tak v raném stádiu hydratace závislá na stupni disociace.

V důsledku vzniku zárodků nové fáze nukleací pak začne docházet k poklesu koncentrace nabitých částic. Vznik klastrů ovlivňuje také viskozitu systému a tedy i pohyblivost zbylých iontů. Celý tento komplexní proces je navíc silně ovlivněn změnou teploty (jako důsledek uvolňovaného hydratačního tepla).

Pro měření elektrické vodivosti používáme střídavého proudu, aby se zabránilo polarizaci elektrod. Na druhé straně, aplikovaná frekvence nesmí překročit jistou kritickou hodnotu, aby nedošlo k rozkladu roztoku. Polarizace elektrod stoupá s rostoucí elektrickou vodivostí, proto je vhodné během měření snižovat frekvenci měřicího proudu. Během procesu hydratace dochází k vývinu hydratačního tepla a tím i k zahřívání měřeného vzorku. Je tedy nezbytné, aby spolu s vodivostí byla měřena i teplota vzorku.

Předmětem další práce bude porovnání výsledků měření elektrické vodivosti cementových malt při užití různých druhů cementů a při použití zpomalovacích přísad při různých teplotách.

LITERATURA

1. Henning O., Lach V.: *Chemie ve stavebnictví*, 1983.
2. Brameshuber W., Brockmann T.: Electrical conductivity measurements to characterize the setting and hardening of mortars, *Proceedings of International Symposium-Non-Destructive Testing in Civil Engineering, Berlin 2003*.

5P-48

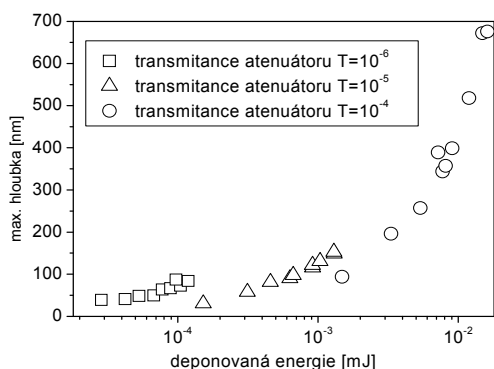
ROZKLAD A SÍTOVÁNÍ PMMA – POLY(METHYL METHAKRYLÁTU) VÍCE PULZY RENTGENOVÉHO LASEROVÉHO ZÁŘENÍ POD ABLAČNÍM PRAHEM

MARTINA TOUFAROVÁ^{a,b,*}, VĚRA HÁJKOVÁ^a, TOMÁŠ BURIAN^a, JAROMÍR CHALUPSKÝ^{a,b}, VLADIMÍR VORLÍČEK^a a LIBOR JUHA^a

^a FZÚ AV ČR, v.v.i., Na Slovance 2, 182 21 Praha 8, ^b FJFI ČVUT, Břehová 7, 115 17 Praha 1 - Staré Město
touf@fzu.cz

V březnu minulého roku byl ve Stanfordu uveden do provozu první rentgenový laser s volnými elektrony LCLS (Linac Coherent Light Source) proladitelný od 1,5 nm (energie fotonů 0,8 keV) do 0,15 nm (8 keV)¹. Výjimečná stabilita výstupních parametrů laseru nám umožnila pomocí jeho svazku prokázat a prostudovat jev foto-indukované desorpce materiálů ozářeného více pulzy na fluenci pod ablačním prahem daného materiálu pro každý jeden laserový impulz.

Pro ozáření na LCLS byl zvolen poly(methyl methakrylát), neboť jeho rentgenově optické a radiačně chemické vlastnosti jsou poměrně dobře známy. Práh ablace PMMA jedním impulzem LCLS naladěného na vlnovou délku 1,5 nm (energie fotonů 825 eV) byl nalezen na 100 mJ cm⁻². Desorpční účinky mnoha akumulovaných pulzů^{2,3} jsme proto studovali na fluencích 40 mJ cm⁻², 4 mJ cm⁻² a 0,4 mJ cm⁻². Maximální hloubky kráteru vytvořeného desorpční materiálu jako funkce energie akumulované ve vzorku jsou vyneseny na obr. 1.



Ramanova spektroskopie s prostorovým rozlišením potvrdila štěpení řetězce; prokázala ovšem i tvorbu dvojných vazeb⁴, jimiž probíhá radiační zesílení. Korelace účinku jednotlivých fotonů a kompetice štěpení a zesílení vysvětluje závislost účinnosti desorpce na dávkovém příkonu.

Práce byla finančně podpořena granty MŠMT ČR (ME10046, LC510, LC528 a LA08024) a AV ČR (Z10100523, IAA-400100701 a KAN300100702).

LITERATURA

- Burian T., Chalupský J., Hájková V., Boháček P., Juha L.: Čs. Čas. Fyz. 59, 357 (2009).
- Juha L. a kol.: J. Appl. Phys. 105, 093117 (2009).
- Chalupský J. a kol.: Opt. Express 17, 208 (2009).
- Mocek T. a kol.: Appl. Phys. Lett. 89, 051501 (2006) a citace tam uvedené.

5P-49

VYUŽITÍ SÍTOTISKU V TIŠTĚNÉ ELEKTRONICE

LUCIE TYLŠOVÁ, TOMÁŠ SYROVÝ a MARIE KAPLANOVÁ

Katedra polygrafie a fotofyziky, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice lucie.tylsova@centrum.cz

V posledních letech je stále více elektronických součástek vyráběno pomocí různých tiskových technik. Tyto elektronické prvky se často nazývají „tištěná elektronika“ a lze si pod daným pojmem představit výrobky jako jsou flexibilní elektronické obvody, miniaturní baterie, RFID štítky, tenkovrstvé tranzistory, aj. Mezi nejčastěji užívané tiskové techniky patří sítotisk. Hlavní výhodou sítotisku je možnost nanášení vodivých vrstev různé tloušťky (v závislosti na tiskových podmínkách 200 nm – 100 μm). V současnosti se pro tištěnou elektroniku nejčastěji využívá jeho rotační varianta. K simulaci produkčního tisku se v laboratorních podmínkách využívají poloautomatické sítotiskové stroje opatřené vakuovým stolem.

Pro sítotisk jsou dodávány speciální vodivé sítotiskové barvy, jedná se především o vodivé kompozitní materiály

a polovodivé polymery. Mezi vodivé kompozitní materiály se řadí termálně tvrditelné systémy na bázi epoxidových pryskyřic, obsahující vysokou koncentraci vodivých částic Ag, Cu nebo C (cca 50–90 hm.%). V případě polovodivých polymerů jsou využívány systémy polymerů obsahující aromatické řetězce, tj. obecně molekuly s konjugovanými dvojnými vazbami. Nejznámějšími polovodivými polymery jsou oligomerní disperze PEDOT.

Kvalita elektrických, příp. mechanických vlastností přímo souvisí i s kvalitou tisku, a proto má ni vliv mnoho parametrů: reologické vlastnosti barvy, povrchové napětí barvy a substrátu, použitý druh síťoviny, vypnutí síťoviny, přítlak těrky při tisku, úhel sklonu těrky, ostrost hrany těrky, tvrdost těrky, odtrh, aj. Pro sledování vlivu podmínek tisku a vlivu nastavení různých parametrů tisku se využívají speciální testovací obrazce. Ty často obsahují prvky z reálných aplikací, jako jsou anténní systémy, elektrodové systémy, vodivé cesty, ale také prvky pro sledování běžných ukazatelů kvality tisku, mezi které patří linky různých frekvencí, plně plochy, objekty umístěné ve směru tisku či kolmo na něj. Tisky jsou charakterizovány na základě mnoha parametrů, elektrických, geometrických, či mechanických.

Pro měření elektrických vlastností může být použit RLC můstek, pro sledování geometrických parametrů tisku lze využít analýzy obrazu, pro zjištění tloušťky nanášených vrstev profilometru, vrstvy mohou být dále podrobovány mechanickým zkouškám – oděr, ohyb, aj. Rozborem jednotlivých ukazatelů získaných z analýzy natištěných testovacích obrazců lze prokázat, jaký vliv má na elektrické, geometrické či mechanické charakteristiky natištěných vrstev hustota síťoviny, přítlak těrky, sklon těrky, reologické vlastnosti síťotiskových barev nebo tloušťka vrstvy.

Tato práce vznikla za podpory MSM0021627501.

5P-50

VLIV VÝKONU Ar NA POVRCHOVÉ VLASTNOSTI MODIFIKOVANÉHO POLYPROPYLENU

ANNA VASINA^{*a}, PETR SLEPIČKA^b, VÁCLAV ŠVORČÍK^a, PETR SAJDL^b a ZDEŇKA KOLSKÁ^c

^a Ústav inženýrství pevných látek, ^b Ústav energetiky, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, ^c Katedra chemie, Univerzita J. E. Purkyně, České mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem vasina_anna@yahoo.com

Jednou z nejefektivnějších metod povrchové úpravy polymerů je plazmatická expozice, která může měnit vlastnosti povrchů materiálů a velmi výrazně rozšířit jejich použití. U plazmatické expozice se projevuje změna vlastností na povrchu modifikovaného materiálu, zatímco bulkový materiál není ovlivněn. Tloušťka modifikované vrstvy se pohybuje od nanometrů až po několik mikrometrů^{1–3}. Bulková hmotnost polymeru se nemění a to při zachování mechanických, fyzikálních a chemických vlastností modifikovaného materiálu v objemu. Působením plazmy na povrchu polymeru měníme povrchovou morfologii materiálu a jeho smáčivost a tím i adhezi tenkých nanovrstev kovu následně deponovaných

naprašování či jinými metodami⁴.

Povrch polypropylenových folií byl modifikován plazmatickým Ar výbojem o různém výkonu. V závislosti na době modifikace a výkonu plazmy byl charakterizován goniometrickými metodami. Chemická struktura plazmaticky modifikovaných PP byla studována s pomocí X-ray fotoelektronové spektroskopie (XPS). Povrchová morfologie modifikované a původní vrstvy PS byla studována s pomocí mikroskopu atomárních sil (AFM, tapping mode). Zeta potenciál původního a modifikovaného substrátu a PP byl stanoven s pomocí SurPASS Instrument. Byl změřen kontaktní úhel, povrchová energie a stárnutí s pomocí Surface Energe Evaluation System (SEE System).

Koncentrace kyslíku na povrchu PP se snižuje s dobou stárnutí. S rostoucí dobou stárnutí se rovněž zvyšuje kontaktní úhel (polarita povrchu se snižuje). Po plazmatické modifikaci se významně mění povrchová morfologie PP. Na povrchu polymeru se projeví zrnitá struktura, je výraznější na PP modifikovaném při vyšším výkonu plazmy. Rozdíl v hodnotě zeta potenciálu mezi původním a modifikovaným PP ukazuje, že plazmatická modifikace vede k zvětšení hydrofilnosti povrchu PP.

Tato práce vznikla za podpory grantu A1 FCHT 2010 001, A2 FCHT 2010 059 a GA ČR č. 106/09/P046.

LITERATURA

1. Švorčík V., Kotál V., Slepíčka P.: Nucl. Instrum. Meth., B 244, 365 (2006).
2. Carnino L., Polini W., Sorrentino L.: J. Mat. Proc. Tech. 153–154, 519 (2004).
3. Arefi-Khonsaria F., Tatouliana M., Bretagnola F., Bouloussab O., Rondelez F.: Surf. Coat. Tech. 200, 14 (2005).
4. Tjong S. C.: Mat. Sci. Eng. R 53, 73 (2006).

5P-51

VLIV MODIFIKACE EPOXIDOVÝCH PRYSKYŘIC POMOCÍ AKRYLÁTOVÝCH CORE-SHELL KOPOLYMERŮ NA VLASTNOSTI A JEJICH STRUKTURU

LUBOŠ PROKŮPEK*, MIROSLAV VEČEŘA,
LADISLAV SVOBODA a ROMAN CHUDOMSKÝ

*Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Oddělení syntetických polymerů, vláken a textilní chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
lubos.prokucek@upce.cz*

V posledních letech narůstají nároky na kvalitu a vlastnosti polymerních materiálů. Jednou z cest jak docílit zlepšení vlastností polymerních systémů je jejich modifikace pomocí různých aditiv a tvorbou kompozitních materiálů.

U epoxidových pryskyřic se pomocí polymerních aditiv eliminuje nedostatečná rázová houževnatost. Toho lze docílit zakomponováním houževnatých polymerních nanočástic na bázi esterů kyseliny methakrylové se zabudovanými funkčními skupinami pro tvorbu prostorové sítě.

Tabulka I

Hmotnostní zastoupení monomerů pro přípravu core-shell částic

Monomer	Core [g]	Sh 1 [g]	Sh 2 [g]	Sh 3 [g]	Sh 4 [g]	Sh 5 [g]	Sh 6 [g]
BA	57,5	90	67,5	45	22,5	0	50
MMA	40	0	22,5	45	67,5	90	50
KA	1,5	–	–	–	–	–	–
AMA	1	–	–	–	–	–	–
GMA	–	10	10	10	10	10	–

Tato práce byla zaměřena na přípravu jednoduchých modelových core – shell částic esterů kyseliny methakrylové pomocí emulzní polymerace a studium jejich vlastností a struktury v závislosti na různém zastoupení jednotlivých akrylátových monomerů v jádru (core) a obalu (shell). Bylo celkem připraveno šest akrylátových disperzí (tab. I.) s funkčními skupinami, kdy se v shellu (Sh) měnilo složení a poměr použitých monomerů (butylakrylát – BA, methylmethakrylát – MMA, kyselina akrylová – KA, allylmethakrylát – AMA a glycidylmethakrylát – GMA).

Všechny připravené disperze byly charakterizovány a poté kombinovány, v první fázi, v různých koncentracích (0, 5, 10, 15 a 20 %) s epoxidovým lakem na vodní bázi CHS EPOXY 200 V55 a tvrdidlem Telalit 180. Byly připraveny filmy a na nich sledovány pevnostní charakteristiky v tahu, dynamická termomechanická analýza (DMA) a sledována jejich mikroskopická struktura.

V druhé části byly připraveny systémy s epoxidovou pryskyřicí CHS EPOXY 520 ve stejné koncentrační řadě a byly připraveny tělíška, u kterých byla opět sledována pevnost v tahu, mikroskopická struktura vzorku a charakteristika lomu v závislosti na typu a koncentraci přidaných akrylátových disperzí.

Tato práce vznikla za podpory grantu MSM 0021627501.

5P-52

VLIV PŘÍDAVKU GeO₂ NA STRUKTURU A VLASTNOSTI ZINEČNATÝCH FOSFÁTOVÝCH SKEL

KATEŘINA VOSEJKOVÁ, PETR MOŠNER
a LADISLAV KOUDELKA

*Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
katerina.vosejkova@seznam.cz*

Oxid fosforečný patří mezi neznámější sklotvorné oxidy a fosforečnanová skla jsou studována s ohledem na široké spektrum jejich technologických aplikací. Díky jejich nízkým teplotám tání a nízké viskozitě se využívají např. jako pájky a zátavové materiály. Vyznačují se také velkou šířkou zakázaného pásu, vysokou propustností v infračervené oblasti a nízkou hodnotou indexu lomu, což je předurčuje pro různé optické

ké aplikace. Nevýhodou fosforečnanových skel je jejich nízká stabilita na vlhkém vzduchu. Přídavek většiny kovových oxidů však jejich chemickou stabilitu zpravidla zlepšuje.

Tato práce je věnována studiu vlivu GeO_2 na strukturu a vlastnosti zinečnatých fosfátových skel připravených v kompoziční řadě $50\text{ZnO}-(50-x)\text{P}_2\text{O}_5-x\text{GeO}_2$.

Bylo připraveno a studováno 6 vzorků skel s obsahem 0–25 mol.% GeO_2 . Skla byla připravena vylitím taveniny (1250–1290 °C) směsi výchozích surovin (ZnO , H_3PO_4 , GeO_2) do grafitové formy temperované na teplotu blízkou teplotě skelné transformace, T_g . Připravená skla byla čirá a bezbarvá.

Ze studia fyzikálně-chemických vlastností vyplynulo, že s rostoucím obsahem GeO_2 ve sklech vzrůstá jejich měrná hmotnost, zatímco molární objem klesá. Nejnížší chemická odolnost byla zjištěna u výchozího metafosforečnanového skla zinečnatého. Při záměně 5 mol.% P_2O_5 za GeO_2 došlo k výraznému zvýšení chemické odolnosti skel, avšak s dalším nárůstem obsahu oxidu germaničitého se chemická odolnost skel téměř neměnila. Z termoanalytických křivek (DSC, TD) vyplynulo, že s rostoucím obsahem GeO_2 vzrůstá teplota skelné transformace v rozmezí 421–476 °C, teplotní roztažnost skel se však s přísadkou téměř nemění. Všechna skla resp. jejich podchlazené taveniny při zahřívání krystalizují v oblasti teplot 500–800 °C. Nejvyšší termická stabilita byla zjištěna u skla s obsahem 5 mol.% GeO_2 . Produktem krystalizace výchozího skla o složení $50\text{ZnO}-50\text{P}_2\text{O}_5$ je metafosforečnanová fáze $\text{Zn}(\text{PO}_3)_2$, která je s rostoucím obsahem GeO_2 postupně nahrazována difosforečnanovými fázemi $\text{Zn}_2\text{P}_2\text{O}_7$ a GeP_2O_7 , resp. krystalickým GeO_2 ($x \geq 20$).

Struktura skel byla studována pomocí Ramanovy a IČ spektroskopie. Ze získaných spekter vyplynulo, že struktura výchozího fosforečnanového skla zinečnatého je tvořena tetraedrickými jednotkami typu Q^2 se dvěma můstkovými kyslíky. S rostoucím obsahem GeO_2 dochází k postupné depolymerizaci metafosfátové strukturní sítě, což je spojeno s transformací jednotek Q^2 na jednotky Q^1 s jedním můstkovým kyslíkem. Oxid germaničitý se do struktury skel zabudovává ve formě tetraedrů GeO_4 .

Autoři práce děkují za finanční podporu MŠMT ČR (projekt č. 0021627501 a SG 300001).

6IL-01

HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE A VYBRANÉ FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÉ METODY VE VÝZKUMU ISOCHINOLINOVÝCH ALKALOIDŮ A JEJICH INTERAKCÍ S DNA

JAN VACEK^{a*}, PAVEL KOSINA^a, EVA VRUBLOVÁ^a, MARTIN KUBALA^b, JITKA ULRICHOVÁ^a a VILÍM ŠIMÁNEK^a

^a Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc, ^bKatedra experimentální fyziky, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc
jan.vacek@upol.cz

Isochinolinové alkaloidy (IA) představují rozsáhlou skupinu rostlinných sekundárních metabolitů, mnohé z nich našly uplatnění v humánní a veterinární medicíně. V přednášce jsou popsány dvě podskupiny IA, kvartérní benzo[*c*]fenanthridinové alkaloidy (KBA, sanguinarin a chelerythrin, Schéma 1) a protopinové alkaloidy (PA, protopin a allokryptopin, Schéma 2)^{1,2}. KBA se vyskytují v závislosti na pH prostředí ve formě pseudobáze **1** a kvartérního kationtu **2**. Podobně je tomu i u PA, u kterých rozlišujeme formu tricyklické báze **3** a tetracyklického kationtu **4**. Rovnováha obou forem úzce souvisí s biologickou aktivitou studovaných alkaloidů³.

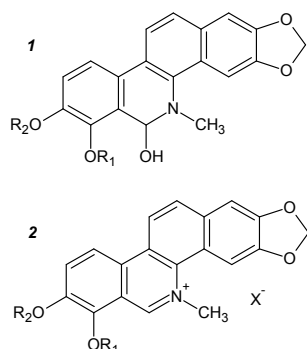


Schéma 1. Chemické struktury benzo[*c*]fenanthridinových alkaloidů, sanguinarinu ($R_1+R_2=CH_2$) a chelerythrinu ($R_1=R_2=CH_3$), ve formě pseudobáze (**1**) a kvartérního kationtu (**2**)

Výše uvedené alkaloidy podléhají v organismu savců metabolickým přeměnám, které vedou ke snížení jejich toxicity a usnadněnému vyloučení z organismu. Ke studiu metabolizace KBA a PA byly navrženy postupy založené na kombinaci vysokoučinné kapalinové chromatografie (HPLC) s UV-Vis spektrofotometrií a hmotnostní spektrometrií (MS). V případě KBA byly pomocí HPLC/MS identifikovány jejich dihydroderiváty jako jedny z primárních produktů metabolizace⁴. V případě metabolitů PA jsou známy hydroxy a methoxyderiváty⁵. V přednášce jsou zmíněny postupy vedoucí k identifikaci alkaloidů a jejich metabolitů v buněčných systémech. Výklad je zaměřen na analýzu IA po jejich biotransformaci v suspenzích a primárních kulturách potkaních a lidských hepatocytů pomocí elektrospřej MS s iontovou pastí.

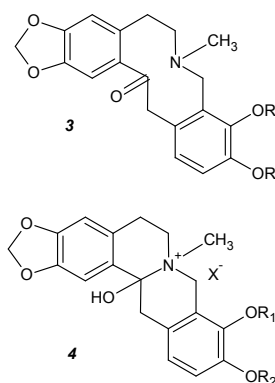


Schéma 2. Chemické struktury protopinových alkaloidů, protopinu ($R_1+R_2=CH_2$) a allokryptopinu ($R_1=R_2=CH_3$), ve formě tricyklické báze (**3**) a tetracyklického kationtu (**4**)

V další části přednášky je věnována pozornost studiu interakcí IA a jejich metabolitů s biomakromolekulami. Diskutovány budou především mechanismy jejich interakce s DNA. K řešení této problematiky jsou vhodné nedestruktivní analytické nástroje (elektroforetické techniky, spektrofotometrie a elektrochemické metody, jako je voltmetrie a potenciometrie), pomocí kterých byla např. prokázána interkalace sanguinarinu do struktury DNA v podmínkách *in vitro*.

Současné výsledky nasvědčují tomu, že IA interagují s nukleovými kyselinami či bílkoviny a zasahují do buněčných procesů⁶. Předpokládáme, že za biologické účinky a toxicitu popisovaných IA odpovídají jejich kvartérní kationty. Alkaloidy ve formě volné báze a metabolity alkaloidů vykazují omezenou schopnost interagovat s DNA a enzymy.

Tato práce vznikla za podpory grantů MŠMT ČR (MSM 6198959216) a GA ČR (525/07/0871).

LITERATURA

- Dvořák Z., Kubáň V., Klejduš B., Hlaváč J., Vičar J., Ulrichová J., Šimánek V.: *Heterocycles* 68, 2403 (2006).
- Guinaudeau H., Shamma M.: *J. Nat. Prod.* 45, 237 (1982).
- Dostál J.: *J. Chem. Educ.* 77, 993 (2000).
- Pšotová J., Klejduš B., Večera R., Kosina P., Kubáň V., Vičar J., Šimánek V., Ulrichová J.: *J. Chromatogr., B* 830, 165 (2006).
- Wynne P. M., Vine J. H., Amiet R. G.: *J. Chromatogr., B* 811, 85 (2004).
- Zdařilová A., Malíková J., Dvořák Z., Ulrichová J., Šimánek V.: *Chem. Listy* 100, 30 (2006).

6IL-02 FROM STEROIDS TO FUNCTIONAL MOLECULES

ZDENĚK WIMMER

*Institute of Experimental Botany AS CR, v.v.i., Isotope Laboratory, Videňská 1083, 142 20 Prague 4
wimmer@biomed.cas.cz*

Phytosterols are important plant products, which are biogenetic precursors of phytoecdysteroids, often produced by plants as defence natural products against insect pests¹. Numbers of them are known to display pharmacological activity against serious diseases². Despite of this importance, practical applications of phytosterols have not received adequate attention yet. Steroids of animal origin have been studied with higher intensity. If plants are treated with cholic acid, a primary bile acid in animals, their effect resulted in induction and accumulation of antimicrobial compounds (phytoalexins), hypersensitive cell death, pathogenesis related protein synthesis and increased resistance to subsequent infection by virulent pathogens. All these mechanisms result in suppression of plant diseases, and the compounds responsible for this effect are generally named elicitors³.

In our research, steroids of plant and animal origin have been used in construction of synthons convenient for designing functional molecules, which may be applied in different areas, from plant protection against insect pests till designing compounds enabling targeted transport of medicaments to the active sites or designing solvent-assisted self-assembly supramolecular systems with potentially broad spectrum of their application.

Insect pest control agents: In the past years of investigation, we have developed the idea of juvenogens, insect homonogenic compounds. The complex conjugate consists of a biologically active molecule, i.e. an insect juvenile hormone bioanalogue (a juvenoid), conjugated to an auxiliary molecule able to modify physico-chemical properties of the target juvenogen. Based on the insect species to be treated, the auxiliary molecules were either low polar molecules (fatty acids) or highly polar ones (saccharide molecules). Recently, we have selected phytosterols and bile acids as conjugating modifiers of physico-chemical properties of juvenogens. These compounds have been tested on several non-related insect species⁴, but the most promising results have been recently achieved in topical and drinking assays on the red firebug (*Pyrrhocoris apterus*)⁵. The effects of these compounds on plants and on microorganisms living in symbiosis with the insects have currently been under investigation.

Conjugates of phytosterols with aromatic compounds bearing nitrogen containing functionality in their molecules: One of the phytosterols, stigmasterol [(3 β ,22 E)-stigmasta-5,22-dien-3-ol] has been used during this investigation to design its amide conjugates with aromatic amino acids. Several 1, ω -dicarboxylic acids, ω -halocarboxylic acids and related organic molecules bearing different functionalities at the positions C(1) and C(ω) have been used as convenient linkers between stigmasterol and the molecule bearing nitrogen functionality. For example, with an amino acid derivative employed in designing such a conjugate, an amide bond was formed. Ester functionality was formed in other types of con-

jugates designed, which were based on using *N*-acyl derived amino acids for the synthesis. Physico-chemical properties of the prepared amide and ester conjugates were studied. UV spectra of the conjugates were recorded in solutions made from mixtures of acetonitrile / water, in which the ratio of both solvents was changed stepwise from 100 % of acetonitrile to 100 % of water. Changes in the intensity of absorbance maxima of numbers of the prepared conjugates were recorded, which indicate the ability of the compounds to form supramolecular systems through solvent-assisted assembly (Figure 1). Formation of gels or partial gels (less stable supramolecular systems) was observed with several structures prepared. The results of this partial investigation will be presented with several examples shown in details.

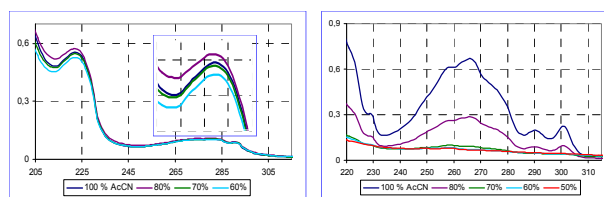


Fig. 1. Examples of the recorded UV spectra

Conjugates of phytosterols with amino acids and other biologically active compounds have also been subjected to the toxicity screening using cell fibroblasts of mouse. Several of these compounds proved their potential to be studied in more details. The toxicity of the tested conjugates towards the cells employed was dependent on the solubility of the tested conjugates in aqueous media.

In summary, it can be stated that conjugates of phytosterols with different molecules display potential to be more intensively studied to get synthons of novel chiral and solvent-assisted supramolecular systems, as well as conjugates with potential pharmacological importance.

This research has been funded by the grants 2B06024, OC09039 and OC10001 (the Ministry of Education, Youth and Sports) and by the Czech-Finnish project M20038090 (Academy of Sciences of the CR).

REFERENCES

1. Dinan L.: *Phytochem.* 57, 325 (2001).
2. Bradford P. G., Awad A. B.: *Mol. Nutr. Food Res.* 51, 161 (2007).
3. Koga J., Kubota H., Gomi S., Umemura K., Ohnishi M., Kono T.: *Plant Physiol.* 140, 1475 (2006).
4. Jurček O., Wimmer Z., Svobodová H., Bennettová B., Kolehmainen E., Drašar P.: *Steroids* 74, 779 (2009).
5. Svobodová H., Ryšavá H., Pavlík M., Šaman D., Drašar P., Wimmer Z.: *J. Agric. Food Chem.*, in press.

6L-01

**NOVÉ PŘÍSTUPY K ZÍSKÁNÍ OPTICKY
ČISTÝCH STEREOISOMERŮ SILYBINU
A 2,3-DEHYDROSILYBINU****RADEK GAŽÁK, KATEŘINA PURCHARTOVÁ,
DAVID BIEDERMANN, PETR MARHOL a VLADIMÍR
KŘEN***Mikrobiologický ústav AV ČR, Videňská 1083, 142 20 Praha 4
gazak@biomed.cas.cz*

Flavonolignany silybin a 2,3-dehydrosilybin, izolované z ostropestřce mariánského (*Silybum marianum*), představují biologicky aktivní přírodní látky působící na mnoha buněčných úrovních¹ a jsou aktivní složkou řady hepatoprotektivních a cytoprotektivních přípravků. Přírodní silybin je ekvimolární směsí dvou velmi obtížně separovatelných diastereoiso-
somerů (2*R*, 3*R*, 10*S*, 11*S* a 2*R*, 3*R*, 10*R*, 11*R*). 2,3-Dehydrosilybin je směsí dvou enantiomerů, vzniklých oxidací směsi obou isomerů silybinu.

Přestože v současnosti neustále narůstá počet publikací věnovaných hlavně silybinu případně celkovému extraktu ze semen *S. marianum*, tzv. silymarinu (asi 100 publikací ročně), pouze zlomek z nich je věnován studiu biologických vlastností čistých stereoiso-
somerů silybinu. Tento nepoměr je dán hlavně dosavadní technikou separace obou diastereoiso-
somerů silybinu, která je realizována téměř výlučně pomocí preparativní HPLC. 2,3-Dehydrosilybin je minoritní složkou obsaženou v silymarinu s významně vyšší antioxidační, ale také protinádorovou aktivitou než silybin. Kromě toho, některé *C*-prenylované a také *O*-alkylované deriváty 2,3-dehydrosilybinu představují účinné modulátory P-glykoproteinu (Pgp). Nicméně, veškeré tyto studie byly realizovány s racemickým 2,3-dehydrosilybinem, doposud žádná práce nestudovala vlastnosti opticky čistých isomerů této látky.

V rámci této práce budou uvedeny přístupy vedoucí k preparativní separaci diastereoiso-
somerů silybinu, syntéza opticky čistých isomerů 2,3-dehydrosilybinu a výsledky biologických studií těchto opticky čistých flavonoidů.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR (P207/10/0288) a výzkumného záměru MBÚ AV ČR AV0Z50200510.

LITERATURA

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

6P-01**SYNTHESIS OF SILYBIN SULFATES****DAVID BIEDERMANN^a, RADEK GAŽÁK^a, CHARLES LAMBERT^b, and VLADIMÍR KŘEN^a**

^a Center for Biocatalysis and Biotransformation, Institute of Microbiology AS CR, Videňská 1083, Praha 4, ^b Laboratory of Connective Tissues Biology, University of Liege, Tour de Pathologie B23/3, CHU Sart Tilman, 4000 Sart Tilman biedermann@biomed.cas.cz

Silymarin is a standardized extract of the seeds of milk thistle (*Silybum marianum*). Major compound of this complex mixture of flavonolignans and flavonoids is silybin, which is valued for its hepatoprotective and antioxidative activity and virtually no toxicity¹. Recently, new applications of silybin in prostate cancer treatment (II stage clin. trials), skin tumor treatment and skin protection were described². Orally administered silybin is partly excreted by the urine, but majority is transformed in the liver to the corresponding glucuronide and sulfate conjugates³. Different diastereoisomerically pure glucuronides of silybin were prepared using chemoenzymatic glucuronization with nucleoside in situ regeneration⁴.

The aim of this work is to prepare other major metabolites, e.g. silybin sulfates. Silybin sulfatation has been accomplished with amine – sulfuric oxide complex. Several silybin sulfates have been prepared. Diastereomerically pure silybin disulfates were obtained using preparative HPLC. It was shown, that some of prepared derivatives inhibit expression of VEGF 111.

This work was supported by the grants LC06010, P207/10/0288 and ME10027.

REFERENCES

1. Saller R., Meier R., Brignoli R.: *Drugs* 61, 2035 (2001).
2. Gažák R., Walterová D., Křen V.: *Curr. Med. Chem.* 14, 315 (2007).
3. Hoh C., Boocock D., Marczylo T., Singh R., Berry D. P., Dennison A., R., Hemingway D., Miller A., West K., Euden S., Garcea G., Farmer P. B., Steward W. P., Gescher A. J.: *Clin. Cancer. Res.* 12, 2944 (2006).
4. Křen V., Ulrichová J., Kosina P., Stevenson D., Sedmera P., Přikrylová V., Halada P., Šimánek V.: *Drug Met. Disp.* 28, 1513 (2000).

6P-02**ANTIBACTERIAL EFFECTS OF CARVACROL AND THYMOL ON STRAINS *Klebsiella pneumoniae* AND *Staphylococcus aureus* RESISTANT TO ANTIBIOTICS****ALEXANDRA JANTOVSKÁ, KAREL VENTURA, PETRA LYSKOVÁ, JAROSLAVA MAZUROVÁ, and KAREL MENCL**

Department of Biological and Biochemical Sciences, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice alexandra.jantovska@student.upce.cz

One of the important problems in the treatment of infectious diseases is increasing resistance of microorganisms to antibiotics. Therefore, attention focuses on research of the effects of natural origin compounds. Natural compounds are also less toxic and degrade in the organism more easily. The aim of this work is verification of microbial effects including determination the lowest effective concentration of thymol and carvacrol, monoterpenes contain in particular in plants of the genus *Thymus* and *Origanum*. Strains of *Staphylococcus aureus* and *Klebsiella pneumoniae* were tested and the resistance to certain antibiotik was detected. These strains were cultivated from clinical material by laboratory workers microbiological department of Regional Hospital Pardubice. Informations about resistance of these strains was evaluated in our lab by microdilution method, sets for these determination were obtained by TRIOS, spol. s r.o., CZ. Minimum inhibitory concentrations of carvacrol and thymol were determined by tube dilution method and microdilution method in the Mueller-Hinton broth. Both tested substances were dissolved in Mueller-Hinton broth. The growth was characterised by turbidity content of the tube in dilution method and in microdilution method by sediment. Results were analyzed after 24, 48 and 72 hours incubation at 37 °C visually. The broth culture was cultivated on blood agar and incubate at 37 °C to confirm the growth. For *Klebsiella pneumoniae* strains was determined by tube dilution method and microdilution method minimum inhibitory concentration (MIC) of carvacrol in the range 150–200 µg ml⁻¹. Thymol inhibited growth of these strains by using tube dilution method in quantity 75–1200 µg ml⁻¹. MIC on 75–600 µg ml⁻¹ was determined by microdilution method. MIC of carvacrol to the strains of *Staphylococcus aureus* determined by tube dilution method was 300 µg ml⁻¹. The effective quantity obtained by testing microdilution method was in the range 150–600 µg ml⁻¹. Thymol tested by tube dilution method showed MIC 75–600 µg ml⁻¹, by microdilution method was concentration determined on 37,5–300 µg ml⁻¹. The results were affected by the solubility of both tested substances in broth.

This work was supported by MSM 0021627502.

6P-03

PREPARATIVNÍ DĚLENÍ DIASTEREOMERŮ
SILYBINU A JEHO SULFÁTŮ

PETRA KOLÁŘOVÁ^{a,b}, DAVID BIEDERMANN^a,
EVA TESAŘOVÁ^b a VLADIMÍR KŘEN^a

^a Centrum biokatalýzy a biotransformací, Mikrobiologický ústav, AV ČR, Vítězská 1083, 142 20 Praha 4,

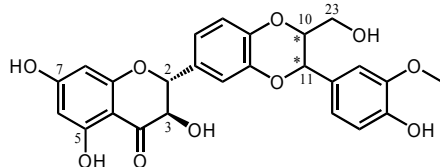
^b Přírodovědecká fakulta UK v Praze
B.B.Petra@seznam.cz

Z plodů ostropestřce mariánského (*Silybum marianum*) se získává standardizovaný extrakt silymarin, jehož hlavní komponentou je silybin¹. Tento flavonolignan je převážně odpovědný za léčivé účinky plodů ostropestřce: antioxidační, hepatoprotektivní, chemoprotektivní a protinádorové účinky.

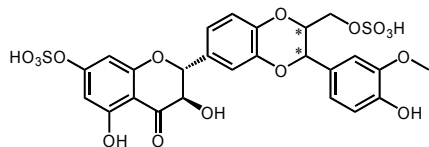
Přírodní silybin existuje jako preparativně neseperovatelná ekvimolární směs stereomerů A a B (**1** a **2**)². Bylo prokázáno, že biologická aktivita silybinu A a B je odlišná, a že se v organismu konjuguje převážně na sulfáty, jejichž struktura ani biologická aktivita není dosud známa.

Cílem této práce je vývoj prakticky použitelné metody pro preparativní separaci stereomerů silybinu A a B a jeho sulfátů, které jsou považovány za hlavní metabolity.

Byla vyvinuta původní preparativní metoda na dělení silybinu A a B v mobilní fázi tvořené 60% MeOH na chromatografické koloně Labio C18 50 × 500 mm s použitím preparativního čerpadla Shimadzu – LC-8A a detektoru SPD-20A. Čistota diastereomerů (d.e.) po prvním separaci byla 70 %, a po druhé následně 97 %. Za jeden den je takto možno získat až 0,5 g silybinu A a 0,5 g silybinu B. Připravené opticky čisté stereomery silybinu byly využity jako výchozí materiál pro sulfataci silybinu a byly získány opticky čisté silybin-7,23-disulfáty (**3**). Tyto látky budou sloužit jako standardy pro studium metabolického profilu silybinu *in vivo*.



1: Silybin A (2*R*, 3*R*, 10*R*, 11*R*); **2**: silybin B (2*R*, 3*R*, 10*S*, 11*S*)



3: Silybin-7,23-disulfát

Tato práce vznikla za podpory grantů LC06010, 303/08/0658, MŠMT OC08049 a ME10027.

LITERATURA

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

6P-04

SUPERKRITICKÁ EXTRAKCE β -SITOSTEROLU
Z KOŘENE KOPŘIVY

KRISTINA ROCHOVÁ, MARIE SAJFRTOVÁ,
HELENA SOVOVÁ a MILENA BÁRTLOVÁ

Ústav chemických procesů AVČR, v.v.i., Rozvojová 135,
165 02 Praha 6 – Suchbátka
rochova@icpf.cas.cz

Díky vysokému obsahu léčivých látek se kopřiva (*Urtica dioica* L.) uplatňuje v oblasti farmacie, kosmetiky a potravinových doplňků. Její listy obsahují nadprůměrné množství chlorofylů a karotenoidy, jež mají anioxidační a antimikrobiální účinky. V kořenech jsou obsaženy mimo jiné steroly, mastné kyseliny, skopoletin, polysacharidy a isolektiny. Rostlinné steroly, minoritní složky rostlinných olejů, jsou cennými látkami díky své schopnosti snižovat hladinu cholesterolu a tím riziko srdečních onemocnění¹. Byla u nich prokázána protizánětlivá a protibakteriální aktivita a protirakovinné účinky².

Superkritický oxid uhličitý (sc-CO₂) jakožto nepolární rozpouštědlo přednostně rozpouští nepolární a slabě polární látky jako jsou rostlinné oleje, vosky, silice a karotenoidy spolu s dalšími minoritními složkami obsaženými v rostlinném materiálu. Minoritní složky jsou v extraktech zastoupeny jen v jednotkách procent či méně, ale právě tyto látky jsou často vysoce ceněny pro svou biologickou aktivitu. Superkritickou extrakcí lze s výhodou tyto složky izolovat, neboť umožňuje regulaci rozpouštěcí schopnosti sc-CO₂ změnou tlaku a teploty (případně přidáním polárního unašeče), čímž je možno dosáhnout selektivní extrakce vůči vybrané látce či skupině látek. Rozdělení celkového extraktu na několik frakcí o různém složení lze provést frakcionací v čase nebo frakcionací v několika separátorech udržovaných při rozdílných hodnotách tlaku a teploty.

Cílem této práce je studium průběhu extrakce a výtěžku β -sitosterolu izolovaného z kořene kopřivy metodou superkritické extrakce sc-CO₂. Na základě získaných dat je pak možná optimalizace podmínek extrakčního procesu spojeného s frakcionací do dvou separátorů za účelem zakoncentrování β -sitosterolu ve vzorku. Extrakční tlak se u jednotlivých pokusů pohyboval v intervalu 15–50 MPa a teplota 40–80 °C. Vedle sc-CO₂ extraktů byla provedena Soxhletova extrakce hexanem. Obsah β -sitosterolu ve vzorcích byl stanoven kapalinovou chromatografií.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR 2B06024.

LITERATURA

1. Jones P. J. H., MacDougall D. E., Ntanios F., Vanstone C. A.: *Can. J. Physiol. Pharmacol.* 75, 217 (1997).
2. Beveridge T. H. J., Li T. S. C., Drover J. C. G.: *J. Agric. Food Chem.* 50, 744 (2002).

6P-05**SUPERKRITICKÁ EXTRAKCE A INSEKTICIDNÍ AKTIVITA HLUCHAVKOVITÝCH ROSTLIN****MARIE SAJFRTOVÁ^{a*}, ROMAN PAVELA^b, JIN-DRÍCH KARBAN^a a HELENA SOVOVÁ^a**

^a Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Rozvojová 135, 165 02 Praha 6-Suchbát, ^b Výzkumný ústav rostlinné výroby, v.v.i., Drnovská 507, 161 06 Praha 6-Ruzyně
sajfrtova@icpf.cas.cz

Časté používání syntetických insekticidů v zemědělství vede k vytváření resistantních populací hmyzu a znamená environmentální nebezpečí pro necílové organismy; navíc zbytky některých pesticidů v potravním řetězci mohou být nebezpečné lidskému zdraví¹. Nový trend v ochraně rostlin představují přípravky na bázi rostlinných výtažků, tzv. botanické insekticidy, které redukuje zmíněné problémy na minimum a navíc se v přírodě snadno rozkládají. Látky s insekticidními účinky se většinou nacházejí v rostlinných silicích, které jsou složeny především z terpenů².

Již při výběru metody pro izolaci rostlinných insekticidů je nutno brát ohled na životní prostředí a zpřísnující se normy pro používání organických rozpouštědel. Z tohoto hlediska je vysoce perspektivní extrakce superkritickým oxidem uhličitým, která nepoužívá toxická rozpouštědla, nedochází při ní k degradaci labilních složek extraktu a poskytuje extrakty s vysokou biologickou aktivitou³.

Tato práce se zabývá porovnáním insekticidní aktivity výtažků získaných SFE a tradičními extrakčními metodami z rostlin čeledi Hluchavkovité (*Lamiaceae*). Díky snadné regulaci rozpouštěcí síly superkritického CO₂ pomocí tlaku, teploty a složení rozpouštědla byly připraveny tři typy extraktů. Extrakty bohaté na silici (při tlaku 12 MPa) nebo na olejoprskyřici (při 28 MPa) byly získány při teplotě 50 °C čistým CO₂, zatímco extrakty s obsahem polárních látek (při 28 MPa) s přídavkem 4,3 hm.% acetonu k CO₂. Samotná silice byla z rostlin získána hydrodestilací a olejoprskyřice Soxhletovou extrakcí etanolem a hexanem.

U získaných výtažků byl plynovou chromatografií (GC-MS a GC-FID) stanoven obsah těkavých látek a otestována jejich biologická aktivita proti hmyzím škůdcům (larvám a dospělcům mandelinky bramborové a mouchy domácí, housenkám blýskavky a komářím larvám). Pomocí hodnot akutní kontaktní toxicity (LD₅₀) a protipožerové aktivity výtažků byla porovnána jejich účinnost v závislosti na rostlinném druhu, způsobu izolace a druhu škůdce.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR 2B06049.

LITERATURA

1. Prakash A., Rao J.: *Botanical insecticides in agriculture*, s. 461. CRC Press, London 1997.
2. Klein Gebbinck E. A., Jansen B. J. M., de Groot A.: *Phytochemistry* 61, 737 (2002).
3. Reverchon E.: *J. Supercrit. Fluids* 10, 1 (1997).

6P-06**SROVNÁNÍ OBSAHU ISOCHINOLINOVÝCH ALKALOIDŮ V JEDNOLETÉ A VÍCELETÉ KULTUŘE *Macleaya microcarpa*****KRISTÝNA PĚNČÍKOVÁ, JANA URBANOVÁ, JANA GREGOROVÁ a EVA TÁBORSKÁ***

Biochemický ústav, Lékařská fakulta, Masarykova univerzita, Kamenice 5, 638 00 Brno
taborska@med.muni.cz

Macleaya microcarpa (Maxim.) Fedde (*Papaveraceae*) je víceletá bylina pocházející z Dálného východu. Obsahuje protopinové alkaloidy allokryptopin a protopin a je jedním z významných zdrojů kvartérních benzo[c]fenanthridinových alkaloidů (KBA). Mezi tyto alkaloidy patří sanguinarin (SA) a chelerythrin (CHE), které jsou doprovázeny minoritními benzofenanthridiny – sanguirubinem (SR), chelirubinem (CR), sanguilutinem (SL), chelilutinem (CL) a makarpinem (MAK). Biologické efekty sanguinarinu a chelerythrinu jsou již detailně popsány v řadě prací. Přestože informace o minoritních alkaloidech jsou dosud sporé, vykazují řadu neobvyklých vlastností. Zejména makarpin je v posledních letech intenzivně zkoumán pro možnost jeho využití při studiu buněčných struktur pomocí průtokové cytometrie a fluorescenční mikroskopie¹. Další studie jsou však limitovány malou dostupností tohoto alkaloidu.

V naší práci jsme se zaměřili na srovnání obsahu alkaloidů v nadzemní i podzemní části u jednoleté a víceleté kultury zejména s přihlédnutím k obsahu KBA.

Rostlinný materiál byl extrahován v Soxhletově extraktoru a vzorky byly vyhodnoceny metodou HPLC s UV detekcí.

Hlavním alkaloidem všech částí rostlin je allokryptopin a ve významném množství je obsažen i protopin. V nadzemní části jednoleté kultury nebyly prokázány významné rozdíly v porovnání s kulturou víceletou. Minoritní KBA byly obsaženy v nadzemních částech obou kultur pouze ve stopových množstvích.

Obsah alkaloidů v kořenech je obecně vyšší než v nadzemní části. Z benzofenanthridinových alkaloidů je v jednoleté kultuře nejvíce zastoupen CHE (0,303 %), dále SA (0,216 %) a ve významném množství též CR (0,133 %). Zastoupení CL (0,033 %) a MAK (0,007 %) jsou podstatně menší. V kořenech víceleté kultury se obsah SA (0,260 %) a CHE (0,367 %) téměř nemění, ale jsou vydatnějším zdrojem minoritních KBA, např. obsah makarpinu je 0,127 %.

Pro izolaci minoritních KBA, zejména makarpinu se jako nejvíce perspektivní jeví kořeny víceleté kultury, kde zároveň klesá obsah protopinových alkaloidů. To odpovídá biosyntetické cestě isochinolinových alkaloidů, kdy makarpin je na konci této dráhy.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR č. 525/08/0819.

LITERATURA

1. Slaninová I., Slanina J., Táborská E.: *Cytometry, Part A* 71A, 9 (2007).

7IL-01 CHEMICKÉ VZDĚLÁVÁNÍ: SOUČASNOST A PERSPEKTIVY

MARTIN BÍLEK^{a,b}

^a *Katedra chemie, Pedagogická fakulta, Univerzita Hradec Králové, Rokitsanského 62, 500 03 Hradec Králové,* ^b *Katedra chemie, Fakulta přírodních věd, Univerzita Konstantína Filozofa v Nitre, Tr. A. Hlinku 1, 949 74 Nitra*
martin.bilek@uhk.cz, mbilek@ukf.sk

Východiska a aktuální problémy současného stavu v posledních letech nově se konstituující vědní disciplíny zaměřené na chemické vzdělávání (didaktiky chemie) v České republice se opírají jak o aktuální problémy výuky chemie na všech stupních školského systému tak o revitalizaci vědecko-výzkumné činnosti v této oblasti včetně operativní aplikace jejich výsledků ve vzdělávání a zejména v profesionalizační přípravě studentů učitelství chemie a v dalším vzdělávání učitelů chemie působících na různých typech škol.

Vědecko-výzkumný „background“ didaktiky chemie nemůže v současnosti vystačit pouze s prezentací „dobré praxe“, ale je třeba posilovat jak metodologické základy vědecko-výzkumné činnosti tohoto oboru, tak průměrných výsledků výzkumu do pedagogické praxe. V současných teoriích vzdělávání můžeme rozlišovat různé proudy (paradigmata), které se zákonitě projevují jak v přístupech k realizaci výzkumných šetření tak v aplikacích získaných výsledků. Různé teorie mají svůj odraz v pojetí oborových didaktik včetně použití adekvátních výzkumných nástrojů. V jednotlivých přístupech můžeme detekovat řadu nosných směrů oborově – didaktického výzkumu, ale také určitá nebezpečí, která může přílišná orientace na určitý přístup znamenat – např. „předmětářství“ (přílišná orientace na obsah vzdělávání s nedostatečným akceptováním specifík poznávacích schopností učících se apod.), „anti-didaktika“ (rezignace na jakékoli řízení nebo usměrňování učebního procesu učících se apod.) nebo „normo-didaktika“ (svázanost vzdělávacích systémů ideologickými přístupy k tvorbě striktně jednotných učebních osnov apod.). Naopak jako pozitivní přístupy se jeví směry didaktiky blízké tzv. interakcím mezi základními úhly tradičního „trojúhelníku učení (učivo, učící se a prostředí učení)“ jako jsou „psychodidaktika“ (respektování individuální povahy poznávacích a učebních schopností, prekoncepty, miskoncepce, učební styly apod.), „envirodidaktika“ (formulace vzdělávacích cílů konzistentních s aktuálními výzvami současnosti jako jsou celoživotní učení, trvale udržitelný rozvoj apod.) či „e-didaktika“ (smysluplné využívání informačních a komunikačních technologií ve vzdělávání, distanční vzdělávání, e-learning, virtuální učební prostředí apod.).

Potřebujeme tedy řešit výzkumné projekty v didaktice chemie (v chemickém vzdělávání)? Odpověď není možná bez širšího zamyšlení, bez kontextu individuálních a společenských požadavků na chemické a v obecnější rovině na přírodovědné vzdělávání. Poznatky přírodních věd a nejrůznější technologie obklopují každého z nás téměř na každém kroku. Stále více pracovních příležitostí vyžaduje přípravu v přírodovědných disciplínách. V médiích a v mnohých situacích každodenního života jsou lidé konfrontováni

s vědeckými termíny, názory či výsledky výzkumu. Přírodovědné vzdělávání by jim mělo být s to pomoci při formování kritického pohledu na nejnovější technologie a jejich souvislosti¹.

Přesto je výuka přírodovědným předmětům včetně chemie zvláště v rámci všeobecného vzdělávání doprovázena řadou problémů. Mnoho žáků ji považuje za obtížnou a nezáživnou, dokonce se vyskytují pochybnosti o její potřebnosti. Změny by zasluhovala i pregraduální příprava učitelů chemie orientovaná doposud více na obsah vzdělávání než na jeho metody, formy a další prostředky, tedy hledat cestu k přípravě učitelů – profesionálů ve své činnosti¹.

Co je tedy v nejširším slova smyslu úkolem výzkumné činnosti v didaktice chemie? Odpovědi můžeme hledat např. v analýzách činnosti studentů doktorských studijních programů a jejich školitelů, doporučeními pro plánování, realizaci a hodnocení disertačních projektů a publikací jejich výsledků. Cílem takové analýzy, kterou jsme u nás provedli v roce 2003 (cit.¹), bylo obhájení relevance chemicko-didaktického výzkumu v době, kdy doktorské studium v České republice nebylo na žádné vysoké škole akreditováno. Studie prokázala srovnatelné zaměření disertačních prací např. se situací v tzv. „starých“ německých zemích, a opíraje se o revitalizaci oboru na Slovensku, v Polsku a dalších zemích tehdy doložila oprávněnost výzkumné činnosti v didaktice chemie.

Na závěr tohoto sdělení bychom se tedy mohli ptát podobně jako Karel Holada v publikaci („záznamu projevu“) „Učitel chemie – pedagog nebo chemik?“² a nechat prostor každému pro vlastní odpověď. Naše odpověď by mohla znít po dvaceti letech stejně jako jeho: „Ani pedagog, ani chemik“, anebo „Něco mezi pedagogem a chemikem“, i když se nabízejí i další odpovědi: „I pedagog i chemik“, „Pedagog“, „Chemik“.

Kdo zajistí do budoucnosti podmínky pro jednoznačnější odpověď: chemie, pedagogika nebo někdo jiný? My se domníváme, a snažíme se v řadě publikací a projektů i dokázat, že adekvátní hledání odpovědi nejen na tuto otázku může zajistit především didaktika chemie. V zahraničí o tom můžeme nalézt také řadu pádných důkazů^{3–5}.

Tato práce vznikla za dílčí podpory grantu GA ČR 406/09/0359.

LITERATURA

1. Bílek M.: *Didaktika chemie – výzkum a vysokoškolská výuka*. M&V, Hradec Králové 2003.
2. Holada K.: Učitel chemie – pedagog nebo chemik. *PVŠ* 41 (1989 – 1990), 4, 296 – 299.
3. Scerri E. R.: *J. Chem. Ed.* 80, 468 (2003).
4. Anton M. A.: *Chem. Sch. (Salzbg.)* 18, 3 (2003).
5. Hildebrandt H.: *Chemiedidaktik und Unterrichtswissenschaftlichkeit. Zur Analyse der chemiedidaktischen Lehre an deutschen Hochschulen*. Frankfurt a/M – Berlin – Bern – New York – Paris – Wien, Peter Lang Verlag, 1998.

7IL-02

JAK POPULARIZOVAT CHEMII

MARTA KLEČKOVÁ

*Přírodovědecká fakulta Univerzita Palackého,
tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc
marta.kleckova@upol.cz*

V oblasti popularizace přírodních věd došlo v posledním desetiletí k velkému rozvoji forem a metod podchycení zájmu mladé generace o přírodní a technické obory. Nejrozšířenější způsob zpřístupňování výsledků vědy a výzkumu široké veřejnosti je realizován prostřednictvím sdělovacích prostředků (televize, rádio, denní tisk, časopisy). Jsou budována Science centra, např. IQ Park Liberec, Techmárium Plzeň a další se plánují. Různé vědecké instituce a jejich přední odborníci se zapojují do popularizace přírodovědných oborů^{1–3}. Přesto se výzkumná pracoviště stále potýkají s nedostatkem mladých vědců.

Přírodovědecká fakulta UP v Olomouci (PřF UP) již řadu let nabízí školám nejrůznější akce, v rámci kterých se žáci seznamují a aktivně zapojují do své první badatelské činnosti. Fakulta získala již několik grantů zaměřených na popularizaci vědy a výzkumu v oblasti přírodních věd, jejichž výstupy našly široké uplatnění v celé ČR. Například Jarmark chemie a fyziky začínal v regionu Morava v roce 2000, na kterém žáci měli možnost vyzkoušet si vlastníma rukama řadu zajímavých experimentů. V letošním roce se uskuteční již 10. ročník Jarmarku pod názvem Přírodovědný jarmark, kde se budou zábavnou formou prezentovat i další přírodovědné obory (matematika, biologie, ekologie, geologie a geografie). Jarmark chemie se nám podařilo přenést i přímo do základních, středních i vysokých škol ČR. Obdobnou akci pořádá od roku 2006 Ostravská Univerzita (Chemie na Slezském hradě) a následovaly další veřejnosti určené prezentace vědy, např. v Plzni (Dny vědy a techniky), Praze a Liberci (Věda v ulicích).

V rámci popularizace chemie i ostatních přírodních věd PřF UP pořádá pro velmi nadané žáky z 1. třídy experimentální školy (děti prošly testováním Menza) chemické exkurze s jednoduchými experimenty ve vysokoškolských laboratořích. Fakulta zrealizovala již 3. ročník Dětské univerzity. Středoškolským studentům, kromě tradičních chemických exkurzí, dnů otevřených dveří apod., nabízí internetovou soutěž L@byrint chemie, soutěž Přírodovědný klokan a zapojení do projektů Přírodovědec (<http://www.prirodovedec.eu>) a Badatel (<http://www.badatel.upol.cz>).

EU projekt Přírodovědec je zaměřený na talentované studenty středních škol se zájmem o přírodovědné obory, kteří se během školního roku pravidelně zúčastňují 8 celodenních seminářů (6 vyučovacích hodin), jejichž náplní jsou zajímavé odborné přednášky a také praktická cvičení z chemie, fyziky a matematiky. Semináře navštěvuje 60 studentů z 16 gymnázií regionu. Další aktivitou projektu je letní škola „Přírodovědec“, v rámci které se studenti blíže seznámí s vědecko-výzkumnou činností několika pracovišť. Zájemci z řad středoškolských studentů se přímo zapojí do výzkumné práce na VŠ. S touto formou spolupráce má již fakulta zkušenosti.

Projekt Badatel probíhá od roku 2006 na PřF UP, nabízí

talentovaným středoškolským studentům možnost spolupráce s vědeckými pracovníky. Na www stránkách projektu si studenti vybírají téma práce z široké nabídky témat jednotlivých vědeckých pracovišť. Poté se zájemci přihlašují prostřednictvím internetu přímo konkrétnímu vedoucímu práce, dohodnou se na termínu prvního setkání a následuje spolupráce na řešení daného tématu. Mezi studenty se tento způsob bádání či „naplnění volného času“ setkal s překvapivě velkým ohlase. Během tří let se do projektu zapojilo 139 studentů. Mladí vědci se zúčastnili několika soutěží a dosáhli mnoho úspěchů. Do celostátního kola SOČ se zapojilo 17 studentů, v celostátní kole soutěže AMAVET byli 2 studenti a na odborných konferencích mělo příspěvek 8 studentů. Velkým úsměchem mladých badatelů je spoluautorství v 5 impaktovaných publikacích a získání 3 cen Učené společnosti a 1 ceny Nadačního fondu Jaroslava Heyrovského. V roce 2008 získala studentka ocenění Česká hlavička⁴.

Všechny popularizační aktivity vyžadují nemalé finanční náklady, od tvůrců a realizačního týmu spoustu času. Na druhé straně značným přínosem pro PřF UP je prezentace výzkumu fakulty v široké veřejnosti, propagace studia mezi studenty středních škol a získání zájmu o přírodní vědy u těch nejmenších. Největším ziskem je bezesporu přijetí talentovaných studentů se zájmem o přírodní vědy na PřF UP, např. projektem Badatel prošlo 26 současných VŠ studentů přírodovědecké fakulty.

Tato práce vznikla za podpory grantu OPVK CZ.1.07/2.3.00/09.0040 Přírodovědec.

LITERATURA

1. Zahradník R.: Chem. Listy 98, 823 (2004).
2. Berek J.: Chem. Listy 88, 749 (1994).
3. Horák J.: Chem. Listy 87, 309 (1993).
4. Kubala M., (ve sborníku): *Možné cesty pozitivní změny postoje mládeže k přírodním vědám*, s. 30. Vydavatelství UP, Olomouc 2009.

7IL-03

ROLE OSOBNOSTÍ V BADATELSKÉM A EDUKAČNÍM VÝVOJI NAUKY O TEPLE

JAROSLAV ŠESTÁK^{a,b}

*^a Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Cukrovarnická 10, 162 00 Praha, ^b New Technology - Research Center in the Westbohemian Region, Západočeská universita, Universitní 8, 301 14 Plzeň
sestak@fzu.cz*

Teplota/ohně (energie) jsou historicky uznávané jako integrující součásti uspořádávající hmotu (i společnost). Jeho role je stručně zmíněna ohledem na řeckou filosofii (*Empedokles-živly*) a středověkou alchymii^{1–3} (Tadeáš Hájek, Daniel Stolcius, Marek Marci, Prokop Diviš, Kryštof Berger). Speciální pozornost je věnována Janu A. Komenskému a jeho spis z roku 1659 (*Disquisitiones de Caloris et Frigoris Natura*), který zřejmě zavedl termín calorik, později široce používaný (Joseph Black, Sadi Carnot). Důležitou roli sehráli fyzik Čeněk Strouhal, František Závíška a Ernst Mach stejně

jako Albert Einstein nebo Rainold Fürst. Ve světle vývoje termických měření nutno zmínit Stanislava Škramovského (stamograph) a česko-slovenské termoanalytiku jako Proks (periodik TA), Šatava (hydrothermal TA), Bergstein (dielectrik TA), Komrska (permeability TA), Chromý (photometric TA) a Balek (emanation TA). Významnou etapu vývoje bylo ustavení zájmových skupin termické analýzy a kalorimetrie jak ve světovém měřítku (ICTA) tak na domácí půdě (TERMANALs)

Výchovný proces s sebou přinesl nejen vývoj nové disciplíny zvané termodynamika, která se vyvinula ve dvou větších „bezdisipační“ kalorimetrická (Black, Clausius, Gibbs) a „disipační“ termomechanická (Fourier, Stokes, Onsager). Významnou se stala analýza původních prací Carnota ve smyslu kalorické varianty termodynamiky⁴ a úvahy nad významem a definicí teploty. Významná je analýza funkce tepelného stroje, kterou zdůvodnit různou hodnotou či kvalitou tepla vztaženou k okamžité pracovní teplotě. Užitečnou práci tak můžeme získat jen tehdy, když pracujeme při dvou různých hodnotách tepla spolu s dvojí vnitřní uspořádaností pracovního systému. Můžeme si představit, že teplota vyjadřuje jakousi toleranci systému vzhledem k jeho neuspořádanosti (chaosu), což nám umožňuje uplatnění, nebo lépe zpodobnění této zákonitosti i do oblasti společenských věd, kde ale stav společnosti není determinován standardním minimem energie (jako ve fyzice), ale naopak pocitem maximální spokojenosti^{2,5,6}.

Pozorované strukturální analogie vykazují obecnou působnost, která umožňuje uplatnění zákonů nauky o teple (termodynamiky) do společenských věd, kde je ale stav společnosti determinován pocitem jak maximálního štěstí či zdraví, tak stavem tolerance a kde teplo je zastoupeno pojmem sociologické seberealizace anebo ekonomickým kapitálem (financemi)⁷. V rámci aplikace tradičního modelu tepelného stroje (např. Carnotova čtyřdobého cyklu spalovacího motoru) na výměnný obchod, pak tepelné sekvence musí být analogicky uskutečněny v různých podmínkách tolerance a bohatství (uspořádání) – nejčastěji existujících v rozdílných nesterajně rozvinutých zemích, aby takto zvolený ekonomický cyklus mohl ve svém průběhu vytvořit plochu práce, zisku či jiných hledaných hodnot.

LITERATURA

1. Šesták J., v knize: *Metaphores and models* (Knut E., Pliska V., Folkers G., ed.), s. 87. Collegium Helveticum, Zurich 2007.
2. Šesták J.: *Heat, Thermal Analysis and Society*, Nucleus, Hradec Králové 2004 a *Science of Heat and Thermophysical Study: a generalized approach to thermal analysis*, Elsevier, Amsterdam 2005.
3. Šesták J., Mareš J. J.: *J. Thermal Anal. Calor.* 88, 763 (2007).
4. Šesták J., Mareš J. J., Hubík P., Proks I.: *J. Thermal Anal. Calor.* 97, 679 (2009).
5. Šesták J.: *Chem. Listy* 104, 277 (2010).
6. Mimkes J.: *J. Thermal Anal. Calor.* 43, 521 (1995), *J. Thermal Anal. Calor.* 60, 1055 (2000).
7. Montenegro R. N., Stanley H. F.: *Introduction to Econophysics: Correlation and Complexity in Finance*. Cambridge University, Cambridge 2000.

7L-01**JAK SILNÁ A STABILNÍ JE KYSELINA UHLIČITÁ****MARTIN ADAMEC***, PAVEL BENEŠ, HANA KOTOUCOVÁ a FRANTIŠEK LIŠKA*Pedagogická fakulta UK v Praze, M. D. Rettigové 4, 116 39 Praha 1
martin.adamec@pedf.cuni.cz*

Tradičně „anorganická“ kyselina uhličitá je nejvyšším oxidačním stupněm uhlíku v oxidačně redukční hierarchii organických sloučenin: methan (–IV), methanol (–II), methanal (0), methanová kyselina (II) a kyselina uhličitá (IV)¹. Samotná, stejně jako její monofunkční deriváty, je nestálá a rozkládá se na oxid uhličitý a vodu (resp. halogenovodík, alkohol, amoniak). Její difunkční deriváty, jako např. močovina, urethan, karmamoylchlorid, guanidin jsou stálé a mnohé tvoří základní stavební bloky řady 5- a 6členných heterocyklů.

Kyselině uhličitě a jejím derivátům (tetrasubstituovaným) bývaly ve starších učebnicích organické chemie, např.^{2,3} věnovány samostatné rozsáhlé kapitoly. V novějších učebnicích je tato kapitola „rozpuštěna“ v kapitole o funkčních derivátech kyselin, např.^{4,5}.

V příspěvku bude diskutován přetrvávající omyl spočívající v záměně konstanty kyselosti kyseliny uhličitě do prvního stupně, K_1 , resp. pK_1 (3,81) za pozorovanou disociační konstantou K_{pozor} , resp. pK_{pozor} (6,35). Dále budou uvedeny experimentální postupy, které umožnily připravit kyselinu uhličitou v bezvodé formě a teoretické práce^{6–9} vysvětlující enormní stabilitu bezvodé kyseliny uhličitě a její enormní nestabilitu v přítomnosti molekuly (molekul) vody. Bude prezentován postup¹⁰, jak ze souhrnného vzorce ternárních kyselin odhadnout jejich relativní sílu (velmi silné, silné, slabé, velmi slabé), který je vhodný pro žáky škol, kteří ještě neznají logaritmy a definice rovnovážných konstant a konstant kyselosti a je založen na rozdílu počtu atomů kyslíku a vodíku. Tento rozdíl koreluje s počtem mezomerních struktur vznikajících aniontů a jejich termodynamickou stabilitou.

LITERATURA

- Liška F.: Chem. Listy 79, 485 (1985).
- Červinka O., Dědek V., Ferles M.: *Organická chemie*. SNTL/ALFA, Praha 1969.
- Beyer H.: *Organická chemie*. SNTL, Praha 1958.
- McMurry J.: *Organická chemie*. VUTIUM Brno a VŠCHT Praha, Praha 2007.
- Wade L. G., Jr.: *Organic Chemistry*, 5. vyd. Prentice Hall, New Jersey 2003.
- Terlouw J. K., Lebrilla C. B., Schwarz H.: *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* 26, 354 (1987).
- Winkel K., Hage W., Loerting T., Price S. L., Mayer E.: *J. Am. Chem. Soc.* 129, 13863 (2007).
- Loerting T., Tautermann C., Kroemer R. T., Kohl I., Hallbrucker A., Mayer E., Liedl K. R.: *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* 39, 892 (2000).
- Mori T., Suma K., Sumiyoshi Y., Endo Y.: *J. Chem. Phys.* 130, 204308 (2009).
- Monroe M., Abrams K.: *J. Chem. Educ.* 62, 41 (1985).

7L-02**BOZP V CHEMICKOM LABORATÓRIU - UPLATŇOVANIE TEORETICKÝCH VEDOMOSTÍ V PRAXI****MELÁNIA FESZTEROVÁ***Univerzita Konštantína Filozofa, Fakulta prírodných vied, Katedra chémie, Tr. A. Hlinku 1, 949 74 Nitra
mfeszterova@ukf.sk*

Práca v chemických laboratóriách, spočíva nielen v osvojení si teoretických vedomostí, princípov a zákonitostí z chemických disciplín (anorganickej, organickej, fyzikálnej a analytickej chémie), ale predovšetkým v ich správnom uplatňovaní v praxi. Predpokladom dobrých výsledkov je zručnosť a obratnosť v základných laboratórnych technikách. Snahou je dosahovať vysokú odbornú úroveň, čo predpokladá neustále sa vzdelávať¹. Dôsledné uplatňovanie bezpečnosti a ochrany zdravia pri práci v chemických laboratóriách je základom pre získanie praktických skúseností, návykov a zručností². Samotný experimentálny charakter chémie podmieňuje získavanie nových poznatkov cestou vhodne zvolených pokusov pri dodržiavaní zásad bezpečnej práce. Takto riadený učebný proces umožní čo v najkonkrétnejšej podobe dostať poznatky chémie do vedomia žiakov. V tejto súvislosti rastie význam bezpečnosti a ochrany zdravia pri práci ako základného činiteľa produktívnej činnosti.

V príspevku poukazujeme na dôležitosť osvojenia si zásad BOZP a ich následné využívanie v praxi ako základného predpokladu pre získanie komplexnejších a hlbších vedomostí.

Táto práca vznikla za podpory projektu „Vybudovanie Centra pre výskum a rozvoj všeobecného prírodovedného vzdelávania“ financovaného z Fondu CVV na FPV UKF v Nitre.

LITERATÚRA

- Hellberg J., Bílek M.: Chem. Listy 94, 1125 (2000).
- Feszterová M., Serafin Č., Jenisová Z.: *Chemické laboratórium a ochrana zdravia pri práci*, s. 23. FPV UKF, Nitra 2009.

7L-03**UČÍME CHEMIU NECHEMIKY NA VŠ****JAN GRÉGR a MARTIN SLAVÍK***Katedra chémie FP, Technická univerzita v Liberci, Studentská 2, 461 17 Liberec
jan.gregr@cz, martin.slavik@tul.cz*

Katedra chémie FP TUL zajišťuje výuku chémie na čtyřech fakultách TUL. Jedná se větší množství studentů např. na Fakultě strojní je v prvním ročníku přes 600 studentů. Znalosti základů chémie studentů ze středních škol jsou na velmi rozdílné úrovni. Každý z oborů navíc vyžaduje rozdílný obsah a rozsah přednášek.

Ve výuce jsme se pokusili využít důsledněji poznatky didaktiky středoškolské chémie. Přednášky se snažíme zpra-

covat podľa študijného systému MURDER. Prednášky majú motivačnú časť, zdôrazňujeme význam prednášenej látky pre následnú prax. Otázkami zisťujeme stupeň pochopenia súvislostí a znalosť predchádzajúcej látky. študenti majú k dispozícii PDF súbory s obsahom prednášok, domáce úlohy pre procvičenie výpočtov, prednášku umiestnenú v sociálnej sieti SlideShare.net a videozáznamy prednášok pořízené zařízením MediaSite. V každej prednáške sú zmienené ICT prostriedky pre rozšírenie prednesenej látky (ACD ChemSketch, ChemSpider.com, Webelements.com) a motivačné materiály (napr. videa na YouTube.com). Nechýbi ani jednoduché experimenty pre lepší pochopenie vlastností materiálov.

V príspevku budú diskutované výhody a nevýhody použitého riešenia.

Tato práce vznikla za podpory grantu FRVŠ č. 1698/2010.

LITERATURA

1. Card S., Mackinlay J., Shneiderman B. (ed.): *Readings in Information Visualization – Using Vision to Think*. Morgan Kaufmann, Elsevier 2005.
2. Jones L.: Learning Science with ICT. [on-line]; prezentace PPT. [cit. 2010-03-19; publ.] Dostupné na: <www.ipst.ac.th/eval_standard/meeting/IPST-Public%20Lecture.ppt>.
3. Valle M.: Advanced Visualization for Chemistry Course [on-line]. [cit. 2010-03-19; rev. 2008-04-16] Dostupné na: <<http://www.cscs.ch/~mvalle/ChemViz/course/>>.

7L-04

VÝZNAM HISTÓRIE CHÉMIE PRE CHEMICKÉ VZDELÁVANIE

EUBOMÍR HELD

*Trnavská univerzita, Hornopotočná 23, 918 43 Trnava
lheld@truni.sk*

Chemické vzdelávanie je v ostatnom čase konfrontované s rozličnými javmi modernej doby, čo sa najkontroverzejšie prejavuje na najnižších stupňoch chemického vzdelávania.

Projektovanie vzdelávacích obsahov na tejto úrovni v minulosti viedlo k zavádzaniu vedecky najaktuálnejších všeobecných pojmov, čo korelovalo s didaktickou zásadou vedeckosti. V mene modernizácie z obsahu chemického vzdelávania vypadli významní ľudia, chemické objavy, stratila sa prirodzená genéza odborných pojmov.

Napriek uvedenej skepse sa zdá, že história chémie a jej štúdium zohrávajú významnú úlohu pri projektovaní perspektívnych vzdelávacích postupov v elementárnom chemickom vzdelávaní. Svedčia o tom nasledovné indicie.

Po tom čo T. S. Kuhn¹ prišiel so svojou štruktúrou vedeckých revolúcií sa ukázalo, že detské nadobúdanie nových poznatkov z množstvom slepých uličiek je rovnako namáhavé ako presadenie sa nových ideí vo vede.

Naivné predstavy detí o prírodných fenoménoch sa veľmi nápadne podobajú na staršie historicky prekonané ale didakticky hodnotné vedecké predstavy².

Existujú vzdelávacie projekty v zahraničí, ktoré uvedené podobnosti využívajú a sú syténé mnohými pre nás už nepri-

jateľnými historickými pojmami³.

Preštudovať historické súvislosti vývinu vedeckého pojmu si kladie za úlohu „nemecký patent“ pre tvorbu didaktických situácií pod názvom didaktická rekonštrukcia⁴.

Nedávno sme sa pokúsili ukázať, že prirodzená gramotnosť je u laickej verejnosti ovplyvňovaná verejným diskurzom, v ktorom zakotvenie odborných pojmov v prirodzenom jazyku, jeho významové rozlúštenie, môže zohrať pozitívny význam.

Tiež sa ukazuje, že cieľová orientácia na kompetencie žiakov v konečnom dôsledku znamená orientáciu na proces a nie na výsledok.

To vyžaduje novú interpretáciu didaktickej zásady vedeckosti v tom zmysle, že veda nie je definitívne utriedený systém poznatkov ale skôr proces neustálych zmien.

Táto práca vznikla s podporou grantu VEGA 1/0413/10.

LITERATÚRA

1. Kuhn T. S.: *Struktura vedeckých revolúcií*. Pravda, Bratislava 1982.
2. Pfundt H., Duit R.: *Bibliography: Student's alternative frameworks and science education*. Kiel 2002, Germany: Leibniz-Institute for Science Education (distributed el.).
3. Held L.: O zmysle historického učiva v projekte FAST. In *Zborník z konferencie FAST-DISCO, RaD PRINT*, s. 42-48, Bratislava 1997.
4. Jelemenská P., Sandner E., Kattmann E.: *Pedagogika* 53, 190 (2003).

7L-05

POSTAVENÍ ŠKOLNÍHO CHEMICKÉHO POKUSU V SOUČASNÉ VÝUCE

PETR KOLOROS

*Gymnázium Pierra de Coubertina, 390 01 Tábor
koloros@gymta.cz*

Školní chemický pokus ve všech podobách obsahuje aktivity žáků směřující k osvojení klíčových i oborových kompetencí v mnoha úrovních definovaných v Rámcových vzdělávacích programech. Je to součást vzdělávací oblasti Člověk a příroda kde by měl být žák veden k provádění soustavných a objektivních pozorování, měření a experimentů, ke zpracování a interpretaci získaných dat a hledání souvislosti mezi nimi¹.

Očekávanými výstupy z této činnosti jsou pak dovednosti navrhnout experiment na ověření určitého tvrzení a z jeho výsledků vyvodit závěry, což je součástí přírodovědné gramotnosti.

Vzhledem k novým možnostem v chemické instrumentaci, kdy se značně zrychlila a objektivizovala práce je žádoucí alternativou též práce žáků v terénu, např. při hodnocení vlastností povrchových vod.

Tyto aktivizační metody a formy výuky vyžadují velmi odpovědnou konstrukci Školního vzdělávacího programu kde bude dost času na praktickou činnost². Optimální variantou by tedy bylo přizpůsobit obsah a rozsah učiva možnostem pokusničení a ne opačně, jak je tomu dosud. Znamenalo by to samozřejmě redukcí témat.

Vedle motivačních pokusů v začátcích výuky chemie by bylo vhodné zařazovat zjišťující pokusy, které vedle motivace, mají co největší výpovědní hodnotu. Pro žáky je atraktivní i experiment, kdy neznáme předem výsledek. Na druhé straně je vhodné doprovázet prezentaci látky i velmi jednoduchými pokusy³. Nebezpečím pro výuku chemie při laboratorních pracích žáků mají pokusy jen podle kuchařky (cookbook pokusy), které po čase studenty nezajímají. Opakem takového zadání je experiment jako problém s maximálním možným prostorem pro žákovu angažovanost. Dobrým vzorem jsou zde praktické části chemické olympiády eventuelně jejich modifikace, které mohou též sloužit k hodnocení úrovně výuky.

Profesionální kvalifikaci učitele je dát žákům v reálné situaci ten správný podnět. Problémem v pregraduální přípravě učitelů je, že na tuto činnost nelze dát žádný konkrétní návod, protože každá pedagogická situace je svým způsobem jedinečná. Lze jen prezentovat některé zásady pro volbu z nekonečného množství variant⁴. Např. se vyplatí se předem si teoreticky i prakticky připravit základní a mnohaletou praxí ověřené pokusy.

O své místo na slunci bojují též virtuální chemické pokusy, které mají nezanedbatelné výhody.

Přes všechna legislativní i bezpečnostní omezení patří dobře cílený školní chemický pokus k základním prostředkům výuky chemie a to i z hlediska žákovských preferencí.

LITERATURA

1. Čtrnáctová H., Čížková V., Marvánová H., Písková D.: *Přírodovědné předměty v kontextu kutikulárních dokumentů a jejich hodnocení*. UK v Praze, Přírodovědecká fakulta, Praha 2007
2. Doulík P., Škoda J.: *Sborník přednášek 19. Mezinárodní vědecké konference*, s. 238–245. Univerzita Hradec Králové, Gaudeamus 2009.
3. Pacholík R.: *Chemické pokusy anorganické*. Jednota československých matematiků a fyziků, Praha 1949.
4. Prokša M.: *Technika a didaktika školských pokusů z chemie*. Přírodovědecká fakulta Univerzity Komenského, Bratislava 1998.

7L-06

KOMPLEXNÍ VYUŽITÍ ICT VE VŠ VÝUCE CHEMIE

MARTIN SLAVÍK, JAN GRÉGR a BOŘIVOJ JODAS

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

Příspěvek ukáže příklady použití moderních informačních a komunikačních technologií ve výuce chemie na vysoké škole, zmíněny budou např.: sociální síť, mobilní telefony, počítačem podporovaný experiment, počítačové algebraické systémy, molekulární vizualizace, e-learningové systémy, analýza obrazu, měření na videosekvencích, multimédia, molekulární vizualizace a simulace. Budou předvedeny ukázky použití didaktických her a motivačních experimentů ve VŠ výuce chemie, které umožňují zmírnit přetechnizovanost výuky. Diskutovány budou dále některé nástroje pro snadné vytváření a sdílení výukových materiálů.

Uvedené aktivity představují součást širšího konceptu vysokoškolské výuky přírodních věd zahrnující soulad mezi teorií a praxí výuky, integraci oborů a dovednosti pro život: „soft skills“ včetně kariérního plánování.

Tato práce vznikla za podpory grantu SGS-FP-TUL 194/2010.

LITERATURA

1. Card S., Mackinlay J., Shneiderman B. (ed.): *Readings in Information Visualization – Using Vision to Think*, Morgan Kaufmann, Elsevier 2005.
2. Jones L.: Learning Science with ICT. [on-line]; prezentace PPT. [cit. 2010-03-19; publ.] Dostupné na: <www.ipst.ac.th/eval_standard/meeting/IPST-Public%20Lecture.ppt>.
3. Valle M.: Advanced Visualization for Chemistry Course [on-line]. [cit. 2010-03-19; rev. 2008-04-16] Dostupné na: <<http://www.cscs.ch/~mvalle/ChemViz/course/>>.
4. Slavík M.: Osobní prezentace [on-line]. [cit. 2010-03-19; rev. 2010-03-19] Dostupné na: <<http://www.slideshare.net/martin.slavik>>.

7L-07

PŘÍSPĚVEK VĚDCŮ Z ÚFCH J. HEYROVSKÉHO AV ČR, v.v.i. K VÝCHOVĚ LIDSKÝCH ZDROJŮ PRO VĚDU A VÝZKUM

KVĚTOSLAVA STEJSKALOVÁ

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

Přírodní vědy nepatří v posledních téměř 15 letech mezi oblíbené předměty, které by studenti se zájmem studovali. Chemie a fyzika jsou založené na experimentování, jež z výuky místo toho, aby se rozvíjelo, mizí. Touha po vědění v daných oborech se tak stala heslem jen pro úzké skupiny jedinců. To jsou smutná fakta, která shrnují statistiky a přehledy vysokých škol, MŠMT i Akademie věd České republiky.

Vědci z ÚFCH JH se rozhodli aktivně zapojit do procesu výchovy středoškolských a vysokoškolských studentů, tj. nových lidských zdrojů pro oblast VaV v přírodních vědách. Od března 2008 do prosince 2009 řešili projekt základního výzkumu s názvem Tři nástroje¹ v programu NPV II – Lidské zdroje poskytovatele MŠMT. Cílem projektu bylo vypracovat a ověřit metodiku, jak zapojit mladou generaci do výzkumné činnosti, a tím probudit či prohlubovat její zájem o vědu jako o své budoucí povolání. Za tímto účelem projekt navrhnul tři nástroje akademického pracoviště, které v průběhu řešení ověřoval a hodnotil: *i)* informace – kvalitní informace o výzkumu v ÚFCH JH šířené prostřednictvím tištěných materiálů, webové prezentace, moderních produktů, jako je multimediální CD-ROM, DVD s videosekvencemi představujícími dvacítku fyzikálně-chemických laboratoří ústavu a DVD s filmovým dokumentem o devíctce úspěšných mladých vědců ÚFCH JH s názvem „Homo Scientist jr.“; *ii)* stáž ve vědeckém týmu – celoroční a prázdninové stáže talentovaných SŠ

a VŠ studentů ve vědeckých týmech a letní škola či workshopy pro VŠ a PGS studenty; *iii*) prezentace výsledků – multioborové semináře studentů, na kterých všechny cílové skupiny referovaly a diskutovaly výsledky svého výzkumu realizovaného v různých týmech akademického pracoviště v průběhu řešení projektu.

Cílovými skupinami projektu byli středoškolští a vysokoškolští studenti a posluchači doktorského studia. Aktivity pořádané v rámci projektu byly přístupné i pro zájemce z řad středoškolských pedagogů, popř. pedagogů základních škol. Texty, fotografie, videa, obrázky a další materiály uveřejňované v informačních nástrojích projektu byly vytvářeny v takové podobě, aby poskytl srozumitelnou informaci o výzkumu v ÚFCH JH i zájemcům z laické veřejnosti. Řešení projektu bylo sice k 31.12.2009 úspěšně ukončeno, jeho aktivity však pokračují a rozvíjejí se i nadále (<http://www.jh-inst.cas.cz/3nastroje>).

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR 2E08038.

LITERATURA

1. Stejskalová K., ve sborníku: *Práce s talentovanou mládeží*, s. 162. JCMM, Brno 2008.

7L-08

CHEMICKÝ PRIEMYSEL V ZRKADLE DEJÍN SLOVENSKA – HISTÓRIA ROZVOJA VLÁKIEN A VLÁKNITÝCH MATERIÁLOV

MARTIN JAMBRICH, MICHAL UHER, VIKTOR MILATA a MILOŠ REVÚS

*Slovenská spoločnosť priemyselnej chémie ZSVTS Bratislava
rosamichal@zoznam.sk*

Dejiny vývoja vláknitých materiálov – vlákien sú rovnako staré ako dejiny ľudstva a civilizácie. Dokonca 19. Stor. boli používané prírodné vlákna ako je ľan, konope, vlna, juta. Prvá priemyselná výroba chemických vlákien začala v roku 1891 výrobou umelého hodvábu na báze celulózy. Výroba vlákien na základe syntetických polymérov bola zavedená v r. 1934.

V prednáške budeme prezentovať históriu rozvoja vlákien na Slovensku. Tieto výsledky budú obsahom pripravovanej monografie „Chemický priemysel v zrkadle dejín Slovenska“, ktorá bude postupne obsahovať spracovanie 14. Odborov chemického priemyslu na Slovensku do roku 1990. Okrem vlastného odboru chemického priemyslu sa bude spracovávať aj činnosť organizácií, ktoré podmieňovali rozvoj chemického priemyslu (výskumné inštitúcie, výrobné organizácie a vysoké školy).

Práca je podporovaná grantom MŠ SR VEGA (2/0109/10).

7L-09

TRINÁŠŤ ROKOV VÝROBY DUSANTOXU L

**JÁN UHLÁR, VIERA ANDRUŠKOVÁ
a PETER LEHOCKÝ**

*VUCHT, a.s. Bratislava, areál Duslo Šaľa 927 03, Slovensko
juhlar@vucht.sk*

V nadväznosti na v roku 1985 realizované rozsiahle výrobné kapacity antidegradantov na báze *p*-fenyldiamínu (PPD) a *N*-cyklohexyltioftalimidu (1990) (NCHTFI) sa zhruba v polovici deväťdesiatych rokov minulého storočia v Duslo Šaľa (SK) zintenzívnili výskumné práce majúce za cieľ nájsť širšie využitie týmito technológiami vyrábaných medziproduktov a hotových výrobkov. Záujem sa sústredil a produkt *N*-(1,3dimetylbutyl)-*N'*-feryl-*p*-fenyldiamín (6PPD) ako aj na významnejšie medziprodukty tzv. Ouchi procesom vyrábaného 6PPD. V prípade 6PPD boli práce sústredené na zlepšenie jeho antidegradačných vlastností prostredníctvom zníženia jeho migrácie v gume z dôvodu zvýšenia mólovej hmotnosti realizovanej cestou alkylácie vybranými alkénmi¹. Výsledkom riešenia bol nakoniec za normálnych podmienok kvapalným zmesovým reakčným produkt 6PPD s α -metylstyrenom nazvaný Dusantox L ako výborný antioxidant a antiozonant pre ochranu pneumatikových suchých zmesí²⁻⁴. Jeho kvapalným stavom⁵ ho priam predurčil na stabilizáciu SBR latexov a polyizoprenových kaučukov. Najvýraznejšie uplatnenie počas nepretržitej trinásťročnej výroby našiel v stabilizácii SBR v Českej republike, kde bol aj nakoniec skôr registrovaný pod reg. číslom 26103-02 podľa vtedy platného zákona o chemických látkach a prípravkoch ČR 157/1998 ako na Slovensku.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0446-07.

LITERATÚRA

1. Humplik A.: *Výskumná správa VÚCHT a.s. Bratislava na objednávku Duslo a.s. Šaľa č. K 0200012*, 1995.
2. Zušťáková J., Uhlár J., Lehocký P.: Zmesný kvapalným stabilizátor bočnicových zmesí, *DNT 95 Matador Púchov*, 24.-25. mája 1995.
3. Uhlár J., Andrušková V., Lehocký P., Svoboda J.: Dusantox-L v bočnicovej zmesi, *SRC 97 Matador a.s. Púchov*, 20.-21. mája 1997.
4. Andrušková V., Uhlár J., Lehocký P., Svoboda J.: Ochranný účinok Dusantoxu L v latexoch SBR a v bočnicovej zmesi na báze SBR, *SRC 98 Matador a.s. Púchov*, 26.-27. mája 1998.
5. Lehocký P., Zušťáková J., Uhlár J.: Sk patent č. 279 532, 2.12.1998, PV 1222 – 1995.

7L-10

PROBLEMATIKA OBECNÉ CHEMIE Z HLEDISKA CHEMICKÉHO VZDĚLÁVÁNÍ**KLÁRA URBANOVÁ a HANA ČTRNÁCTOVÁ***UK v Praze - Přírodovědecká fakulta, Albertov 6, Praha 2
urbanklara@seznam.cz*

Koncepce výuky chemie, která v současnosti zcela převažuje na všech stupních chemického vzdělávání, výrazně preferuje výuku obecné chemie jako výchozí disciplíny, na níž by měly všechny další části učiva chemie navazovat. Poznatky obecné chemie vypovídají o takových jevech, látkách a dějích, které většinou nejsou přímo dostupné našemu pozorování. Tím se výrazně zvyšuje obtížnost výuky a snižuje se míra porozumění a pochopení obecné chemie žáky a studenty. Přitom je tato část chemie nejen výchozím učivem, ale i učivem poměrně rozsáhlým. Na středních i základních školách je obecné chemii věnováno minimálně 30 % výuky, stejně jako na vysokých školách chemického zaměření¹. Výuka obecné chemie tedy významně ovlivňuje první dojem, který žáci a studenti o oboru chemie získávají. S tím pak úzce souvisí i dlouhodobý trend, kdy se chemie umísťuje na základních a středních školách mezi nejméně oblíbenými předměty a vysoké školy chemického zaměření se potýkají s malým počtem přihlášených studentů.

Proto se snažíme hledat prostředky, které by pomohly zvýšit jak názornost a efektivitu výuky, tak i atraktivitu této části chemie². Je známo, že jedním z nejvíce efektivních didaktických prostředků je chemický experiment. Bohužel v učivu obecné chemie je mnoho částí, kde experiment nelze využít. Snažíme se tedy najít pro tyto části učiva vizuální znázornění, která by pomohla zvýšit porozumění danému učivu. Jsou to především různá zobrazení tvarů molekul, grafy (týkající se hlavně vlastností prvků a sloučenin), dále pak schémata a jednoduché animace chemických procesů. Tyto neverbální prvky následně spojujeme do výukových celků, vytvořených v programu MS PowerPoint, které jsou přímo využitelné v reálné výuce³. Takto vytvořené materiály pak ověřujeme především z hlediska jejich vlivu na efektivitu výuky. Z výsledků vyplývá pozitivní vliv na míru porozumění učivu ze strany žáků a zároveň i zvyšování jejich zájmu o chemii⁴. I když tento zájem je vyšší především v počátcích užívání nových materiálů a má tendenci se časem snižovat, přesto lze jejich celkový přínos hodnotit velmi pozitivně.

Tato práce vznikla za podpory projektu CZ.1.07/1.3.04/0040 OPVK MŠMT.

LITERATURA

1. Čtrnáctová H., Zajiček J.: Chem. Listy, v tisku.
2. Craig R. J., Amernic J. H.: Innovative Higher Education 31 (3), 147 (2006).
3. Urbanová K., Čtrnáctová H.: *Stavba a vlastnosti látek – prezentace v programu PowerPoint*. Univerzita Karlova, Praha 2007.
4. Urbanová K., Čtrnáctová H.: Problems of Education in the 21st Century. 17 (17), 203 (2009).

7L-11

VÝUKA OBECNÉ A ANORGANICKÉ CHEMIE NA FCHT UNIVERZITY PARDUBICE**MIROSLAV VLČEK^a a VLADIMÍRA VLČKOVÁ^b**

^a *Katedra obecné a anorganické chemie*, ^b *Katedra ekonomiky a managementu chemického a potravinářského průmyslu, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice
miroslav.vlcek@upce.cz*

V této práci autoři rozebírají současný stav výuky obecné a anorganické chemie na Fakultě chemicko-technologické Univerzity Pardubice v bakalářských studijních oborech. Vlastní náplň této vědní disciplíny je rozdělena do dvou samostatných celků/předmětů. První, vyučovaný ihned v zimním semestru 1. ročníku studia, označovaný jako „Obecná a anorganická chemie I“ (dále OAnCh I), absolvují povinně všichni studenti, kteří se zapsali do studia v kterémkoliv z 10 studijních bakalářských programů vyučovaných v tomto roce na FCHT. Předmět je tak jedním z prvních a pro mnohé studenty „prubířským“ předmětem jejich schopnosti přejít na vysokoškolský způsob studia. Úspěšnost, resp. neúspěšnost v tomto předmětu je tak pro mnohé studenty stimulačním/deprimujícím prvkem pro jejich další studium. Předmět Obecná a anorganická chemie II (dále OAnCh II) je pak pro povinný v letním semestru 1. ročníku studia pouze pro studenty 2 studijních programů. Posluchači studijního programu Chemie a technická chemie si ho mohou zapsat jako povinně volitelný ve 4. semestru jejich studia.

Hodnocení výuky je zde provedeno jak z pohledu hlavního autora tohoto příspěvku, který oba předměty přednáší, tak z pohledu samotných studentů. V této části se vychází z druhým autorem provedeného statistického rozboru dotazníkových průzkumů mezi studenty na konci přípravného kurzu, tj. na začátku studia a vždy na konci semestru, ve kterém se vyučoval daný předmět (OAnCh I resp. OAnCh II). V nich se zjišťovala náročnost jednotlivých probíraných témat na přednáškách a seminářích, náročnost ročníkových písemných prací, efektivnost a míra využití přednášejícím poskytovaných e learningových materiálů („neúplné“ texty přednášek, příklady k samostudiu s věcnými poznámkami atd.), dostupnost studijní literatury. V neposlední řadě je pak proveden rozbor úspěšnosti při zkouškách a nejčastější příčiny případného neúspěchu studentů na těchto zkouškách.

V závěru jsou diskutovány konkrétní kroky prováděné v současné době pro zlepšení kvality výuky obou předmětů, a to jak na přednáškách, tak na seminářích s cílem celkově zvýšit úspěšnost studia obecné a anorganické chemie cestou dosažení vyššího stupně pochopení probírané látky bez zbytečného mentorování a s ohledem na budoucí potřeby absolventa bakalářského studijního programu.

7L-12

**HISTÓRIA A SÚČASNOSŤ VÝSKUMU A VÝROBY
BENZOTIAZOLSULFÉNAMIDOVÝCH
URÝCHĽOVAČOV V SR****ŠTEFAN WENCHICH, STANISLAV PODMANICKÝ,
EUBICA MUNTÁGOVÁ a MIROSLAV PETERKA***VUCHT a.s., Nobelova 34, 836 03 Bratislava
swenchich@vucht.sk*

Benzotiazolsulfénamidové urýchľovače sa používajú od roku 1925 a patria k najviac používaným typom vo výrobe pneumatík¹. Tieto výrobky sú vyrábané aj na Slovensku od roku 1950 v ISTROCHEM (v minulosti CHZJD, teraz ako o.z. Duslo a.s), pričom všetky technológie výroby sú z vlastného výskumu a vývoja².

- 1948: Začiatok budovania výroby 2-merkaptobenzotiazolu (2-MBT) s využitím poznatkov od fy Baťa (už vtedy ako kontinuálna výroba).
- 1953: Zriadenie závodného výskumu v rámci chemických závodov J. Dimitrova a začiatok systematického výskumu v oblasti gumárskych chemikálií.
- 1954: Ukončená nová výrobná Kaptaxu (2-MBT).
- 1958: Začiatok výroby *N*-cyklohexyl-benzotiazolyl-2-sulfénamid (CBS, šaržovitý postup, 300 t/r).
- 1962: Ukončená výstavba novej výroby 2-MBT s rafináciou cez vápenatú soľ (2500 t/r Ca soli).
- 1963: Ukončená výstavba novej jednotky CBS/30.
- 1975: Nový typ rúrkového reaktora na prípravu 2-MBT.
- 1981: Ukončenie riešenia úlohy: príprava CBS priamo z taveniny s prebytkom cyklohexylamínu, ktorý slúži jednak ako reaktant, jednak ako rafinačné činidlo (VUCHT).
- 1992, 1993: nábeh novej jednotky CB.
- 1993 – doteraz: Inovačné zlepšenia procesu³.

V období ostatných desiatich rokov bola významná pozornosť venovaná výskumu a vývoju technológie výroby 2-merkaptobenzotiazolu (2-MBT), *N-terc*.butyl-benzotiazolyl-2-sulfénamidu (TBBS) a *N*-cyklohexyl-benzotiazolyl-2-sulfénamidu (CBS) a vo VUCHT sa riešili technológie s inými oxidačnými činidlami ako je chlórnan sodný.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0168-07" (projekt: EETBBS) a spolufinancovateľom projektu: Duslo a.s. Šaľa. Obom vyjadrujú autori poďakovanie.

LITERATÚRA

1. Datta R. N.: *Rubber Curing Systems (Rapra Review Reports)*. Smithers Rapra Technology, 2002 and references therein.
2. Jambrich M. a spol.: *História rozvoja spracovania kaučukov, gumárskej výroby a gumárskych prísad na Slovensku*, Zväz chemického a farmaceutického priemyslu Slovenska, Slovenská spoločnosť pre priemyselnú chémiu Bratislava, Chemicko-technologická fakulta STU, Bratislava, Fakulta priemyselných technológií TrU, Púchov, Bratislava 1999.

3. a) SK 280367 (1995); b) SK 278 224 (1995); c) SK 278 347 (1995); d) SK 280365 (1995); e) SK 280 087 (1995); f) SK 278 370 (1995); g) SK 278 586 (1995); h) SK 278 656 (1991); i) SK 261 448 (1988).

7P-01
POSSIBILITIES AND LIMITS OF VIRTUAL
MEASURING IN EARLY CHEMISTRY EDUCATION

MARTIN BÍLEK and **PETRA SKALICKÁ**

*Department of Chemistry, Faculty of Education, University of Hradec Králové, Rokitanského 62, 500 03 Hradec Králové
 martin.bilek@uhk.cz*

The application of virtual measuring environments in early chemistry education is a current challenge for school curriculum in the period of information society. Possibilities of virtual (simulated and/or animated) school chemical experiments and their combinations with the real experiments we are analyzing in new research project¹. The project design, including pilot results, can be presented on the example of laboratory work “pH measuring”². Two as much as identical scenarios were prepared using either real or virtual pH-meter, managed by worksheets containing tasks of three levels: pH measuring of different solutions, answers to problem-based questions and open-task to create set of next pH measuring.

The analysis of pupils' results on Level 1 unreservedly verified our hypothesis. In pH values collected from real and virtual pH-meters no statistically significant differences appeared. On Level 2, which focused on problem-solving tasks based on previous activities and pupils' common experience, statistically significant differences were identified between groups working in either real or virtual environment in the first round of measurements. Results of Level 3 were tensely expected, as they were to provide proposals for follow-up measurements, procedures, explaining consequences etc. More proposals were recorded just in the virtual environment. Although it was obvious from direct observations, pupils asked more frequently about other possibilities of working with the real pH-meter, they did not write down the questions to the worksheets.

The feasible real experiment should not be in any way eliminated from school laboratory practice. On the other hand it is impossible to avoid indirect observations and working with models and computer simulated instruments. Researching these fields leads, or not, to proving intuitive estimations, which is important, as well as answering other questions which result from this area of potential assets and threats.

The article was published with support of the Grant Agency of the Czech Republic Project (GA ČR) Nr. 406/09/0359 and Specific Research Project of Faculty of Education, University of Hradec Králové.

REFERENCES

1. Bílek M. et al.: *Interaction of Real and Virtual Environment in Early Science Education: Tradition and Challenges*. Gaudeamus, Hradec Králové 2009.
2. Bílek M., Skalická P.: Real, Virtual Laboratories together in General Chemistry Education: Starting Points for Research Project. *Problems of Education in the 21st Century*, Vol. 16, s. 30 – 39 (2009).

7P-02
INTERAKTIVNÍ ELEKTRONICKÉ TESTY
Z ORGANICKÉ CHEMIE

RADEK CIBULKA^a, BEDŘICH KOŠATA^b, HANA
KOTOUČOVÁ^c a FRANTIŠEK LIŠKA^c

^a Ústav organické chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6,

^b Laboratoř informatiky, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, ^c Katedra chemie a didaktiky chemie, Pedagogická fakulta, Univerzita Karlova v Praze
 cibulka@vscht.cz

Jednou z nejdůležitějších schopností, kterou by měl student získat absolvováním předmětu "Organická chemie", je porozumění „řeči vzorců“. Pro osvojení této dovednosti je naprosto nezbytné, aby studenti při studiu aktivně kreslili vzorce. Bohužel právě tato funkce byla donedávna zapovězena webovým elektronickým materiálům. Nebyly totiž dostupné nástroje, které by umožňovali snadné a pohodlné kreslení v prostředí webového prohlížeče. Tato situace se naštěstí v poslední době změnila a je k dispozici několik možných nástrojů, které tuto funkcionalitu umožňují.

V prezentaci bude představen internetový portál¹ umožňující studentům testovat své znalosti z organické chemie prostřednictvím interaktivních testů vyžadujících aktivní zapojení při kreslení chemických struktur. Výhodou portálu je okamžité vyhodnocování odpovědí, ve studijním modu je zobrazována správná odpověď. Příklady jsou rozděleny do tří obtížností a do kategorií podle typu sloučenin či reakcí. Portál je vhodný pro studenty organické chemie na vysokých školách a rovněž pro středoškoláky s hlubším zájmem o chemii.

Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy za finanční podporu (projekt č. C57).

LITERATURA

1. <http://ich.vscht.cz/projects/och>

7P-03
CHEMICKÉ VZDELÁVANIE V ŠTUDIJNOM
PROGRAME ENVIRONMENTALISTIKA

MELÁNIA FESZTEROVÁ

*Univerzita Konštantína Filozofa, FPV, Katedra chémie, Tr. A. Hlinku 1, 949 74 Nitra
 mfeszterova@ukf.sk*

Výrazné sociálno-ekonomické zmeny, znečisťovanie prírodných zdrojov, vnášanie cudzorodých látok do prostredia, zásahy do krajiny, hromadenie odpadov to všetko má nepriaznivý dopad na životné prostredie. Chemický priemysel patrí do skupiny priemyselných odborov spojených s únikom rozličných látok a plynov, ktoré nie sú prirodzenou zložkou životného prostredia¹. Negatívne účinky chémie, chemizácie a chemických procesov na životné prostredie sa stávajú nebezpečím pre život a zdravie ľudí². Je preto potrebné, aby mladá generácia bola vzdelávaná vo všetkých prírodovedných

disciplínach.

Bakalársky študijný program "Environmentalistika" je odborne a didakticky zameraný tak, aby absolvent získal potrebné vedomosti nielen z oblasti environmentalistiky, ale aj z ostatných disciplín. Profesná príprava je dlhodobý a rôznorodý proces, ktorého súčasťou sú aj chemické disciplíny. Disciplína "Všeobecná chémia" je orientovaná nielen na oblasť chémie, jej úlohou je oboznámiť študentov s možnosťou aplikácie získaných poznatkov v praxi, v zložkách životného prostredia. S ohľadom na sebarealizáciu budúcich absolventov rozširuje ich vedomosti o tie, ktoré sa dajú uplatniť v každodennom živote napr. vplyv kyslých dažďov na životné prostredie, význam redoxných dejov v životnom prostredí a ďalšie.

Práca vznikla za podpory projektu „Vybudovanie Centra pre výskum a rozvoj všeobecného prírodovedného vzdelávania“ financovaného z Fondu CVV na FPV UKF v Nitre.

LITERATÚRA

1. Bobro M., Matanin J.: Ochrana ovzduší 6, 133 (1992).
2. Prousek J.: *Rizikové vlastnosti látok*, s. 76. STU, Bratislava 2001.

7P-04

VÝZNAM VEDECKÝCH PODUJATÍ PRE ŠTUDENTOV

MICHAL GALAMBOŠ^a a **VLADIMÍRA DŽUGASOVÁ^b**

^a Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra jadrovej chémie, ^b Katedra mikrobiológie a virológie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava galambos@fns.uniba.sk

Študentské vedecké konferencie majú na Prírodovedeckej fakulte Univerzity Komenského v Bratislave, ktorá je ich organizátorom, dlhú tradíciu. Ide o vedecké podujatie s medzinárodnou účasťou. Výstupom podujatia je recenzovaný zborník príspevkov s ISBN, ktorý obdrží každý aktívny účastník konferencie. Recenzentmi sú renomovaní odborníci v jednotlivých prírodovedných oblastiach. Komisia zložená z docentov a profesorov fakulty vyberie za každú sekciu jeden príspevok, autor ktorého dostane vecnú resp. finančnú cenu a diplom za najlepší príspevok konferencie v danej sekcii. Fakulta tieto konferencie na svojej pôde usporadúva už niekoľko desaťročí. Termín konania sa pripravovaného vedeckého podujatia je stanovený na 28. apríla 2010. Miestom konania, tak ako po minulých ročníkoch je pôda fakulty.

Zameranie konferencie pokrýva široké spektrum prírodovedných oblastí, a to: biológiu (antropológia, botanika, fyziológia rastlín, genetika, mikrobiológia, virológia, molekulárna biológia, zoológia, živočíšna fyziológia, etológia), biotechnológie, chémiu (analytická chémia, anorganická chémia, biochémia, fyzikálna a teoretická chémia, jadrová chémia a rádioekológia, organická chémia), geológiu (aplikovaná a environmentálna geofyzika, geológia, paleontológia, hydrogeológia, inžinierska geológia, ložisková geológia, mineralógia, petrológia), geografiu (fyzická geografia, geoekológia, humánna geografia, demogeografia, kartografia, geoinforma-

tika, diaľkový prieskum zeme, regionálna geografia, ochrana a plánovanie krajiny), environmentalistiku (eksozológia, fyziotaktika, geochemia, krajinná ekológia, pedológia), didaktiku prírodných vied, psychológia a pedagogiky.

Cieľom konferencie je poskytnúť študentom príležitosť verejne prezentovať výsledky svojej vedeckej práce. Študenti svojou aktívnou účasťou získavajú praktické skúsenosti pri formulovaní záverov, zovšeobecňovaní výsledkov a učia sa prezentovať dosiahnuté výsledky a seba ako osobnosť. Získavajú prehľad o stave výskumu aj na iných vedeckých pracoviskách.

Účastníkmi konferencie sú študenti bakalárskeho, magisterskeho a doktorandskeho štúdia, a to nielen z PriF UK, ale aj z iných univerzít, vrátane účastníkov z okolitých krajín. Počet aktívnych účastníkov z roka na rok rastie. V roku 2009 to bolo viac než 800 účastníkov, z čoho takmer polovicu predstavovali prezentujúci študenti. Podujatie má značný edukačný význam aj pre neprezentujúcich účastníkov. Študentské vedecké konferencie na PriF UK začínajú čoraz viac navštevovať aj študenti stredných škôl a gymnázií.

Študentská vedecká konferencia Prírodovedeckej fakulty Univerzity Komenského 2010 sa bude konať 28. apríla 2010 pri príležitosti 70. výročia od jej vzniku.

7P-05

NOVÉ A OBNOVITEĽNÉ ZDROJE ENERGIE V PROJEKTOVOM VYUČOVANÍ

JÚLIA KALAFUTOVÁ a **MÁRIA GANAJOVÁ**

Oddelenie didaktiky chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Safárika v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice julia.kalafutova@upjs.sk

Cieľom príspevku je informovať o možnostiach výučby témy Nové a obnoviteľné zdroje energie prostredníctvom projektového vyučovania. V rámci projektu KEGA č. 3/6301/08 „Vzdelávanie učiteľov chémie a prírodovedných predmetov k vybraným témam trvalo udržateľného rozvoja“ sa v súlade s požiadavkami Štátneho vzdelávacieho programu dôraz kladie na prierezové témy (napr. energia, voda, apod.) a na metódy aktívneho poznávania. Jednou z nich je metóda projektového vyučovania¹.

Projektové vyučovanie vnímame ako jednu z koncepcií skúsenostného vyučovania. Je charakterizované najvyšším stupňom samostatnosti poznávacej činnosti žiakov. Patrí medzi aktivizačné metódy, ktoré rozvíjajú kľúčové kompetencie žiakov v požadovanom obsahu a rozsahu na akomkoľvek stupni školy².

Pre realizáciu projektového vyučovania k tejto téme sme pre učiteľov chémie pripravili štrukturované učebné texty, experimenty, pracovné listy, ako aj elektronické výučbové materiály prístupné na stránke <http://kekule.science.upjs.sk>, ktoré využili pri tvorbe projektových prác žiakov k projektovej súťaži realizovanej v rámci projektu KEGA.

K téme Nové a obnoviteľné zdroje energie boli vypracované nasledovné práce: Nalaď sa modrá planéta na zelenú vlnu? Načerpajte mi bionaftu, prosím! Biopalivá ako možná náhrada fosílnych palív. Perspektívy a riziká!

Poznatky získané z tvorby didaktických materiálů, tvorby elektronických výučbových zdrojů k této téme a z tvorby prezentací závěrečných prací jsme využili při tvorbě didaktického materiálu „Nové a obnovitelné zdroje energie vo výučbe chémie“ a metodické příručky „Projektové vyučovanie v chémii“. Metodická příručka bude sloužit k výučbe novokoncipovaného predmetu na základnej škole „Tvorba projektu a prezentačné zručnosti“ a nachádzajú sa v nej vzorové návrhy projektových prací, možnosti ich realizácie, vyhodnotenia, ako aj medzipredmetové vzťahy k danej téme. Súčasťou príručky je aj súbor chemických experimentov k vybranej problematike.

Táto práca vznikla za podpory grantu KEGA č. 3/6301/08 a LPP-0131-06.

LITERATÚRA

1. Bajtoš J.: *Kapitoly zo všeobecnej didaktiky*. Equilibria, Košice 2007.
2. Šulcová R., Böhmová H., Pisková D.: *Aktivizace v chemickém vzdělávání: projektové vyučování, pomůcky a hry, školní projekty, netradiční experimenty*. Univerzita Karlova, Praha 2007.

7P-06

PŘÍBĚH KAPKY: CESTA K NOBELOVĚ CENĚ PŘES PADAJÍCÍ RTUŤOVÉ KAPÍČKY

KVĚTOSLAVA STEJSKALOVÁ^a, MICHAEL HEYROVSKÝ a ROBERT KÁLVODA

*Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejšková 2155/3, 182 23 Praha 8
kvetoslava.stejskalova@jh-inst.cas.cz*

Putovní výstava s názvem Příběh kapky¹ se snaží připomenout a přiblížit návštěvníkům osobnost Jaroslava Heyrovského (20. 12. 1890 – 27. 3. 1967) nejen jako vědce, ale i jako člověka. Expozice je uspořádána z dokumentů, které byly po dlouhá léta uloženy v archivu Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, řada informací byla čerpána z knih o Jaroslavu Heyrovském, které napsal jeho žák Jiří Koryta² či z vyprávění dalších žáků či spolupracovníků³ J. Heyrovského. Vystavena je desítka různých polarografů z let 1924 až po 90. léta, fotografie a písemné dokumenty, knihy a publikace a filmový materiál. Pro výběr exponátů tým prohlédl téměř 10 kg písemných materiálů, 200 fotografií, 150 diapositivů a 6 km celuloidových filmů z 50. a 60. let a desítku polarografů. První přípravy začaly již počátkem roku 2008 a výstava měla svou komorní předpremiéru v listopadu 2008 v rámci Týdne vědy a techniky organizované AV ČR v prostorách budovy na Národní třídě. Vzbudila poměrně značný zájem u návštěvníků této akce, a tak se autorský tým rozhodl její uspořádání v roce 2009 dotáhnout do konce a nabídnout ji v rozpracovanější podobě veřejnosti na několika místech České republiky.

Expozice je tvořena sadou dvanácti plakátů (formát A0), které přibližují návštěvníkovi život a vědeckou práci Jaroslava Heyrovského. Rodinou Heyrovských byly k pořízení kopií zapůjčeny fotografie z rodinného alba. Druhou část expozice

tvoří přístroje (vývojová řada 8–10 polarografů), skleněné polarografické nádoby, diapositivы, se kterými polarografisté přednášeli, ukázky knih a publikací o polarografii v různých světových jazycích. Filmy zhotovené v 50. a 60. letech dokumentující Heyrovského výzkum jsou promítány v třetí části expozice ve formě nekonečné smyčky. Výstava je doplněna doprovodným programem řady popularizačních přednášek nejen o Jaroslavu Heyrovském a jeho výzkumu v oboru polarografie, ale i o současné vědě a výzkumu v oboru fyzikální chemie, kterou se vědci v ÚFCH JH zabývají dnes.

V roce 2009 byla výstava úspěšně instalována v Pardubicích, Brně a v Praze a celkem ji navštívilo téměř 4700 návštěvníků. V roce 2010 bude pokračovat expozicemi v Olomouci, případně i Ostravě, a u příležitosti 120. výročí narození J. Heyrovského se v prosinci opět vrátí do Prahy. Aktuální informace o výstavě přináší webové stránky (<http://www.jh-inst.cas.cz/heyrovsky>).

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR 2E08038.

LITERATURA

1. Stejskalová K.: Chem. Listy 103, 898 (2009).
2. Koryta J.: *Jaroslav Heyrovský*. Melantrich, Praha 1990.
3. Kalvoda R.: Chem. Listy 103, 880 (2009).

7P-07

VÝVOJ A MONITOROVÁNÍ CHEMICKÝCH TESTOVÝCH ÚLOH PRO STÁTNÍ MATURITU V ČR

MARIE VASILESKÁ^a, RENATA ŠULCOVÁ^b a BARBORA ZÁKOSTELNÁ^{b*}

*^a Centrum pro zjišťování výsledků vzdělávání (CERMAT) Jeruzalémská 12, 110 00 Praha 1, ^b Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Albertov 6, 128 43 Praha 2
Z.Barborka@seznam.cz*

Od roku 2001 probíhají v rámci cyklu podpůrných programů k nové maturitě výzkumná šetření, která monitorují na celostátním vzorku studentů středních škol očekávané znalosti a dovednosti žáků z chemie, a to ve třech kategoriích: (1) znalost s porozuměním, (2) aplikace poznatků a řešení problémů a (3) práce s informacemi. Jedná se o okamžitou reflexi na úkoly, stanovené v Katalogu chemie pro maturitní zkoušku^{2,3}. Nejnovější katalog³ platný od roku 2009/2010 je v pořadí již třetím (ze zákona musí být katalog vydán 2 roky před maturitní zkouškou) a definuje maturitní požadavky tak, aby si je mohli osvojit žáci bez ohledu na typ navštěvované školy i programového dokumentu, z něhož vychází vzdělávací program dané školy. Dále jsou zohledněny i možnosti, že výsledky státní maturitní zkoušky z chemie se mohou stát součástí přijímacích kritérií na vysoké školy.

V říjnu 2009 byla prezidentem republiky podepsána novela školského zákona kodifikující odklad spuštění nové maturitní zkoušky na rok 2011. Tím se značně rozšířil prostor pro autorské kolektivy na vytvoření, realizaci a ověření nových souborů chemických testových úloh pro státní maturitu. Ze statisticky podložených výsledků ověřených úloh, vytvořených našim kolektivem, vyplynulo, že dobře vytvořené

didaktické testy se mohou opravdu stát nástrojem pro zjišťování úrovně znalostí a dovedností žáků v chemii.

Zkušební testy jsou sestavovány tak, aby svou strukturou reprezentovaly všechny možné typy úloh. Výchozí texty úloh, se kterými se žák v maturitní zkoušce z chemie bude setkávat, by měly zahrnovat krátké charakteristiky vážící se též k problematice tematického celku Chemie kolem nás, která je vřazena do klasických čtyř okruhů učiva chemie obecné, anorganické, organické a biochemie. Předpokládáme, že v ostré maturitní zkoušce budou pro každé zkušební období testy parametrizovány a standardizovány, složení úloh bude mít jednotný charakter (počet částí, počet úloh v částech, délky výchozích textů, rozmanitost témat, obtížnost atd.).

LITERATURA

1. Vasileská M.: Hodnocení v chemii jako součást nové státní maturity v ČR, V: *ChemZi 5/9 2009 V. Tatry*, s. 97. Bratislava 2009.
2. Katalogy požadavků zkoušek společné části maturitní zkoušky: *Chemie*. MŠMT (2000, 2005).
3. Katalog požadavků zkoušek společné části maturitní zkoušky platný od školního roku 2009/2010: *Chemie*. MŠMT (2008).

8IL-01 NOVÉ PYROLÝZNE TECHNOLOGIE NA ZHODNOCOVANIE BIOMASY

MARTIN BAJUS

Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie, Oddelenie technológie ropy a petrochémie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava martin.bajus@stuba.sk

Aplikácia pyrolýznych procesov na spracovanie lignocelulózovej biomasy vedie k celému radu cenných a užitočných kvapalných a tuhých derivátov a plynových palív. Už v roku 1950 sa pri pyrolýze dreva identifikovalo viac než 200 chemických látok. Ešte pred nástupom petrochémie na začiatku dvadsiateho storočia sa termochemické technológie komerčne využívali na výrobu širokého spektra palív, rozpúšťadiel, chemikálií a ďalších špecifických produktov z biomasy. K obnoviteľnému záujmu v moderných variantoch o termochemické technológie vedú pretrvávajúce globálne problémy spojené s intenzívnym využívaním hlavne fosílnych palív v minulom storočí (globálne otepľovanie, postupné vyčerpávanie prírodných zdrojov, zaistovanie zásob energie a surovín pre budúce generácie). Skutočnosť, že komponenty biomasy reagujú rozdielne pri odlišných teplotách za vzniku bohatého spektra produktov, sa môže využiť na získanie cenných chemikálií z biomasy. To je obnoviteľná cesta k produktom, s ktorými uvažujeme v budúcnosti ako jednu z možností petrochemickej náhrady. Konceptia postupného splynovania / odplynovania je nízkoteplotnou termochemickou cestou získavania cenných (hlavne kyslíkových) chemikálií z lignocelulózovej biomasy.

Reprezentatívne zložky biomasy, akými sú hemicelulóza, celulóza a lignín sa môžu rozložiť na hodnotné chemikálie. Tento termický rozklad sa riadi termochemickou stabilitou jednotlivých zložiek biomasy, ktorá sa mení od hemicelulózy (rýchle splynovanie/ rozklad od 200 do 300 °C), ako najmenej stabilného polyméru, k stabilnejšej celulóze (rýchle splynovanie/ rozklad od 300 do 400 °C). Lignín prejavuje prechodnú termickú degradáciu (postupné splynovanie/ rozklad od 250 do 500 °C).

Technológie uplatňujúce rýchlu pyrolýzu, v ktorých sa biomasa vyhreje na teplotu okolo 500 °C, umožňujú takmer okamžite získať obrovské množstvo rozkladných produktov. Následným schladením vycondenzujú kvapalné podiely známe ako pyrolýzny olej alebo bioolej. Dnes je už zrejme, že izolácia a následné spracovanie cenných chemikálií z komplexnej zmesi kvapalných pyrolýznych produktov je v súčasnosti nielen veľkou výzvou ale i príležitosťou dostať sa k atraktívnym oxygenátom. Zatiaľ čo rýchla pyrolýza biomasy sa prednostne využíva na maximálne výťažky kvapalných produktov (bioolejov), postupné splynovanie/ odplynovanie je zamerané na citlivé uvoľňovanie prchavých podielov rozkladu biomasy. V dôsledku relatívne miernych podmienok vznikajúce spektrum produktov je jednoduchšie a stabilnejšie. Menšia je aj náchylnosť k priebehu neželaných sekundárnych reakcií v porovnaní s rýchlou pyrolýzou prebiehajúcou za tvrdších podmienok, kedy všetky tri zložky biomasy sa rozkladajú simultane pri rovnakej teplote. Medzi zaují-

mavé a cenné chemikálie, ktoré vznikajú termochemickým rozkladom cukrového podielu biomasy (hemicelulózy a celulózy) patria levoglukozán a furfural.

Hoci na výrobu furfuralu je v súčasnosti známych niekoľko termochemických „suchých“ procesov, moderné komerčné procesy vychádzajú najčastejšie z vodnej fázy hydrolyzy/dehydratácie pri relatívne nízkych teplotách (okolo 200 °C) za použitia kyseliny sírovej ako katalyzátora. Tým zostáva jedine anhydrocukor levoglukozán (dehydratovaná glukóza), ako najzaujímavejší kandidát, ktorý by sa mohol vyrábať priamo z karbohydrátovej frakcie biomasy postupnou degazifikáciou alebo pyrolýzou. Alternatívne postupná degazifikácia by sa mohla zamerať aj na výrobu skupiny chemikálií, ktoré by si svoje vlastnosti mohli vylepšiť v existujúcich (petro) chemických procesoch, napríklad selektívnou hydrogenáciou. Do uvedenej skupiny patria karboxylové kyseliny (mravčia, octová, propiónová), furány (furfural, furfurylalkohol, furanón, hydroxymetylfurfural), C2, C3 a C4-oxygenáty (hydroxyacetaldehyd, glyoxal, acetal), anhydrocukry (hlavne levoglukozán), fenol, krezoly, aromatické aldehydy, ktoré potencionálne vznikajú termochemickým rozkladom produktov z lignínu. Je samozrejme, že delenie a následná rafinácia (zušľachťovanie) tejto skupiny chemikálií patria medzi ľahšie a lacnejšie operácie v porovnaní izoláciou jednotlivých chemikálií z komplexnej zmesi produktov termického rozkladu.

Medzi produktmi tepelného rozkladu lignocelulózovej biomasy sa nachádzajú: metanol, karboxylové kyseliny (octová kyselina, kyselina mravčia), ďalšie oxygenáty (acetaldehyd, metylmravčan, metylacetát, etylacetát, propanol, aceton, 2-butenal, hydroxyaceton (acetól), 1-hydroxy-2-butanón, furany (alfa angelica laktón, 5-metyl-2(3H)-furanón, furfural, 5-metyl-2-furalaldehyd, furfurylalkohol, 2(5H)-furanón, hydroxymetylfurfural), levoglukozán, fenoly (2-metoxifenol (guaiaicol), 4-metylguaiacol, fenol, eugenol, 3-etylphenol, 2,6-dimetoxylphenol, izo-eugenol, pyrokatechol, syringaldehyd, hydrochinón), deriváty arómatov (3,4,5-trimetoxytoluén, 1,2,4-trimetoxybenzén). Pre analyzované vzorky je typické, že 40 až 60 % podielu zostáva nezanalyzované. Levoglukozán je kryštalická látka s teplotou topenia 179 °C. Vyznačuje sa otáčavosťou do ľava (alfa)D = – 66,2 stupňov, z čoho vznikol aj názov. Levoglukozán, alebo beta-glukozóza je 1,6-beta anhydroglukóza. Pripravuje sa vakuovou destiláciou beta-D-glukózy, ako aj z beta-glukozidov, oligosacharidov a polysacharidov a čiastočne buničiny. Levoglukozán sa používa na syntézu lineárnych dextrínov, opticky aktívnych ligandov, aktívnych segmentov antibiotík, levoglukozénu, biotínu (vitamín H), chemických špeciálov, polyuretánov, oxozlúčenín a povrchovo aktívnych látok.

Pre zhodnocovanie biomasy novými termochemickými procesmi je v súčasnosti k dispozícii široká škála reaktorov. Najlepší spôsob výroby zatiaľ nie je špecifikovaný. Reaktory s fluidným lôžkom sú robustné s pestrou veľkosťou a dizajnom. Riešia sa v nich problémy sprestupom tepla, hlavne pri veľkokapacitných usporiadaniach. Mechanické systémy pri ablatívnych, rotačne-kuželovitých a skrutkovnicových reaktoroch majú výhody v kompaktnosti pri realizácii bez fluidizačného plynu.

Rád by som poďakoval Grantovej agentúre Slovenskej republiky (VEGA) za finančnú podporu. Práca vznikla vďaka vedeckému projektu No 1/0012/09.

8IL-02**KONKURENCESCHOPNÝ CHEMICKÝ PRŮMYSL V ČESKÉ REPUBLICE, ANO, ČI NE?****LADISLAV NOVÁK**

*Svaz chemického průmyslu České republiky, Dělnická 12, 170 00 Praha 7
ladislav.novak@schp.cz*

Česká chemie, jako součást chemického průmyslu EU, patří mezi sektory, které čelí globální a velmi tvrdé konkurenci. Jak se na její další působení podívat v horizontu příštích 15 až 20 let? Má vůbec chemický průmysl v tomto regionu šanci na udržení, rozvoj a na posílení své konkurenceschopnosti vůči zbytku světa?

Český a evropský chemický průmysl spolu úzce souvisí. Evropský chemický průmysl je třetím nejvýznamnějším průmyslem v EU, v globálním pohledu je evropská chemie stále světovým lídrem s 29 % celkových tržeb a výroby, chemický průmysl zaměstnává v rámci EU přímo více než 1,5 milionu lidí. Rok od roku však své postavení ztrácí. Ještě v roce 1999 to bylo přes 34 %! Na paty jí šlape především Asie v čele s Čínou a Indií, ale také USA a nově vznikající významné kapacity v Brazílii a v oblasti Středního východu.

Postavení chemického průmyslu ČR odpovídá zhruba postavení chemie v EU. Český chemický průmysl tvoří asi 1 % evropského a zaměstnává přímo více než 100 tisíc lidí. V ČR mu patří třetí místo mezi průmyslovými obory, tvoří přibližně 13 % průmyslového HDP. Je významným dodavatelem do mnoha navazujících průmyslů, např. automobilového, elektrotechnického, stavebního, potravinářského, atp.

Přestože chemický průmysl patří mezi nejvýznamnější, dokonce strategické sektory, jeho vnímání veřejností není dobré. Zde je hlavní zdroj problémů. Chemický průmysl je snadným terčem pro ekologické aktivisty. Je také snadným cílem evropských i českých regulátorů. Je jednoduché a populární regulovat obor, který pro veřejnost automaticky představuje to, co škodí zdraví a životnímu prostředí. Je to cesta, jak se zviditelnit a případně být znovuzvolen do, například, Evropského parlamentu. České specifikum pak je být papežtější než papež a evropskou regulaci ještě zpřísnit. Příkladem nejnákladnějších regulací, z pohledu chemického průmyslu jsou: REACH a CLP (odhadem 5–10 miliard Kč), EU ETS (odhadem 100–200 miliard Kč), IPPC recast (prozatímní odhad 10–15 miliard Kč). A to má chemický průmysl vydržet. Není to spíše snaha tento průmysl z evropského prostoru vytěsnit? Mnohé aktivity evropských regulátorů tomu napovídají. Na druhou stranu se zdá, že EU vnímá důležitost chemického průmyslu, jeho strategickou váhu. Proto byla zřízena vysoká pracovní skupina pro konkurenceschopnost evropského chemického průmyslu (HLG Chemicals), jejíž činnost řídil tehdejší komisař pro průmysl G. Verheugen. HLG pracovala dva roky (za aktivní účasti České republiky a SCHP ČR, který měl zástupce ve všech pracovních skupinách) a v únoru 2009, za českého předsednictví publikovala své závěry a doporučení. Ta se dají shrnout do tří skupin:

1. aktivizace lidských zdrojů, podpora výuky chemie, vědy, výzkumu a inovací (a rozumný přístup k regulacím – dodávám já, protože, přes mnohé diskuse na toto téma, se regulace v textu doporučení explicitně nevyskytlo),

2. stálý a garantovaný přístup ke zdrojům surovin, energiím, jejich pravidelné dodávky, zlepšení logistiky v oblasti chemického průmyslu,
3. obchodní politika, fér podmínky pro všechny, celní bariéry pro členské země EU při vývozech, naopak dumpingové ceny některých mimoevropských dodavatelů.

Z pohledu SCHP ČR lze se závěry souhlasit. Důležité je, jak budou závěry a doporučení vnímány jednotlivými členskými státy. V ČR se podařilo konstituovat vysokou pracovní skupinu mezi MPO a SCHP ČR, která bere do úvahy závěry HLG a pracuje také s českými specifiky. Vrcholem by měla být společná konference věnovaná konkurenceschopnosti chemického průmyslu v ČR, která se uskuteční 6. května t.r.

Ke shora uvedeným bodům chci ještě přidat několik námětů. Z pohledu ČR je zřejmé, že ani v EU nedochází a nedojde vždy ke shodě v řadě témat. Existuje zde rozdíl mezi lepšími a horšími technologiemi, mezi severem a jihem a konečně i mezi západem a východem, resp. mezi tzv. starými zeměmi a těmi, které přistoupily od roku 2004. Nové země tvoří zajímavý trh se 150 miliony obyvatel a spotřebou chemikálií na 25 % úroveň starých zemí. To je fakt. Historicky nové země disponují horšími technologiemi, což je proti starým zemím znevýhodňuje. To všechno se zvyrazňuje za současné krize. Čísla za rok 2009 jsou více než alarmující a výhledy na rok 2010 zatím nepřesvědčivé.

Tady nastupuje nezastupitelná role státní správy, která může a dokonce musí podpořit národní zájmy, ne snad, že bychom chtěli něco vyjimečného, chceme srovnatelné podmínky s ostatními. Konečně, nezanedbatelnou roli zde hraje i sociální aspekt. Jen prosperující chemický průmysl je konkurenceschopný. Prosperovat může za daných a transparentních podmínek. Takové je prostředí, které umí přilákat investory, aktivizovat podnikatele. Chci tady zopakovat, že jde o podporu výuky chemie, podporu průmyslové vědy, výzkumu, podporu inovačních procesů, nejenom deklarativně, ale konkrétně. Rozumnou, opakují ROZUMNOU míru regulace (chemické a environmentální). Výzvy, kterým bude v budoucnu lidstvo čelit – dostatečné zdroje energie, zdroje pitné vody, dostatek potravy pro 9–11 miliard lidí v relativně blízké budoucnosti – jsou řešitelné. A je to právě chemický průmysl, který nalézá východiska a umí přinášet řešení, ať už v oblasti procesů, nových materiálů a technologií (nano, bio).

Chemický průmysl v ČR má na rozvoj, udržitelný rozvoj, je schopen být konkurenceschopný, budou-li brána v úvahu fakta shora zmíněná. Vědecké zázemí a vysoce kvalifikovaná pracovní síla, stejně jako jasné vlastnické vztahy hrají pro.

Vždyť který jiný průmyslový sektor nese jméno školního předmětu, který se vyučuje už na základní škole?

8IL-03
SOUŽITÍ ZÁKLADNÍHO A APLIKOVANÉHO
VÝZKUMU V AKADEMICKÉ VĚDECKÉ INSTITUCI

FRANTIŠEK RYPÁČEK

*Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6
 rypacek@imc.cas.cz*

Diskuze na téma vztahu základního a aplikovaného výzkumu, v poslední době tak frekventovaná, v rozumné společnosti zpravidla dojde k závěru, že mezi základním a aplikovaným výzkumem nelze vést ostrou dělicí čáru. Smysl má rozlišovat pouze výzkum kvalitní a nekvalitní. Přednáška vychází z této obecně přijímané teze a věnuje se poměru a vzájemné provázanosti mezi základním výzkumem a jeho aplikacemi z pohledu vědecké instituce, jakou je Ústav makromolekulární chemie AV ČR. Makromolekulární chemie, či obecněji makromolekulární věda, je už ze své podstaty průnikem několika disciplin, kdy téměř každý řešený problém v sobě zahrnuje dílem organickou chemii, fyzikální chemii či biochemii a dílem fyziku nebo chemické a materiálové inženýrství. Tímto rozkročením úvahy o využitelnosti výsledků do projektů z oblasti makromolekulárních systémů a polymerních materiálů snadno pronikají. Je tedy přirozené, že již od samého vzniku ústavu byla řada tématik řešených v Ústavu makromolekulární chemie spojena s aplikačními výstupy. Svého času, některá významná odvětví a s nimi spojené podniky chemického průmyslu v tehdejší Československu navazovaly nebo čerpaly z výsledků výzkumu ÚMCH a jeho patentů. Jako příklady lze uvést polyamidy (Silon), výroba PVC (Spolana) nebo membrány a membránové technologie. Se změnou vlastnických vztahů, zaměřením i možností domácího chemického průmyslu se sice mnohé z těchto tradičních vazeb mezi ústavem a aplikovaným výzkumem či průmyslem ztratily, nicméně povaha vědy o polymerech, jako disciplíny s mnoha přirozenými mezioborovými vazbami a velkým aplikačním potenciálem se nezměnila. Naopak, jestliže v 60. letech minulého století polymerní materiály – plasty – pronikaly do řady odvětví včetně architektury a umění jako horká novinka a zvláštnost, že se až podílely na vytvoření stylu „zlatých šedesátých“, v současnosti téměř nenajdeme odvětví a výrobek, v kterém by se polymerní materiály v nějaké podobě nevyužívaly. Počínaje medicínou a farmacií, přes textilní výroby, konstrukční materiály až po pokročilé technologie a molekulární elektroniku, makromolekulární látky a materiály na nich založené jsou všude přítomny.

I současný vědecký program Ústavu makromolekulární chemie AV ČR se zabývá tématy, která spojují přístupy různých disciplin a z nichž vybíhají nitky k různým možným aplikacím. Na příkladech současných projektů jsou demonstrovány typické problémy, s kterými se soužití základního výzkumu a aplikací potkává a způsoby, kterými k jejich řešení ústav přistupuje. Ani v současných podmínkách nelze rezignovat na dobré soužití mezi základním a aplikovaným výzkumem, aby v závěru byla potvrzena počáteční teze o jejich neoddělitelnosti.

8IL-04
VÝVOJ KATALYZÁTORŮ PRO SELEKTIVNÍ
KATALYTICKOU REDUKCI NO_x AMONIAKEM
A ROZKLAD N₂O – ZKUŠENOSTI S PŘENOSEM
VÝSLEDKŮ ZÁKLADNÍHO VÝZKUMU
DO PRŮMYSLOVÉ REALIZACE

ZDENĚK SOBALÍK^a, BLANKA WICHTERLOVÁ^a,
PETR SAZAMA^a a KAREL SVOBODA^b

*^a Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, AVČR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, ^b Eurosupport Manufacturing Czechia, s.r.o., Litvínov
 zdenek.sobalik@jh-inst.cas.cz*

Koncové plyny výroby kyseliny dusičné představují potenciálně jeden z největších zdrojů směsi oxidů dusíku, a to jak NO/NO₂ (dále NO_x) tak N₂O (cca 7 kg N₂O/ t HNO₃). Jejich zdrojem je na jedné straně neúplná absorpce NO_x v absorpčních věžích, na druhé straně tvorba N₂O během oxidace amoniaku na používaných platinových sítích. Koncentrace NO_x a N₂O v exhalátech se pro oba oxidy dusíku pohybují v rozsazích 1000–3000 ppm. Obě složky představují vysokou zátěž pro životní prostředí. Zatímco NO_x jsou pravidla likvidovány katalytickým procesem na vanadovém katalyzátoru, N₂O odchází v nezměněné koncentraci do ovzduší. Výrobní kyseliny dusičné tak celosvětově produkují ca 400 kt N₂O/rok a chemický průmysl se tak podílí ca 30 % na celkovém úniku N₂O do ovzduší.

Dodržení současných ekologických limitů pro koncentrace NO_x v koncových plynech je v současné době dosahováno procesem selektivní katalytické redukce NO_x amoniakem (SCR-NH₃), především s využitím vanadového katalyzátoru (V₂O₅/Al₂O₃, V₂O₅/TiO₂). Přes mimořádnou životnost tohoto typu katalyzátoru a relativní procesní spolehlivost, hlavní argumenty pro potřebu nasazení nové generace katalyzátorů pro tento proces jsou: *i*) potřeba snížení teploty procesu, s cílem snížit náklady na ohřev plynu po nedokonalé absorpci NO_x, *ii*) zajištění minimálního průniku redukčního činidla (amoniaku) – zejména při nestacionárních režimech systému (především najíždění systému).

Oxid dusný (N₂O) není v současné době omezen zákonným limitem, nicméně jeho škodlivost jako skleníkového plynu a likvidátora ozonové vrstvy je i vzhledem k jeho dlouhé životnosti v atmosféře enormní. V rámci Evropské unie se počítá v dohledné době se zavedením zákonných limitů pro vypouštění N₂O. Tato skutečnost vyvolává pochopitelný zájem výrobců kyseliny dusičné o uvedení procesů současné likvidace NO_x a N₂O. Únik N₂O do ovzduší, ve srovnání například s CO₂ představuje mnohonásobně (310×) vyšší zátěž pro životní prostředí. I přes relativně menší objemy N₂O v exhalátech v přepočtu na ekvivalent CO₂ bude únik N₂O v blízké budoucnosti představovat značnou ekonomickou zátěž pro výrobce kyseliny dusičné. Z hlediska výrobce zařízení pro jednotky kyseliny dusičné je také proces likvidace N₂O zásadní pro konkurenceschopnost nabízené technologie. Přijmutí Kyotského protokolu a pravidel pro obchodování s odpady a obchodovatelnosti snížení emise N₂O (ekvivalent 1 tuna N₂O/ 310 tun CO₂) nových i stávajících výroben kyseliny dusičné je významným ekonomickým prvkem bilance nabízené technologie.

Řešení vývoje katalyzátorů pro selektivní katalytickou redukci NO_x amoniakem a rozklad N₂O vycházelo z dlouhodobých zkušeností v oblasti základního výzkumu vedeného v ÚFCH JH v oblasti syntézy zeolitických katalyzátorů a jejich reaktivity v redox katalytických reakcích a ze zkušeností výrobce heterogenních katalyzátorů (Eurosupport Manufacturing Czechia, s.r.o., Litvínov) zejména s nanášením aktivních oxidických a kovových komponent na nosiče a tvarování zeolitických katalyzátorů. Mohlo tak dojít k optimálnímu propojení systematicky vedeného základního výzkumu v oborech zahrnujících progresivní přístupy k atomární analýze mikroporézních materiálů a využívající nejmodernější spektrální metody a postupy strukturní analýzy^{1–6}, s vysokou zkušeností ve vývoji a přípravě průmyslových katalyzátorů.

Postupně přešel v rámci řešení projektu vývoj syntézy zeolitických katalyzátorů, vedený v laboratorním měřítku v ÚFCH JH, do poloprovodního měřítka v laboratořích Eurosupport a prototypy katalyzátorů tak byly testovány jak v laboratorním měřítku, tak i v závěrečné etapě za reálných průmyslových podmínek v odplynech výroby kyseliny dusičné.

Vývoj struktury a technologie přípravy strukturovaných katalyzátorů pro oba stupně procesu eliminace N₂O a NO/NO₂ byl zakončen přípravou Prototypů v objemu 200 l. Tyto Prototypy byly testovány v kombinovaném procesu současného odstranění N₂O a NO/NO₂ na reálných koncových plynech jednotky výroby kyseliny dusičné v BorsodChem MCHZ a v nestacionárních podmínkách v jednotce RENOX – ESMC. Výsledky potvrdily vysoké technické parametry nasazených katalyzátorů.

Oproti cílovým hodnotám projektu, bylo dosaženo v dlouhodobém testu na reálných odplynech jednotky výroby kyseliny dusičné podstatně vyšších hodnot konverzí, které v obou případech přesáhly hodnotu 95 %.

Dosažené vysoké aktivity Prototypů katalyzátorů za reálných podmínek umožňují provozní nasazení obou katalyzátorů v kombinovaném procesu likvidace N₂O i NO/NO₂.

Spolupráce na projektu prokázala známou zkušenost o nezbytnosti propojení základního výzkumu a vývoje jako jediné cestě k realizovatelným výstupům.

LITERATURA

1. Wichterlová B., Sobalík Z., Dědeček J.: *Appl. Catal.*, B 41, 97 (2003).
2. Sobalík Z., Dědeček J., D. Kaucký, B. Wichterlová, L. Drozdová, Prins R.: *J. Catal.* 194, 330 (2000).
3. Dědeček J., Wichterlová B.: *J. Phys. Chem.*, B 103, 1462 (1999).
4. Kaucký D., Dědeček J., Wichterlová B.: *Micropor. Mesopor. Mat.* 31, 75 (1999).
5. Dědeček J., Kaucký D., Wichterlová B.: *Micropor. Mesopor. Mat.* 35–6, 483 (2000).
6. Dědeček J., Čapek L., Kaucký D., Sobalík Z., Wichterlová B.: *J. Catal.* 211, 198 (2002).

8L-01**VPLYV BIODOPATIBILNOSTI NA POVRCHOVÝ ÚPRAVU INOVAČNÝCH MATERIÁLŮ V ZDRAVOTNICKÝCH ZARIADENIACH****ELEONÓRA BENČÍKOVÁ^a a MARIÁN BEREŠÍK^b**

^a *Fakulta špeciálneho inžinierstva, Žilinská univerzita v Žiline, Ul. 1 mája 32, 010 26 Žilina,* ^b *Klinika AIM, ÚVN SNP Ružomberok-FN, Generála Miloša Vesela 21, 034 26 Ružomberok*
Eleonora.Bencikova@fsi.uniza.sk

Súčasný stav rozvoja vedy v medicínskych aplikáciách kladie dôraz na vývoj inovačných materiálov s antimikrobiálnou úpravou, ktorá znižuje výskyt nozokomiálnych nákaz. V etiopatogenéze nozokomiálnych infekcií sa čoraz častejšie stretávame s uplatnením najrôznejších mikroorganizmov považovaných za komensálne alebo saprofitické. Zavedenie intravenózneho katétru je veľmi frekventovaný výkon a infekčné komplikácie s ním spojené bývajú medzi najčastejšie uvedenými problémami zdravotníckej starostlivosti. Biokompatibilita môže byť opísaná ako viacfaktorová, rôzne materiálové vlastnosti vplývajú na reakciu hosťovského prostredia. Infekcia nozokomiálnymi často polyrezistentnými patogénmi spôsobuje morbiditu, mortalitu následkom zlyhania liečby a zvýšené náklady antibiotík vzhľadom na tendenciu týchto infekcií k relapsu. Vysokú mieru aktuálnosti pri znižovaní prenosu infekčného agens zo zdroja nákazy na vnímavého hosťovca má naviazanie chlorhexedínu a sulfadiazínu striebra po celej dĺžke povrchu katétru. Hlavným cieľom je v maximálnej miere minimalizovať riziko infekcií krvného riečišťa a ohrozenie ľudského zdravia mikroorganizmami, ktoré sú rezistentné.

Príspevok je zameraný na implementáciu inovačných materiálov v zdravotníckych zariadeniach zabezpečujúcich environmentálnu bezpečnosť prostredia pri zhodnocovaní špecifického zdravotníckeho odpadu v maximálnej miere obmedziť ohrozenie ľudského zdravia.

LITERATÚRA

1. Benčíková E., Berešik M., Ondrášiková K.: *ChemZi* 5/9, 116 (2009).
2. Trupti A., Gaonkar T. A., Modak S. M.: *J. Antimicrob. Chemoth.* 52, 389 (2003).
3. <http://www.arowintl.com>, staženo 17.09.2009.

8L-02**MIKROSTRUKTUROVANÝ REAKTOR PRO ELEKTROORGANICKOU SYNTÉZU – VÝVOJ A CHARAKTERIZACE****KAREL BOUZEK^{a*}, ROMAN KODÝM^a, TOMÁŠ BYSTRŇ^a, VLADIMÍR JIŘIČNÝ^b a JIŘÍ KRÍŠŤÁL^b**

^a *Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6,* ^b *Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Rozvojová 2, 165 02 Praha 6*
bouzekk@vscht.cz

Využití mikrostrukturovaných systémů představuje nový perspektivní přístup k navrhování vybraných chemických technologií. Tento problém je předmětem intenzivního výzkumu celé řady početných chemicko-inženýrských a technologických laboratoří po celém světě. Jak vyplývá z publikovaných prací a známých průmyslových technologií, na poli elektrochemického inženýrství a elektrochemické technologie je tento vývoj zřetelně opožděn. Tato skutečnost je překvapivá zejména s ohledem na to, že elektrochemické inženýrství využívá některé z výhod mikrostrukturování elektrochemických reaktorů již po několik desetiletí přímo v průmyslové praxi. Typický příklad takového přístupu představuje cela s kapilární vzdáleností mezi elektrodami (TCG) využívaná v oblasti elektroorganické syntézy.

Cela typu TCG využívá zejména jedné z výhod nabízených mikrostrukturovanými zařízeními, a to malé vzdálenosti elektrod. Tento přístup byl motivován původně zejména snahou snížit ohmickou ztrátu napětí na elektrolytu danou nízkou vodivostí roztoků používaných v tomto typu procesů. Avšak zmenšení mezielektrodové vzdálenosti nabízí některé další výhody. Ty následující mohou být uvedeny jako nejvýznamnější: rovnoměrné rozložení lokálních hodnot potenciálů a proudových hustot na povrchu elektrod a v mezielektrodovém prostoru, možnost segmentace elektrod bez nárůstu významu tzv. efektu hran a v neposlední řadě vysoký stupeň konverze reaktantu při jednom průchodu roztoku elektrolytu celou. Dosud největší překážkou většímu rozšíření tohoto přístupu v průmyslové praxi představuje omezené množství dostupných materiálů vhodných pro konstrukci tohoto typu zařízení a vysoká výrobní cena těchto jednotek. Významnou komplikací rovněž představuje dosud pouze dílčí pochopení zákonitostí dějů probíhajících v zařízeních s charakteristickým rozměrem v řádu do 100 μm. To významným způsobem omezuje návrh a optimalizaci tohoto typu zařízení a jejich následnou implementaci do vlastní technologie.

Tato práce poskytuje stručnou informaci o vývoji mikrostrukturovaného reaktoru pro elektrochemickou syntézu 4-methylanisolu a na uvedeném příkladu dokumentuje výhody, které toto zařízení poskytuje v porovnání se stávající průmyslově využívanou technologií.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM6046137301.

8L-03

ELEKTROCHEMICKÉ VYLUČOVANIE VOLFRÁMU Z TAVENÍN

VLADIMÍR DANIELIK* a MIROSLAVA MRAVČÁKOVÁ

Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov,
FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
vladimir.danielik@stuba.sk

Elektrochemické vylučovanie kovov je atraktívna metóda nanášania kovových povlakov kvôli vysokému stupňu kontroly, ktorý môže byť dosiahnutý zmenou experimentálnych podmienok. Patrí k najpoužívanejším spôsobom povrchových úprav. Kovy, zlatiny a kompozitné vrstvy sa elektrolyticky vylučujú za vzniku jedno- až mnohovrstvových povlakov.

Volfrám je dôležitým legovacím kovom v oceliarstve. Žiaruvzdornosť, korózná odolnosť, odolnosť voči oderu a oteru, ako i tvrdosť volfrámu a jeho karbidov ich predurčujú ako sľubný anorganický materiál v odvetviach, kde sa používajú vysokoteplotné, agresívne prostredia. Čisté volfrámové povlaky sa nedajú pripraviť z vodných elektrolytov, iba vo forme zliatinového povlaku Ni-W¹. Preto cieľom tejto práce bolo vylúčiť volfrámový povlak z taveniny FLINAK (eutektická zmes sústavy LiF – NaF – KF) na oceľovom podklade pri teplote 500 °C.

Ako elektroaktívna látka sa do systému pridával volfráman sodný, Na₂WO₄, v koncentračnom intervale 2–44 hm.%. Elektrolyt bol umiestnený v grafitovom tégliku, ktorý zároveň slúžil ako anóda. Pokovovaná matrica bola katódou, experimenty sa realizovali v inertnej argónovej atmosfére. Povlaky sa vylučovali pomocou jednosmerného prúdu, ako aj impulzného prúdu (Power Pulse pe86, Plating Electronic GmbH, DE).

Z výsledkov vyplýva, že optimálna koncentrácia elektroaktívnej zložky sa pohybuje v rozmedzí 5–10 hm.%. Pod touto koncentráciou nedochádzalo k vylučovaniu volfrámu, pri vyšších koncentráciách dochádzalo ku vzniku dentritov. Stanovená optimálna prúdová hustota bola 0,022–0,025 A cm⁻². Pri týchto prúdových hustotách však dochádzalo aj ku vzniku karbidu W₂C, čo sa dokázalo RTG difrakčnou analýzou. Pri nižších prúdových hustotách nedochádzalo ku vzniku volfrámovej vrstvy, pri vyšších vznikali dentrity volfrámu bez vzniku karbidu W₂C.

Pri použití impulzného prúdu nedochádzalo k depozícii volfrámu, dochádzalo k rozpadu kovovej matrice. Možno to vysvetliť tým, že v jednom katódovom impulze sa povrch matrice nestačil pokryť rovnomernou vrstvou povlaku a v následnom impulze sa rozpúšťala matrica.

Táto práca vznikla za podpory Slovenskej grantovej agentúry VEGA (VEGA 1/0535/08).

LITERATÚRA

1. Brenner A.: *Electrodeposition of alloys*. Academic Press, New York and London 1963.

8L-04

PRODUKCE VODÍKU PARCIÁLNÍ OXIDACÍ ŘEPKOVÉHO ŠROTU A ROPNÝCH ZBYTKŮ

JIŘÍ HANIKA^a, JAROMÍR LEDERER^b, VRATISLAV TUKAČ^c a VÁCLAV VESELÝ^a

^a Ústav chemických procesů AV ČR, v.v.i., Rozvojová 135, 165 02 Praha 6, ^bVýzkumný ústav anorganické chemie, a.s., Ústí nad Labem, ^c Vysoká škola chemicko-technologická Praha hanika@icpf.cas.cz

Hlubší energetické zpracování odpadního šrotu parciální oxidací v přítomnosti vodní páry na syntézní plyn s významným obsahem vodíku představuje velkou výzvu pro výzkum a vývoj. Technologie parciální oxidace odpadního šrotu může být řešena v návaznosti na parciální oxidaci ropných zbytků¹, která se desítky let využívá v ropných rafineriích pro petrochemickou produkci vodíku. Hlavní rozdíl mezi zpracováváním ropných zbytků a odpadní biomasou² spočívá především v tom, že struktura biomasy obsahuje kromě uhlíku a vodíku další biogenní prvky (kyslík, síra, dusík, fosfor) a také popeloviny.

Simulační výpočty procesu zplyňování biomasy byly provedeny s modelovými zástupnými látkami (na základě dostupnosti dat o jejich vlastnostech): glukosa, vanilin, *n*-butyl-styren, glycin, methionin, tri-ethyl-fosfát. V případě visbreakingového zbytku zvoleny tyto zástupné látky: naftalen, dodekan, benzothiofen, chinolin a antrachinon. Proces parciální oxidace byl simulován s použitím programu Aspen-Plus® (Aspen Tech. Inc.).

Při simulačních výpočtech byla v prvním stupni byla uvažována pyrolýza, resp. krakování suroviny, dekompozice jednotlivých složek na prvky a jejich parciální oxidace (bilanční reaktor Ryield). Ve druhém stupni byla řešena komplexní chemická rovnováha mezi vzniklými produkty minimalizací Gibbsovy energie (rovnovážný reaktor RGibbs). Při výpočtu byly uvažovány tyto reakční podmínky: surovina – 10 % řepkového šrotu v uhlovodíkovém zbytku z visbreakingu; vstupní teplota proudů 250 °C; tlak 3,62 MPa; adiabatické podmínky zplyňování (výstupní teplota nad 1300 °C).

Na základě provedených výpočtů byla postavena čtvrtprovozní aparatura se zplyňovacím reaktorem vnitřního průměru 0,4 m a výšky 2 m, se žiaruvzdornou vyzdívkou, opatřeným co-anulární tryskou pro přívod suspenze řepkového šrotu ve směsi uhlovodíků, kyslíku (vzduchu) a vodní páry.

Výsledky ukázaly, že současné zpracování obou odpadů může přispět ke zvýšení produkce vodíku o 2,5 % při současném snížení spotřeby jak kyslíku, tak i páry o 5 %. Ukázalo se, že jak poměr vodní páry k přiváděné surovině (v rozmezí 0,4–0,55), tak i k obsahu řepkového šrotu k směsi odpadních uhlovodíků (v rozmezí 5–10 %) má malý vliv na molární zlomek vodíku v produktu. Současně bylo zjištěno, že přidávkou řepkového šrotu k odpadním uhlovodíkům v množství 10 % se zvýší produkce vodíku o cca 2,5 %, přičemž se sníží měrná spotřeba komprimovaného kyslíku a páry o 5 %.

Projekt „BIOVODÍK“ byl finančně podpořen Ministerstvem průmyslu a obchodu ČR, ev.č. 2A-2TP1/024.

8L-05

ŽELEZANY V TAVENINÁCH

JÁN HÍVEŠ*, LUCIA HRNČIARIKOVÁ, KAMIL KEREKEŠ a JÁN KAMENÁR

Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov,
FCHPT, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
jan.hives@stuba.sk

Táto práca je pokračovaním výskumu elektrochemickej prípravy železanov v rámci projektu VEGA 1/0579/10. Silné oxidačné vlastnosti železanov môžu byť využité predovšetkým z ekologického, dezinfekčného a detoxikačného hľadiska. Hlavnou úlohou práce je podať obraz o elektrochemickej príprave železanov, zhrnúť poznatky o početných faktoroch vplyvujúcich na účinnosť elektrochemickej prípravy železanov, vypíchnúť možnosti ďalšej optimalizácie procesu prípravy železanov. Na elektrochemickú prípravu železanu v tavenine sa testovali rôzne systémy hydroxidov a ich zmesí. Železany sú známe už dve storočia napriek tomu ich najintenzívnejší výskum sa realizoval za posledných 20 rokov¹. Značný pokrok sa udial v chápaní teoretickej aj praktickej stránky elektrochemickej prípravy železanov. Významný pokrok sa dosiahol v poznaní úlohy povrchovej vrstvy anódy pri vzniku železanov a vplyv zloženia anódy a anolytu na túto vrstvu². Prvé kroky oxidácie železa na Fe(II) a Fe(III) sú známe už z výskumov korózneho správania sa železa v alkalickom prostredí. Železany sú vysoko účinné oxidanty schopné rozložiť nebezpečné znečisťujúce látky (chemické aj biologické) vo vodnom prostredí. Ich výhodou je rýchla reakcia, netoxický produkt Fe(OH)₃ správajúci sa ako účinný sorbent a koagulant a vo väčšine prípadov zabezpečuje kompletný rozklad znečisťujúcej látky bez nebezpečných vedľajších produktov. Navyše, hydratovaný Fe₂O₃ je bežnou súčasťou prírody a teda neznečisťuje životné prostredie.

Elektrochemické metódy ako cyklická voltametria sa použila na charakterizáciu procesov prebiehajúcich na stacionárnej železnej elektróde z čistého železa a železnej elektróde s prímiesou Si. Anódové prúdové píky zodpovedajúce tvorbe železanu ako aj katódové prúdové píky zodpovedajúce jeho redukcii sú zrejmé z polarizačných kriviek³. Metóda EIS sa použila pri charakterizácii povrchových vrstiev anódového materiálu pri príprave železanov. Impedančné spektrá sú charakteristické dvoma časovými konštantami, ktoré sa môžu interpretovať pomocou modelu dvojitej povrchovej vrstvy na anóde.

Táto práca vznikla za podpory grantu MŠ SR VEGA 01/0579/10.

LITERATÚRA

1. Mácová Z., Bouzek K., Híveš J., Sharma V. K., Terryn R. J., Baum J. C.: *Electrochem. Acta* 54, 2673 (2009).
2. Híveš J., Mácová Z., Benová M., Bouzek K.: *J. Electrochem. Soc.* 155, E113 (2008).
3. Híveš J., Benová M., Bouzek K., Sitek J., Sharma V. K.: *Electrochem. Acta* 54, 203 (2008).

8L-06

SOFTWAREVÁ ANALÝZA MERANIA PÓROVITOSTI TEXTÍLIÍ

PAVOL LIZÁK, JELA LEGERSKÁ
a LUBICA MRVOVÁ

Trenčianska univerzita A. D. v Trenčíne, Fakulta priemyselných technológií, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov
legerska@fpt.tnuni.sk

Póry predstavujú priestory medzi väzbovými bodmi v štruktúre textilie z ktorej je vytvorený odev. Cez póry v odevu sa uskutočňuje prestup tepla, vodných pár a potu. Smer prechodu je od pokožky cez odev do prostredia. Prestup týchto médií sa vzájomne kombinuje a je najviac ovplyvnený teplotnými gradientami a tlakovými spádmi medzi jeho časťami¹. Prechod tepla kombinovaný s vodnými parami je o to väčší, čím je odevná textília pórovitejšia a čím sú kratšie transportné a difúzne cesty na prestup týchto médií v smere od pokožky cez odev do prostredia. Uvedomujúc si tieto zákonitosti fyziologických pochodov na odevu bolo realizované meranie pórovitosti a súvisiacich vlastností. Meraním bol preskúmaný relatívne nezávislý počítačový systém riadenia celého experimentu merania pórovitosti. Na jeho základe sa spracoval softwarový program merania pórovitosti s použitím obrazovej analýzy NIS element zlozenej z mikroskopu, CCD kamery a špeciálneho softwaru Nis element². Prístrojové zariadenie dokáže obraz nielen získať a zväčšiť, ale aj spracovať a archivovať. Hlavným cieľom širokého využitia tohto zariadenia je možnosť merania rôznych geometrických rozmerov na snímanom obraze. Každý rozmer bolo možné merať až po nakalibrovaní systému, čím sa geometrickému rozmeru pridelila reálna veľkosť. Spracované objekty boli vytvorené spojením pixlov jedného typu (farba čierna) pre pletiariku väzbu a pozadia pre množinu pórov (farba biela). Podiel rozdelenia plochy snímaného obrazu na biele a čierne objekty bol ovplyvnený nastavenou prahovou hodnotou. Táto bola zvolená na hodnotu 120 a plocha raportu väzby bola ohraničená meracím rámikom. Výsledkom meraní bolo vyjadrenie priemernej plošnej pórovitosti textílie p_o [%] a zakrytia textílie z [$z = 100 - p_o$]. Meranie pórovitosti bolo porovnané s meraním množstva vzduchu R [cm s^{-1}], ktoré prechádza cez póry pletenín³. Priama korelačná závislosť medzi pórovitosťou a prestupom vzduchu a vysoká tesnosť sledovaných vlastností potvrdila správnosť meraní pórovitosti prostredníctvom novej metódy.

LITERATÚRA

1. Murárová A., Jambrich M.: *Prestup tepla cez vrstvu zloženú z dutých vlákien*. Visník, Ukrajina 2008 (ISSN 1813-6796).
2. IN č.11-108-01/01: *Meranie pórovitosti systémom obrazovej analýzy*, TU Liberec, 2007.
3. STN EN ISO 9237: *Stanovenie priepustnosti vzduchu plošnými textíliami*, SÚTN Bratislava, 1998.

8L-07**VPLYV PÓROVITOSTI NA PRESTUP TEPLA TEXTÍLIU****PAVOL LIZÁK a JELA LEGERSKÁ**

Trenčianska univerzita A. D. v Trenčíne, Fakulta priemyselných technológií, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov legerska@fpt.tnuni.sk

V práci sa študoval vplyv pórovitosti na prestup tepla pletenín. Dôvodom bolo to, že množstvo staticky uzavretého vzduchu v póroch rôznych pletiar-ských väzieb bude značne vplývať na hodnoty tepelných parametrov. Pórovitosť pletenín bola experimentálne meraná prostredníctvom obrazovej analýzy zloženej z mikroskopu, CCD kamery a špeciálneho softwaru Nis element. Výsledkom meraní bolo vyjadrenie pórovitosti p_o [%] pletenín¹. V práci bol overený nový spôsob merania pórovitosti pletenín uskutočňovaný v raporte pletiar-skovej väzby. Prestup tepla bol experimentálne meraný pomocou prístroja Alambeta². Metóda merania tepelných charakteristik textílii simulovala tepelný kontakt medzi pokožkou – odevom – prostredím. Z výsledkov meraní bol vybraný ukazovateľ tepelného odporu R [$W^{-1} m^2 K$]. Meraním bolo dokázané, že rast pórovitosti pletenín znižuje jej odolnosť proti pre-stupu tepla. Plocha pórov v pletenine vykazuje vysokú variabilitu. Pri sledovaní korelačných závislostí bola dokázaná nepriama závislosť medzi tepelným odporom a pórovitosťou pletenín, ale vysoká tesnosť medzi sledovanými vlastnosťami. Z viacerých sledovaných vzoriek bola vybraná pletenina s najlepšimi tepelno-izolačnými vlastnosťami. Je všeobecne známe, že rastúce množstvo vzduchu uzavretého v štruktúre textílie zlepšuje tepelno-izolačné vlastnosti³. Merania na pleteninách túto teoretickú úvahu nepotvrdili. Kde je tá pomyslená hranica kedy tomu už tak nie je bude predmetom skúmania do budúcnosti.

LITERATÚRA

1. IN č.11-108-01/01: *Meranie pórovitosti systémom obrazovej analýzy*, TU Liberec, 2007.
2. Vrbová V.: I.IN 23-304-02 01: *Měření tepelných vlastností na přístroji Alambeta*, TU Liberec, 2002.
3. Militky J.: *Textil comfort. Seminar on clothing and textiles*, Durban, 2007.

8L-08**ANALYSIS OF INNOVATION DEVELOPMENT IN CHEMICAL****DARIUSZ MARKIEWICZ***

University of Warsaw, Faculty of Management, 1/3 Szturmowa Street, 02-678 Warszawa dariusz.markiewicz@student.uw.edu.pl

The innovation is commonly understood as successfully applied on the market new value: product, process or service. In general, there are two main sources of demand for innovation: external – driven by market, or in other words, because

there is demand for particular value. This category includes innovations that are pushed on the market by company. Internal (within the organization) – when some process might be enhanced, for example production of the same items but applying process that requires less resources or might be manufactured with cheaper materials.

Chemical sector from business point of view is very specific because of its size, required capital, long term of investment etc. Because of that managing innovation is more than just Research and Development Department's domain. Although, this department is accountable for many major revisions and upgrades, in case of some particular huge investments (like new construction of production line) external specialized companies are involved.

In case of chemical sector we can see five general rules how to upgrade production process to secure best usage of: the differences of potentials, raw materials, energy, apparatus and technological moderation.

Research was conducted thanks to financial support from European Social Fund and Budget of Poland as a part of Integrated Operational Program for Regional Development 2004-2006 (Priority 2, Operation 2.6).

REFERENCES

1. Harding R.: *Eur. Management J.* 20, 470 (2002).
2. Synoradzki L., Wisialski J.: *Designing of technological proces*, p. 87. Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warsaw 2006.

8L-09**KORELÁCIA HASIACEJ ÚČINNOSTI INERTNÝCH PLYNOV CO₂ A N₂ PRI ELIMINÁCIÍ HOMOGÉNNEHO HORENIA****IVETA MARKOVÁ**

Technická univerzita vo Zvolene, Drevárska fakulta, Katedra protipožiarnej ochrany, T. G. Masaryka 24, 960 53 Zvolen markova@vsl.d.tuzvo.sk

Hasiace efekty hasiacich látok sú predmetom výskumu prakticky od samotného počiatku požiarneho inžinierstva (Fire Engineering). Determinujú jednak celkovú účinnosť a spôsob hasenia, ale zároveň aj priamo ovplyvňujú oblasť nasadenia hasiacich látok¹. V súčasnosti sa do popredia výskumu v oblasti požiarneho inžinierstva presadzujú plynné hasiace látky z dôvodu ich jednoduchej aplikácie, neobmedzenej dĺžky skladovania, vyplývajúcej z ich chemickej stability, ale predovšetkým z dôvodu ich nedestrukčného systému hasenia, vyjadrený pojmom „bezzvyškové hasiace látky“.

Príspevok je zameraný na vyhodnotenie pôsobenia častkových hasiacich efektov na celkovú hasiacu účinnosť plynných hasiacich látok. Pre účely výskumu boli zvolené prírodné plyny – oxid uhličitý a dusík a experimentálna metóda ISO 14520 (cit.²) – pre sledovanie hasiacej účinnosti plynných hasiacich látok³.

Palivo, pre tvorbu homogénneho horenia v difúzne oblasti je súbor kvapalných organických látok definovaného zloženia, a to: acetón, benzén, metanol, etanol, toluén. Homo-

génne horenie bolo naformulované stechiometrickými rovnicami horenia a bol kvantifikovaný podiel reaktantov za stanovených podmienok experimentu². Vypočítaný potrebný počet mólov kyslíka pre uvedené chemické reakcie bol konfrontovaný s experimentálne stanovených podielom množstva hasiacej látky. Na základe týchto hodnôt bola vytvorená grafická závislosť hasiacej koncentrácie CO₂ a N₂ od množstva potrebného kyslíka na spálenie 1 mólu horľavej látky. Porovnané boli experimentálne merania zistenej hasiacej koncentrácie s počítačovým modelovaním hasenia plameňa inertnými plynnými hasiacimi látkami. Cieľom bolo namodelovať uhasenie kinetických plameňov pri primiešaní CO₂ alebo N₂ do zmesi palivo-vzduch, prostredníctvom on-line systému – PREMIX z balíka CHEMKIN IV.

Táto práca vznikla za podpory grantu MS SR 1/0483/08.

LITERATÚRA

1. Cote A. E.: *Fire Protection Handbook*. 18th Ed. NFPA, 2400 (1998).
2. ISO 14520: Gaseous fire extinguishing systems (2003).
3. Mózser V.: *Dizertačná práca*. Technická univerzita vo Zvolene, Zvolen 2009.

8L-10

POROVNANIE ANALYTICKÝCH METÓD POMOCOU BILANČNÉHO MODELU LÚHOVANIA MAGNEZITU

KATARÍNA ŠTEFUŠOVÁ, PAVEL RASCHMAN
a **ALENA FEDOROČKOVÁ**

Hutnícka fakulta Technickej Univerzity v Košiciach, Letná 9, 042 00 Košice
katarina.stefusova@student.tuke.sk

Chemické spracovanie patrí medzi progresívne spôsoby využitia slovenského prírodného magnezitu. Odstráni sa izomorfne železo aj nežiaduce prímеси (najmä vápnik) a získajú sa vysokočisté produkty, ktoré sa využijú v rôznych oblastiach priemyslu a pri ochrane životného prostredia. Pre chemické spracovanie slovenských magnezitov majú najväčší význam „chloridové technológie“, ktoré využívajú ako lúhovacie činidlo kyselinu chlorovodíkovú alebo chlorid amónny^{1,2}.

V práci³ sa študoval priebeh chemického rozpúšťania horčíka, vápnika a železa pri lúhovaní žihaného magnezitu roztokmi kyseliny chlorovodíkovej, kyseliny octovej a chloridu amónneho pri rôznych podmienkach. Použitá vzorka žihaného magnezitu a všetky získané výluhy a nerozpustené zvyšky sa podrobili chemickej analýze. Obsahy Mg, Fe a Ca v tuhých vzorkách sa paralelene stanovili metódou AAS (Hutnícka fakulta) a RTG-fluorescenčnej analýzy (spoločnosť INTOCAST SLOVAKIA Košice). Pri analýze výluhov sa použila metóda AAS a súčasne komplexometrická titrácia. Pre hodnotenie výsledkov chemických analýz sa použila materiálová bilancia lúhovania. Kým rozdiely medzi výsledkami AAS a komplexometrickej titrácie pri analýze výluhov boli v rámci presnosti použitých analytických metód, rozdiely medzi výsledkami AAS a RTG-

fluorescenčnej metódy pri analýze tuhých vzoriek boli významné – ako správnejšie sa ukázalo chemické zloženie určené na základe výsledkov RTG – fluorescenčnej analýzy.

Získané výsledky potvrdzujú význam výberu vhodných analytických metód tak pre výskum, ako aj pre medzioperačnú kontrolu reálneho technologického procesu.

Táto práca vznikla s podporou operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja (projekt ITMS 26220120017 „Centrum excelentného výskumu získavania a spracovania zemských zdrojov“) a grantu VEGA č.1/0267/09.

LITERATÚRA

1. Raschman P., Fedoročková A.: *Hydrometallurgy* 71, 403 (2004).
2. Raschman P.: *Acta Metallurgica Slovaca* 4, 148 (2001).
3. Štefušová K.: *Diplomová práca*. TU v Košiciach, Hutnícka fakulta, Košice 2009.

8L-11

CHEMICKÁ RECYKLACE POLYETHYLENTEREFTALÁTU

VÁCLAV VESELÝ a JIŘÍ HANIKA

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

Výchozí surovinou při chemické recyklaci bývá drť z nápojových lahví. Ta obsahuje vedle primární kontaminace původním nápojem a barvivem i papír, lepidlo, PE, PVC a minerální složky. Prvním krokem v technologii bývá solvolýza, kdy se naruší původní makromolekula a vznikají jednoduché komponenty. Podle použitého činidla můžeme dělit solvolýzu na alkoholýzu, glykolýzu a hydrolyzu.

Hydrolyzu můžeme provádět třemi způsoby. Hydrolyza vodou se provádí při teplotě 250 °C a tlaku cca 5 MPa. Produktem je surová kyselina tereftalová a vodný roztok glykolu. Právě čištění kyseliny tereftalové zapříčiňuje druhotnou tvorbu odpadů a technologie bývá nepřijatelná z hlediska environmentálního i ekonomického. Podobná situace nastává i v případě kyselé hydrolyzy. Ta se provádí v prostředí minerální kyseliny, např. kyseliny sírové při atmosférickém tlaku a teplotě 150 °C, a po prostém naředění vodou se vyloučí nerozpustná kyselina tereftalová. Ta je jediným produktem a je třeba ji upravit dle následného použití. Třetím způsobem provádění hydrolyzy je základní hydrolyza louhem sodným nebo draselným. Tento způsob jsme rozpracovali a vyvinuli jsme původní technologii recyklace.

Technologie zpracovává druhotně netříděnou ale pranou drť, která je hydrolyzována louhem sodným v přebytku ethylglykolu. Hydrolyza se provádí při atmosférickém tlaku a je násadová. Vzniklá sodná sůl kyseliny tereftalové se rozpustí v demineralizované vodě, kleruje se aktivním uhlím a filtrací se získá roztok surového tereftalátu. Tento roztok se podrobí membránové elektrolyze, při níž se zároveň připraví čistá kyselina sírová a vznikne roztok louhu. Tento roztok se vrací do hydrolyzy a čistý roztok tereftalátu se sráží čistou kyseli-

nou sírovou. Volná kyselina tereftalová se separuje filtrací a filtrát se vrací do elektrolyzy k uvolnění čisté kyseliny sírové. Při separaci krystalů tereftalátu sodného z hydrolyzátu je filtrát surový ethylenglykol, který se čistí vakuovou destilací a hlavový produkt je čistý ethylenglykol. Destilační zbytek obsahuje nečistoty a je odpadem vhodným ke spálení.

Produktem navrženého postupu je kyselina tereftalová a ethylenglykol. Jejich kvalita odpovídá podmínkám opětovné esterifikace a následné kondenzace. Tím lze připravit „panenský“ polymer vhodný k použití i v potravinářském průmyslu.

Hlavním přínosem navržené technologie je nízké zatížení životního prostředí druhotnými odpady při dosažení potřebné kvality produktů pro jejich opětovné použití k původním účelům. Nevýhodou jsou velké povozní náklady a pro současné turbulence v ekonomice je recyklace nerentabilní.

Tato práce vznikla za podpory projektu MPO ČR, ev. č. FI-IM4/0096.

8L-12

ZLIATINOVÉ POVLAKY Ni-W VYLÚČENÉ Z VODNÝCH ELEKTROLYTOV

MATILDA ZEMANOVÁ, MARGARÉTA KRIVOSUDSKÁ a MARTA CHOVANCOVÁ

*Ústav anorganické chémie, technológie a materiálov,
FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
matilda.zemanova@stuba.sk*

Ni-W zliatinové povlaky sú náhradou za používané chrómové povlaky. Sú rovnocenné svojimi mechanickými a koróznymi vlastnosťami a zároveň ich toxicita je nižšia v porovnaní s povlakmi chrómu. Nanokryštalové materiály svojou jedinečnou morfológiou prispievajú k získaniu netypických vlastností pripravených materiálov. Nanokryštalové Ni-W zliatinové povlaky sa pripravili z vodných roztokov impulzovou technikou. Skúmal sa vplyv morfológie na kvalitu pripraveného povlaku (koróznou odolnosť). Zmena morfológie zliatinového povlaku sa dosiahla zmenou podmienok impulzového pokovovania a koncentrácie volfrámu v elektrolyte.

Nanokryštalové zliatinové povlaky Ni-W sa získali pokovovaním impulzovým prúdom pri teplote 60 °C a pracovnom cykle 9,1 %. Toto bolo potvrdené meraniami SEM. Korózna odolnosť povlakov sa skúmala potenciodynamickou polarizáciou klasickým trojelektrodovým systémom v roztoku chloridových iónov. Štandardom pre hodnotenie korózných vlastností bol zliatinový povlak Ni-W vylúčený jednosmerným prúdom. Pred koróznymi skúškami a po nich sa metódou EDX zisťoval obsah Ni/W v zliatinovom povlaku. Zvýšenie korózne odolnosti pripravených zliatinových povlakov sa dosiahlo najmä vysokým obsahom volfrámu v zliatinovom povlaku (40 hm.%).

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA SR 1/0535/08.

8P-01

CHARAKTERIZACE A MOŽNOSTI ZPRACOVÁNÍ
ZAOLEJOVANÝCH KOVOVÝCH KALŮROMAN GABOR^{a,b} a JANA SEIDLEROVA^b^a VÚHŽ a.s., 739 51 Dobrá 240, ^b VŠB-Technická Univerzita
Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava-Poruba
gabor@vuhz.cz

V souladu s Plánem odpadového hospodářství České republiky došlo v období let 2002–2008 k redukci odpadů kategorie nebezpečný o 23 %. Tento vývoj nebyl dosažen u strojních zaolejovaných kovových kalů, jejichž produkce v letech 2007–2008 naopak rostla a dosáhla množství 17 000 až 20 000 tun tohoto nebezpečného odpadu ve výše uvedeném období. V závislosti na řezném a broušícím procesu opracovaného druhu oceli může kal obsahovat 10–50 % oleje, 45–80 % kovů a 1–5 % dalšího materiálu. Olej je využíván jako chladicí medium a mazivo, které obvykle obsahuje estery fosforu a vodou rozpustné aditiva, které slouží k zlepšení tribologie obráběcího procesu.

Současné způsoby nakládání s tímto nebezpečným odpadem vedou k případné kontaminaci životního prostředí a růstu nákladů na jeho stabilizaci. Rovněž dochází vzhledem k chemickému složení kalů ke ztrátě kovového Fe, Mn, W, V, Cr a dalších kovů.

V minulosti byla věnována značná pozornost úpravě a recyklaci zaolejovaných kovových kalů. Jejich přímé využití v podílové vsázce tavících agregátů není vzhledem k obsahu oleje možné a proto byly studovány možnosti aplikace nízkoteplotní desorpce, pyrolýzy, superkritické extrakce oxidu uhličitého a pracích procesů s využitím tenzidů.

Aplikace pyrolýzní technologie pro odstranění odpadních olejů (řezných, hydraulických, strojních) z kovových kalů představuje alternativu ke spalování a umožňuje získání cenných produktů. Podmínky pyrolýzního procesu je nutné optimalizovat vzhledem k požadavkům na tuhý zbytek, kapalnou a plynnou fázi. Vznikající pyrolýzní plyn, jehož hlavními složkami jsou CO₂, CO, H₂, CH₄, C₂H₄ je dále možné energeticky využívat. Krakováním kapalných uhlovodíků dochází v pyrolýzním procesu k produkci lehkých alkenů, BTEX (benzen, toluen, ethylbenzen, xylen) a polycyklických aromatických uhlovodíků. Cílem příspěvku je blíže charakterizovat vlastnosti kovových kalů, popsat a navrhnout postupy vedoucí k jejich úpravě a následnému využití v průmyslové výrobě. Větší pozornost je věnována pyrolýzní technologii, zejména návrhu procesní teploty vedoucí k požadovanému složení tuhého zbytku a vznikajícího podílu kapalně a plynně fáze.

Tato práce vznikla za podpory grantu SP/2010141.

LITERATURA

- Chang J. I., Lin J. J., Huang J. S., Chang Y. M.: Resour. Conserv. Recy. 49, 191 (2006).
- Nerín C., Domeño C., Kliner R., Lazaro M. J.: J. Anal. Appl. Pyrol. 55, 171 (2000).

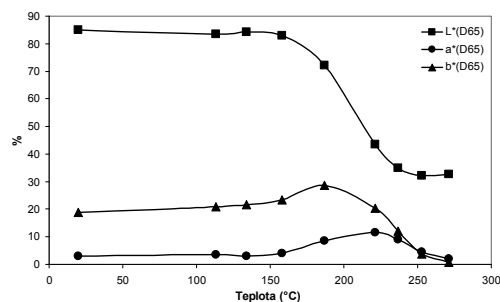
8P-02

ZMENA FARB Y JAVOROVÉHO DREVA VPLYVOM
TEPLotyIVAN KUBOVSKÝ, FRANTIŠEK KAČÍK a DANICA
KAČÍKOVÁTechnická univerzita vo Zvolene, Drevárska fakulta,
T. G. Masaryka 24, 960 53 Zvolen
kacik@vsld.tuzvo.sk

K důležitým charakteristickým znakom dreva patrí farba – jednak prirodzená alebo dodatočne zmenená farebným zušľachtením. Okrem nanášania náterových látok je možné zmeniť farbu dreva modifikáciou štruktúry jeho hlavných zložiek (celulózy, hemicelulózy a lignínu), predovšetkým pôsobením tepla, vlhkosti, svetla alebo ultrafialového žiarenia, čo predstavuje ekologicky prijateľnejšiu alternatívu oproti chemickým technológiám úpravy^{1,2}.

Technologické procesy, kde hrá hlavnú úlohu teplo, sa využívajú pri ohreve, sušení a parení dreva. Vznikajúce chemické zmeny v štruktúre dreva majú vplyv aj na zmenu pevnosti, hustoty, modulu pružnosti v ťahu a ohybe³ a bola zistená korelácia medzi mechanickými vlastnosťami a farbou dreva⁴.

Príspevok informuje o zmene farby dreva získanej ohrevom pri rôznych teplotách. Experimentálne vzorky tvorili hranolčeky javora (*Acer pseudoplatanus*, L.), rozmerov 8 × 10 × 120 mm (hrúbka × šírka × dĺžka), ktoré boli získané z kmeňa tangenciálnym rezom. Vzorky boli naklimatizované na absolútnu vlhkosť 12 %. Ohrev bol uskutočnený pri teplotách: 20, 113, 134, 158, 187, 221, 237, 253 a 271 °C. Hodnoty farby sú vyjadrené v kolorimetrickej sústave CIE L*a*b*. Zo získaných výsledkov vyplýva, že k výraznejším zmenám farby dochádza pri teplotách nad 160 °C.



Obr. 1. Závislosť hodnôt L*, a*, b* od teploty

Táto práca vznikla s podporou projektu VEGA 1/0490/09.

LITERATÚRA

- Mitsui K.: Holz Roh-Werkstoff 64, 243 (2006).
- Káčik F., Káčiková D., Bubeníková T.: Cellulose Chem. Technol. 40, 643 (2006).
- Gunduz G., Aydemir D., Karakas G.: Mater. Design 30, 4391 (2009).
- Bekhta P., Niemz P.: Holzforschung 57, 539 (2003).

8P-03**STANOVENIE SACHARIDOV V HYDROLYZÁTOCH PO HORÚCOVODNEJ PREDÚPRAVE DREVA****MARTA LAUROVÁ* a FRANTIŠEK KAČÍK**

Technická univerzita vo Zvolene, Drevárska fakulta,
T. G. Masaryka 24, 960 53 Zvolen
laurova@vsld.tuzvo.sk

Horúcovodná predúprava lignocelulózovej (LC) biomasy je dôležitou súčasťou technologických postupov napr. pri výrobe bioetanolu enzymatickou hydrolyzou celulózy a následnou mikrobiálnou fermentáciou D-glukózy (tzv. C6 frakcie) na etanol¹⁻³. Ako vedľajšie produkty sa získavajú predhydrolyzáty bohaté na mono- a oligosacharidy prevažne hemicelulózovej frakcie – xylánov^{4,5}. Z tohto dôvodu je možné získané hydrolyzáty ďalej po úprave využiť na získavanie reatívne čistých a hodnotných sacharidov, ktoré môžu ďalej slúžiť napr. ako východiskové suroviny pre chemický, potravinársky a farmaceutický priemysel, resp. na výrobu energeticky bohatších krmovín⁶.

Naša práca je zameraná na sledovanie vplyvu podmienok (teplota 140 až 180 °C, čas 30 až 240 min, hydromodul 1:4 g cm⁻³) horúcovodnej predhydrolyzy dreva brada- vičnatej (*Betula verrucosa* Ehrh.) (26 a 62 ročného) na uvoľňovanie jeho hemicelulózovej frakcie do roztokov.

V dôsledku uvoľňovania nascentných organických kyselín z dreva sa pH hydrolyzátoov priamoúmerne so zvyšujúcou sa teplotou a predlžovaním času predhydrolyzy posúvalo do kyslejších oblastí (4,2 až 2,9).

Maximálna koncentrácia uvoľnených mono- a oligosacharidov do hydrolyzátoov, stanovená plynovou chromatografiou (GC) vo forme aldonitrilacetátov na kolóne DB-5 metódou vnútorného štandardu⁷, bola pri podmienkach predúpravy 180 °C a 60 min (staršie drevo), resp. 120 min (mladšie drevo).

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0282 a Vedeckou grantovou agentúrou MŠ SR a SAV č. 1/0385/08.

LITERATÚRA

1. Pandey A.: *Handbook of plant-based biofuels*. CRC Press, Boca Raton 2009.
2. Mosier N., Wyman Ch., Dalec B., Elander R., Lee Y. Y., Holtzapfel M., Ladisch M.: *Bioresour. Technol.* 96, 673 (2005).
3. Sun Y., Cheng J.: *Bioresour. Technol.* 83, 1 (2002).
4. Garrote G., Domínguez H., Parajó J. C.: *Holz Roh-Werkstoff* 57, 191 (1999).
5. Conner A. H.: *Wood Fiber Sci.* 16, 268 (1984).
6. Košíková B., Bučko J.: *Biotechnologické a chemické spôsoby využitia rastlinnej biomasy*. Technická univerzita vo Zvolene, Zvolen 2002.
7. Kačík F., Kačíková D.: *Folia For. Pol. Ser., B* 40, 61 (2009).

8P-04**WELLNESS TEXTÍLIE****ANNA MURÁROVÁ*, ZUZANA MURÁROVÁ^b a JELA LEGERSKÁ^a**

^a Trenčianska univerzita A. D. v Trenčíne, Fakulta priemyselných technológií, I. Krasku 491/30, 020 01 Púchov,
^b Univerzita Komenského v Bratislave, Lekárska fakulta, Špitalská 24, 813 72 Bratislava
mix007@post.sk

Podľa moderných predstáv je wellness celková koncepcia zdravia. Pojednáva o všetkých vplyvoch, ktoré upevňujú telesné a duševné zdravie. Wellness sa stáva megatrendom životného štýlu a programom zdravovedy. Hlavné zdroje koncepcie wellness sú výživa, pohyb, relax a v ostatnom čase sa k nim priradujú textilné materiály¹, ktoré človek používa a majú výrazné wellness funkcie. Wellness textílie sú inteligentné textílie², ktoré môžu citlivo meniť svoje vlastnosti v závislosti od rôznych podmienok pri používaní ako sú napr. poveternostné podmienky a telesné zaťaženie. V koncepcii wellness textílie ovplyvňujú naše zmysly a podporujú fyziologický a psychologický komfort.

Wellness textilné materiály majú kozmetické, biologické a medicínske funkcie. Tieto funkcie sa zabezpečujú riadenou aditíváciou do textilného materiálu rôznych aktívnych látok s kozmetickým, biologickým a medicínskym účinkom. Často sa pritom využívajú kapsulové systémy so zabudovanou aktívnou látkou a s jej cieľným účinkom. Účinok aktívnej látky sa prejavuje po enkapsulácii v kontaktnej textílii s pokožkou napr. vplyvom pododovej vlhkosti. V závislosti od vlastností aktívnej látky sa táto adsorbuje na pokožke, alebo preniká do rôznych vrstiev pokožky cestou penetrácie, permeácie, alebo absorpcie³.

Kritéria na zdravotnú nezávadnosť textilných materiálov sú prísne^{4,5}. Napriek tomu sa vyskytuje iritácia/inflamácia pokožky vyvolaná textíliou mechanickým a chemickým podráždením. Iné formy kontaktnej dermatitídy vyvolávajú alergizujúce aditíva, farbivá a pigmenty v textíliách, o čom svedčia časté klinické výskytý.

LITERATÚRA

1. Lizák P.: Structure of Textile Fibres. In: *Proceedings of the 12. Slovak Rubber Conference, Púchov, 2000*.
2. Lizák P.: Inteligentné textílie. In: *Proceedings of the 1. Medzinárodný textilný seminár, Ružomberok, 2009*.
3. Umbach K. H.: *Wellness textiles-what do we mean by that?* In: *Proceedings of the 45th Dornbirn Man - Made Fibres Congress, Dornbirn, 2006*.
4. Szokolayová J., Uhnák J., Piecková E.: *Vlákna Text.* 13, 124 (2006).
5. Höfer D.: Textile medical devices – safety requirements. In: *Proceedings of the 45th Dornbirn Man - Made Fibres Congress, Dornbirn, 2006*.

8P-05 VIACÚČELOVÉ VYUŽITIE ODPADOVÝCH SULFÁTOVÝCH VÝLUHOV

EVA RUŽINSKÁ a IVETA MARKOVÁ

*Technical University, T.G. Masaryka 24, 960 53 Zvolen
evaruzin@vsld.tuzvo.sk*

Aktuálne je preferované viacúčelové využívanie odpadov ako cenných druhotných surovín. Pri sulfátovom spôsobe prípravy buničín (v celulózo-papierenskom priemysle) dochádza v dôsledku prebiehajúcich delignifikačných procesov k tvorbe veľkého množstva odpadových produktov, napr. čiernych sulfátových výluhov^{1,2}.

V súčasnosti sa organické zložky sulfátových výluhov spaľujú³, čím sa „zužítujú“ v regeneračnom procese a poskytujú tak tepelnú energiu a uhlík, potrebný na redukcii síranu sodného na sulfid, ako jednu zo zložiek varného roztoku, potrebnú regenerovať pred každým pracovným cyklom pri výrobe sulfátovej buničiny.

Takéto využívanie vzniknutých odpadov – čiernych sulfátových výluhov nepredstavuje optimálny spôsob ich zhodnocovania⁴ v zmysle efektívneho využitia z pohľadu technologického, nakoľko možno pripraviť produkty s vyššou pridanou hodnotou, napr. kompozitné drevné materiály, obsahujúce upravené odpadové sulfátové výluhy v kombinácii so zmesovými polykondenzačnými adhezívami. Takéto navrhnuté a experimentálne pripravené drevné kompozitné materiály (drevotrieskové a preglejované dosky)^{1,2} preukázali porovnateľné kvalitatívne charakteristiky v porovnaní so štandardne produkovanými drevnými materiálmi, avšak s výraznou ekonomickou úsporou a významným ekologickým aspektom – znížením emisií plyných polutantov (zníženie obsahu formaldehydu uvoľňujúceho sa z pripravených lepidlových zmesí pri recipročnej náhrade PF adhezíva modifikovanými sulfátovými výluhmi).

Ďalším efektívnym využitím³ odpadových sulfátových výluhov je ich použitie pre prípravu kompostovacích zmesí (Kompost 310100), kde sú zastúpené popri odpadoch z biomasy, vápennom kale, jemnom popole, zeolitoch a exkrementoch hospodárskych zvierat. Zhodnocovanie odpadových sulfátových výluhov kompostovaním sa preukázalo ako účinné na rozdiel od ich energetického využitia, ktoré sa javí ako problematické, najmä kvôli prítomnosti inkrustujúcich látok anorganického povahy, znižujúcich ich spalné teplo^{3,5}.

Táto práca vznikla za podpory grantu MS SR 1/0483/08.

LITERATÚRA

1. Ružinská E.: Wood Res. 48, 1/2 (2003).
2. Ružinská E.: Papír a Celulóza 57, 5 (2002).
3. Mašura V.: Papír a Celulóza 43, 3 (1988).
4. Sano Z., Endo M.: Jap. Tappi 47, 2 (1993).
5. Marková I., Réh R., Orémusová M.: Acta Fac. Xylol., XXII, 2 (2010), v tlači.

8P-06 STUDIUM VLIVU PERIODICKÉ MODULACE TLAKU NA HYDROGENACI DIENŮ

**ROMAN SNOP, MICHAELA ZEMANOVÁ
a VRATISLAV TUKAČ**

*VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6
roman.snop@vscht.cz*

Zpracování směsí dienů v C₄ a C₅ frakcích produkovaných ethylenovou pyrolýzou a katalytickým krakováním (FCC) představuje výzvu pro organickou technologii a petrochemii.

Selektivitu a rychlost katalytické hydrogenace směsí dienů lze ovlivnit vedle vlastností použitých katalyzátorů také modulací tlaku vodíku.

Hlubší využití surovin v petrochemii vyvolává potřebu intenzifikace a hledání nových produktů. Zajímavou skupinou uhlovodíků jsou dieny obsažené v C₄ a C₅ frakci, které produkují hlavně jednotky ethylenové pyrolýzy a katalytického krakování (FCC).

Hydrogenace představují základní krok pro další využití těchto dienových uhlovodíků. Problémem zůstává dosažení vysoké selektivity k hlavním produktům při vyšších konverzí. Existuje několik potenciálních možností, které mohou vést ke značnému zlepšení selektivity hydrogenací. Kromě vývoje katalyzátorů lze řídit selektivitu také podmínkami reakce. Modulace tlaku může mít pozitivní vliv na průběh heterogenně katalyzovaných reakcí. Díky periodické změně tlaku by mohlo v některých případech dojít k výraznému potlačení difúzního odporu a ke zlepšení selektivity.

Předmětem práce je studium vlivu periodických změn tlaku vodíku na rychlost a selektivitu individuální respektive konkurenční hydrogenace dienů. Byly testovány směsi dicyklopentadienu s isoprenem na katalyzátoru typu egg-shell v drcené a původní peletové formě. Hydrogenace modelové směsi byly vedeny v míchaném nerezovém autoklávu, který byl napojen na jednotku řízení tlakových modulací Bronkhorst.

Tlaková modulace ovlivňuje více průběh hydrogenace DCPD než isoprenu. Na práškovém katalyzátoru je vliv modulací slabý. Při testování konkurenční hydrogenace směsi DCPD a isoprenu na peletové formě katalyzátoru se projevila účinnost tlakových periodických změn hlavně ve smyslu zvýšení selektivity k jinak nejméně preferovaným produktům. Lze tedy konstatovat, že modulací tlaku bylo dosaženo urychlení transportu hmoty v pórech katalyzátoru a usnadnění vnitřní difúze molekul.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.21/2010).

LITERATURA

1. Silveston P. L., Hudgins R. R.: Chem. Eng. Sci. 59, 4055 (2004).
2. Zirkwa I., Wernke R., Grünwald M., Agar D. W.: Chem. Ing. Technik 76, 955 (2004).
3. Skála D., Hanika J.: Chem. Pap. 62, 215 (2008).
4. Skála D., Hanika J.: Pet. Coal 45, 105 (2003).
5. Ayude M. A., Cassanello M. C., Haure P. M., Martínez

- O. M.: *Ind. Eng. Chem. Res.* 44, 9594 (2005).
- Lin Tzong-Bin, Chou Tse-Chuan: *App. Catal.* 108, 7 (1994).
 - Krupka J., Severa Z., Pašek J.: *React. Kinet. Catal. Lett.* 89, 359 (2006).
 - Alves J. A., Bressa S. P., Martínez O. M., Barreto G. F.: *Chem. Eng. J.* 99, 45 (2004).
 - Liu G., Mi Z., Wang L., Zhang X.: *Ind. Eng. Chem. Res.* 44, 3846 (2005).
 - Zou Ji-Jun, Zhang Xiangwen, Kong Jing, Wang Li: *Fuel* 87, 3655 (2008).
 - Tukač V., Hanika J., Chyba V., Handlová M., Stanov Z., Lederer J., Kolena J., Kubička D., Kubičková I., Jiříčný V., Stavárek P.: *Kinetika 4. část. Závěrečná výzkumná zpráva etapy A projektu FT-TA/039 za rok 2007.*

8P-07**STUDIUM VLASTNOSTÍ BIODEGRADABILNÍHO HYDROGELU**

**STANISLAV ŠUSTEK, LADISLAV SVOBODA
a MIROSLAVA MATOUŠKOVÁ**

*Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice
stanislav.sustek@student.upce.cz*

Hydrogely, neboli superabsorpční polymery, jsou hydrofilní, síťované materiály, které jsou schopny zadržet velké množství vody nebo vodných roztoků. V minulosti nacházely uplatnění především v hygienických prostředcích, v posledních letech se začaly uplatňovat také v zemědělství, kde slouží pro retenci vody a uvolňování živin. První hydrogely byly založeny čistě na syntetické bázi. V současnosti je snaha připravit biodegradabilní hydrogely založené na přírodních materiálech, případně na hybridech, které jsou tvořeny přírodním materiálem a syntetickou složkou¹.

V této práci byly studovány vlastnosti zesíťovaného biodegradabilního polysacharidového hydrogelu Glycasorb 2060S XP (Glycanex, Německo) s ohledem na možné využití v agrochemických aplikacích. Byla stanovena rychlost botnání tohoto materiálu v destilované vodě a v nasyceném roztoku síranu amonného. Současně bylo zjištěno množství vody, resp. roztoku hnojiva, které je hydrogel schopen pojmout. Analýzou vysušeného hydrogelu připraveného botnáním v roztoku síranu amonného bylo zjištěno, že obsahoval 16,75 % dusíku a 18,27 % síry, přičemž výchozí gel tyto prvky neobsahoval². Rychlost uvolňování amonných a síranových iontů byla stanovena pomocí vyluhovacího testu založeného na měření časové závislosti vodivosti vyluhovacího média, kterým byla demineralizovaná voda².

Cílem práce bylo posoudit botnavost a možné využití hydrogelu jako zdroje živin pro výživu rostlin. Absorpce destilované vody činila 50,4 g/g sušiny, v případě nasyceného roztoku síranu amonného na 1g sušiny hydrogelu připadalo 6,4 g roztoku. Veškerá voda se z hydrogelu při laboratorní teplotě ~ 25 °C uvolnila během 24 h. Síran amonný se z hydrogelu do vodného prostředí uvolňoval velmi rychle, k jeho úplnému vyloužení došlo během 20 min. Testovaný

hydrogel má tedy velmi dobré absorpční schopnosti a může být významným zdrojem živin. Tento materiál je uvolňuje do vodného prostředí přibližně stejnou rychlostí, jako granulovaná průmyslová hnojiva, nevykazuje tedy vlastnosti hnojiva s dlouhodobým účinkem.

Tato práce byla finančně podpořena z prostředků výzkumného záměru č. MSM 0021627501.

LITERATURA

- Zohuriaan-Mehr M. J., Kabiri K.: *Iranian Polym. J.* 17, 451 (2008).
- Matoušková M.: *Bakalářská práce.* Univerzita Pardubice, Pardubice 2009.

8P-08**VLIV POUŽITÉHO DRUHU APATITU NA REAKCI S KYSELINOU DUSIČNOU**

**JAN VÍDENSÝ, DAVID GABRIŠ, IVONA
SEDLÁŘOVÁ a MONIKA DRAKSELOVÁ**

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

Rozklad fosfátů kyselinou dusičnou má velký význam v průmyslové výrobě fosforečných hnojiv. Tento proces je výchozí technologickou operací, během které dochází k převedení vodonerozpustné formy fosforu na formu vodorozpustnou, tedy pro rostliny asimilovatelnou. Proces se uskutečňuje v důsledku heterogenní nekatalyzované reakce, která probíhá na mezifázovém rozhraní. Reakční systém je velmi komplikovaný, a proto jsou k jeho popisu použita modelová zjednodušení.

Tato práce se zabývá studiem rozkladu různých druhů apatitu kyselinou dusičnou. Jedná se o reakci mezi kapalnou a pevnou fází, která je vedena tak, že všechny vznikající produkty jsou v systému rozpuštěny. Veškeré experimenty byly prováděny ve vsádkovém izotermním míchaném reaktoru pro počáteční fázi rozkladu s úzkou frakcí částic apatitu 0,315 až 0,400 mm. Kyselina dusičná byla použita v dostatečně velkém přebytku, a to tak, že se její koncentrace během reakce prakticky neměnila. Průběh rozkladu byl sledován vážením nezreagovaného zbytku apatitu po přerušení reakce v daném čase. Výsledkem experimentálních měření jsou závislosti stupně konverze na čase pro různé druhy apatitu. Z průběhu křivek je zřejmé, že například reakce apatitu Kovdor s kyselinou dusičnou je třeba i dvakrát rychlejší než reakce apatitu Kola super s kyselinou dusičnou. Experimentální data byla vyhodnocena na základě vztahů odvozených z modelu nezreagovaného jádra s využitím kinetické rovnice mocninného typu. Byly získány údaje o rychlosti reakce v závislosti na reakčních podmínkách a hodnoty zdánlivého řádu reakce a aktivační energie pro studované druhy apatitu.

9L-01

ANTIMIKROBIÁLNÍ, ANTIOXIDATIVNÍ
A PROTIZÁNĚTLIVÝ ÚČINEK CHINONŮ ZE SEMEN
ČERNUCHY SETÉ

LADISLAV KOKOŠKA

*Katedra tropických a subtropických plodin a agrolesnictví,
Institut tropů a subtropů, Česká zemědělská univerzita
v Praze, Kamýcká 129, 165 21 Praha 6-Suchdol
kokoska@its.czu.cz*

Černucha setá (*Nigella sativa* L.) je jednoletá bylina pocházející z oblasti Středomoří a Středního východu, jejíž semena jsou využívány jako koření a jako léčebný prostředek v tradiční lidové medicíně. Hlavní skupinou látek zodpovědnou za biologické účinky semen jsou chinony, a to především thymochinon (TQ), u kterého byla prokázána celá řada významných farmakologických účinků¹. Jelikož biologická aktivita dalších chinoidních látek vyskytujících se v semenech č. seté není doposud dostatečně prozkoumána, rozhodli jsme se v rámci této studie porovnat *in vitro* efekt TQ s účinky dithymochinonu (DTQ) a thymohydrochinonu (THQ).

Pro testování biologické aktivity byly DTQ a THQ syntetizovány podle dříve popsanych metod^{2,3} z TQ (Sigma-Aldrich, CZ). Prostřednictvím bujónové diluční metody⁴ byl porovnán inhibiční účinek chinonů a potravních konzervantů proti kvasinkám způsobujícím kažení mléčných výrobků na dvou různých hladinách pH (4 a 5,5). Na rozdíl od THQ a TQ, účinkujících v rozsahu MIK od 8 do 128 $\mu\text{g ml}^{-1}$, byl inhibiční efekt potravních konzervantů významně ovlivněn hladinou pH. Výrazná schopnost eliminovat volné radikály byla prokázána především u THQ, a to jak pomocí metody založené na měření přenosu elektronů (DPPH test⁵, $\text{IC}_{50} = 2,4 \mu\text{g ml}^{-1}$), tak i prostřednictvím metody monitorující transfer atomů vodíku (ORAC test⁶, rel. ORAC = 2,6 ekvivalentů troloxu). Výsledky testů zaměřených na inhibici syntézy PGE_2 prostřednictvím testu COX-2⁷ prokázaly výrazné protizánětlivé účinky THQ ($\text{IC}_{50} = 0,02 \mu\text{g ml}^{-1}$) a TQ ($\text{IC}_{50} = 0,05 \mu\text{g ml}^{-1}$), které inhibovaly COX-2 při koncentraci porovnatelné s indomethacinem, látkou běžně používanou při léčbě závažných onemocnění.

Na základě dosažených výsledků se domníváme, že THQ a TQ jsou perspektivními látkami pro využití v potravinářském nebo ve farmaceutickém průmyslu.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 525/08/1179.

LITERATURA

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-Dakhkhny M.: *Planta Med.* 11, 465 (1963).
4. Jorgensen J. H., Turnidge J. D., Washington J. A., v knize: *Manual of Clinical Microbiology*, kap. 118, s. 1526. ASM Press, Washington 1999.
5. Sharma O. P., Bhat T. K.: *Food. Chem.* 113, 1202 (2009).
6. Ou B., Hampsch-Woodil M., Prior R. L.: *J. Agric. Food Chem.* 49, 4619 (2001).
7. Noreen Y., Ringbom T., Perera P., Danielson H., Bohlin L.: *J. Nat. Prod.* 61, 2 (1998).

9L-02

STABILIZATION OF FATS EXPOSED
TO MICROWAVE HEATINGSTANISLAV SEKRETÁR, ŠTEFAN SCHMIDT,
JARMILA HLÁŠNIKOVÁ, and IVANA KOLESÁROVÁ

*Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University
of Technology, 812 37 Bratislava
stanislav.sekretar@stuba.sk*

Microwave heating is one of the most frequently used methods of food preparation today because of its convenience and rapidity. However, the safety of the microwaved food is still questionable¹. Some studies have been published on the effects of microwaves on edible fats and its constituents^{2–9}.

Samples of common edible fats (lard, sunflower and rapeseed oils with/without addition of various antioxidants) were exposed to 20 min microwave heating and their oxidation stability was determined using Rancimat apparatus. Some other parameters (peroxide and *p*-anisidine values, UV spectra) were also used for the monitoring of fat oxidation.

While conventional heating at 155 °C causes only slow increase in peroxide and *p*-anisidine values of samples, microwave heating rapidly increases these values (starting approx. after 4–6 min of heating). Addition of 0,1 % of natural antioxidant formulation (based on a rosemary extract) was necessary to retard the oxidation of fats during microwave heating to the level of conventional heating one. Stability and synergism effect of tocopherols and natural antioxidant formulation was evaluated both in natural vegetable oils (containing tocopherols) and in oils free of tocopherols. In Rancimat measurements the oils containing tocopherols were much more stable (rapeseed oil 12 times, sunflower oil 4 times) than the oils without them. The oxidation stability of all fats after 20 min of microwave heating decreased 2–6 times in comparison with non-irradiated samples. After addition of 0,1 % of natural antioxidant formulation, the strong protective effect was observed in lard and in oils free of tocopherols, slight stabilization effect was observed in natural oils.

This work was supported by the grant APVV-0310-06 and grant VEGA 1/0746/08.

REFERENCES

1. Sekretár S.: *Životné prostredie* 42, 202 (2008).
2. Farag R. S.: *Fat. Sci. Technol.* 96, 215 (1994).
3. 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).
4. Sekretár S., Zelenka M., Schmidt Š.: *Chem. Listy* 91, 711 (1997).
5. Albi T., Lanzón A., Guinda A., Pérez-Camino M. C., León M.: *J. Agric. Food Chem.* 45, 3000 (1997).
6. Albi T., Lanzón A., Guinda A., León M., Pérez-Camino M. C.: *J. Agric. Food Chem.* 45, 3795 (1997).
7. Sekretár S., Schmidt Š., Niklová, I., Kováč M.: *Czech J. Food Sci.* 18, 127 (2000).
8. Sekretár S., Schmidt Š., Zahradníková L., Janáč L.: *Chem. Listy* 100, 724 (2006).
9. Malheiro R., Oliveira I., Vilas-Boas M., Falcão S., Bento A., Pereira J. A.: *Food Chem. Toxicol.* 47, 92 (2009).

9L-03

ANTIOXIDAČNÁ AKTIVITA NIEKTORÝCH
MALOKARPATSKÝCH ODRODOVÝCH VÍNFRANTIŠEK ŠERŠEŇ^a a PETER CHOWANIEC^b

^a *Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského
v Bratislave, Mlynská dolina CH2, 842 15 Bratislava,*
^b *Chowaniec & Krajčírovič, Vinné pivnice Svätý Jur s.r.o.
Horné predmestie 16, 900 21 Svätý Jur
sersen@fns.uniba.sk*

Viacere medicínske štúdie dokumentovali súvis striedameho užívania červeného vína so znížením rizika vzniku kardiovaskulárnych chorôb. To, že striedame pitie červeného vína má zdraviu prospešné účinky možno pripísať jeho antioxidačným vlastnostiam. Je známe, že najmä červené víno obsahuje viacero antioxidantov (flavonoidy: prokyanidíny, antokyani-ny, flavonoly, a iné polyfenolické zlúčeniny – resveratrol, ellagitániny), z ktorých mnohé sú dobrými vychytávačmi rôznych druhov radikálov^{1,2}.

Cieľom práce bolo zistiť antioxidačnú aktivitu (AA) niektorých odrodových vín z produkcie firmy Chowaniec & Krajčírovič zo Svätého Jura a porovnať ich s AA niektorých bežne dostupných ovocných nápojov.

AA sa stanovila spektrofotometricky vychytávaním DPPH radikálov v metanolovom roztoku (10^{-4} mol dm^{-3}). Silu AA sme vyjadrili pomocou hodnôt SC_{50} , t.j. množstva vína, ktoré spôsobí pokles absorpcie pri 517 nm na polovicu.

Zistili sme, že všetky testované vína a džúsy majú AA (tab. I, II a III), pričom najväčšiu AA mali červené vína, ktorá bola ca. 10× väčšia ako AA bielych vín. AA džúsov bola nižšia ako AA červených vín.

Vyššia aktivita červených vín môže byť spôsobená tým, že majú vyšší obsah antioxidantov, ktoré sú obsiahnuté hlavne v šupke. Keďže červené víno sa vyrába tak, že pomleté hrozno sa necháva stať niekoľko dní na šupkách, počas ktorých prebieha kvasenie, ktorého následkom sa zvyšuje obsah alkoholu v rmutu a tým dochádza k lepšiemu vyluhovaniu biologicky účinných látok do rmutu. Je známe, že biele hrozná

Tabuľka I

 SC_{50} hodnoty bielych vín v ml dm^{-3}

Veltlínske zelené	Rulandské šedé	Müller Thurgau	Ryzling vlašský	Tramín červený
33,39	30,79	29,40	29,07	22,44

Tabuľka II

 SC_{50} hodnoty bielych vín v ml dm^{-3}

Frankovka modrá	Cabernet Sauvignon	André	Alibernet	Zweigetrebe
3,13	2,49	2,47	2,28	2,40

Tabuľka III

 SC_{50} hodnoty ovocných štiav v ml dm^{-3}

Alibernet	Jablko	Ananas	Pomaranč	Marhule
17,67	46,67	17,24	8,38	20,62

majú nižší obsah antioxidantov. Navyiac, biele vína sa vyrábajú bez nakvšania na šupkách a aj preto majú aj nižší obsah antioxidantov. Na druhej strane ovocné šťavy sa vyrábajú tiež bez nakvšania a teda, majú tiež nižší obsah anitoxidantov oproti červeným vínam.

Táto práca vznikla za podpory grantu MŠ SR VEGA 1/0145/10.

LITERATURA

- Rodrigo M., Rivera G.: *Free Radical Biol. Med.* 33, 409 (2002).
- Corder R.: *Vino jako lék*. IKAR, 2007.

9P-01

VÝVOJ SYŘÍČÍCH VLASTNOSTÍ MLÉKA

LIBOR BABÁK, PETRA ŠUPINOVÁ a EVA VÍTOVÁ

Ústav chemie potravin a biotechnologií, Fakulta chemická,
Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno
babak@fch.vutbr.cz

V syrařství je vyžadována vysoká kvalita mléka z důvodů zásadního vlivu na jakost sýrů. Výrobní mléko musí splňovat nejen obvyklé požadavky kvality jako je senzoričká jakost, mikrobiologická čistota, absence inhibičních látek atd., ale další specifické požadavky, např. vhodnou syřitelnost a kysací schopnost¹. Syřitelnost je schopnost mléka srážet se syřidlem v důsledku koagulace hlavní mléčné bílkoviny – kaseinu a tvořit tak syřeninu vyžadovaných vlastností². Je ovlivněna chemickým složením mléka, zejména obsahem vápníku v ionizované formě³, množstvím kaseinu a zastoupením jeho jednotlivých frakcí, hodnotou pH, teplotou skladování a dalšími faktory. Při zhoršené syřitelnosti se tvoří málo kompaktní křehká sraženina, takže značné množství syřeniny i tuku odchází do syrovátky a vytvořené sýry se pak vyznačují nízkou hodnotou sušiny. To potom vede k ekonomickým ztrátám při výrobním procesu¹.

Hlavním cílem této práce bylo v průběhu daného období sledovat vývoj syřících vlastností mléka vstupujícího do výroby sýrů s bílou plísní na povrchu (Pribina Příbyslav).

Stanovována tedy byla syřitelnost mléka jako časový interval od přidání syřidla do mléka do objevení prvních vloček srážejícího se kaseinu⁴ pomocí nefelo-turbidimetrického snímače koagulace. Současně byly též analyzovány celkový dusík v mléce a titrační kyselost a studovány jejich vlivy na parametr syřitelnosti. Průměrná hodnota syřitelnosti u syrového mléka činila 295 ± 18 s, u pasterovaného pak 288 ± 44 s. Lze tedy říci, že pasterace statisticky neovlivnila hodnotu syřitelnosti, avšak chyba je více než dvojnásobná. Dále bylo prokázáno, že celkový dusík v mléce nemá vliv na jeho syřitelnost. Naopak u titrační kyselosti byla prokázána statisticky významná souvislost s parametrem syřitelnosti. Lepší syřící vlastnosti má mléko s vyšší titační kyselostí, tedy kyselejší mléko.

Z práce tedy plyne, že je důležité dodržovat konstantní titační kyselost mléka při srážení, dále pak zjišťovat syřitelnost výrobního mléka ještě před přidáním syřidla a podle výsledku pak nastavit celkovou dobu koagulace tak, aby byla ve fázi krájení zpracována pokaždé syřenina o velmi blízkých vlastnostech.

LITERATURA

1. Gajdůšek S.: *Mlékařství II*. MZLU, Brno 1998.
2. Forman L.: *Mlékárenská technologie II*. VŠCHT, Praha 1996.
3. Kratochvíl L.: *Mlékařství*. Státní pedagogické nakladatelství, Praha 1972.
4. Teplý M.: *Výroba sýrů, kaseinů a kaseinátů*. SNTL, Praha 1985.

9P-02

DYNAMIKA OBSAHU ŤAŽKÝCH KOVŮ V ANATOMICKÝCH ČÁSTIACH POHÁNKY JEDLEJ (*Fagopyrum esculentum* Moench.)**JUDITA BYSTRICKÁ*, ALENA VOLLMANNOVÁ, IVETA ČIČOVÁ a JANETTE MUSILOVÁ**

Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva,
Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra
judita.bystricka@centrum.sk

V súčasnej dobe je zaznamenaný zvýšený záujem o pestovanie pseudocereálií. Pohánka jedlá (*Fagopyrum esculentum* Moench.) je zaujímavá pre vysoký obsah bielkovín, vyvážený obsah aminokyselín. Má vplyv na reguláciu krvnej zraňanlivosti a obsahu cholesterolu v krvi a má antioxidačný účinok.

Ťažké kovy sa do potravín dostávajú rôznymi cestami, podobne ako ďalšie kontaminanty, ktoré sa vyznačujú rozdielnym zdrojom pôvodu, vlastnosťami ako aj pôsobením na živé organizmy¹.

V práci sme sledovali dynamiku obsahu ťažkých kovov (Cd, Pb, Cr) v konzumných častiach pohánky jedlej (*Fagopyrum esculentum* Moench.) počas vegetácie. Analyzovali sme 6 odrôd: Pyra, Špačinská, Emka, Kasho, Jana C1 a Hrusowska.

Z dosiahnutých výsledkov možno konštatovať, že v listoch pohánky jedlej (*Fagopyrum esculentum* Moench.) sme namerali najvyššiu koncentráciu ťažkých kovov vo všetkých sledovaných odrodách. Počas vegetácie, koncentrácie obsahu ťažkých kovov mali stúpajúcu tendenciu pri všetkých odrodách aj v stonkách aj v listoch. Najvyššie prípustné množstvá (NPM) olova ($0,2 \text{ mg kg}^{-1}$) a kadmia ($0,1 \text{ mg kg}^{-1}$) stanovené Potravinovým kódexom Slovenskej republiky boli niekoľnásobne prekročené.

Najvyššie prekročenie obsahu kadmia sme zaznamenali v odrode Pyra na konci vegetácie a predstavovalo hodnotu $1,38 \text{ mg kg}^{-1}$. V prípade olova sme takisto prekročili NPM. Najvyššia hodnota bola zaznamenaná u odrody Kasho ($7,30 \text{ mg kg}^{-1}$), čo predstavovalo až 36 násobné zvýšenie a takisto bola zaznamenaná na konci vegetačného obdobia. Pri sledovaní ďalšieho ťažkého kovu, chrómu, ani v jednom prípade a ani pri jednej odrode nebolo zaznamenané prekročenie NPM. Nažky pohánky jedlej (*Fagopyrum esculentum* Moench.) takisto obsahovali nadlimitné množstvá olova a kadmia. Namerané hodnoty olova v nažke pohánky jedlej (*Fagopyrum esculentum* Moench.) boli od $0,3\text{--}1,20 \text{ mg kg}^{-1}$. Najvyššie prekročenie obsahu kadmia v nažke bolo zaznamenané v odrode Hrusowska a Jana C1, pričom v oboch prípadoch malo hodnotu $0,310 \text{ mg kg}^{-1}$.

Naše výsledky naznačujú významné riziko akumulácie ťažkých kovov rastlinami pohánky, preto treba dôsledne sledovať obsahy rizikových kovov v jej konzumných častiach.

Príspevok vznikol s finančnou podporou grantu VEGA 1/0030/09.

LITERATÚRA

1. Bajčan D., Lahučký, L., Stanovič R., Trebichalský P., Timoracká M.: *Výživa a potraviny pre tretie tisícročie „Výživa a nádorové ochorenia“*. SPU, Nitra 2006.

9P-03

VYUŽITÍ EXTRAKCE NADKRITICKOU TEKUTINOU A EXTRAKCE V SOXHLETOVĚ EXTRAKTORU PRO IZOLACI A STANOVENÍ VYBRANÝCH ANTIOXIDANTŮ V BYLINÁCH

PETR DOBIÁŠ^{*}, PETRA PAVLÍKOVÁ, MARTIN ADAM a KAREL VENTURA

*Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
peejay1@seznam.cz*

Antioxidanty jsou látky bránící organismy před škodlivým vlivem volných radikálů, které mohou způsobovat řadu vážných onemocnění, jako jsou rakovina nebo kardiovaskulární nemoci. Tyto volné radikály vznikají v těle jak vlivem vnějšího prostředí (kouření, výfukové plyny apod.), tak vlivem vnitřního prostředí organismu (např. syntéza adrenalinu). Antioxidanty tlumí účinek těchto velmi agresivních látek nebo je převádí do méně reaktivních či zcela nereaktivních stavů.

Antioxidanty lze rozdělit na přírodní a syntetické. Syntetické získáváme přípravou v laboratořích. Přírodní antioxidanty se nacházejí v téměř všech druzích rostlin, ze kterých se musí izolovat s využitím vhodných extrakčních technik. Mezi přírodní antioxidanty patří zejména flavonoidy, kumariny a tokoferoly. Vzhledem k jejich vlastnostem se dnes využívají také v potravinářském průmyslu k zabránění oxidace potravin, např. tokoferoly se přidávají do margarínů nebo vitamin C do piva.

K jejich izolaci z bylin lze využít různých extrakčních technik. V této práci byla využita metoda extrakce s využitím Soxhletova extraktoru, která je stále v praxi využívána jako standardní (normovaná) technika v mnoha odvětvích chemického průmyslu. Z moderních extrakčních metod byla použita extrakce nadkritickou tekutinou (SFE). Jejimi výhodami jsou minimalizace použití organických rozpouštědel a také poměrně krátká doba trvání jednotlivých extrakcí, což je dosaženo prací nad kritickými hodnotami tlaku a teploty daného rozpouštědla (obvykle CO₂). Výsledky získané oběma technikami byly na závěr porovnány z několika různých hledisek, jako např. doby trvání extrakce, výtěžnosti či snadnosti provedení extrakce.

Projekt byl realizován díky finanční podpoře grantového projektu Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR (projekt MSM 0021627502).

9P-04

STUDY OF MOLECULAR CHANGES IN SURFACE LAYERS OF APPLES STORED IN DIFFERENT CONDITIONS

KATEŘINA DUROŇOVÁ^{a*}, JITKA FERDOVÁ^a, IVANA MÁROVÁ^a, and MILAN ČERTÍK^b

*^a Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Purkyňova 118, 612 00 Brno, ^b Slovak Technical University, Faculty of Biochemical Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
katka.duronova@gmail.com*

Process of storage has a significant impact on shelf-life of apples, their overall physiology and content of related substances beneficial to health. In the presented work selected antioxidant parameters and fatty acids (FA) composition in common 3 varieties of apples available year-round in the Czech Republic were analyzed. Apples were stored for 158 days at two types of controlled atmosphere with different oxygen content (regular atmosphere—RA, modified atmosphere with lower oxygen—MA). Biological material was obtained in cooperation with the Institute of Post-Harvest Technology MZLU in Lednice.

Fatty acid analysis was performed by GC/FID/MS system. Activity of antioxidant enzymes (superoxide dismutase – SOD, catalase – CAT, phenolic oxidase – PPO, lipoxygenase – LOX) was determined by spectrophotometric methods. Group antioxidant parameters (total phenolics, flavonoids, antioxidant activity—TAS, Randox) were analyzed spectrophotometrically. Surface microflora was detected by Envirocheck tests (Merck). Light microscopy was used for surface change monitoring.

First, sample preparation for enzyme and FA analysis was optimized. Fruit samples for enzyme analysis were prepared by using liquid nitrogen with the addition of detergent. The highest content in apples exhibited CAT followed by SOD, LOX and PPO. Higher and more stable enzyme activities were measured in modified atmosphere. Enzyme activities differed according to storage phase; at the beginning mainly high SOD and LOX activities were observed. CAT and PPO act probably synergistically and are activated as defence systems in ripened and/or damaged fruits. Red apples exhibited generally shorter vitality than green apples.

For FA analysis from apple fruits previous isolation and separation of lipid fractions by TLC was necessary. FA distribution changed during storage similarly in all tested apple varieties stored in all conditions – saturation degree increased with time, so, levels of saturated FA increased, while some other decreased. In all apple fractions major fatty acids (above 10 %) are palmitic, stearic, oleic and linoleic acid.

Modified atmosphere seems to be probably more favourable for maintaining of biological activity of apple fruits. Nevertheless, the differences are relatively low and the high average intake of apples in Czech population (cca 600 g/ week) contributes to their importance as natural antioxidant source.

This work has been supported by project 2B08057 of the Czech Ministry of Education.

9P-05

IDENTIFIKACE SENZORICKY AKTIVNÍCH LÁTEK V BEZU ČERNÉM (*Sambucus nigra*)**EVA HÝSKOVÁ, RADKA MOKÁŇOVÁ, EVA VÍTOVÁ* a JANA ZEMANOVÁ***Fakulta chemická VUT v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno
evavitova@post.cz*

Bez černý (*Sambucus nigra*) získává v posledních letech stále větší význam ať už pro jeho vonné a chuťové vlastnosti způsobené těkavými senzory aktivními látkami, nebo pro obsah účinných látek, které mají pozitivní vliv na lidské zdraví. Má široké využití v léčitelství, farmacii i potravinářství. Využívají se všechny části keře – květy, plody i listy¹. Květy obsahují glykosidy (sambunigrin a rutin), éterické oleje, slizovité látky a některé organické kyseliny a vitamíny. Rutin zvyšuje pružnost cév, snižuje hladinu LDL cholesterolu a má významné antioxidační účinky. Odvar ze sušených květů je močopudný, podporuje pocení, snižuje horečku a mírní kašel.

Plody bezu (bezinky) obsahují organické kyseliny (jablečná, citronová, vinná), cukry glukosu a fruktosu a vitamíny, především A a C. Blahodárné účinky mají při léčení migrén a jiných nervových chorob. V syrových a především nezralých plodech planého bezu se nachází poměrně vysoké koncentrace toxického sambunigrinu (až 0,1 mg l⁻¹ šťávy). Sambunigrin je kyanogenní glykosid, který při požití vyvolává nevolnost, průjem, závratě, zimnici. Proto jsou v čerstvém stavu plody bezu jedovaté a měly by se konzumovat pouze po tepelné úpravě. Mají široké využití pro přípravu marmelád, džemů, povidel, kompotů, sirupu nebo bezinkového vína. Šlechtěné odrůdy bezu obsahují této toxické látky asi o jeden řád méně než plody planého bezu. Vzhledem k vysokému obsahu anthokyanových barviv má šťáva z plodů bezu tmavočervenou až fialovou barvu a používá se jako přírodní potravinářské barvivo. Tyto látky se zároveň řadí mezi významné antioxidanty².

Významnými pěstiteli šlechtěných odrůd bezu jsou Dánsko, Maďarsko a Rakousko. Český potravinářský průmysl využívá zatím pouze dovažené zmražené plody, které se přidávají jako ovocná složka do jogurtů. S pěstováním šlechtěných odrůd u nás se v podstatě teprve začíná, nicméně zvyšující se poptávka po produktech z černého bezu zvýšila i vědecký zájem o tuto rostlinu. Široké spektrum zdraví prospěšných látek obsažených v bezu by mohlo v podobě vhodných moderních potravinářských výrobků obohatit spotřební trh.

Cílem této práce bylo identifikovat a kvantifikovat těkavé senzory aktivní látky ve vybraných odrůdách bezu černého pomocí mikroextrakce tuhou fází ve spojení s plynovou chromatografií s hmotnostní detekcí (HS-SPME-GC-MS). Byly analyzovány sušené plody, mražené plody, bezová šťáva, kompot a květy.

LITERATURA

1. Kowalchik C., Hylton W. H., v knize: *Rodale's Illustrated Encyclopedia of Herbs*, s. 178. Rodale Press, 1998.
2. Veberic R., Jakopic J., Stampar F., Schmitzer V.: *Food Chem.* 114, 511 (2009).

9P-06

DETERMINATION OF PHENOLIC COMPOUNDS IN CEREAL PRODUCTS**ANDREA LICHNOVÁ, HEDVIKA VONDRÁČKOVÁ, and IVANA MÁROVÁ***Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Purkyňova 118, 612 00 Brno
xclichnova@fch.vutbr.cz*

Phenolic compounds are a group of natural antioxidants, which can protect organism against negative effects of free oxygen radicals. Main nutrition sources of phenolics are cereals, fruits, vegetables and some beverages as tea, coffee and wine. Cereal foods and products belong to basic part of human nutrition. Except phenolics they contain high amount of sugars, proteins, dietary fiber, vitamins and minerals. There are many studies about benefit health effect of cereals in prevention of cardiovascular diseases, cancer and hyperlipidaemia. This beneficial effect could be partially caused by phenolics. Many cereals are mixed with other components (e.g. cocoa, nuts, seeds, honey, chocolate and dried fruit), which could enhance beneficial effect of cereal product.

The aim of presented work was to optimize methods for analysis of phenolic content in different cereal matrixes – raw cereals or cereal processed by different methods (e.g. flakes, chips). In 24 kinds of cereal materials some group parameters – total phenolics, total flavonoids and antioxidant activity were measured by spectrophotometry. Individual phenolics were analyzed by HPLC/UV-VIS and identified by HPLC/PDA/ESI-MS. Sugar part of glycoside was determined by HPLC/RI.

Phenolics form a heterogenous group of compounds at different polarity. Thus, separate analysis of polar and less polar compounds was done. First, extraction procedure for isolation of phenolics from different cereal material was optimized according to group of analyzed derivatives. Direct water extraction, methanol and methanol/water extraction was compared with ethylacetate extraction followed by vacuum evaporation. Further, glycoside and aglycone analysis was performed, thus, glycoside hydrolysis conditions were tested.

HPLC conditions were optimized too. For phenolic separation Kinetex C18, Kinetex HILIC (Phenomenex) and Zorbax EclipsePlus C18 (Agilent) columns were tested. Separation was done in isocratic as well as gradient mode using different ratio of methanol, acetonitril and acidified water. Qualitative analysis and identification of individual derivatives was evaluated based on PDA and MS data. Quantitative analysis was performed using external calibration. In cereal samples about 30 different phenolic compounds were identified. In all samples content of phenolic acids – gallic, chlorogenic and ferulic, catechins and catechin gallates and flavonoids – rutin, quercetin, cyanidins were evaluated. Analysis of aglycone phenolics was substantially more reproducible and accurate when compared with glycoside form.

This work was supported by project 2B08057 of the Czech Ministry of Education.

9P-07

KUMULÁCIA Cd A Pb V ZEMIAKOKH A ICH VPLYV NA OBSAH LIPIDOV**JANETTE MUSILOVÁ*, JUDITA BYSTRICKÁ a JÁN TOMÁŠ**

Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra janette.musilova@uniag.sk

Nízky obsah lipidov v zemiakoch robí z tejto plodiny diétnu potravinu. Tvoria asi 0,8 % suchej hmoty (SH), resp. 0,1–0,2 % čerstvej hmoty (ČH)^{1,2}. Lipidy v zemiakoch sú komplexnou zmesou, zahŕňajúcou fosfolipidy, glykolipidy, steroly, glyceridy a masné kyseliny, hlavné zastúpenie má kyselina palmitová, linolová a linolénová³.

V práci sme sledovali vplyv zvýšených obsahov Cd a Pb v pôde na ich kumuláciu v rôznych odrodách zemiakov (Junior, Impala, Adora, Livera, Agria, Asterix, Désirée) a na celkový obsah lipidov v zemiakoch.

Aplikáciou zvyšujúcich sa dávok Cd (0; 3; 5; 10 mg kg⁻¹ pôdy) sa jeho obsah vo všetkých variantoch zvyšoval v jednotlivých odrodách v poradí Asterix-Agria-Livera-Junior: var. A: 0,407–1,090; var. B: 1,675–2,510; var. C: 2,267–2,899; var. D: 2,832–3,513 mg kg⁻¹ SH. Kumulácia Cd v zemiakoch nemala štatisticky preukazný vplyv na obsah lipidov; priemerný obsah lipidov (v %): A: 0,194; B: 0,395; C: 0,255; D: 0,258. Aplikáciou zvyšujúcich sa dávok Pb (0; 70; 105; 140 mg kg⁻¹ pôdy) sa obsah Pb okrem var. A zvyšoval v odrodách v poradí Désirée-Agria-Livera-Impala. V odrode Impala sa potvrdila negatívna korelácia medzi obsahom Pb a lipidov v SH zemiakovej hľuzy. Obsah lipidov (v %): var. A: 0,163–0,193; B: 0,110–0,185; C: 0,130–0,187; D: 0,120–0,160. Rovnako ako v zemiakoch pestovaných v modelových podmienkach vegetačných nádobových pokusov i v zemiakoch z pestovateľských plôch 4 lokalít Hontianskeho a Banskoštiavnického regiónu, ktorý je charakteristický antropickým a prirodzeným typom kontaminácie pôdy, sa zvýšené obsahy Cd a Pb v pôde prejavili ich zvýšenými obsahmi v SH zemiakov (v mg kg⁻¹): Cd 0,156 (Terany) – 1,428 (Prenčov-1); Pb 0,02 (Terany) – 1,92 (Prenčov-2). Ani v tomto prípade sa nepotvrdila súvislosť medzi obsahmi ŤK a lipidov (v %) v zemiakoch: Terany 0,25; Hontianske Nemce 0,20; Prenčov-1 0,31 a Prenčov-2 0,17.

Na základe uvedených výsledkov možno predpokladať, že zvýšené obsahy ťažkých kovov v pôde a ich kumulácia v zemiakových hľuzách štatisticky preukazne neovplyvňujú obsahy lipidov v zemiakoch.

Príspevok vznikol s finančnou podporou grantu VEGA 1/0030/09.

LITERATÚRA

1. Velíšek J., v knihe: *Chemie potravin I*, kap. 3.3, s. 94. Vyd. OSSIS, Tábor 2002.
2. Galliard T.: *J. Sci. Food Agric.* 24, 617 (2006).
3. Matos A. R., Pham-Thi A. T.: *Plant Physiol. Biochem.* 47, 491 (2009).

9P-08

ZÁSOBNÉ BIELKOVINY AKO MARKERY TECHNOLOGICKEJ KVALITY ZRNA *Triticum spelta* L., *Triticum durum* DESF. A *Hordeum vulgare* L.**VERONIKA OSLOVIČOVÁ, MILAN CHŇAPEK, MARIÁN TOMKA a ZDENKA GÁLOVÁ**

Katedra biochémie a biotechnológie, FBP, SPU v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra Veronika.oslovicova@uniag.sk

Obsah a kvalita zásobných bielkovín – glutenínov (pšenica) a hordeínov (jačmeň) je hlavným faktorom ovplyvňujúcim technologickú kvalitu. Jednotlivé HMW glutenínové podjednotky a ich kombinácie sa v genotypoch pšenice vyskytujú s rôznou frekvenciou. V súčasnosti pestovaných kvalitných odrodách sa však ich spektrum zužuje na tie, ktoré majú najvyšší vplyv na kvalitu múky¹.

V nadväznosti na uvedené, sme sa zamerali na detekciu individuálnych HMW-GS elektroforetickou metódou SDS PAGE podľa metodiky ISTA (cit.²) v kolekcii 34 genotypov *Triticum spelta* L. a 35 genotypov *Triticum durum* DESF. a detekciu hordeínov pomocou škrobovej elektroforézy podľa optimalizovanej ČSN 46 1085-1 (cit.³) v súbore 30 genotypov *Hordeum vulgare* L.

Genotypy pšenice špaldy sa vyznačujú viaclínioušťou, pričom bolo identifikovaných spolu 44 rozdielnych línií HMW-GS. Na Glu-A1 lokuse bola najčastejšie detegovaná alela 1, ktorá sa považuje za zdroj vysokej pekárskej kvality. Opačný vplyv mal súbor alel 6+8 najčastejšie detegovaný na lokuse Glu-B1 a 2+12 na lokuse Glu-D1. Glu-hodnotenie bolo určené v rozsahu hodnôt 4 až 8.

Odrody pšenice tvrdej boli homogénne a jednolíniové, pričom bolo identifikovaných 8 elektroforetických profilov. Dominantné zastúpenie predstavovali genotypy pšenice tvrdej s komponentnou skladbou HMW-GS 0, 7+8 s Glu-hodnotením 4 (54 %), čo potvrdzuje možnosť ich využitia pre výrobu cestovín.

V analyzovanej kolekcii jačmeňa siateho bolo detegovaných 29 typov hordeínových alel. Najvýznamnejšie bolo zistenie prítomnosti alely A23, ktorá je potenciálnym markerom vysokej hmotnosti tisícich zrn a alely B47, ktorá je markerom vysokého obsahu extraktu v sušine sladu.

Táto práca bola riešená v rámci grantovej výskumnej úlohy VEGA č. 1/0471/09.

LITERATÚRA

1. Metakovsky E. V., Branlard G.: *Theor. Appl. Genet.* 96, 209 (1998).
2. Wrigley C. W.: *Seed Analysis 1992*, 17.
3. Bradová J., Sýkorová S.: *Optimalizace metod elektroforézy proteinů pro identifikaci odrůd ječmene (Hordeum vulgare L.)*, s. 36. VÚRV Praha, Praha 2006.

9P-09
DETEKCIA CELIAKÁLNYCH AGENS
IMUNOCHEMICKOU METÓDOU

EVA PALENČÁROVÁ a ZDENKA GÁLOVÁ

*Katedra biochémie a biotechnológie, FBP SPU v Nitre,
 Tr. A. Hlinku 1, 949 76 Nitra
 eva.palencarova@gmail.com*

Celiakia je jednou z najrozšírenejších potravinových intolerancií na svete. Proamínové bielkoviny pšenice, raže, jačmeňa a ovsá vyvolávajú u geneticky prediponovaných jedincov poškodenie štruktúry sliznice tenkého čreva¹. Vhodnou terapiou pri tomto celoživotnom ochorení je bezgluténová diéta, pri ktorej pacient musí vylúčiť zo svojej stravy produkty z uvedených cereálií². Veľmi dôležité je presné testovanie prítomnosti, resp. neprítomnosti celiakálne aktívnych bielkovín v potravinách. Jednou z najpoužívanejších imunochémických metód používaných na detekciu protilátok je ELISA-test, ktorý využíva interakciu antigénu so špecifickými protilátkami za tvorby imunokomplexu antigén-protilátka.

V našej práci sme použili na detekovanie prítomnosti gluténu Elisa test RIDASCREEN® Gliadin pre kvantitatívne stanovenie gliadínov od firmy R-Biopharm, SRN. Vo vzorkách vybraných genotypov (pšenica, raž, jačmeň, ovos, pohánka, láskavec) bola stanovená absorbanca roztoku pri 450 nm. Zo zostrojenej kalibračnej krivky sme zistili hodnotu koncentrácie prolaminov. Obsah gluténu v sledovaných genotypoch láskavca sa pohyboval v rozmedzí 0,05–0,18 g kg⁻¹, v genotypoch pohánky od 0,01 g kg⁻¹ do 0,16 g kg⁻¹. V analyzovaných genotypoch pšeníc, raže a jačmeňa sa potvrdil nadlimitný podiel prolaminov. Obsah gluténu varíroval pri pšenici od 5,2 g kg⁻¹ do 115 g kg⁻¹, v jačmeni od 28,3 g kg⁻¹ do 283 g kg⁻¹, v genotypoch raže od 2,2 g kg⁻¹ do 30,9 g kg⁻¹. V analyzovaných genotypoch ovsá bol priemerný obsah gluténu taktiež nadlimitný (5,1 g kg⁻¹), avšak vo dvoch genotypoch (Valentín – 0,06 g kg⁻¹ a Detvan – 0,15 g kg⁻¹) sme zaznamenali akceptovateľné hodnoty. Vylúčenie ovsá z bezlepkovej diéty je stále predmetom diskusií. Až na niekoľko výnimiek, klinické štúdie preukázali, že dlhodobé užívanie ovsá nespôsobuje klinické alebo histologické poškodenia u detí ani dospelých s celiakiou³.

Získané výsledky potvrdili, že pseudocereálie sú perspektívnou skupinou plodín vhodných na rozšírenie potravinového spektra pri celiakii, nakoľko prítomné prolaminý majú iba nízke zastúpenie a obsah glúenu neprekračuje povolené množstvo 0,2 g kg⁻¹.

Táto práca bola riešená v rámci grantovej výskumnej úlohy VEGA č. 1/0471/09.

LITERATÚRA

1. Mowat A.: The Lancet 361, 1290 (2003).
2. Wieser H., Koehler P.: Cereal Chem. 1, 85 (2008).
3. Haboubi N. Y., Taylor S., Jones S.: Postgrad. Med. J. 82, 672 (2006).

9P-10
ANALYSIS OF CAROTENOIDS PRODUCED
BY SEVERAL RED YEAST STRAINS USING
DIFFERENT TYPES OF WASTE SUBSTRATES

SINIŠA PETRIK, ANDREA HÁRONIKOVÁ, TEREZIE
DVOŘÁKOVÁ, and IVANA MÁROVÁ*

*BUT, Faculty of Chemistry, Department of Food Science and Biotechnology, Purkyňova 118, 612 00 Brno
 marova@fch.vutbr.cz*

Carotenes are responsible for the orange colour of many fruits and vegetables. Despite the availability of a variety of natural and synthetic carotenoids, there is currently renewed interest in microbial sources – bacteria, yeasts and fungi. There are many yeast strains able to produce some carotenoids, mainly as a part of their response to various environmental stresses.

The aim of this work is to control production of carotenoids in red yeast cells. Different yeast strains (*Sporobolomyces* sp., *Rhodotorula* sp. and *Cystofilobasidium* sp.) will be compared. Each strain was cultivated at optimal growth conditions and in medium with modified nutrient sources. Synthetic media with addition of complex substrates (e.g. yeast extract) as well as some waste materials were used for yeast growth. To increase the yield of carotenoid pigments at improved biomass production, several types of alternative nutrition sources were tested. As waste substrates materials from dairy, fruit and vegetables processing and cereal production were used – pear and apple mass, apple fibre, pasta, whey, various cereals and glucose as a control. Analysis of carotenoids after disruption of cells with acetone, saponification, extraction by ethyether and vacuum evaporation was performed by HPLC/UV-VIS and verified by HPLC/PDA/ESI-MS

The best production of biomass was obtained in all tested strains during cultivation in mineral/glucose medium with yeast extract. The highest biomass production in optimal conditions was reached in *Rhodotorula glutinis* CCY 20-2-26 (about 35 g l⁻¹ in laboratory fermentor), while production of other strains was about 30–80 %. Most strains were able to utilize waste substrates containing glucose rests. The best results of biomass and carotenoid production were obtained in all strains grown on processed whey substrate. Addition of protein-less whey into production medium led to 2–4× increased production of beta-carotene without changes in yeast growth. Non-processed whey added to production media led to about 3× increase of beta-carotene production but it was accompanied by lost in biomass. *S.roseus* and *R.aurantiaca* produced higher carotenoid amount (1.3× and 2.5×, respectively) in presence of waste apple mass, while *R.glutinis* utilized this substrate only partially. From tested cereal substrates crushed pasta was the best one, in all strains except *C. capitatum* higher carotenoid production was reached when compared with control. *R.glutinis* was able to utilize meal substrate; biomass production was slightly lower and carotenoid yield was about 1.5× higher than in glucose medium.

In conclusion, changes in medium composition and mild nutrition stress can induce changes in biomass as well as carotenoid production. Some agriculture and food industry waste

substrates can be used as medium component, which can induce carotenoid-rich biomass production and contribute to final biomass quality. Such dried carotenoid-enriched red yeast biomass could be directly used in feed industry as well as in pharmacy as nutrition supplement.

This work was supported by project MSM 0021630501 of Czech Ministry of Education.

9P-11

STABILITY OF LIPID FRACTION OF SOYBEAN SPREADS CONTAINING LINSEED

ŠTEFAN SCHMIDT, FRANTIŠEK KREPS,
STANISLAV SEKRETÁR, and JARMILA
HLÁŠNIKOVÁ

*Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, 812 37 Bratislava
stefan.schmidt@stuba.sk*

Flax is becoming a prospective crop that is grown in a wide temperature range, in particular for textile use and production of oil from flax seed. Its excellence is in a high content (58–60 %) of alpha linolenic acid¹. This essential fatty acid is present in the human body as a precursor of biosynthesis long chain n-3 fatty acids. Flax seeds contain also significant amount of health beneficial lignans, which are able to reduce cancer cells for example^{1,2}. With the benefits mentioned above are flax seeds and pressed flax oils used as a progressive food ingredient with high biological value.

Soya spreads were subjected to a storage experiment with 5, 7 and 10 % additions of crushed flax seeds. From fresh and stored spreads were extracted lipid parts, which were characterized by iodine number in the range from 126,9 to 132,2 (as Hanus method), depending on the addition of flax seeds to spreads. To be connected with increased proportion of flax seeds, the content of alpha-linolenic acid was increased as well. Furthermore, the oxidation stability was determined by peroxide content and by values of induction periods (Rancimat apparatus). The best results of oxidation stability derived from evaluated spreads were achieved in spreads with addition of 5 % flax seed and containing 10,1 % of essential linolenic acid.

This work was supported by the grant APVV-0310-06 and grant VEGA 1/0746/08.

REFERENCES

1. Przybylski R., in book: *Bailey's Industrial Oil and Fat Products*, 6th Edition, Vol. 02, p. 281. J. Wiley, Hoboken, New Jersey 2005.
2. Fradet V., Cheng I., Casey G., Witte J. S.: *Clin. Cancer Res.* 15, 2559 (2009).

9P-12

STUDIUM ŽIVOTASCHOPNOSTI PROBIOTIK Z KOMERČNÍCH PREPARÁTŮ

PETRA ŠUPINOVÁ a LIBOR BABÁK

*Ústav chemie potravin a biotechnologií, Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno
xcsupinovap@fch.vutbr.cz*

Zdraví člověka do značné míry závisí na střevní mikroflóře. Tato mikroflóra přispívá k řádnému průběhu metabolických procesů ve střevě a působí jako bariéra. Brání usazení patogenních bakterií. Růst a metabolismus mnoha mikroorganismů osídlujících tlusté střevo závisí zejména na dostupných substrátech. Živé mikroorganismy jsou označovány jako probiotika a substráty jako prebiotika. Je nezbytné tyto dva pojmy rozlišovat¹. Dávka 10^6 až 10^9 CFU denně se považuje za minimální účinnou pro terapeutické účely². Optimální terapeutická denní dávka je uváděna v rozsahu 10^{10} – 10^{11} CFU¹.

Mezi probiotika obsažená v preparátech je možno zařadit některé druhy rodu *Lactobacillus* a *Bifidobacteria*, ale také grampozitivní koky rodu *Lactococcus*, *Streptococcus* a *Enterococcus*³. Kromě bakterií se zde mohou vyskytovat i kvasinky, nejčastěji rodu *Saccharomyces*.

Nejvíce využívanými prebiotika jsou inulin, froktooligosacharidy, galaktooligosacharidy, laktulóza a laktitol³.

Předmětem našeho výzkumu bylo studium životaschopnosti probiotik z komerčních preparátů ve vodném prostředí v závislosti na čase. Jedna kapsle probiotického preparátu byla rozpuštěna ve 25 ml média o různém složení. Zkumavka se šroubovacím víčkem byla uzavřena pro zajištění minimálního přístupu kyslíku a kultivována v temnu při pokojové teplotě po dobu 48 h. Po ukončení kultivace byly odebrány vzorky, v nichž byly mikroskopicky počítány živé a mrtvé buňky.

Z výsledků vyplývá, že již na počátku bylo v preparátu asi 24 % mikroorganismů mrtvých, což mohlo být dáno končící dobou expirace. Po ukončení kultivace se úmrtnost mikroorganismů pohybovala v rozmezí asi 30–38 % v závislosti na složení média. Počet živých mikroorganismů se při všech měřeních pohyboval v rozmezí asi $1,7$ – $2,2 \cdot 10^{10}$ jednotek tvořících kolonie (CFU), což je považováno za účinnou terapeutickou dávku. Z výsledků vyplývá, že je možné udržet probiotika z komerčních preparátů životaschopné v dostatečném množství i po rozpuštění ve vodném prostředí po 48 hodinách.

LITERATURA

1. Macfarlane G. T., Cummings J. H.: *BMJ* 318, 999 (1999).
2. Sýkora J., Schwarz J., Siala K.: *Pediatr. pro Prax.* 5, 264 (2006).
3. Collins M. D., Gibson G. R.: *Am. J. Clin. Nutr.* 69, 1052 (1999).

9P-13

ZRANITEĽNOSŤ PÔDY V OBLASTI STRÁŽSKE Z POHĽADU JEJ EKOLOGICKÝCH FUNKCIÍ VZHLADOM NA Cd, Pb A Ni**JÁN TOMÁŠ*, JURAJ ČÉRY a JÚLIUS ÁRVAY**

*Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra
jan.tomas@uniag.sk*

Prístup k stanoveniu indikátorov zraniteľnosti pôdy z pohľadu jej ekologických funkcií musí byť komplexný, má vychádzať a zohľadňovať ich vzájomné pôsobenie ako aj ich fyzikálno-chemické vlastnosti jednotlivých kontaminantov^{2,3}.

V práci sme sledovali, vzájomné vzťahové korelácie medzi rizikovými prvkami a pôdnymi vlastnosťami, taktiež sme sa snažili overiť mobilitu rizikových prvkov v sledovanom pôdnom profile formou sekvenčnej analýzy.

Výmennú pôdnu reakciu sme zhodnotili úrovni mediánu ako slabo-kyslú ($6,34 \pm 0,771$). Percentuálny obsah humusu ($1,92 \pm 0,190$) sme zhodnotili na úrovni strednej hodnoty ako mierne humózne. Hodnoty zistenia pseudototálnych obsahov ťažkých kovov resp. ich stredných hodnôt boli nasledovné: Cd $0,55 \pm 0,112 \text{ mg kg}^{-1}$; Ni: $33,5 \pm 11,738 \text{ mg kg}^{-1}$; Pb: $15,825 \pm 3,325 \text{ mg kg}^{-1}$. Stredné hodnoty mobilných obsahov sledovaných rizikových prvkov bola určené hodnotami: Cd: $0,028 \pm 0,006 \text{ mg kg}^{-1}$; Ni: $0,185 \pm 0,073 \text{ mg kg}^{-1}$; Pb: $0,27 \pm 0,494 \text{ mg kg}^{-1}$. Z hodnotenia korelačných koeficientov a indexov determinácie z korelačnej matice premenných (celkového a mobilného obsahu rizikových prvkov) vyplýva antagonistický vzťah skúmaných premenných len u Pb. Percentuálna výťažnosť mobilných a pre rastlinu prístupných frakcií z celkového obsahu Cd tvorila 21,67 %. Medzi extrakčnými činidlami z I. a II. frakcie sme zistili významnú korelačnú závislosť, keďže ich vzájomný koeficient determinácie mal hodnotu $R^2 = 0,992$. Nikel sa vyextrahoval v najväčšom množstve v VII. reziduálnej frakcii, kde tvoril 66,7 % podiel. Zo štatistického hľadiska sme zistili vysokú korelačnú závislosť medzi I. a IV. sekvenčným činidlom v prvku Ni ($R^2 = 0,964$). Olovo sa najviac extrahovalo do V. a IV. frakcie (V. frakcia: 34,23 %; IV. frakcia: 30,2 %), čo súvisí so schopnosťou olova koprecipitovať s oxidmi železa a mangánu.

Na základe uvedených výsledkov možno predpokladať, zvýšenú rizikovosť prijateľnosti Cd rastlinami, čo sa nám aj štatisticky potvrdilo a upriamuje týmto našu pozornosť na remedičné opatrenia.

Príspevok vznikol s finančnou podporou grantu VEGA 1/0339/08.

LITERATÚRA

1. *Alas krajiny Slovenskej republiky*, MŽP SR, 342 (2002).
2. Bajčan D., Lahučký L., Stanovič R., Árvay, J.: *LX. Baskoštiavnicke dni*, s. 33–38 (1999).
3. deMatos A.T., Fontes M. P. F., daCosta L. M., Martinez M. A.: *Env. Pol.* 111, 429 (2001).

9P-14

ZDROJE ORTUTI V POTRAVINÁCH**TOMÁŠ TÓTH*, JUDITA BYSTRICKÁ, ALENA VOLLMANNOVÁ, PAVOL TREBICHALSKÝ a JURAJ TÓTH**

*Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra
tomas.toth@uniag.sk*

V životnom prostredí sa ortuť nachádza v rôznych chemických formách. Jednou z najtoxickjších foriem je metylortuť. Jej afinita k síre a k SH-skupinám je hlavným faktorom určujúcim biochemické vlastnosti Hg a jej zlúčenín. Ortuť sa v prírodnom prostredí nachádza prirodzene v rôznych množstvách, ako súčasť hornín, hlavne vo forme sulfidov. Ako reziduálna sa môže taktiež vyskytovať v potravinách. Zdroje expozície týmto prvkom pre ľudí môže pochádzať z prostredia ako aj z konzumácie kontaminovaných potravín alebo vody.

Prítomnosť Hg a jej zlúčenín v potravinách môže mať nepriaznivý vplyv na zdravie človeka a zvierat. Vo vodnom prostredí sa dostáva do planktónu a rýb a následne potravinovým reťazcom až do organizmu človeka. Otravy organickou ortuťou sa vyskytujú v dôsledku kontaminácie potravín metylortuťou (ryby a plody mora). Geogénne zdroje v pôdach sú späté s mineralizovanými zónami, antropogénne zdroje s bankou, priemyselnou činnosťou, so spaľovaním fosílnych palív, s dopravou, poľnohospodárskou činnosťou alebo aj s cezhraničnou atmosférickou kontamináciou.

Obsah Hg v pôde je na celom území Slovenska o niečo vyšší v porovnaní s pôdami vo svete. Ohrozené sú oblasti okolo banských a priemyselných centier, najmä Stredný Spiš (Rudňany a Krompachy, lokálne až 45 aj viac násobne prekročenie limitnej hodnoty – $25,132$ až $27,120 \text{ mg kg}^{-1}$), Žiar nad Hronom, Jelšava, Strážske atď. Zlúčeniny Hg nachádzame i v insekticídoch, herbicídoch, fungicídoch, v niektorých medicínskych prípravkoch. Ortuť sa kumuluje v podzemných častiach rastlín, pestovaných na kontaminovanej pôde. Obsahy Hg v zrne potravinárskej pšenice na Strednom Spiši boli $0,012$ – $0,18 \text{ mg kg}^{-1}$ a v semene olejníka až $0,236$ – $0,335 \text{ mg kg}^{-1}$. V organizme sa kumuluje v malom množstve, môže však spôsobiť poškodenie mozgu, nervového systému, obličiek a pečene. Intoxikácia začína ľahkými poruchami čítania, citlivosti končatín, jazyka, zúženie zorného poľa, porucha sluchu, neskôr postihnutý celý nervový systém. Nadmerné množstvo Hg poškodzuje aj časť hrubého čreva a spôsobuje defekty u novorodencov, vypadávanie zubov, degeneráciu nervového systému a svalovú triašku.

Táto práca vznikla za podpory projektu VEGA č. 1/0339/08.

LITERATÚRA

1. Bencko V., Cikrt M., Lener J.: *Toxické kovy v životním a pracovním prostředí člověka*, s. 282. Grada Publ., 1995.
2. Tóth T., Lazor P., Vollmannová A., Tomáš J., Jomová K., Čéry J.: *Chemzi* 3/1, 125 (2007).
3. Tomáš J.: *Stopové prvky v životnom prostredí*, s. 10–18. VES-SPU, Nitra 2000.

9P-15

OBSAH KOBALTU, NIKLU A CHRÓMU VO VYBRANÝCH ODRODÁCH JAČMEŇA SIATEHO V ZÁVISLOSTI OD RACIONALIZAČNÝCH SYSTÉMOV HOSPODÁRENIA**PAVOL TREBICHALSKÝ^{a*}, JULIANA MOLÁROVÁ^b, ALENA VOLLMANNOVÁ^a a JUDITA BYSTRICKÁ^a**

^a Katedra chémie, Fakulta biotechnológie a potravinárstva, Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, ^b Katedra rastlinnej výroby, Fakulta agrobiológie a potravinových zdrojov, Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra
palotre@atlas.sk

V r. 2008 sa realizoval maloparcelový výskum zameraný na vstup mikrobiogénnych prvkov (Co, Ni, Cr) do zrna vybraných odrôd jačmeňa siateho (odrody jarného jačmeňa: Lédi, KM2084, Marthe a Xanadu; odrody ozimného jačmeňa: Gerlach, Malwinta a Graciosa) v závislosti od troch úrovni výživy rastlín: variant bez aplikácie živín a tri varianty s nasledujúcimi dávkami makroprvkov (v kg ha⁻¹): a) 100 N + 4 P + 17 K, b) 80 N + 22,7 P + 36 K, c) 60 N + 22,7 P + 36 K + 25 Ca. Boli vykonané dva typy orby: konvenčná – orba do hĺbky 0,20 m a minimalizačná – do hĺbky 0,10–0,12 m. Plodiny sme zberali v čase plnej zrelosti a po mineralizácii rastlinných vzoriek suchou cestou sme stanovili obsahy mikroelementov metódou AAS na prístroji Varian AA 240FS.

Ani v jednom prípade neboli prekročené najvyššie prípustné množstvá sledovaných prvkov podľa Potravinového kódexu SR. V experimente sa nezaznamenal vplyv odrody na celkový priemerný obsah ťažkých kovov v zrne jačmeňa siateho, okrem chrómu a to len v ozimnom jačmeni v nasledujúcom poradí: Graciosa > Malwinta > Gerlach nezávisle od typu orby. Vplyv výživy na kumuláciu všetkých troch stopových prvkov sa zistil len v jarných odrodách jačmeňa siateho a to nárastom Co a Cr (cit.¹) a redukciami Ni v porovnaní s nevyživovaným variantom. Extrémne skoky sa zaznamenali v odrode KM2084 a to prudkým nárastom obsahu kobaltu vo variantoch s konvenčnou orbou a silným poklesom niklu vo variantoch s minimalizačnou orbou. Väčšia dĺžka vegetačného obdobia ozimných variantov, ktorej následkom bol dlhší účinok klimatických podmienok, mala pravdepodobne vplyv na rôznorodosť príjmu Co, Ni, Cr vo variantoch s aplikovanými makroprvkami. V podstate možno tvrdiť, že agrotechnický zásah do pôdy nemal vplyv na vstup ani jedného zo sledovaných prvkov do zrna jačmeňa siateho.

Príspevok vznikol s finančnou podporou grantu VEGA 1/0030/09 a VEGA 1/0551/08.

LITERATÚRA

1. Shar G. Q., Kazi T. G., Shar L. A., Afridi H. I., Jamali M. K., Arain M. B.: J. Res. Sci. B. Z. Univ. 18, 53 (2007).

9P-16

SLOŽENÍ MASTNÝCH KYSELIN TAVENÝCH SÝROVÝCH ANALOGŮ**EVA VÍTOVÁ, EVA HÝSKOVÁ, RADKA MOKÁŇOVÁ a JANA ZEMANOVÁ**

Fakulta chemická VUT v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno
evavitova@post.cz

Sýrové analogy jsou náhražky přírodních sýrů, při jejich výrobě je mléčný tuk nebo mléčná bílkovina zcela nebo z části nahrazena nemléčnou složkou, nejčastěji rostlinného původu^{1,2}. Nahrazení mléčného tuku rostlinnými tuky způsobuje typické texturní defekty, nedostatečné aroma a chuť výrobku, zhoršuje tavicí vlastnosti, na druhé straně však přispívá ke zdravějšímu poměru nasycených a nenasycených tuků a ke sníženému obsahu cholesterolu. Texturní defekty mohou být minimalizovány vhodnou volbou a kombinací surovin, kdy vznikají analogy téměř identické chuti a struktury jako mají pravé sýry.

Technologický proces výroby sýrových analogů se velmi podobá výrobě klasických tavených sýrů. Zahrnuje výběr ingrediencí, jejich homogenizaci, tavení, přidání regulátorů kyselosti a aditiv, balení a chlazení. Největší vliv na konečné vlastnosti taveného sýra mají emulsifikační soli, které zajišťují uniformní distribuci částic a tím se podílejí na tvorbě struktury a konzistence sýra. Velkou roli hraje také přidání příchutí a jejich zvýrazňovačů, bez kterých by analogy neměly téměř žádnou sýrovou chuť³. Volbou vhodného poměru rostlinných tuků a mléčného tuku, mléčných proteinů a rostlinných proteinů nebo škrobů lze získat výrobky různých vlastností přizpůsobených pro různé aplikace. Jejich hlavní použití je v rychlém občerstvení, školních jídelnách apod. do salátů, sendvičů, sýrových omáček, hamburgerů, polotovarů, pomazánek, strouhaných sýrových směsí atd.^{3,4}. Sýrové analogy mají své místo i na českém trhu, kde zaujímají necelých 10 % z celkové výroby sýrů. Prodávají se tavené, plátkové i blokové a jsou k dostání v celé řadě chuťových variací.

Cílem této práce bylo porovnat složení mastných kyselin tavených sýrových analogů vyrobených s přidáním různých typů rostlinných tuků. Celkový tuk byl ze vzorku extrahován petroletherem. Mastné kyseliny byly převedeny na methylestery s použitím methanolického roztoku KOH jako katalyzátoru a stanoveny plynovou chromatografií.

LITERATURA

1. Roginski H., Fuquay J. W., Fox P. F., v knize: *Encyclopedia of Dairy Science*, s. 428. Academic Press, London 2002.
2. Guinee T. P., Carić M., Kaláb M., v knize: *Cheese: Chemistry, Physics and Microbiology*, s. 349. Elsevier Applied Science, London 1997.
3. Bachmann H. P.: Int. Dairy J. 11, 505 (2001).
4. Tamine A. Y., Shenana M. E., Muir M. E., Dawood A. H.: LWT 32, 50 (1999).

9P-17

ODRODOVÁ ZÁVISLOSŤ OBSAHU FENOLOVÝCH KYSELÍN V PLODOCH ČUČORIEDKY CHOCHOLÍKATEJ A BRUSNICE PRAVEJ**ALENA VOLLMANNOVÁ*^a, MÁRIA TIMORACKÁ^a, JÁN DANIEL^b a MICHAL MEDVECKÝ^b**

^a Slovenská poľnohospodárska univerzita v Nitre, Tr. A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, ^b Regionálne výskumné pracovisko Výskumného ústavu trávnych porastov a horského poľnohospodárstva, 027 55 Krivá na Orave
alena.vollmannova@uniag.sk

Rastlinné fenolové komponenty, ktoré vykazujú ochranné účinky proti oxidačným procesom prebiehajúcimi v bunkách, sú súčasne zodpovedné aj za široké spektrum farieb rôznych druhov ovocia a zeleniny. Práve tieto rastlinné pigmenty sa vyznačujú vysokou antiradikálovou a antioxidantnou aktivitou. Plody drobného lesného ovocia, ako sú čučoriedky¹, brusnice², maliny a černice sú bohatými zdrojmi týchto chemoprotektívnych látok.

Cieľom tejto štúdie bolo sledovanie odrodovej závislosti obsahu vybraných fenolových zlúčenín v plodoch štyroch odrôd čučoriedky chocholíkatej (Reka, Puru, Bluecrop a Sunrise) a troch odrôd brusnice pravej (Runo Bielawski, Ida a Koralle). Fenolové zlúčeniny boli stanovené po kyslej hydrolyze metódou HPLC s detekciou diódovým poľom. Čučoriedky obsahovali 210,42–400,785 mg kg⁻¹ resp. 27,48–51,69 mg kg⁻¹ voľnej kyseliny chlorogénovej resp. kávovej a iba stopy kyseliny *p*-kumárovej, zatiaľ čo brusnice obsahovali iba stopy voľnej kyseliny chlorogénovej, 0–21,33 mg kg⁻¹ voľnej kyseliny kávovej, 15,861–28,006 mg kg⁻¹ kyseliny *p*-kumárovej, 16,697–168 mg kg⁻¹ kyseliny ferulovej a 0–11,514 mg kg⁻¹ voľnej kyseliny sinapovej. V oboch druhoch ovocia boli rádo vo vyššie obsahy esterovo a glykozidicky viazanej kyseliny kávovej (200–1270 mg kg⁻¹ resp. 1480–2383 mg kg⁻¹ v čučoriedkach, 186–336 mg kg⁻¹ resp. 328–515 mg kg⁻¹ v brusniciach), *p*-kumárovej (22–52 mg kg⁻¹ resp. 426–621 mg kg⁻¹ v čučoriedkach a 341–639 mg kg⁻¹ resp. 1436–1952 mg kg⁻¹ v brusniciach) a ferulovej (stopy resp. 150–550 mg kg⁻¹ v čučoriedkach a 129–388 mg kg⁻¹ a 1038–1805 mg kg⁻¹ v brusniciach).

Z pohľadu obsahu sledovaných fenolových zlúčenín možno z analyzovaných odrôd považovať odrodu Bluecrop (čučoriedky) a odrodu Ida (brusnice) za odrody s najväčším benefitom pre ľudské zdravie.

Príspevok vznikol s finančnou podporou grantu VEGA 1/0030/09.

LITERATÚRA

1. Serafini M., Testa M. F., Villano D., Pecorari M., van Wieren K., Azzini E., Brambilla A., Maiani G.: Free Radical Biol. Med. 46, 769 (2009).
2. Sellapann S., Akoh C. C., Krewer G.: J. Agric. Food Chem. 50, 2431 (2002).

9P-18

MOISTURE ADSORPTION CHARACTERISTICS OF DRIED BERRIES AT VARIOUS TEMPERATURES**DAI LONG VU and LIBOR ČERVENKA***

Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
libor.cervenka@upce.cz

Moisture adsorption characteristics of black currant (*Ribes nigrum* L.), black elderberry (*Sambucus nigra* L.), chokeberry (*Aronia melanocarpa*, [Minchx] Ell.) and juniper berries (*Juniperus communis* L.) were studied at 10, 25 and 40 °C using Brunauer – Emmet – Teller¹, Guggenheim – Anderson – de Boer (GAB)² and Peleg sorption equations³. The moisture adsorption isotherms were determined gravimetrically by exposing dry berry samples at various temperature in the presence of different salt solutions.

A reasonable goodness of fit to the experimental data over the entire range of water activities was obtained with Peleg's model with exception of juniper berries where GAB equation gave the best fit^{4,5}. Generally, increasing temperature decreased adsorbed moisture particularly at 10 °C, whereas the adsorption was similar at 25 and 40 °C in the range of 0.10–0.75 water activities for all the berry samples. More water was adsorbed at 40 °C than at 10 or 25 °C above 0.75 a_w. This phenomenon known as crossing the isotherms was well described in many foods of high sugar contents^{6,7}. It can be related to the fact that sugars sorbed relatively small amount of water compared to polymers (protein, starch) at low water activities, whereas high water uptake of sugars or other soluble components was found at higher water activities as documented for dried apricot² or dried mango and pineapple⁷. The monolayer moisture contents were determined in the range of 9.07 to 2.51 % on dry basis and decreased with an increase in temperature of adsorption using the GAB model as in other food system⁸. Caurie's equation was used to obtain data on non-freezing water, surface area of sorption, density of sorbed water and the number of adsorbed monolayers. The bound or non-freezing water was adsorbed onto the exposed surface of the berries in different layers yielding particular surface area. It was evident that non-freezing water, surface area of sorption and the number of adsorbed monolayers of berry samples decreased with the increase in temperature. These decreases were pronounced for temperatures ranging from 10 °C to 25 °C, whereas further increase in temperature lead to slightly decreased values of these parameters.

Values of the net isosteric heat of sorption (q_{st}) were calculated from equilibrium data at different temperatures using Clausius-Clapeyron equation. Isosteric adsorption heat was high for the low water content, indicating the strong link between the adsorbed water and the adsorbent. Higher values for juniper berries (16.5 kJ mol⁻¹) followed by black currant (9.57 kJ mol⁻¹) and black elderberry (8.92 kJ mol⁻¹). In contrast, chokeberry had low net isosteric heat of adsorption (3.16 kJ mol⁻¹) at low moisture content (7 % d.b.). The high net isosteric heat of adsorption indicates a strong link between the adsorbed water and the adsorbent (berries). Starting from moisture content > 15 % (d.b.) for juniper berries and > 10 %

(d.b.) for the rest of the berry samples, q_{st} decreased gradually approaching zero, which meant that isosteric heat was equal to the heat of condensation of water. The corresponding moisture contents can be considered as the limit of “bound” water⁹.

Results showed that the refrigerated storage of dried fruits (berries) may be beneficial to their shelf life stability.

This work is supported by MSMT of Czech Republic (MSM0021627502).

REFERENCES

1. Brunauer S., Emmet P. H., Teller E.: *J. Am. Chem. Soc.* **66**, 309 (1938).
2. Samaniego-Esguerra C. M., Boag I. F., Robertson G. L.: *J. Food Eng.* **13**, 115 (1991).
3. Peleg M.: *J. Food Proc. Eng.* **16**, 21 (1993).
4. Červenka L.: *J. Food Nutr. Res.* **47**, 131 (2008).
5. Červenka L.: *J. Food Proc. Eng.*, v tisku.
6. Falade K.O., Aworth O.C.: *Eur. Food Res. Technol.* **218**, 278 (2004).
7. Talla A., Jannot Y., Nkeng, G. E., Puiggali J. R.: *Dry. Technol.* **23**, 1477 (2005).
8. Ayranci E., Duman O.: *J. Food. Eng.* **70**, 83 (2005).
9. Tsami E., Marinou-Kouris D., Maroulis Z. B.: *J. Food Sci.* **55**, 1594 (1990).

9P-19

POSSIBLE USE OF CHICKEN SKIN TISSUE AS ALTERNATIVE SOURCE OF TYPE I COLLAGEN

ŽIVANGOJKOVIC, ZUZANA MIKULÍKOVÁ, LUCIE ZOUHAROVÁ, STANISLAV OBRUČA, and IVANA MÁROVÁ*

*BUT, Faculty of Chemistry, Department of Food Science and Biotechnology, Purkyňova 118, 612 00 Brno
marova@fch.vutbr.cz*

Collagen is considered to be an important fibrous protein because of its abundance in animal body and its commercial applications. It forms up to 30 % of total body proteins and up to 80 % of total skin proteins. Collagen is present in form of fibrils, providing necessary mechanical strength of tissues exposed to constant tensile forces. Fibrils form extracellular matrix holding cells in place. Collagen occurs in six varieties with different biological roles, and only type I is of importance as material for biomedical usage. Macromolecule conformation, is shown to be triple helix generating (Gly-X-Y)_n pattern as a signature of a collagen¹.

The task of this study was isolation of type I collagen from different animal skin tissues (*collagen type I is in further text referred to as collagen*). As biological sources chicken, fish, turkey and pork skin tissue were tested. Study was oriented at optimization of isolation procedure, determination of amino acid composition and molecular weight of collagen, thermal and chemical stability of collagen, and comparison of economical parameters related to isolation with price of commercial collagen derived from beef achilles tendon. Alternative sources are economically eligible due to absence of BSE contamination threat, commonly associated with beef.

Methods used in this study were: freeze-drying of obtained suspensions; PAGE-SDS vertical electrophoresis; PAGE-SDS microchip electrophoresis on Experion Bio RAD; ultrasonic spectroscopy on HRUS 102 Ultrasonic Scientific.

Final results of isolation were between 6 % yield for pork skin to 14 % yield for fish skin, calculated as 20 % of suspension per kg of raw material. Average water content was determined as 80 %. PAGE-SDS electrophoresis was conducted under different conditions. Results showed ubiquitous presence of collagen type I main fraction with molecular weight of 300 kDa, with two following subunits at Mr about 130 kDa. Data were confirmed using microchip electrophoresis. Thermal stability of suspensions was determined using ultrasonic spectroscopy, showing general pattern of degradation starting at 50 °C followed by total degradation at 70 °C, only chicken collagen remained stable up to 90 °C. Amino acids content showed high percentage of lysine in chicken skin collagen, probably responsible for better thermal stability than beef collagen.

Study demonstrated that it is possible to extract collagen from different animal tissues using non expensive procedures. Basic information regarding physical and chemical properties of suspensions was gathered. Economical aspect of isolation showed potential as it involved very low costs. Price of raw material (less than 2€ per kilogram) when compared with high price of commercial product and relatively simple isolation procedure supports further pursuit in this research.

This work was supported by the project MSM 0021630501 of the Czech Ministry of Education.

REFERENCE

1. Richards F. M., Eisenberg D. S., Kuriyan J.: *Advances in Protein Chemistry. Fibrous proteins: Coiled-Coils, Collagen and Elastomers*, Vol. 70. Elsevier Academic Press, 2005.

10IL-01**AMORFNÍ CHALKOGENIDY – ZAJÍMAVÉ ANORGANICKÉ POLYMERY I „HIGH-TECH“ MATERIÁLY PRO ŘADU APLIKACÍ****MILOSLAV FRUMAR^a, TOMÁŠ WÁGNER^c, BOŽENA FRUMAROVÁ^b, PETR NĚMEC^d a VÁCLAV PARCHANSKI^a**

^a Katedra obecné a anorganické chemie, ^d Katedra polygrafie a fotofyziky, *Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice*, ^c *Centrum materiálového výzkumu Univerzity Pardubice*, ^b *Ústav makromolekulární chemie AVČR, v.v.i., Praha*
miloslav.frumar@upce.cz

Je popsáno a diskutováno složení, struktura, vlastnosti a principy současných i potenciálních aplikací amorfních a sklovitých chalkogenidů, založené na výsledcích jejich mnohaletého studia na pracovištích autorů. Chalkogenidy jsou tvořeny těžšími atomy než silikáty, boráty a většina organických polymerů a jsou dobře propustné v IČ oblasti spektra. To dovoluje jejich využití v IČ optice, v optických senzorech řady chemických látek, při dálkovém monitorování jevů a zařízení spojených s absorpcí a emisí v IČ oblasti spektra. Intenzivní luminiscence chalkogenidů dotovaných prvky vzácných zemin je základem jejich aplikace v IČ zesilovačích, generátorech, při „up-konverzi“ světla v solárních článcích i jinde, při konstrukci IČ laserů pro nekrvavé operace, vláknových senzorů a zesilovačů. Vysoký index lomu většiny chalkogenidových skel je základem nelineárních optických členů, optoelektronických a čistě optických obvodů a v budoucnu jistě i optických počítačů. Elektrické vlastnosti řady chalkogenidů lze ovlivnit elektrickým polem a vytvářet prahové i paměťové spínače. Paměťové buňky mohou pracovat nejen na bázi telluridů (CD, DVD, Blue Ray), ale i na bázi elektrochemických elementů, tvořených tenkou vrstvou chalkogenidu dotovaného Ag⁺ ionty a vytvářejících působením elektrického pole whiskery elementárního Ag, které mohou sloužit jako netěkavé paměťové buňky vysoké hustoty. Výrazné fotostrukturní jevy jsou nejen zajímavé, ale i základem jejich aplikací při tvorbě světlovodů, optických mřížek, i jako fotorezistů vysokého rozlišení.

10IL-02**VÝZNAM JÍLŮ A JÍLOVÝCH MINERÁLŮ V NANOTECHNOLOGIÍCH****DANIELA PLACHÁ*, GRAŽYNA SIMHA MARTYNKOVÁ a MARTA VALAŠKOVÁ**

Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava, Centrum nanotechnologií, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava – Poruba
daniela.placha@vsb.cz

Všeobecně uznávaná definice jílu říká, že jílem je nazýván směsný přírodní materiál, složený z jemně zrnitých minerálů, který je obecně plastický při přiměřeném obsahu vody a ztvrdne po vysušení či vypálení^{1,2}. Jedná se o ryze přiroze-

nou složku půdního prostředí, levnou, běžně dostupnou, netoxickou a pro životní prostředí nezávadnou. Součástí jílu jsou jílové minerály, především fylosilikáty, tj. silikáty s vrstevnatou strukturou. Tento přehled je věnován možnostem využití přirozeně se vyskytujících planárních fylosilikátů.

Vrstvy planárních fylosilikátů 1:1 a 2:1 jsou tvořeny z tetraedrických a oktaedrických sítí. Křemík v tetraedrech může být substituován hliníkem, hliník v oktaedrech hořčíkem a dvojmocným železem. Tato substituce jinými prvky s nižším mocenstvím vede k přebytku záporného náboje na vrstvě. Prostor mezi vrstvami se nazývá mezivrství, které je mezi 1:1 vrstvami bez výplně mezivrstevním materiálem, mezi 2:1 vrstvami jsou v mezivrství molekuly vody a různé hydratované či nehydratované kationy. Podle chemického složení, typu vrstev, velikosti náboje na vrstvě a obsahu v mezivrství jsou jílové minerály klasifikovány podle mezinárodní komise Association Internationale pour l'Etude des Argiles (AIPEA, International Association for the Study of Clays). Největší technologický význam mají skupiny kaolinu, smektitů a vermikulitu^{1,2}.

Tloušťka jedné vrstvy jílových minerálů dosahuje mocnosti cca 1 nm. Tento rozměr umožňuje zařazení těchto materiálů k nanomateriálům, u nichž se předpokládá alespoň jeden rozměr v rozmezí nanometrů. Fylosilikáty jsou běžně používány ve své přírodní formě nebo ve formě modifikované buď vhodnou výměnou anorganických kationů nebo polykationů nebo interkalací organickými molekulami.

Mezi nejvýznamnější produkty, které využívají jílové minerály, patří polymerní nanokompozitní materiály³. Primární úlohou nanočástic jílových minerálů v polymerní matici je vyztužení a zvýšení modulu pevnosti výsledného polymeru. Nanokompozitní materiály obsahující exfoliované nebo interkalované jílové částice však vykazují řadu dalších významných vlastností, kterých lze využít v mnoha aplikacích, např. zvýšení tepelné stability a odolnosti vůči hoření, snížení propustnosti plynů, zlepšení kompatibility jednotlivých fází při přípravě polymerních směsí snížením mezifázového napětí apod. Přídavek jílových minerálů dále obecně snižuje tažnost, koeficient tepelné roztažnosti, mění reologické vlastnosti polymeru apod. Polymerní nanokompozity obsahující jílové částice jsou dnes používány např. v obalových a izolačních materiálech nebo v automobilovém průmyslu.

Velká pozornost je v současnosti věnována farmaceutickým a biologickým možnostem aplikace jílových minerálů, za vzniku nano-biohybridních materiálů, které jsou využívány v oblasti účinného a bezpečného transportu biologicky aktivních molekul, případně vznikají materiály s antibakteriálními účinky^{5,6}. Hybridní materiály tvořené jílovými částicemi a účinnými látkami nabízejí řízené uvolňování léčiv či cílený transport na požadované místo apod.

V oblasti aplikace pesticidů jílové minerály umožňují zvýšení efektu účinných látek, a zároveň brání jejich únikům do prostředí, případně je chrání před fotodegradací. K tomu se využívá tvorba reverzibilních komplexů příslušných pesticidů a jílových minerálů modifikovaných organickými molekulami. Organicky modifikované jílové minerály se rovněž využívají pro přípravu nanosorbentů pro nepolární organické látky, kdy v mezivrství modifikovaného jílu je navázána organická fáze, umožňující sorpci těchto látek. Účinnost takto připravených sorbentů se prokázala velmi vysoká⁷, až 90–100 %.

Zvýšenou pozornost si zasluhují i různé porézní kera-

mické materiály, kdy keramická složka má funkci plniva s polymerní maticí, anebo vystupuje jako samostatná matrice. Keramický cordierit je v průmyslu připraven běžně sinterováním směsi mastku a kaolinitu. Použitím vermikulitu do prekeramických směsí bylo dosaženo zvýšené porozity cordieritové keramiky⁸.

Struktura některých fylosilikátů, například montmorillonitu, obsahuje katalytická aktivní místa, která umožňují jeho použití jako účinného katalyzátoru po příslušné kationové výměně. Tento typ katalyzátorů se používá běžně v organických syntézách⁹. Zároveň fylosilikáty slouží pro ukotvení kovových nanočástic, např. Au, Ag, Fe apod., případně nanočástic oxidů kovů, např. TiO₂.

Zkrácený přehled možností využití jílových minerálů v nanotechnologiích, využívajících jejich charakteristické vrstevnaté struktury, prostoru v mezivrstvi a povrchových vlastností dokazuje, že jílové minerály jsou velmi perspektivní materiály s širokými možnostmi průmyslových, farmaceutických, biologických a environmentálních aplikací.

Tato práce vznikla za podpory grantu ČR 205/08/0869.

LITERATURA

- Weiss Z., Kužvart M.: v knize: *Jílové minerály, jejich struktura a využití*, kap. 1, s. 11–37. Karolinum, Praha 2005.
- Bergaya F. A.: *Microporous Mesoporous Mat.* 107, 141 (2008).
- Paul D. R., Robeson L. M.: *Polymer.* 49, 3187 (2008).
- Simha Martynková G., Buchtík O., Plevová E., Barabaszová K., Holešová S., Valášková M.: *J. Sci. Conf. Proc.* 2, 42 (2010).
- Choy J. H., Choi S. J., Oh J. M., Park T.: *Appl. Clay Sci.* 36, 122 (2007).
- Holešová S., Valášková M., Plevová E., Pazdziora E., Matějová K.: *J. Colloid Inter. Sci.* 342, 593 (2010).
- Plachá D., Martynková Simha G., Rummeli M. H.: *J. Colloid Inter. Sci.* 327, 341 (2008).
- Valášková M., Simha Martynková G., Smetana B., Študentová S.: *Appl. Clay Sci.* 46, 196 (2009).
- Udinn F.: *Metal. Mater. Trans.*, A 39A, 2804 (2008).

10IL-03

MICROSTRUCTURE CHARACTERISATION OF NANOMATERIALS USING XRD, TEM AND EELS

DAVID RAFAJA

*Institute of Materials Science, TU Bergakademie Freiberg, Gustav-Zeuner-Str. 5, D-09599 Freiberg
rafaja@ww.tu-freiberg.de*

Nanocrystalline materials, nanocomposites and nanostructures play increasingly important role in technical applications. Their relevance results mainly from the pronounced relationship between their microstructure and properties, which is often used to achieve desirable materials properties via microstructure design. A prerequisite of the microstructure design is a thorough microstructure characterisation, which is inevitable both for explanation of the relationship

between the materials properties and the microstructure and for verification of the microstructure that was created in a technological process.

From the point of view of technical applications, compact nanostructured materials are the most important ones. Some examples of these materials that will be discussed in the talk are hard and thermally stable nanocrystalline coatings and thin film nanocomposites based on nitrides of transition metals, multilayers containing diamond-like carbon, ultrahard volume nanomaterials based on boron nitride, pearlitic steels, austenitic steels showing the effect of transformation induced plasticity and multilayers with the giant magnetoresistance effect.

Although the applications fields of the nanostructured materials listed above are very different, the main tasks for their microstructure characterisation are similar. In most cases, the essential microstructure features that affect the materials properties are the phase composition, the distribution of individual phases, the mutual orientations of crystallites at the crystallite and phase boundaries, the crystallite sizes, the kind and amount of the residual stresses and the local lattice strains, the local concentration gradients and the kind and density of microstructure defects.

The main problem of the microstructure analysis on nanomaterials is that the above microstructure features cannot be easily distinguished from each other in many cases. It will be shown, how this problem can be solved using a combination of X-ray diffraction, fast Fourier transformation of high-resolution transmission electron micrographs and electron energy loss spectroscopy. The capability of these experimental methods will be illustrated on determination of the phase composition, the mutual orientation of crystallites and the local strain fields in the nanostructures, which contained fcc-(Ti,Al)N/fcc-AlN/w-AlN, fcc-(Cr,Al)N/fcc-AlN, h-BN/w-BN/c-BN, Cr/ta-C, α -Fe/Fe₃C, α -Fe/ γ -Fe and/or Co/Cu interfaces. Furthermore, the effect of these microstructure features on the phase stability and stabilisation of metastable phases will be discussed.

This work was performed within the Cluster of Excellence "Structure Design of Novel High-Performance Materials via Atomic Design and Defect Engineering (ADDE)" that is financially supported by the European Union and by the Ministry of Science and Art of Saxony (SMWK).

10IL-04

"NANO" V BIOMATERIÁLECH PRO OBNOVU KOSTNÍ TKÁNĚ

MONIKA ŠUPOVÁ

*Oddělení kompozitních a uhlíkových materiálů, Ústav struktury a mechaniky hornin AV ČR, v.v.i., V Holešovičkách 41, 182 09 Praha
supova@irms.cas.cz*

Tato přednáška se bude věnovat jak struktuře a složení kostní tkáně na její nanoúrovni, tak přehledu jednotlivých typů biokompozitních materiálů vhodných pro její obnovu a to kovovým, keramickým, polymerním či uhlíkovým, neboť

každý z těchto materiálů je z určitého hlediska výhodný. Zvláštní pozornost bude věnována tzv. kompozitům polymer-polymer, tj. materiálům složených z polymerní výztuže i matrice, neboť takovéto kompozity by mohly nejlépe napodobit extracelulární matrix kostní tkáně. Budou popsány jednotlivé komponenty biokompozitu – nanočástice, nanovlákna, polymerní matrice a také různé způsoby přípravy těchto kompozitních materiálů.

10L-01

STUDY OF LASER INDUCED CRYSTALLIZATION PROCESSES OF (Ag)-Sb-S THIN FILMS

JAN GUTWIRTH^a, TOMÁŠ WÁGNER^{a,b}, PETR BEZDÍČKA^c, MILAN VLČEK^d, SAFA O. KASAP^e, and MILOSLAV FRUMAR^a

^a University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Department of General and Inorganic Chemistry and Research Centre LC 523, Nam. Cs. Legii 565, 532 10 Pardubice, ^b University of Pardubice, Centre for Material Science, Studentska 95, 532 10 Pardubice, ^c Institute of Inorganic Chemistry, AS CR v. v. i., 250 68 Husinec-Rez, ^d Joint Laboratory of Solid State Chemistry of the Institute of Macromolecular Chemistry AS CR, v. v. i. and of University of Pardubice, Studentska 84, 532 10 Pardubice, ^e University of Saskatchewan, Department of Electrical Engineering, Campus Dr. 57, S7N 5A9 Saskatoon
Jan.Gutwirth@upce.cz

Currently applied active materials in phase-change memories are generally Te based. However, research effort to improving current materials or develop new ones still continues, e.g. due to introduction of short wavelength lasers or optics with high numerical apertures.

Thin amorphous (Ag)-Sb-S films were prepared by thermal evaporation (TE) of Sb-S bulk sample and optically induced diffusion and dissolution (OIDD) of Ag into these thin Sb-S films. This procedure allows us to obtain sets of samples with particular Sb:S ratio and increasing content of Ag.

Crystallization behavior of deposited thin films was tested via Ar⁺ ion laser irradiation. Deposited thin films and/or dot laser exposures were characterized by Energy Dispersive X-Ray analysis coupled with Scanning Electron Microscope (composition, chemical homogeneity, surface morphology), UV-Vis-NIR Spectroscopy (optical properties, thickness), X-Ray Diffraction (crystallinity) and Differential Scanning Calorimetry (thermal properties). Dot laser exposures are moreover characterized by transmission optical microscopy and local measurement of optical transmission.

Influence of composition and Ag content on optical and thermal properties and namely on laser induced crystallization processes are determined. Crystallization behavior of prepared thin films was described and discussed.

The authors thank to Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Research Centre LC 523 project, project MSM 0021627501).

10L-02

PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE ANTIBAKTERIÁLNÍCH ORGANOVERMIKULITŮ

SYLVA HOLEŠOVÁ^{a*}, MAGDA SAMLÍKOVÁ^a, MARTA VALÁŠKOVÁ^a a ERICH PAZDZIORA^b

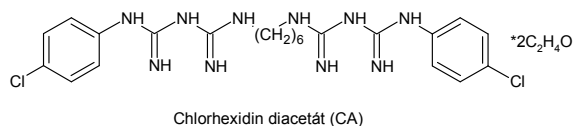
^a VŠB-TU Ostrava, Centrum Nanotechnologií, 17. listopadu 15/2172, 708 33 Ostrava-Poruba, ^b Zdravotní ústav Ostrava, Centrum klinických laboratoří, Partyzánské náměstí 7, 702 00 Ostrava
sylva.holesova@vsb.cz

Vývoj nových materiálů se schopností inhibovat růst bakterií je v současné době jednou z velmi zkoumaných oblastí. Širokou škálu tvoří antibakteriální sloučeniny kotvené na pevné nosiče, jako jsou např. mesoporézní silika, hydroxyapatit nebo také jílové minerály.

Významnou vlastností jílových minerálů je schopnost modifikace jejich vrstevnaté struktury pomocí procesu interkalace. Vermikulit je vysoce nabitý vrstevnatý fylosilikát, jehož strukturu tvoří tetraedrické (základem tetraedru je [SiO₄]⁻), centrální atom Si⁴⁺ může být nahrazen Al³⁺) a oktaedrické sítě (centrálním atomem je převážně Mg²⁺) typu 2:1 spojené pomocí bazálních kyslíků.

Antibakteriální organické sloučeniny kotvené na jílové minerály a tím tvořící tzv. organojíly, mají oproti anorganickým sloučeninám^{1,2} jednu velkou výhodu, a to je organofilicita, která zajišťuje lepší adhezi a tím i vyhubení bakterií.

Chlorhexidin diacetát (CA) je kationová povrchově aktivní látka vyznačující se vysokým antibakteriálním účinkem.



Předmětem studia je kotvení CA na jílový minerál vermikulit za vzniku antibakteriálního organovermikulitu. Naše předešlá práce pojednává o přípravě takového materiálu s využitím Na-vermikulitu a popisuje především antibakteriální chování vůči vybraným kmenům bakterií³. Nyní byly připraveny nové série antibakteriálních organovermikulitů s využitím CA. Jako nosiče byly použity modifikované formy Zn(II), Cu(II) a Ag(I) vermikulitu, které samy o sobě vykazovaly antibakteriální aktivitu. Ta byla stanovena na vybraných kmenech bakterií *E. faecalis*, *E. coli* a *P. aeruginosa*.

Autoři děkují Grantové agentuře ČR za finanční podporu (projekt GAČR 205/08/0869).

LITERATURA

- Rivera-Garza M., Olguín M. T., García-Rosa I., Alcántara D., Rodríguez-Fuentes G.: *Micropor. Mesopor. Mater.* 39, 431 (2000).
- Zhao D., Zhou J., Liu N.: *Appl. Clay Sci.* 33, 161 (2006).
- Holešová S., Valášková M., Plevová E., Pazdziora E., Matějová K.: *J. Colloid Interface Sci.* 342, 593 (2010).

10L-03

IONTOVĚ VODIVÁ CHALCOGENIDOVÁ SKLA SYSTÉMU LiI-Ga₂S₃-GeS₂

JAKUB KOLÁŘ^{a*}, TOMÁŠ WÁGNER^a, VÍTĚZSLAV ZIMA^b, ŠTĚPÁN STEHLÍK^a, BOŽENA FRUMAROVA^b, LUDVÍK BENEŠ^b, MILAN VLČEK^b a MILOSLAV FRUMAR^a

^a Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, ^b Společná laboratoř chemie pevných látek Ústavu makromolekulární chemie Akademie věd České republiky a Univerzity Pardubice, Studenská 85, 532 10 Pardubice bufo-bufo@seznam.cz

Jednou z významných vlastností některých chalcogenidových skel je vysoká iontová vodivost, ta je zajímavá jak z fyzikálně-chemického hlediska, tak i z hlediska potenciálních aplikací. V této práci byla studována iontově vodivá chalcogenidová skla systému LiI-Ga₂S₃-GeS₂. Dvě řady skel, první o složení xLiI-xGa₂S₃-(100-2x)GeS₂, kde x= 15, 20 a 25 a druhá o složení 20LiI-xGa₂S₃-(80-x)GeS₂, kde x= 0, 5, 10, 15 a 20. Skla byla připravena přímou syntézou z prvků a iodidu lithného polovodičové čistoty. Z důvodu citlivosti iodidu lithného a připravených skel na vzdušnou vlhkost byly všechny operace prováděny buď v glove boxu, sondě s kontrolovanou atmosférou či speciálních kyvetách. Složení skel nebylo zvoleno náhodně. První řada skel byla analogická k dříve studovaným sklům¹ systému AgI-Ga₂S₃-GeS₂, druhá řada byla připravena pro sledování vlivu Ga₂S₃ na vlastnosti skla. Hlavní motivací studie těchto skel je srovnání jejich elektrických vlastností s dříve studovanými skly. Elektrické vlastnosti byly studovány metodou imedanční spektroskopie a metodou potenciostatické chrono-amperometrie. Přičemž imedanční spektroskopie poskytla informace o celkové vodivosti a potenciostatická chrono-amperometrie informace o vodivosti elektronové (resp. děrové). Vodivost skel v řadě s proměnným obsahem LiI i Ga₂S₃ rostla s jejich obsahem a byla vyšší než u analogických skel obsahujících stříbro. Řada s proměnným obsahem Ga₂S₃ nevykázala z pohledu vodivosti jednotný trend. Pro lepší porozumění vlastnotím studovaných skel, byla skla studována dalšími metodami. Skelný stav byl ověřen metodou XRD, některé strukturní jednotky studovaných skel byly určeny z dat získaných Ramanovou spektroskopií a tepelné vlastnosti byly studovány metodami DSC a MDSC.

Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky MSM0021627501 a Výzkumnému Centru LC523 Univerzity Pardubice za jejich finanční podporu.

LITERATURA

1. Stehlik S., Zima V., Wagner T., Ren J., Frumar M.: Solid State Ionics 179, 1867 (2008).

10L-04

VISCOSITY OF CHALCOGENIDE GLASS-FORMING MELTS AND ITS CONNECTION WITH CONFIGURATIONAL ENTROPY

PETR KOŠTÁL and JIŘÍ MÁLEK

Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
petr.kostal@upce.cz

Glasses are non-crystalline materials with immense technological importance. Many glassy materials contains nanostructures and essentially are nanomaterials¹. Chalcogenide glasses are interesting materials with unique properties, which have found plenty of applications². For example their optical and electrical properties are used in nanotechnology for construction of memory devices³.

Viscosity is very important physical parameter. However, this is not all. In the case of glasses and their undercooled melts, viscosity influences also the processes of structural relaxation and crystallization. The viscosity interval which is interesting from the view of structural relaxation and crystallization is relatively broad and its determination requires more than one measuring method. Description of this broad viscosity interval is very important because lower viscosity values in the undercooled melt region cannot be measured through rapid crystallization of sample. The empirical (e.g. Arrhenius type of VFT) equations are mostly used for description of this temperature dependence of viscosity. Interesting approach to describe viscosity dependence was introduced by Adam and Gibbs⁴. Their concept, which is called entropy theory, was dedicated for the description of relaxation behavior. However, relaxation time is proportional to viscosity. The Adam-Gibbs theory can be expressed by following equation:

$$\eta = \bar{A} \exp\left(\frac{C}{TS_c}\right)$$

where η stands for viscosity, S_c stands for configurational entropy, T stands for temperature, A and C stand for constants which can be considered as independent on temperature and pressure. Configurational entropy, which is of course temperature dependent, can be determined from the heat capacities of crystal and melt⁵.

This work has been supported by the Ministry of Education Youth and Sports of the Czech Republic under project: LC 523 and the Czech Science Foundation under grant No: 104/08/1021.

REFERENCES

1. Min'ko N. I., Nartsev V. M.: Glass Ceram. 65, 148 (2008).
2. Mehta N.: J. Sci. Ind. Res. 65, 777 (2006).
3. Lee M., Shi L., Tian Y., Gan C., Miao X.: Phys. Status Solidi A - Appl. Mater. Sci. 205, 340 (2008).
4. Adam G., Gibbs J. H.: J. Chem. Phys. 43, 139 (1965).
5. Angell C. A., Borick S.: J. Non-Cryst. Solids 307, 393 (2002).

10L-05**MECHANISMUS VZNIKU NANOČÁSTIC STŘÍBRA PŘI REDUKCI V ALKALICKÉM PROSTŘEDÍ****LIBOR KVÍTEK^a, ROBERT PRUCEK^a, ALEŠ PANÁČEK^a, MIROSLAVA VANDLÍČKOVÁ^b a RADEK ZBOŘIL^a**

^a Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, Tr. 17. Listopadu 12, 771 46 Olomouc, ^b Fakulta speciálního inženýrstva, Žilinská univerzita v Žilíně, Ul. 1. mája 32, 010 26 Žilina
libor.kvitek@upol.cz

Nanočástice stříbra představují zatím jeden z mála nanomateriálů, který již pronikl do běžné lidské praxe. Jejich příprava je poměrně snadná a aplikační potenciál, zejména díky výjimečné antibakteriální aktivitě¹, vysoký. Základní metodu produkce velkých množství nanočástic stříbra představuje redukce rozpustné stříbrné soli vhodným redukčním činidlem. Požadavek na řízení velikosti takto připravovaných nanočástic lze realizovat výběrem reakčního prostředí, redukčního činidla a v neposlední řadě i vazbou stříbrného iontu do vhodné komplexní sloučeniny.

Uvedené proměnné jsou využity v metodě řízené přípravy nanočástic stříbra, založené na modifikované Tollensově reakci². Rozsah řízení velikosti připravovaných nanočástic stříbra koncentrací amoniaku, jakožto komplexotvorného činidla, však vede při určité koncentraci amoniaku k prudkému nárůstu velikosti částic stříbra z několika desítek nm až na hodnotu stovek nm. Jako hlavní důvod pro tento prudký nárůst velikosti částic se ukázala rychlá agregace v systému primárně vyredukovaných nanočástic stříbra vyvolaná vysokou iontovou silou reakčního systému. K této vysoké iontové síle přispívá zejména přidávek NaOH pro zvýšení pH, které je nutné pro průběh redukce kationtu $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ redukujícím cukrem v prostředí s vysokou koncentrací amoniaku. Podrobná studie zaměřená na stanovení kritické koagulační koncentrace (CCC) elektrolytů s různým typem protiiontu (Na^+ a Ca^{2+}) v primárně připravené vodné disperzi nanočástic stříbra navíc ukázala, že hodnota CCC je silně ovlivněna nejen typem protiiontu, jak předpovídá teorie DLVO, ale i vlastnostmi druhého iontu v molekule elektrolytu. Tento efekt je známý v chemii pod pojmem lyotropní řada, ovšem klasická teorie stability koloidních soustav vliv druhého iontu na hodnotu CCC neuvažuje.

Tato práce vznikla za podpory grantů MŠMT ČR č. MSM6198959218, MSM0021620822 a IM6198959201.

LITERATURA

1. Panáček A., Kvítek L., Pucek R., Kolář M., Večeřová R., Pizúrová N., Sharma V. K., Nevěčná T., Zbořil R.: J. Phys. Chem., B 110, 16248 (2006).
2. Kvítek L., Pucek R., Panáček A., Novotný R., Hrbáč J., Zbořil R.: J. Mat. Chem. 15, 1099 (2005).

10L-06**ŠTÚDIUM DISPERZIÍ A TENKÝCH FILMOV NA BÁZE MONTMORILLONITU A FLUORESCENČNÝCH FARBÍV****MARIÁN MATEJDES^a a MARIÁN JANEK^{a,b}**

^a Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina CHI, 842 15 Bratislava, ^b Technologický inštitút, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 13 Bratislava
matejdes@fns.uniba.sk

Příprava nových organicko-anorganických nanokompozitních materiálů nadobudla svou významnost v posledních desítech letech pro jejich možné využití při vylepšení vlastností polymerů¹, ale i při přípravě nových materiálů v jejich kombinaci s polovodivými polyméry s elektroluminiscenčními vlastnostmi. Takéto materiály jsou perspektivně nejen kvůli zlepšeným mechanickým vlastnostem, ale v případě luminiscenčních materiálů mohou poskytnout rozšíření spektrální oblasti v porovnání s konvenčními polovodiči.

Vlastnosti těchto materiálů jsou závislé nejen od vlastností individuálních komponentů, ale také i od jejich morfologických vlastností a charakteru fázového rozhraní. V našem štúdiu sa zaoberáme podmienkami prípravy nanokompozitného materiálu na báze fluorescenčných farbív, pričom úlohu nosného skeletu zastupuje organizovaná štruktúra sodného montmorillonitu. Význam jeho prípravy spočíva v tom, že tento materiál môže v jeho ďalšom využití slúžiť ako úzkospektrálna odozva na excitačné žiarenie, polarizačný člen v optických zariadeniach, prípadne ako zložka v solárnych paneloch alebo v zariadeniach, kde je nutný prenos energie s vysokou účinnosťou.

Vo väčšine prác týkajúcich sa prípravy nanokompozitných materiálov na báze ílového minerálu so záporným vrstvom nábojom a kationových organických molekúl dochádza k tvorbe agregátov organických molekúl na povrchu vrstiev ílového minerálu. Nevýhodou tvorby agregátov je tá, že optické a iné vlastnosti agregátov sú odlišné od vlastností ich monomérnych foriem.

V príspevku k tejto problematike predpokladáme, že vzniknutý problém je možné riešiť pridaním vhodného "spacera" (β -cyklodextrínu), schopného interagovať s jednou organickou molekulou za účelom vzniku supramolekulového komplexu, čoho výsledkom je predpokladané zamedzenie tvorby molekulových agregátov.

Táto práca vznikla za podpory grantu Univerzity Komenského č. UK/143/2009 a grantu Vedeckej grantovej agentúry VEGA, č. 1/4457/07.

LITERATÚRA

1. Lebaron P. C., Wang Z., Pinnavaia T. J.: Appl. Clay Sci. 15, 1 (1999).
2. Bujdák J., Czimerová A., Iyi N.: Thin Solid Films 517, 2 (2008).

10L-07**NANOKOMPOZITY S TiO₂ NANOČÁSTICEMI PŘIPRAVENÉ Z TiCl₄****LUCIE NEUWIRTHOVÁ^a, KATEŘINA MAMULOVÁ KUTLÁKOVÁ^a a TUŽRUL CETYNKAYA^b**^a VŠB – Technická Univerzita Ostrava, Centrum nanotechnologií, 17. Listopadu 15, 708 33 Ostrava,^b Sakarya University Engineering Faculty, FMMI, Esentepe Campus, 54187 Sakarya
lucie.neuwirthova@vsb.cz

Oxid titaničitý (TiO₂) je jedním z nejstudovanějších fotokatalyzátorů, právě pro jeho antibakteriální vlastnosti, dezodorační účinky a schopnost rozkládat organické nečistoty.

Jílové minerály (např. montmorillonit, vermikulit, kaolinit...) jsou netoxické a snadno dostupné materiály, které mají mimořádný význam v řadě průmyslových odvětví, používají se jako sorbenty, filtry, katalyzátory, plniva. Díky těmto unikátním vlastnostem představují vhodné matrice pro nejrůznější funkční nanostruktury a tím je dáno i jejich využití v nanotechnologiích pro pěstování nano a mikro částic.

Jako prekurzor pro přípravu nanokompozitů jsme použili TiCl₄. Nano a mikro částice TiO₂ připravené z TiCl₄ byly ukotveny na různých typech vrstevnatých silikátů a na SiO₂.

Připravené nanokompozity byly charakterizovány pomocí XRFS, RTG, IČ a SEM. Fotokatalytické účinky jsou testovány pomocí jejich fotodegradačních vlastností při měření fotoaktivity.

Při stejném postupu přípravy se nanokompozity liší:

- obsahem TiO₂,
- strukturou a velikostí částic,
- morfologií práškových částic nanokompozitů.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 205/08/0869.

LITERATURA

1. Fujishima A., Hashimoto K., Watanabe T.: *TiO₂ fotokatalýza, základy a aplikace*, Praha 2002.
2. Jianjun L., Xinping L., Shengli Z., Yingchun Y.: *Science Direct* 37, 275 (2007).
3. Šucha V.: *Íly v geologických procesech*. Univerzita Komenského, Bratislava 2001.

10L-08**BIOLOGICKÁ AKTIVITA NANOČÁSTIC STŘÍBRA****ALEŠ PANÁČEK^{a*}, LIBOR KVÍTEK^a, ROBERT PRUCEK^a, MILAN KOLÁŘ^b a RADEK ZBOŘIL^a**^a Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Tr. 17 listopadu 12, 771 46 Olomouc, ^b Ústav mikrobiologie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc
ales.panacek@upol.cz

Nanočástice stříbra tvoří velmi významnou skupinu v oblasti nanomateriálů především díky svým optickým, elektrickým a biologickým vlastnostem, které lze využít v mnoha

aplikačních oblastech, např. v elektronice, katalýze či v lékařství. Biologická aktivita nanočástic stříbra byla intenzivně studována na počátku 20. století, ovšem s objevem penicilínových antibiotik studium antibakteriálních vlastností nanočástic stříbra ustoupilo do pozadí. Současná situace na poli užívání klasických antibiotik v lékařské praxi je spojena s tvorbou bakteriální rezistence, což vede k výzkumu a vývoji nových látek s antibakteriální aktivitou, vůči kterým nejsou bakterie rezistentní. Nanočástice stříbra tak v současné době patří mezi „znovuobjevené“ látky vykazující antimikrobiální účinky, které jsou velmi intenzivně studovány nejen na poli základního výzkumu, ale také v oblasti aplikovaného výzkumu.

Metoda přípravy nanočástic stříbra spočívající v modifikaci Tollensova procesu, která byla vyvinuta na našem pracovišti, umožňuje připravit nanočástice stříbra s nejnižší průměrnou velikostí 25 nm. Provedené in vitro studie antimikrobiální aktivity takto připravených nanočástic stříbra prokázaly vysokou bakteriostatickou a fungistatickou aktivitu při velmi nízkých koncentracích (1 μg ml⁻¹ až 10 μg ml⁻¹), které současně nevykazují akutní cytotoxicitu vůči savcím buňkám, která byla stanovena při koncentracích vyšších než 30 μg ml⁻¹ (cit.¹⁻³). Navíc doposud nebyla v odborné literatuře publikována práce prokazující bakteriální rezistenci vůči nanočásticím stříbra. Nanočástice stříbra tak nachází uplatnění např. v lékařství k potlačení infekcí při léčbě popálenin či k omezení tvorby bakteriálního biofilmu na cévních náhradách, katetrech či protézách.

Tato práce vznikla za podpory grantů MŠMT (MSM6198959218, MSM6198959223, 1M6198959201) a GA ČR P304/10/1316.

LITERATURA

1. Panacek A., Kvítek L., Pucek R., Kolar M., Vecerova R., Pizurova N., Sharma V. K., Nevecna T., Zboril R.: *J. Phys. Chem., B* 110, 16248 (2006).
2. Kvítek L., Panacek A., Soukupova J., Kolar M., Vecerova R., Pucek R., Holecova M., Zboril R.: *J. Phys. Chem., C* 112, 5825 (2008).
3. Panacek A., Kolar M., Vecerova R., Pucek R., Soukupova J., Krystof V., Hamal P., Zboril R., Kvítek L.: *Biomaterials* 30, 6333 (2009).

10L-09**PŘÍPRAVA VODNÝCH DISPERZÍ NANOČÁSTIC MĚDI V PŘÍTOMNOSTI POLYAKRYLÁTŮ****ROBERT PRUCEK, LIBOR KVÍTEK, ALEŠ PANÁČEK a RADEK ZBOŘIL**Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, tr. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc
robert.pucek@upol.cz

Nanočástice kovů díky svým výjimečným vlastnostem jsou v poslední době předmětem značného zájmu jak ze strany vědeckého výzkumu tak i ze strany průmyslových aplikací. Nejinak je tomu i v případě nanočástic mědi či jejich oxidů jež nabízí slibné použití v oblastech katylýzy¹, biosenzorů², fotovoltaiky³, aditiv zlepšujících tepelnou vodivost⁴, atd. Mezi

metodami přípravy nanočástic mědi zřejmě převládají postupy založené na chemické redukci měďnatých solí. Tyto metody jsou poměrně jednoduché, rychlé a umožňují změnou reakčních podmínek ovlivňovat výsledné charakteristiky přípravných částic. Jako redukční činidla jsou velmi často používány hydrazin, kyselina askorbová nebo tetrahydridoboritan sodný. Značným problémem vyvstávajícím během přípravy nanočástic mědi je však jejich náchylnost vůči oxidaci. K zábránění tohoto jevu je třeba pracovat v nepolárních rozpouštědlech, případně během syntéz v polárním prostředí používat rozpouštědla zbavená kyslíku a reakce provádět v inertní atmosféře.

V uvedené práci byly nanočástice mědi připravovány redukcí měďnatých iontů tetrahydridoboritanem sodným v přítomnosti sodných solí polyakrylových kyselin. Byly použity polyakryláty o molekulových hmotnostech 1200, 8000 a 15 000. Velikost připravených částic mědi byla určována pomocí metody dynamického rozptylu světla (DLS). Ověření velikosti částic a zjištění jejich morfologie byla provedeno za využití transmisní elektronové mikroskopie (TEM). Případně oxidaci nanočástic mědi připravených výše uvedeným způsobem bylo zabraňováno pomocí přísady sířičitanu sodného k výsledné disperzi. Naopak, provzdušňování připravené disperze nanočástic vedlo ke vzniku „nanokrychliček“ oxidu měďného. Katalytická aktivita jak nanočástic mědi, tak i oxidu měďného byla zkoumána za využití modelové reakce – redukce 4-nitrofenolu.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM6198959218 a 1M6198959201.

LITERATURA

- Jensen J. R., Johannessen T., Wedel S., Livbjerg H.: *J. Catal.* 218, 67 (2003).
- Wang Y., Wei W. Z., Zeng J. X., Liu X. Y., Zeng X. D.: *Microchim. Acta* 160, 253 (2008).
- Musa A. O., Akomolafe T., Carter M. J.: *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 51, 305 (1998).
- Bonnemann H., Botha S. S., Bladergroen B., Linkov V. M.: *Appl. Organomet. Chem.* 19, 768 (2005).

10L-10

STUDIUM PŘÍTOMNOSTI MIKRO A NANOČÁSTIC KOVŮ V LIDSKÉM ORGANISMU

JANA SEIDLEROVÁ^a, EVA GRÝČOVÁ^a a PAVEL ŠTRÝMPL^b

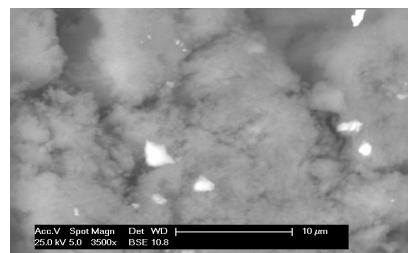
^a CNT VŠB-Technická Univerzita Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava-Poruba, ^b ORL, Fakultní nemocnice Ostrava, 17. listopadu 1790/5, 708 00 Ostrava-Poruba
jana.seidlerova@vsb.cz

Lidský organismus je v průběhu života vystavován řadě negativních vlivů, mezi něž patří také polutanty ze znečištěného životního prostředí. Látky vzniklé antropogenní činností člověka se stávají součástí atmosféry, vod i půd a různými způsoby tak mohou vstupovat do potravinového řetězce, popř. přímo do tkání živých organismů. Podle charakteru polutantu jej organismus vyloučí, nebo dochází k jeho uložení v tkáních.

Část populace je postižena onemocněním, které vede k ucívání slinných žláz a následně vzniku slinných kamenů – sialolitiázou. Hromadění slin vyvolává pocit napětí až bolesti a proto je nezbytné kámen chirurgicky odstranit. Četnost výskytu tohoto onemocnění je u dospělé populace 1,2 %, s mírnou převahou u mužů. Více než 80 % kamenů se objevuje v podčelistní žláze. Velikost slinných kamenů se pohybuje od 1 mm do 1 cm, mohou se vyskytnout i kameny o velikosti větší než 1,5 cm, vzácně od 3,5 do 7 cm.

Prevence tohoto onemocnění je spojena se znalostí chemického složení slinných kamenů a s popisem mechanismu jejich vzniku. S ohledem na velikost kamenů je nutné volit vhodnou kombinaci metod, jako je scanovací elektronová mikroskopie (SEM), mikroskopie atomárních sil, IČ spektroskopie, prášková rtg. difrakce a termogravimetrie.

V průběhu dvou let byl analyzován soubor slinných kamenů, jejichž hmotnost se pohybovala od 0,002 g do 1,9 g. Bylo dokázáno, že obsahují proteiny a anorganické součeniny na bázi fosforečnanů a uhličitánů, což je v souladu s dostupnou literaturou. Přibližně v 50 % zkoumaných vzorků byla elektronovou mikroskopií dokázána přítomnost kovů, jako jsou Fe, Cu, Ni, Cr, ale také V a W, které byly rozptýleny v kamenu jako nanočástice, případně jako mikročástice (obr. 1).



Obr. 1. Snímek povrchu slinného kamene s obsahem částic Fe (výrazné světlé body), získaný SEM při zvětšení 3500 \times

Tato práce vznikla za podpory projektu GA ČR, reg. číslo 205/08/0869 a grantu MŠMT SP/2010141.

10L-11

ELECTRIC PROPERTIES AND PHASE SEPARATION IN $\text{Ag}_x(\text{As}_{0.33}\text{S}_{0.67})_{100-x}$ GLASS SYSTEM

ŠTĚPÁN STEHLÍK^{a*}, TOMÁŠ WÁGNER^a, VÍTEZSLAV ZIMA^b, MILAN VLČEK^b, and MILOSLAV FRUMAR^a

^a Department of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Cs. Legion's Sq. 565, Pardubice 532 10, ^b Joint Laboratory of Solid State Chemistry, University of Pardubice and the Institute of Macromolecular Chemistry, AS CR, v.v.i., University of Pardubice, Studentska 95, 532 10 Pardubice
stepan.stehlik@upce.cz

Chalcogenide glasses heavily doped by silver can play an important role of solid electrolytes in various electronic devices such as batteries, sensors, programmable metalliza-

tion cells etc^{1–3}. Ag-As-S system serves as a “model” system among silver chalcogenide glasses. It is broadly accepted that two relatively small glass forming regions exist in this system⁴. It was found out, that the glasses, lying between these two glass forming regions, are separated into silver rich and silver poor phases^{5,6}.

We recently found out, that as soon as the concentration of silver exceeds ~ 26 at.% Ag the glasses became phase separated again. The separated domains were identified by scanning electron microscope and their composition was checked by energy dispersive X-ray analysis in the range of 28–32 at.% Ag. In addition, the conductivity of the samples was measured by impedance spectroscopy at 25–100 °C temperature range. It was suggested from the impedance spectra that the conductivity is mainly ionic. The potentiostatic chronoamperometry provided information about the fraction of the residual electronic (hole) conductivity. Amorphous state of every sample was confirmed by X-ray diffraction analysis.

This research was financially supported by the projects VZ 0021627501, AVOZ 40500505, GA CR project GA 203/06/1368, project MSM0021627501 and the Research Centre LC 523 at the University of Pardubice.

REFERENCES

1. Schubert J., Schoning M. J., Mourzina Y. G., Legin A. V., Vlasov Y. G., Zander W., Luth H.: *Sens. Actuators, B* 76, 327 (2001).
2. Ingram M. D. In: *High Performance Glasses* (Cable M., Parker J.M., ed.), chap. 7. Chapman and Hall, New York 1992.
3. Kozicki M. N., Balakrishnan M., Gopalan C., Ratnakumar C., Mitkova M.: *Non – Volatile Memory Technology Symposium*, 7 – 10, 7 pp., 2005.
4. Kawamoto Y., Agata M., Tsuchihashi S.: *Yogyo-Kyokai-shi* 82, 40 (1974).
5. Ohta M., Tsutsumi M., Izumi F., Ueno S.: *J. Mater. Sci.* 17, 2431 (1982).
6. Borisova Z. U.: *Glassy semiconductors*. Plenum Press, New York 1981.

10L-12

Ag-CONDUCTING CHALCOGENIDE GLASSES, THEIR PROPERTIES IMPORTANT FOR POTENTIAL APPLICATION AS CBRAM NANOMATERIALS

TOMAS WAGNER^a, STEPAN STEHLIK^a, MIROSLAV BARTOS^a, VITEZSLAV ZIMA^b, and MILOSLAV FRUMAR^a

^a Department of General and Inorganic Chemistry, Research Centre, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Cs. Legion's Sq. 565, 532 10 Pardubice, ^b Joint Laboratory of Solid State Chemistry of the Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences, Czech Republic, v.v.i. and University of Pardubice, Studentska 95, 532 10 Pardubice
tomas.wagner@upce.cz

Chalcogenide glasses containing metal elements have been recently studied to be a potential candidate to the fabrication of electrical memories^{1,2}. The chalcogenide glasses belong to a large family of vitreous semiconductors and they can be doped with metals (Ag, Cu, Li) or their compounds (Ag₂S, AgI, CuS, Li₂S), gaining some portion of ionic conductivity and becoming mixed ionic-electronic conductors^{2–4}. In these conductors the total electrical conductivity consists of two contributions: the electronic (hole) and the ionic contributions. Such glasses then behave like ionic conductors or even fast ionic conductors (FIC)⁵. The aim of this work was to prepare and compare electric properties of chalcogenide bulk glasses of general composition Ag_x(As(Ge)Ch), where Ch = S, Se and Te and x = 0–24 at.% Ag depending on glass-forming region. The total electrical conductivity was determined by means of impedance spectroscopy and the electronic (hole) contribution by means of direct current (dc) measurements, sputtered blocking platinum electrodes were used in both cases. The conductivity increased with silver content and a percolation behavior due to inhomogeneity of the glasses in some composition region was observed. The contribution of electronic (hole) conductivity to the total conductivity increased from the sulfur based glasses to selenium and tellurium based glasses. Spinodal decomposition and properties percolation is dependent on the silver concentration.

The authors thanks to Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Research Centre LC 523 project, project MSM 0021627501) and to Academy of Sciences of the Czech Republic v.v.i. (AVOZ 40500505 project).

REFERENCES

1. Mitkova M., Kozicki M.N.: *J. Non-Cryst. Solids* 299, 1023 (2002).
2. Terabe K., Nakayama T., Hasegawa T., Aono M.: *Appl. Phys. Lett.* 91, 10110 (2002).
3. Krbal M., Stehlik S., Wagner T., Zima V., Benes L., Frumar M.: *J. Phys. Chem. Solids* 68, 958 (2007).
4. Krbal M., Wagner T., Srba T., Schwarz J., Orava J., Kohoutek T., Zima V., Benes L., Kasap S. O., Frumar M.: *J. Non-Cryst. Solids* 353, 1232 (2007).
5. Piarristeguy A., Conde Garrido J. M., Ureña M. A., Fontana M., Arcondo B.: *J. Non-Cryst. Solids* 353, 3314 (2007).

10L-13
TAILORING OF PROPERTIES
OF DIKETOPYRROLOPYRROLES DERIVATIVES
FOR ORGANIC ELECTRONIC AND PHOTONICS

MARTIN WEITER^{a*}, MARTIN VALA^a, IMAD OZZANE^a, STANISLAV LUŇÁK JR.^b, JAN VYŇUCHAL^c, and LUBOMÍR KUBÁČ^d

^a Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118, 612 00 Brno, ^b Department of Organic Technology, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice, ^c Synthestia, a.s., Semtín 103, 532 17 Pardubice, ^d Centre of Organic Chemistry, Rybitví 296, 533 54 Rybitví
 weiter@fch.vutbr.cz

Nowadays, we can see a strong effort in seeking for highly performing materials for cheap organic electronics. Together with the high performance of the materials, the usual second requirement is their high photo- and thermal-stability. Therefore we have investigated a several derivatives of 3,6-diphenyl-2,5-dihydro-pyrrolo[3,4-c]pyrrole-1,4-dione, commonly referred to as DPPs. They represent recent industrially important high-performance pigments with promising semiconducting properties. The aim of our work consist in preparation of nanostructured thin layers and nanocomposites of DPP with outstanding optical or electrical properties.

Several different derivatives of DPP with alkyl side groups were synthesized to increase their solubility. Simultaneously, groups with various electron donating or withdrawing ability were linked to the basic pyrrolinone core to improve some of their optical and electrical properties such as absorption molar coefficient, conductivity, photogeneration yield and others. Thermal and thermooxidative stability was studied by thermal gravimetry and differential scanning calorimetry in either nitrogen or air. Relationship between the molecular structure of DPPs, organic thin film morphology and their optical and optoelectronic properties such as charge transport and photogeneration were studied. The experimental characterizations were accompanied with quantum chemical calculations.

It was shown, that depending on the side groups substitution, studied DPPs exhibit high molar absorption coefficient as well as high quantum yield of fluorescence or significant quantum yield of photogeneration. Some derivates exhibit gas sensing properties. These properties together with chemical, light and thermal stability predestines them as potential candidates for electronics and optical applications such as photovoltaic and lighting devices, gas sensors and others.

The support of the Ministry of Education of the Czech Republic by project MSM 0021630501, Ministry of Industry and Trade by projects FR-TII/144 and FT-TA3/048 and the Academy of Sciences project KAN401770651 are acknowledged.

10L-14
STRUCTURE-PROPERTY RELATIONSHIPS IN
SMECTIC AND COLUMNAR GOLD NANOPARTI-
CLES. SHAPE-ADAPTIVE MODEL FOR
MESOPHASES MADE BY GOLD NANOPARTICLES

MICHAŁ WÓJCIK^a, MILENA KOŁPACZYŃSKA^a, MONIKA GÓRA^a, DAMIAN POCIECHA^a, EWA GÓRECKA^a, and JÓZEF MIECZKOWSKIA^b

^a Department of Chemistry, University of Warsaw, Pasteura 1, Warsaw, ^b Military University of Technology, Kaliskiego 2, 00-908 Warsaw
 mwojcik@chem.uw.edu.pl

The use of functional molecules in macroscopic devices (bottom-up technology) requires some degree of low dimensionality self-organization (1D or 2D). Going to the 3D world, liquid crystals are the archexample of self-organizing nano-objects¹. The properties of an ensemble of densely packed metallic nanoparticles and the effective material properties could be a route to obtain metamaterials². The coverage of nanoparticles with organic groups not only enhances the processability of such systems, but, where suitable functional groups are included, it allows the investigation of self-organization process and arrangements of created systems³.

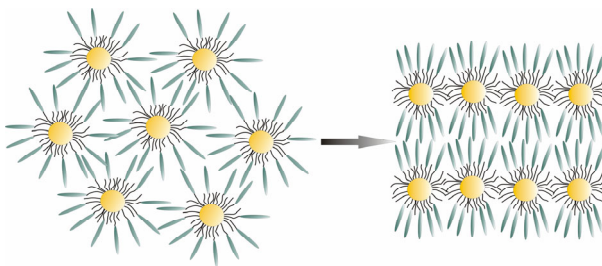


Fig. 1. Cooling an isotropic phase to smectic phase made of modified gold nanoparticles

Throughout our studies we have synthesized a series of novel mesogenic or pro-mesogenic organic thiols and used it in surface modification of small gold nanoparticles. To investigate the influence of organic molecules on self-organization process we designed and obtained series of various organic thiols with different terminal chains and linking groups. Varying volume of linking chains as well as the influence of primary alkyl thiols has been investigated. In our presentation I will explain the main idea of our “soft-rods” theory and the mechanism of formation of smectic and columnar liquid crystalline phases made of gold nanoparticles.

This work was supported by the Grant 0150/B/H03/2010/38 of Polish Ministry of Science and Higher Education, and by the European Science Foundation 2007/03-LC NANOP.

REFERENCES

- Donnio B., García-Vázquez P., Gallani J. L., Guillon D., Terazzi E.: *Adv. Mater.* 19, 3534 (2007).
- Rockstuhl C., Schaft T.: *J. Microsc.* 229, 281 (2008).
- Wojcik M., Lewandowski W., Matraszek J., Mieczkowski J., Borysiuk J., Pocięcha D., Gorecka E.: *Angew. Chem., Int. Ed.* 48, 5167 (2009).

10L-15
NANOSTRUCTURAL CERIA BASED MATERIALS
AS CATALYSTS FOR OXIDATION OF VOLATILE
ORGANIC COMPOUNDS

MALGORZATA M. ZAITZ, MARCIN MOLEND,
MALGORZATA BARAN, LUCJAN CHMIELARZ,
ALICJA RAFALSKA-ŁASOCHA, BARBARA DUDEK,
ZOFIA PIWOWARSKA, and ROMAN DZIEMBAJ*

Department of Chemical Technology, Faculty of Chemistry
Jagiellonian University, Ingardena 3, 30-060 Kraków
dziembaj@chemia.uj.edu.pl

Finding new technologies which can be called pollution-free is sometimes impossible. That is why many researchers are looking for more efficient ways for cleaning wasted and outlet gases. Volatile Organic Compounds (VOCs) are the group of compounds which are always present in outlet gases. There are many different ways for removing VOCs from air. The main two routes are to adsorb them or to incinerate. Thermal oxidation of VOCs is the most obvious way but it is not very efficient. That is why more interesting path for removal of VOCs is catalytic incineration. Commercial catalysts used in oxidation of VOCs are working in temperatures around 500 °C. Materials based on cerium (IV) oxide can be an alternative for this available on the market now. Thanks to many structural defects caused by doping or activation procedure ceria shows high catalytic activity in redox reactions.

Precursors of the nanostructured materials based on cerium (IV) oxide were prepared using a modified reverse microemulsion method¹. The thermal decomposition of the obtained precursors into oxides systems was studied using thermal analysis methods (EGA-TGA/DTG/SDTA). 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. The morphology of the obtained nanoparticles from different precursors differs from each other. The ceria doped materials formed mono phase solid solutions and is showing fluorite-like structure.

All of the obtained materials were catalytically active in the incineration of selected VOCs molecules (ethylene, methanol or acetone).

This work was supported by Research Project Grant number N N209 099337, from the Polish Ministry of Science and Higher Education.

REFERENCE

1. Dziembaj R., Molenda M., Chmielarz L., Drozdek M., Zaitz M.M., Dudek B., Rafalska-Łasocha A., Piwowarska Z.: *Catal. Lett.* 135, 68 (2010).

10L-16
STUDIUM VLASTNOSTÍ HYDROLAS
IMOBILIZOVANÝCH
NA SUPERPARAMAGNETICKÝCH NANOČÁSTICÍCH

LUDMILA ZAJONCOVÁ^a, KRISTÝNA POSPÍŠKOVÁ^a,
MICHAELA PEČOVÁ^a, MAREK ŠEBELA^a, ZDENKA
MARKOVÁ^c, KATEŘINA POLÁKOVÁ^c, DALIBOR
JANČÍK^c a RADEK ZBOŘIL^{b,c}

^a *Katedra biochemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc-Holice,*

^b *Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc,*

^c *Centrum výzkumu nanomateriálů, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 11, Olomouc-Holice*

ludmila.zajoncova@upol.cz

Hydrolasy jsou významné biokatalyzátory, které nacházejí uplatnění v biotechnologických procesech pro svou specifitu a schopnost reagovat za mírných reakčních podmínek. Aplikace volných enzymů v biotechnologii je omezena jejich sníženou stabilitou a složitým procesem recyklace. Těmto problémům lze předcházet imobilizací enzymů na pevné nosiče, čímž se zvýší jejich stabilita, možnost opakovaného použití a snadná separace z reakční směsi. Do struktury nosiče mohou být enzymy zabudovány adsorpcí, enkapsulací, zesíťováním nebo kovalentní vazbou. Hlavní nevýhodou porézních nosičů je limitovaná difúze a obtížná separace z viskózních roztoků. Řešením je použití neporézních nosičů jako jsou magnetické mikro či nanočástice. Magnetické nanočástice poskytují velký povrch pro vazbu bioaktivních látek a mohou být ovládnuty a separovány vnějším magnetickým polem.

Na magnetické nanočástice (Fe₃O₄), které byly připraveny synteticky¹ nebo izolací z magnetotaktických bakterií (*Magnetospirillum gryphiswaldense*), byly imobilizovány hydrolasy (α-amylasa, lipasa a trypsin). Nanočástice byly před imobilizací pokryty chitosanem nesoucím volné amino a hydroxyskupiny pro vazbu enzymů. Jako vazebné činidlo byl využit karbodiimid nebo glutaraldehyd. Vlastnosti imobilizovaných hydrolas byly studovány (Michaelisova konstanta K_m, termostabilita, pH optimum, operační stabilita, stabilita při skladování, saturační magnetizace a TEM).

Imobilizované hydrolasy na magnetických nanočásticích mohou najít uplatnění v řadě biotechnologických procesů. Amylasy se používají v potravinářském a fermentačním průmyslu, lipasy mají význam při výrobě biopaliv a léčiv, hydrolasy jsou také součástí pracích prášků a zároveň se využívají v procesu čištění průmyslových odpadních vod.

Tato práce vznikla za podpory grantu MSM 6198959216.

LITERATURA

1. Kluchová K., Zbořil R., Tuček J., Pečová M., Zajoncova L., Šafařík I., Mashlan M., Marková I., Jančík D., Šebela M., Bartoňková H., Bellesi V., Novák P., Petridis D.: *Biomaterials* 30, 2855 (2009).

10P-01**APPLICATION POTENTIAL OF RF MAGNETRON SPUTTERED Se-DOPED Ge-Sb-Te THIN FILMS FOR DATA STORAGE**

JAN GUTWIRTH^a, MIROSLAV BARTOŠ^a, TOMÁŠ WÁGNER^{a,b}, PETR BEZDÍČKA^c, JAN PŘIKRYL^a, MARTIN HRDLÍČKA^a, MILAN VLČEK^d, and MILOSLAV FRUMAR^a

^a University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Department of General and Inorganic Chemistry and Research Centre LC 523, Nam. Cs. Legii 565, 532 10 Pardubice, ^b University of Pardubice, Centre for Material Science, Studentska 95, 532 10 Pardubice, ^c Institute of Inorganic Chemistry, AS CR v. v. i., 250 68 Husinec-Rez, ^d Joint Laboratory of Solid State Chemistry of the Institute of Macromolecular Chemistry AS CR, v. v. i. and of University of Pardubice, Stusentska 84, 532 10 Pardubice
Subai@centrum.cz

Doped Sb-Te materials, namely Ge-Sb-Te (GST) or Ag-In-Sb-Te (AIST) materials, are currently dominant active materials for rewritable non-volatile phase-change based data storage systems commercialized as rewritable optical disks or electrically switched memories known as PC-RAM/P-RAM/C-RAM/OUM[®] devices.

Thin amorphous Ge-Sb-Te-Se films were deposited by RF ($f = 13.56$ MHz) magnetron sputtering of Ge₂Sb_{2.3}Te₄Se₁ target in argon plasma. Feasibility of prepared thin films for PC-RAM application was tested via four-point probe measurement of temperature dependence of sheet resistance known as Van der Pauw technique.

As-deposited and thermally treated thin films were characterized by the same way. Composition, chemical homogeneity and surface morphology were studied by Energy Dispersive X-Ray analysis coupled with Scanning Electron Microscopy (SEM-EDX) whilst crystallinity was determined by X-Ray diffraction (XRD).

Influence of deposition conditions (RF power, Ar pressure, deposition geometry) or thermal treatment to composition, crystallinity and surface morphology were established. Profile of temperature dependence of sheet resistance and characteristic temperatures (e.g. crystallization temperature and/or phase transformation temperature) were obtained and discussed.

The authors thank to Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Research Centre LC 523 project, project MSM 0021627501) and to Academy of Sciences of the Czech Republic v.v.i. (AV0Z 40500505 project).

10P-02**PŘÍPRAVA A HODNOCENÍ VLASTNOSTÍ NANOČÁSTIC ZnO**

EDITA BRETŠNAJDROVÁ^a, LADISLAV SVOBODA^a a JIŘÍ ZELENKA^b

^a Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legii 565, 532 10 Pardubice, ^b Synpo, a.s., S.K. Neumanna 1316, 532 07 Pardubice
edita.bretsnajdrova@student.upce.cz

V současné době je věnována velká pozornost přípravě a studiu vlastností různých typů nanočástic. Tyto materiály nacházejí uplatnění v různých oblastech lidské činnosti – např. v elektronice, medicíně, kosmonautice, automobilovém průmyslu a v mnoha dalších oborech. Velmi perspektivní oblastí využití nanokompozitních systémů je průmysl nátěrových hmot, kdy přidávkem malého množství vhodných nanočástic dochází k pozitivnímu ovlivnění celé řady vlastností (zvýšení odolnosti proti stárnutí, vůči povětrnostním vlivům, vůči zvýšené teplotě a různým roztokům a rozpouštědlům). Pro danou aplikaci je důležitá volba vhodné nanočástice a její kompatibilita s cílovým prostředím, popřípadě vhodná volba dispergačních metod. Pro průmysl nátěrových hmot jsou velmi důležité nanočástice, které pozitivně ovlivňují hned několik vlastností nátěrového filmu. Jako příklad takových částic lze uvést nanočástice oxidu zinečnatého, které mají dvě velmi důležité funkce. V nátěrovém filmu působí jako UV filtr a zároveň mají antibakteriální účinek.

Naše pozornost byla zaměřena na přípravu nanočástic ZnO vhodných fyzikálních vlastností a přijatelné ceny. Pro přípravu byla zvolena srážecí metoda¹, která byla modifikována jak pro vodu ředitelné, tak i pro rozpouštědlové systémy. Zásadní význam pro velikost a polydisperzitu nanočástic má vhodný typ stabilizátoru. Pomocí metod ultrazvukové spektrometrie, AFM a TEM bylo zjištěno, že i koncentrace zvoleného stabilizátoru má na distribuci velikosti částic oxidu zinečnatého významný vliv. Stejně metody byly použity k hodnocení stability studovaného koloidního systému. Bylo prokázáno, že v něm dochází k sedimentaci určitého podílu ZnO, velikost sedimentu klesala s rostoucí koncentrací daného stabilizátoru. Zásadní otázkou bylo, zda sediment obsahuje primární částice větších rozměrů, nebo zda se jedná o agregaci primárních částic. Aby bylo možné vysvětlit tento jev, byl metodami AFM a TEM sledován tvar a velikost nanočástic jak v koloidním roztoku, tak v sedimentu.

Tato práce vznikla za přispění Ministerstva průmyslu a obchodu ČR v rámci řešení projektů č. FT-TA3/055 a FT-TA4/074 a byla podpořena z prostředků výzkumného záměru č. MSM 0021627501.

LITERATURA

1. Khrenov V., Schwager F., Klapper M., Koch M., Müllen K.: Colloid Polym. Sci. 284, 927 (2006).

10P-03
PŘÍPRAVA NANOČÁSTIC STŘÍBRA
DVOUSTUPŇOVOU SYNTÉZOU

ARIANA FARGAŠOVÁ a **ROBERT PRUCEK**

*Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc
 ariana.fargasova@centrum.cz*

V průběhu posledních deseti let rapidně vzrostl zájem o vývoj metod přípravy nanočástic kovů. Tyto nanočástice jsou využívány v oblastech chemie, biotechnologie, nanosenzorů, elektrotechniky či v oblasti medicíny¹. Důvodem použití nanočástic kovů ve výše zmíněných oblastech je fakt, že tyto materiály vlastní jedinečné optické, magnetické, elektronické, atd. vlastnosti, které jsou závislé jednak na jejich chemickém složení, ale také na jejich velikosti, tvaru a jejich vzájemném uspořádání². Velká pozornost je věnována nanočásticím stříbra, které lze připravit chemickou redukcí, redukcí UV či gama zářením³. Koloidní stříbro se uplatňuje např. jako substrát pro povrchem zesílenou Ramanovu spektroskopii. Dále pak také v medicíně jako inhibitor růstu bakterií díky jeho antimikrobiální aktivitě⁴. Pro konkrétní aplikaci (např. SERS) je třeba syntetizovat částice s určitou požadovanou velikostí. Proto tedy je stále aktuální vývoj metod umožňujících řízeně ovlivňovat velikost částic stříbra. V případě použití chemických redukčních metod, může být jedním z faktorů ovlivňujících velikost získaných částic stříbra i koncentrace použitého redukčního činidla.

V uvedené práci byly koloidní stříbrné částice připravovány redukcí amoniakálního komplexu stříbrných iontů glukosou, kdy roztok $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ byl vpravován do roztoku glukosy. Byl sledován vliv změny koncentrace uvedené redukční látky na velikost připravených částic. K charakterizaci částic byly použity metody dynamického rozptylu světla (DLS), UV-vis absorpční spektroskopie a transmisní elektronové mikroskopie. Bylo zjištěno, že s klesající koncentrací glukosy v reakčním systému docházelo k nárůstu průměrných velikostí částic stříbra.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM6198959218 a 1M6198959201.

LITERATURA

1. Lisiacky I., Pileni M. P.: *Langmuir* 19, 9486 (2003).
2. Goia D. V., Matijevic E.: *New. J. Chem.* 1998, 1203.
3. Shirtcliffe N., Nickel U., Schneider S.: *J. Colloid Interface Sci.* 211, 122 (1999).
4. Mosier-Bross P. A., Lieberman S. H.: *Anal. Chem.* 77, 1031 (2005).

10P-04
OPTICAL AND ELECTRICAL PROPERTIES
OF Sb-RICH THIN FILMS FROM Sb-In-Te SYSTEM

LUDEK HROMÁDKO^{a*}, PETR NĚMEC^a, MIROSLAV BARTOŠ^a, MILAN VLČEK^b, LUDVÍK BENEŠ^b, and MILOSLAV FRUMAR^a

*^a Department of General and Inorganic Chemistry, University of Pardubice, Legion's square 565, 532 10 Pardubice, ^b Joint Laboratory of Solid State Chemistry of the University of Pardubice and the Institute of Macromolecular Chemistry Academy of Science Czech Republic, Studentska 84, 532 10 Pardubice
 ludek.hromadko@upce.cz*

Materials for phase change memories with better parameters than those one which are already commercially used have been intensively studied. The eutectic composition $\text{Sb}_{70}\text{Te}_{30}$ doped with further elements is promising material. In this paper we have studied $\text{Sb}_{70}\text{Te}_{30}$ doped by indium and its properties.

The bulk samples of $\text{Sb}_{70}\text{Te}_{30}$, $\text{Sb}_{63}\text{In}_7\text{Te}_{30}$ and $\text{Sb}_{56}\text{In}_{14}\text{Te}_{30}$ were prepared from elements of semiconductor purity. All prepared films were crystalline according X-ray diffraction analysis. The thin films were prepared from bulk samples by pulsed laser deposition. As-deposited films were amorphous. Prepared films can be crystallized by annealing.

Spectral dependences of refractive index and extinction coefficient were evaluated using variable angle spectroscopic ellipsometry. Values of refractive index decrease with increasing content of indium from 5.0–5.8 ($\lambda = 1500 \text{ nm}$) for as-deposited films and from 5.6 to 9.6 for crystalline films.

The optical band gaps of as-deposited films were evaluated by Tauc's method and were from the range 0.35 to 0.46 eV. The optical band gaps increase with increasing content of indium. Crystalline films have metallic character.

The optical reflectivity of as-deposited and crystalline films was measured. The optical contrast was calculated according formula $C = 2(R_a - R_c)/(R_a + R_c)$, where R_a is reflectivity of as-deposited film and R_c is reflectivity of crystalline film. Optical contrast decreases with increasing content of indium from 0.27 to 0.15 ($\lambda = 650 \text{ nm}$).

The electrical sheet resistance of thin films decreases during crystallization for about 3 orders. The values of sheet resistance of as-deposited thin films were 10^5 – $10^7 \Omega/\text{sqr.}$ and 10^1 – $10^2 \Omega/\text{sqr.}$ for crystalline films. The sheet resistance increases with increasing content of indium. The crystallization temperature was found from 130 to 203 °C and increases with increasing content of indium.

Because of large changes of optical reflectivity and electrical resistance due to crystallization, these materials can be potentially applied as active part for phase change memories.

The authors are grateful for financial support to Grant Agency of the Czech Republic for project GA 104/08/0229; for project MSM0021627501 and Research Center LC523 to Ministry of Education of Czech Republic.

10P-05**Ag-MONTMORILLONIT A Ag-VERMIKULIT
A JEJICH ANTIBAKTERIÁLNÍ ÚČINEK****MARIANNA HUNDÁKOVÁ^{a*}, MARTA VALÁŠKOVÁ^a
a ERICH PAZDZIORA^b**

^a Centrum nanotechnologií, VŠB – Technická univerzita Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava, ^b Zdravotní ústav Ostrava, Partyzánské náměstí 7, 702 00 Ostrava
marianna.hundakova@vsb.cz

Jílové minerály patří v současnosti k materiálům, které jsou využívány v mnoha odvětvích průmyslu. Jejich výjimečnost spočívá v jejich struktuře, která je tvořena aluminosilikátovými vrstvami a prostorem mezi nimi, ve kterém jsou vyměnitelné hydratované kationy. Výsledkem izomorfní substituce v tetraedrických a oktaedrických sítích, které tvoří vrstvy, je přebytek negativního náboje na vrstvách. Modifikacemi jílových minerálů vhodnými anorganickými i organickými prekuzory je možno upravit obsah mezivrstev a neutralizovat přebytek negativních nábojů ve struktuře.

Přírodní jílové minerály vermikulit a montmorillonit s odlišným strukturním negativním nábojem a jejich formy po iontové výměně mezivrstevních kationů Na-montmorillonit a Na-vermikulit byly vybrány jako jílové nosiče stříbra. Zdrojem stříbra byl vodný roztok dusičnanu stříbrného.

Prvkovou analýzou bylo zjištěno, že obsahy stříbra v Ag-jílových nanokompozitech se liší a závisí na velikosti negativního náboje jílového minerálu a typu mezivrstevního kationu. Změny ve struktuře jílových minerálů po působení dusičnanu stříbrného a po odstranění anionů dusičnanů promýváním vodou byly hodnoceny metodou rentgenové difrakce. Změny profilů bazálních difrakcí jílových minerálů a přítomnost difrakce stříbra v difrakčních záznamech potvrzují přítomnost iontového stříbra vázaného v mezivrstevním prostoru i nanočástic kovového stříbra ukotveného na povrchu vrstev^{1,2}.

Připravené nanokompozity Ag-montmorillonity a Ag-vermikulity vykazovaly pozitivní účinek na inhibici růstu gram-pozitivních (G^+) a gramnegativních (G^-) bakterií, přičemž tento účinek na (G^-) bakterie je intenzivnější.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR SP/2010111 a GA ČR 205/08/0869.

LITERATURA

1. Valášková M., Simha Martynková G., Lešková J., Čapková P., Klemm V., Rafaja D.: J. Nanosci. Nanotechnol. 8, 3050 (2007).
2. Tokarský J., Čapková P., Rafaja D., Klemm V., Valášková M., Kukutschová J., Tomášek V.: Appl. Surf. Sci., doi:10.1016/j.apsusc.2009.11.037 (2009).

10P-06**MECHANICKÁ SYNTÉZA A CHARAKTERIZACE
DEFINOVANÝCH ČÁSTIC****ALENA KALIŠOVÁ a KARLA BARABASZOVÁ***

Centrum nanotechnologií, VŠB – TU Ostrava, 17. listopadu 15/2172, 708 33 Ostrava – Poruba
karla.barabaszova@vsb.cz

S rozvojem nových technologických postupů přípravy částic vzrůstá nutnost nalezení takových metod přípravy, které by nezvyšovaly konečnou cenu připravovaného produktu. Z tohoto důvodu se technologové vrací k již známým metodám přípravy materiálů s cílem jejich inovací. Mechanické mletí se tak stává nejjednodušší a nejefektivnější metodou, která umožňuje syntézy nanokrystalických materiálů, resp. nanočástic kovů a jejich oxidů¹.

Částice oxidů kovů představují díky svým specifickým vlastnostem velký aplikační potenciál v celé řadě odvětví. Vykazují magnetické, antibakteriální nebo katalytické chování^{2,3}. Při jejich přípravě v kulovém mlýně dochází buď k mechanickému mletí (rozklad hrubozrnných nebo složených materiálů na jemné částice) nebo k mechanickému legování (mletí rozdílných typů materiálů za současného „přesunu“ materiálu). Výhodou těchto metod je možnost zpracování rozdílných typů materiálů⁴.

Pro přípravu částic oxidů kovů – kobaltu, niklu a mědi, byly jako výchozí látky zvoleny chloridy kovů $CoCl_2 \cdot 6 H_2O$, $NiCl_2 \cdot 6 H_2O$, $CuCl_2 \cdot 6 H_2O$, Na_2CO_3 a $CH_3COONa \cdot 3 H_2O$, resp. $NaCl$. Mechanicky zpracované (mleté) prekuzory byly kalcinovány při různých teplotách, což vedlo k formování definovaných částic oxidů kovů o různých velikostech a morfologiích.

Připravené částice byly fázově charakterizovány pomocí rentgenové difrakční analýzy (XRD), strukturně pomocí skenovacího elektronového mikroskopu (SEM) a mikroskopu atomárních sil (AFM) a pomocí distribuce velikostí částic (DVC). Průměrná velikost částic jednotlivých oxidů kovů dosahovala 2 μm . Morfologie částic byla rozdílná pro jednotlivé typy oxidů, částice vykazovaly homogenní charakter plochých destiček a sferoidů.

Výsledky dokazují, že mechanochemický proces je z ekonomického a výkonnostního hlediska slibnou metodou produkce ultrajemných – definovaných prášků.

Tato práce vznikla v rámci řešení projektu GA ČR 205/09/0352 „Mechanická příprava a charakterizace definovaných částic s využitím tryskového mlýna“ a projektu MŠMT ČR SP/2010111.

LITERATURA

1. Tsuzuki T., Ding J., McCormick P. G.: Physica, B 239, 378 (1997).
2. Tsuzuki T., McCormick P. G.: J. Mater. Sci. 39, 5143 (2004).
3. Koch C. C.: Rev. Adv. Mater. Sci. 5, 91 (2003).
4. Yang H., Hu Y., Zhang X., Qiu G.: Mater. Lett. 58, 387 (2003).

10P-07**STUDIUM ADSORPCE NANOČÁSTIC STŘÍBRA NA VYBRANÝCH ADSORBENTECH****MARTINA KARLÍKOVÁ a LIBOR KVÍTEK***Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc
Mar.Karlikova@centrum.cz*

V období posledních desítek let zaznamenává dynamický rozvoj relativně mladé odvětví chemie, zabývající se částicemi velikosti pod 100 nm, tzv. nanočásticemi. Ty jsou pro své unikátní fyzikálně-chemické vlastnosti využívány čím dál častěji nejen v samotné chemii, ale i ve fyzice, biologii a medicíně.

Specifické chování koloidních disperzních soustav je dáno především velkou plochou fázového rozhraní, které částice v porovnání ke své velikosti vytvářejí, což se odráží na jejich výjimečných optických, elektrických a katalytických vlastnostech.

Zvýšení užitých vlastností nanočástic kovů v praxi přináší jejich zakotvení na pevném substrátu díky jejich snadné adsorpci. Adsorpce kovů, převážně z vodných roztoků, je studována zejména v souvislosti s obnovou drahých kovů v hydrometalurgických procesech, odstraňováním toxických těžkých kovových iontů z vody a v neposlední řadě byl výzkum adsorpce zaměřen na katalytické procesy, při kterých mohou vhodné adsorbenty sloužit jako nosiče katalyticky účinných látek. Částice stříbra adsorbované na aktivním uhlí se často využívají jako katalyzátory při odstraňování toxických látek z ovzduší nebo jako antibakteriální materiál pro čištění odpadních vod, kdy současně dochází k odstranění nebezpečných kyanidů.

Naše pozornost byla věnována studiu adsorpce nanočástic stříbra o průměrné velikosti 30 nm na aktivním uhlí a posléze na silikagelu. Nanočástice byly připraveny redukcí diaminstříbrného komplexu redukujícím disacharidem maltosou. Jejich množství zachycené na adsorbentu bylo vyhodnoceno spektrofotometricky a výsledky byly potvrzeny atomovou absorpční spektrometrií.

Experimentálně získaná data ukazují, že se adsorpce na obou sorbentech řídí modelem Langmuirovy adsorpční izotermy, přičemž pro adsorpci na aktivním uhlí bylo maximální zjištěné množství adsorbovaných nanočástic stříbra rovno 11,22 mg/1 g sorbentu, pro silikagel pak byla tato hodnota výrazně nižší – pouze 2,2 mg Ag/1 g sorbentu.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM6198959218 a 1M6198959201.

LITERATURA

1. Jia Y., Demopoulos G. P.: *Ind. Eng. Chem. Res.* 42, 72 (2003).
2. Kvítek L., Panáček A., Soukupová J., Kolář M., Večeřová R., Pruček R., Holecová M., Zbořil R.: *J. Phys. Chem., C* 112, 5825 (2008).

10P-08**PŘÍPRAVA A FYZIKÁLNĚ CHEMICKÉ VLASTNOSTI VYBRANÝCH VZORKŮ SYSTÉMU Ag-Sb-Pb-Ge-Te****PETR KOZIEL, JAN PŘIKRYL a MILOSLAV FRUMAR***Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
petr.koziel@gmail.com*

Byly připraveny vybrané objemové vzorky ze systému GeTe – AgSbTe₂ a AgGeSbTe₃ – AgPbSbTe₃. Vakuovým napařováním byly připraveny tenké vrstvy na skleněné a křemíkové substráty. Temperanci vzorků nad teplotou fázového přechodu byly pod ochrannou atmosférou inertního plynu (Ar) připraveny krystalické tenké vrstvy.

Amorfni i krystalické vrstvy byly charakterizovány pomocí DSC, XRD, EDX. Výsledky spektroskopické elipsometrie s proměnným úhlem a optické propustnosti a reflektivity v UV, VIS, NIR byly použity k vyhodnocení optické šířky zakázaného pásu. Byla měřena izokinetická teplotní závislost plošného odporu Van der Pauwovou metodou a vyhodnoceny aktivizační energie vodivosti.

Čerstvě připravené vrstvy obsahující germanium se dle XRD podařilo připravit amorfni, vrstvy bez obsahu germania byly krystalické. Z měření DSC a teplotní závislosti plošného elektrického odporu zjištěného Van der Pauwovou metodou vyplývá, že ke krystalizaci amorfni vrstev zpravidla docházelo v rozmezí teplot 130–170 °C.

Permanentní „phase-change“ paměti využívají změny optické reflektivity (nebo elektrického odporu) při fázové změně. Některé ze studovaných materiálů mohou být vhodné pro použití jako aktivní materiál pro takové paměti. U některých vzorků, např. o složení AgPb_{0,7}Ge_{0,3}SbTe₃, činil rozdíl v hodnotách optické reflektivity cca. 20 % v celém rozsahu viditelného spektra. Rozdíl v hodnotách plošných elektrických odporů mezi krystalickou a amorfni fází byl u většiny vzorků přibližně tři řády.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 203/09/0827 a projektu MŠMT ČR LC523. Děkujeme M. Vlčkovi za měření EDX, L. Benešovi za XRD analýzu, P. Košťalovi za DSC, M. Bartošovi za VASE a M. Hrdličkovi za měření plošného odporu.

LITERATURA

1. van der Pauw L. J.: *Phillips Res. Rep.* 13, 1 (1958).
2. Kissinger H. E.: *Anal. Chem.* 29, 1702 (1957).
3. Mott N. F., Davis E. A.: *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*. Oxford University Press, 1971.

10P-09 STUDIUM SYNTÉZY NANOČÁSTIC MĚDI

EVA MINÁRIKOVÁ a ROBERT PRUCEK

*Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc
eva.min@seznam.cz*

Během posledních několika desítek let se výzkum přípravy nanočástic velmi intenzivně rozvíjí. Nanočástice díky svým ojedinělým optickým, magnetickým, elektrickým, či katalytickým vlastnostem zasahují do celé řady oborů jako např. medicíny, farmacie, elektroniky, průmyslu, atd. Příprava nanočástic s sebou nese řadu úskalí, protože jejich unikátní vlastnosti nejsou závislé pouze na jejich velikosti, ale také na tvaru, morfologii a struktuře. Syntéza by měla být snadná a měly by vznikat nanočástice, které by měly požadované vlastnosti a byly by natolik stabilní, aby je bylo možno dále sledovat a případně využít v praxi. U nanočástic mědi, které lze využít např. jako katalyzátory, aditiva do maziv, materiály pro elektronické a optické přístroje, je zřejmě největším problémem jejich náchylnost k oxidaci.

V uvedené práci byly nanočástice mědi připravovány redukcí pentahydrátu síranu měďnatého tetrahydridoboritanem sodným v přítomnosti různých komplexních činidel (kyseliny vinné, citronanu sodného a amoniaku). Byl sledován vliv koncentrace komplexního činidla na velikost a stabilitu připravených nanočástic mědi. Redukce probíhaly za pokojové teploty během několika desítek sekund. Redukce Cu^{2+} na Cu^0 byla provázána změnou zbarvení roztoku ze světle modré na tmavě červenohnědou. Velikost připravených částic byla stanovována pomocí metody dynamického rozptylu světla (DLS). Ověření velikosti částic a zjištění jejich morfologie bylo provedeno na základě snímků z transmisního elektronového mikroskopu (TEM). Syntetizované nanočástice byly také charakterizovány pomocí UV-VIS absorpční spektroskopie.

Velikost získaných nanočástic mědi se pohybovala v rozmezí 3–10 nm. Při použití amoniaku jako komplexního činidla musely být upraveny výchozí reakční podmínky, z důvodu přílišné nestability částic. Takto připravené nanočástice byly pak výrazně polydisperznější než nanočástice připravené za použití citronanu sodného a kyseliny vinné.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM6198959218 a 1M619895920.

LITERATURA

1. Kvítek L., Panáček A.: *Koloidní chemie*. Univerzita Palackého v Olomouci, Olomouc 2006.
2. Wu Ch., Mosher B. P., Zeng T.: *J. Nanopart. Res.* 8, 965 (2006).

10P-10 REOLOGIE A STABILITA MIKRODISPERZÍ TiO_2

VĚRA PĚNKAVOVÁ*, JAROSLAV TIHON a ONDŘEJ WEIN

*ICPF AV ČR, v.v.i., Rozvojová 135, 165 02 Praha 6
penkavova@icpf.cas.cz*

Studována byla reologie nanokapalin, připravených z pěti různých nanoprášků TiO_2 (krystalických forem anatasu a rutilu) dispergací v acidobazických puffech (zředěných roztocích HCl nebo NaOH). Stabilita těchto mikrodisperzí^{1–3} v gravitačním poli závisí na zeta-potenciálu, který může být ovlivňován změnou pH. V souladu s dosavadními poznatky odpovídají nejstabilnější disperze extrémům na křivce zeta-potenciálu (zde jak v kyselém, tak v bazickém prostředí).

Každý prášek byl dispergován v optimálním acidobazickém prostředí. Distribuce velikosti částic byla zjišťována metodou dynamického rozptylu světla (DLS) na přístroji ZetaSizer Nano (Malvern).

Lyofilní disperze při proudění často vykazují skluzové chování na stěně. Tento jev může být detekován pomocí AWS viskometrie^{4–6}, opakovaným měřením tokových křivek při různých hydraulických poloměrech senzoru (poloměr kapiláry, šířka šterbiny mezi válci). V této práci byl použit nový typ senzoru typu kužel-kužel (KK), který umožňuje při axiálním posunu vřetena plynule nastavovat šířku šterbiny s desetkrát vyšší přesností než běžný senzor typu disk-disk. Pro měření byly k dispozici senzory KK ze čtyř různých materiálů (ocel hladká i zdrsňená, titan, eloxovaný dural). Reologická měření byla prováděna na rotačním viskozimetru HAAKE RS-600, s využitím vlastního programu pro zpracování dat.

Tato práce nově využívá AWS viskometrii pro zředěné disperze s viskozitou blízkou viskozitě vody. To je možné díky měření na velmi úzkých šterbinách (řádově 0,1 mm) a následné korekci dat na setrvačné efekty⁷.

Všechny testované disperze vykazují Newtonské chování bez skluzových efektů, a to i při hydraulických poloměrech kolem 100 mikrometrů.

Tato práce vznikla za podpory grantových projektů GA ČR 104/08/0428, 104/09/0972 a 104/07/1110.

LITERATURA

1. Pak B. Ch., Cho Y. I.: *Exp. Heat Transfer* 11, 151 (1998).
2. Murshed S. M. S., Leong K. C., Yang C.: *Appl. Therm. Eng.* 28, 2109 (2008).
3. Murshed S. M. S., Leong K. C., Yang C.: *Appl. Therm. Eng.* 28, 2109 (2008).
4. Choi S. U. S.: *J. Heat Transfer* 131, 033106 (2009).
5. Barnes H. A.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 56, 221 (1995).
6. Wein O., Tovčigrečko V. V.: *J. Rheol.* 36, 822 (1992).
7. Wein O., Večeř M., Tovčigrečko V. V.: *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 139, 135 (2006).
8. Wein O., Večeř M., Havlica J.: *Rheol. Acta* 46, 2704 (2007).

10P-11

IMOBILIZACE HYDROLAS NA MAGNETICKÉ NOSIČE

KRISTÝNA POSPÍŠKOVÁ^{a,*}, LUDMILA ZAJONCOVÁ^a, MARTINA POSPÍŠILOVÁ^a, ZDENKA MARKOVÁ^{b,c}, MICHAELA PEČOVÁ^a, KATEŘINA POLÁKOVÁ^b, DALIBOR JANČÍK^b, RADEK ZBOŘIL^{b,c} a MAREK ŠEBELA^a

^a Katedra biochemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, ^b Centrum výzkumu nanomateriálů, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, ^c Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc
kristyna.pospiskova@seznam.cz

V biotechnologických procesech se stále ve větším měřítku uplatňují enzymy imobilizované na pevné nosiče. Pro imobilizaci hydrolas (lipasy a α -amylasy) byly využity magnetické nanočástice železa (magnetit – Fe_3O_4). Magnetické nanočástice byly připraveny podle Belessi¹ resp. izolací z magnetosomů magnetotaktických bakterií *Magnetospirillum gryphiswaldense* a před imobilizačním procesem pokryty chitosanem, který zlepšuje jejich stabilitu a poskytuje funkční skupiny pro kovalentní vazbu biologicky aktivních látek. Enzymy byly kovalentně navázány na upravené částice pomocí glutaraldehydu resp. karbodiimidu. Velikost a struktura magnetických nanočástic s imobilizovanými enzymy byly charakterizovány transmisí elektronovou mikroskopií a magnetické vlastnosti metodou saturační magnetizace.

Lipasa [EC 3.1.1.3.] katalyzuje hydrolyzu esterových vazeb. Byla použita lipasa z prasečího pankreatu a mikrobiální lipasa z kvasinky *Candida rugosa*. Aktivita volné a imobilizované lipasy byla stanovena spektrofotometricky pomocí umělého substrátu 4-nitrofenyl butyrátu resp. 4-nitrofenyl acetátu.

α -Amylasy [EC 3.2.1.1.] katalyzuje štěpení škrobu na dextriny a maltosu. Byla použita α -amylasa z vepřového pankreatu a mikrobiální α -amylasa z bakterie *Bacillus subtilis*. Stanovení aktivity α -amylasy bylo provedeno pomocí komerčního biochemického setu firmy BioSystems se substrátem 4,6-ethyliden-4-nitrofenyl- α -D-maltoheptaosidem. Imobilizací hydrolas došlo ke zlepšení teplotní stability a imobilizované enzymy bylo možno opakovaně použít bez výraznější ztráty aktivity.

Imobilizované hydrolasy mohou najít uplatnění v biotechnologických procesech. Navázání lipas na nanočástice vede ke zlepšení podmínek např. pro esterifikace a transesterifikace v organických rozpouštědlech. Imobilizované amylasy mohou být použity v potravinářském a fermentačním průmyslu.

Tato práce vznikla za podpory grantu MSM 6198959216.

LITERATURA

1. Belessi V., Zbořil R., Tuček J., Mashlan M., Tzitzios V., Petridis D.: Chem. Mater. 20, 3298 (2008).

10P-12

THE PREPARATION OF AMORPHOUS THIN FILMS OF MULTI-ELEMENT CHALCOGENIDES

JAN PŘIKRYL^a, MARTIN HRDLIČKA^a, MARTIN PAVLIŠTA^a, Jiří ORAVA^a, TOMÁŠ KOHOUTEK^a, MILAN VLČEK^b, LUDVÍK BENEŠ^b, and MILOSLAV FRUMAR^a

^a Department of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice and Research Centre LC523, Cs. Legion's Sq. 565, 532 10 Pardubice, ^b Joint Laboratory of Solid State Chemistry of the Institute of Macromolecular Chemistry AS CR, v.v.i. and University of Pardubice, Studentská 84, 532 10 Pardubice
jan.prikryl@student.upce.cz

The presented work is aimed on evaluation of different methods for preparation of multi-element chalcogenide thin films.

During thermal evaporation of $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ at first evaporates a small portion of nearly pure tellurium, then evaporates nearly $\text{Ge}_{33}\text{Te}_{67}$ and finally evaporates nearly $\text{Sb}_{80}\text{Te}_{20}$. The deposited films have not homogeneous composition through depth profile. The fractionation during deposition process of In_2Se_3 leads to depth profile (gradation) of thin film refractive index, which changes from $n_{1500\text{nm}} = 2.45$ to 3.45.

Using pulsed laser deposition method the amorphous thin film of $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5 + \text{In, As, Se} < 5\%$ were deposited. Composition of homogeneous part of thin film differed above 50 % from composition of target. Thin films have non-uniform thickness. The optimization of the process conditions leads to minimization of number of surface droplets.

Using flash evaporation method were prepared homogeneous $\text{Ge}_4\text{Sb}_4\text{Te}_x$ ($x = 8, 9, 10$) amorphous thin films. The composition of thin film is different only about 2 % from source material. The physical-chemical properties of prepared $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ thin films are in good agreement with those published in literature. The flash evaporation method allows the preparation of the chalcogenide complex multilayers, which are applicable like photonics crystals, optical filters and mirrors in VIS/IR spectrum of light.

The authors thank to Research Center LC 523 and University of Pardubice for steady support.

10P-13**THE EFFECTS OF METAL IODIDE ON NEAR- AND MIDDLE-IR LUMINESCENCE OF Dy³⁺-DOPED CHALCOHALIDE GLASSES BASED ON Ge-Ga-Se****JING REN^a, TOMAS WAGNER^a, JIRI OSWALD^b, BOZENA FRUMAROVA^c, and MILOSLAV FRUMAR^a**

^a University Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Department of General and Inorganic Chemistry, Research Centre, Legion's sq. 565, 532 10 Pardubice, ^b Institute of Physics, Academy of Sciences of the Czech Republic, Cukrovárnická 10, 162 53 Praha 6, ^c Joint Laboratory of Solid State Chemistry, Institute of Macromolecular Chemistry, Czech Academy of Sciences, University of Pardubice, Studentska 84, 532 10 Pardubice
jing.ren@upce.cz

The chalcogenides have particularly low phonon frequencies and, therefore, they are potentially attractive hosts for laser transition in the near- and middle-IR region. In this work, the near- and middle-IR emission properties of Dy³⁺ doped Ge-Ga-Se-MI (M = K, Cs, and Ag) chalcohalide glasses were investigated by photoluminescence spectroscopy. It is found that the emission intensities of dysprosium ions were strongly dependent on which metal iodide is present in the Ge-Ga-Se host glass. For example, compared to host glasses, the emission intensity is twice stronger in glasses doped with KI, while there is only slight increase in glasses doped with AgI. And there is no increase at all in glasses doped with CsI.

The emission lifetime was measured at four wavelengths for all samples, i.e. 1142 nm, 1324 nm, 1730 nm and 2670 nm. It is interesting to notice that the lifetime is the largest in glasses doped with CsI whereas the emission intensity is the lowest.

It is derived from Raman spectra that the glass structures undergo certain changes with different metal iodide. The main feature is the formation of iodine-containing structural units e.g. GeSe_{4-n}I_n at the expense of edge-shared Ge(Ga)Se₄ tetrahedra upon the introduction of metal iodide into Ge-Ga-Se glasses.

The Dy³⁺ doped Ge-Ga-Se-MI chalcohalide glasses are promising luminescent materials for applications in near- and middle-IR regions.

The Author thank to Ministry of Education, Youth and Sports of Czech Republic for financial support to Research Centre grant LC 523 and grant MSM 0021627501, GA203/06/1368 and to project of the Academy of Sciences of the Czech Republic AVOZ 40500505.

10P-14**INTERAKCE VERMIKULITU S KYSELINOU ŠŤAVELOVOU****PETRA MAJEROVÁ, JANA SEIDLEROVÁ a GRAŽYNA SIMHA MARTYŇKOVÁ**

Centrum nanotechnologií VŠB-TU Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava
jana.seidlerova@vsb.cz

Jílové minerály jsou v dnešní době stále používanějším materiálem v mnoha odvětvích průmyslu. Dostupnost a finanční nenáročnost jsou jedny z jejich pozitivních vlastností. Jednou z úloh je vytvoření nových modifikací struktury jílových minerálů, které by našly v praxi nové uplatnění, např. v kosmetice, lékařství nebo při průmyslovém čištění odpadních vod.

Vermikulity jsou minerály, které se nachází ve dvou strukturách, dioktaedrických a trioktaedrických, v závislosti na základním minerálu, ze kterého vznikají. Hlavním oktaedrickým kationtem je Mg, který je zároveň vyměnitelným kationtem. V mezivrstvi vermikulitu se nachází mezivrstevní voda. Jejich hlavní vlastností je expandibilita, v důsledku které jsou schopny do své struktury přijímat vodu i organické látky¹. Mnoho komerčních vermikulitů je používáno v zemědělství pro úpravu půdy, nebo jako nosiče pro hnojiva. Vysušený vermikulit se používá jako tepelná izolace, nebo jako odlehčovací přísada do cementu².

Kyselina šťavelová je bílá krystalická látka, která se přirozeně vyskytuje v přírodě a je toxická. Používá zejména jako redukční činidlo, dobře reaguje s ionty kovů alkalických zemin. V průmyslu se používá k čištění kovů a glycerinu³.

Z brazilského vermikulitu o krystalochemickém vzorci (Si_{6,32}Al_{1,58}Ti_{0,1})(Mg_{4,75}Ca_{0,34}Fe_{0,91})O₂₀(OH)₄Ca_{0,04}K_{0,38} byla připravena frakce s částicemi menšími než 200 μm. Ze známého množství vermikulitu kyseliny šťavelové se připravila suspenze ve vodném prostředí, která se za stálého míchání po dobu 2 hodin udržovala na dané teplotě. Po oddělení tuhého zbytku vermikulitu se ve filtrátu metodou AAS-ICP stanovily koncentrace vybraných prvků. Změny ve struktuře vermikulitu po interakci s kyselinou šťavelovou byly sledovány pomocí elektronového mikroskopu, rtg. difrakcí a změny velikosti částic byly zjištěny laserovou granulometrií.

Z provedeného porovnání vyplynulo, že v důsledku interakce vermikulitu s kyselinou šťavelovou ve vodném roztoku dochází k narušení struktury a zmenšení částic jílového minerálu. Tato změna je výraznější, probíhá-li interakce při zvýšené teplotě.

Tato práce vznikla za podpory projektu GA ČR, reg. číslo 205/08/0869 a grantu MŠMT SP/2010141.

LITERATURA

1. Šucha V.: *Íly v geologických procesech*, s. 159, 2001.
2. Klein C., Dutrow B.: *Manual of Mineral Science*, 23. vyd. J. Wiley, 2008.
3. <http://science.jrank.org/pages/4958/Oxalic-Acid>.

10P-15**INFLUENCE OF THE PREPARATION METHOD TO THE POPULATION OF VARIOUS VO_x SPECIES OVER MESOPOROUS SUPPORT****MICHAL SETNIČKA*, PAVEL ČIČMANEC, ROMAN BULÁNEK, and ALENA KALUŽOVÁ**

Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
 Michal.Setnicka@student.upce.cz

The catalysts based on the supported vanadium oxides attend great interest of scientific community especially due to their unique ability to activate C-H bond of organic compounds at relatively low temperature. Several methods exist to introduction of vanadium oxide species to the surface of mesoporous support but prepared materials exhibit different catalytic activity. The role of various vanadium oxide species is still unclear mainly due to lack of reliable instrumental methodology for the determination of the abundance of these species.

In this work was used the hexagonal mesoporous silica (HMS)¹ as support for studying of the procedure of the various sources of vanadium oxides depositions. The catalysts were characterized by means XRF, DR UV-VIS, H₂-TPR and N₂-BET methods².

The results H₂-TPR allow us to separate VO_x species to three different classes based on their different redox properties. The results obtained from DR UV-VIS extended three types of vanadium oxo-species: (i) isolated tetrahedrally coordinated VO_x, (ii) oligomeric VO_x species and (iii) bulk like vanadium oxide particles³. The concentration of particular vanadium form is influence by preparation method and total vanadium oxide concentration.

The tendence to formation of oligomeric vanadium oxo-species increases with the increasing of the total vanadium concentration.

The preparation procedure can be used for control of formation various oligomeric species.

The targeted preparation of materials with increasing concentration particular vanadium units can bring new information about their role in catalytic processes.

A financial support provided the Grant Agency of the Czech Republic in the project No. P106/10/0196 and Ministry of Education of Czech Republic in the project No. MSM 0021627501 is highly acknowledged.

REFERENCES

1. Tanev P. T., Pinnavaia T. J.: Science 267, 865 (1995).
2. Setnička M., Čičmanec P., Adam J., Bulánek R.: Sci. Pap. Univ. Pardubice, A 14, 65 (2008).
3. Čapek L., Adam J., Grygar T., Bulánek R., Vradman L., Košová-Kučerová G., Čičmanec P., Knotek P.: Appl. Catal., A 342, 99 (2008).

10P-16**STUDIUM STABILIZACE NANOČÁSTIC STŘÍBRA ROZTOKY ŽELATINY****MARTIN SIVERA, LIBOR KVÍTEK a ALEŠ PANÁČEK**

Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc
 MartinSivera@seznam.cz

21. století má ve svém znamení nanomateriály. Ty se stávají běžnou součástí našeho života, což platí zvláště pro nanočástice stříbra, které se pro své antibakteriální vlastnosti uplatňují v řadě textilních, kosmetických i zdravotnických výrobcích. Tato vysoká antibakteriální aktivita¹ nanočástic stříbra v důsledku růstu rezistence bakterií na penicilinová antibiotika akceleruje výzkum jejich aplikace ve specifických medicínských oblastech jako je léčba popálenin, vývoj antibakteriálních úprav chirurgických nástrojů, zubařského materiálu či protetických pomůcek. Stříbrné nanočástice se uplatňují i při vývoji vysoce citlivých senzorů založených na jejich optických vlastnostech, typicky jde o povrchem zesílenou Ramanovu spektroskopii (SERS), která se stává citlivou a vysoce specifickou analytickou technikou².

Cílem této práce bylo studium stabilizace nanočástic stříbra připravených modifikovanou Tollensovou metodou za pomoci želatiny. Pro experimenty byly použity nanočástice o velikosti 25–30 nm. Stabilizace koloidního disperze těchto nanočástic byla provedena želatinou tak, aby její koncentrace v disperzi byla 0,01 % w/w. Připravené a modifikované nanočástice byly charakterizovány měřením jejich velikosti metodou DLS, dále pomocí UV-VIS spekter a TEM snímků.

Vlastní studium stabilizace nanočástic stříbra želatinou bylo provedeno na základě stanovení kritické koagulační koncentrace (CCC) různých typů elektrolytů – poly(dialyldimethylamonium) chloridu (PDDA), NaNO₃ a Ca(NO₃)₂. Porovnáním zjištěných hodnot CCC pro nestabilizovanou a želatinou stabilizovanou disperzi byla prokázána mohutná stabilizační aktivita želatiny, neboť ve všech studovaných případech došlo k řádovému nárůstu hodnoty CCC. V případě použití PDDA došlo k nárůstu CCC z hodnoty 2,47·10⁻⁵ % w/w pro nestabilizovanou disperzi na hodnotu 3,47·10⁻⁴ % w/w pro stabilizovanou disperzi. U NaNO₃ narůstá CCC z hodnoty 0,08 mol l⁻¹ na 3,31 mol l⁻¹ a při použití Ca(NO₃)₂ hodnota CCC narůstá z 0,50 mmol l⁻¹ na 11,30 mmol l⁻¹.

Provedená studie prokázala, že želatina je pro nanočástice stříbra výborný stabilizátor a želatinou stabilizované nanočástice mohou být vzhledem k povaze stabilizátoru použity i v medicínských nebo potravinářských produktech.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT ČR MSM6198959218 a 1M6198959201.

LITERATURA

1. Kvítek L., Panáček A., Soukupová J., Kolář M., Večeřová J., Pucek R., Holecová M., Zbořil R.: J. Phys. Chem., C 112, 5825 (2008).
2. Kvítek L., Pucek R., Panáček A., Novotný R., Hrbáč J., Zbořil R.: J. Mat. Chem. 15, 1099 (2005).

10P-17**THE INFLUENCE OF SILVER AND SODIUM IONS ON THE OPTICAL PROPERTIES OF TUNGSTEN-TELLURITE GLASSES****BORIS STEPANOV^a, TOMAS WÁGNER^a, MILOSLAV FRUMAR^a, MIKCHAIL CHURBANOV^b, and YURI CHIGIRINSKY^c**

^a University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Department of General and Inorganic Chemistry, Legions' sq. 565, 532 10 Pardubice, ^b Institute of Chemistry of High-Purity Substances of the Russian Academy of Sciences (IChHPS RAS) 49 Tropinin str., GSP-75, 603950 Nizhny Novgorod, ^c Physical Technical Institute of Nizhniy Novgorod, 23 Gagarin str., 603950 Nizhny Novgorod
Boris.Stepanov@upce.cz

Tellurium dioxide (TeO₂) based glasses are of scientific and technological interests on account of their several useful properties such as good transparency in the visible and infrared regions (0.4–6 μm), high dielectric constants, high refractive indices (≈ 2) and low melting temperatures¹. Tellurite glasses find applications for up conversion of infrared to visible light^{2,3}, ultra broadband fiber Raman amplifiers and gas sensors⁴.

The fabrication of planar lasers based on the tellurite glasses is a quite promising application as well⁵. A waveguide is one of the main parts of planar lasers. The planar waveguides could be prepared by various methods and all of these methods include the refractive index modification. There is important to know, how the refractive index changes could be obtained by adding different modifier ions.

The main purpose of this study was to observe influence of silver and sodium ions on the optical properties of tungsten-tellurite glasses.

In the frame of this study the tungsten-tellurite glasses with different concentrations of sodium and silver oxides were prepared by melt quenching method.

The Raman and UV-VIS absorption specters of these glasses were measured. The dependence of refractive index on the silver and sodium ions concentration was obtained by Variable Angle Spectral Ellipsometry.

The refractive index increases with increase of silver ions concentration and decreases with increase of sodium ions concentration. The adding of these modifiers doesn't affect significantly to UV-VIS absorption of given tungsten-tellurite matrix.

The authors thanks to The Ministry of Education, Youth and Sports MSM0021627501 and Research Centre LC 523 of University of Pardubice for financial support.

REFERENCES

1. El-Mallawany R.: *Tellurite Glasses Handbook: Physical Properties and Data*. CRC Press, 2002.
2. Rakov N., Maciel G. S., Sundheimer M. L., de S. Menezes L., Gomes A. S. L., Messaddeq Y., Cassanjes F. C. , Poirier G., Ribeiro S. J. L.: *J. Appl. Phys.* 92, 6337 (2002).
3. Yang J., Zhang L., Wen L., Dai S., Hu L., Jiang Z.: *J.*

Appl. Phys. 95, 3020 (2004).

4. Chakraborty S., Satou H., Sakata H.: *J. Appl. Phys.* 82, 5520 (1997).
5. Sakida S., Nanba T., Miura Y.: *Opt. Mater.* 30, 586 (2007).

10P-18**THIN FILMS FROM Ge-Sb-Te TERNARY SYSTEM PREPARED BY RF MAGNETRON SPUTTERING****LUKÁŠ STŘIŽÍK^a, JAN GUTWIRTH^a, TOMÁŠ WÁGNER^{a,b}, PETR BEZDIČKA^c, MILAN VLČEK^d, and MILOSLAV FRUMAR^a**

^a University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Department of General and Inorganic Chemistry and Research Centre LC 523, Nam. Cs. Legii 565, 532 10 Pardubice, ^b University of Pardubice, Centre for Material Science, Studentska 95, 532 10 Pardubice, ^c Institute of Inorganic Chemistry, AS CR v. v. i., 250 68 Husinec-Rez, ^d Joint Laboratory of Solid State Chemistry of the Institute of Macromolecular Chemistry AS CR, v. v. i. and of University of Pardubice, Studentska 84, 532 10 Pardubice
lukas.strizik@centrum.cz

Materials from Ge-Sb-Te ternary system are currently dominant materials applied for rewritable phase-change based non-volatile data storage. The reversible phase change between amorphous and crystalline state and vice versa is achieved by electrical pulses (PC-RAM/P-RAM/C-RAM/OUM[®] devices) or by optical pulses (CD-RW, DVD±RW, DVD-RAM, HD DVD-RAM, BD-RE discs), while the detection is based on different electrical resistivity or optical reflectivity between amorphous and crystalline state.

Thin amorphous films of Ge-Sb-Te were deposited by RF ($f = 13.56$ MHz) magnetron sputtering in argon plasma. Targets of composition Ge₂Sb₂Te₅, Ge₂Sb_{2.3}Te₅, Ge₂Sb_{6.3}Te₅ (better known as Ge₁₅Sb₄₇Te₃₈) were utilized for deposition process. Composition and chemical homogeneity of prepared thin films were traced by Energy Dispersive X-Ray analysis coupled with Scanning Electron Microscope (SEM-EDX). SEM technique was also used for surface morphology observation. Crystallinity of prepared thin films was studied by X-Ray diffraction (XRD). Optical parameters of prepared thin films (optical band gap energy E_g^{opt} , refractive index spectral dependence) and film thickness were established via UV-Vis-NIR spectroscopy and Variable Angle Spectral Ellipsometry (VASE).

Influence of target composition as well as influence of deposition conditions to thin film properties (composition, optical properties, crystallinity) and to parameters of sputtering process (deposition rate) were established and discussed.

The authors thanks to Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (Research Centre LC 523 project, project MSM 0021627501) and to Academy of Sciences of the Czech Republic v.v.i. (AV0Z 40500505 project).

10P-19**PRELIMINARY STUDY OF STIMULATED NUCLEATION ON POLYMER NANOFIBERS****ALEXEY SVESHNIKOV^{a,b*}, PETRA TICHÁ^a, PAVEL DEMO^{a,b}, and ŠÁRKA HOŠKOVÁ^a**^a *Department of Physics, Faculty of Civil Engineering, Czech Technical University in Prague, Thákurova 7, 166 29 Praha 6*^b *Institute of Physics, Academy of Science of the Czech Republic, v.v.i., Cukrovarnická 10, 162 53 Praha 6*
sveshnik@fzu.cz

Nanofibers are defined as fibers with diameter up to 100 nm. They possess a number of unique properties in comparison with macroscale materials. The extremely small sizes of nanofibers lead to different modes of interactions with the environment, while large surface to volume ratio ensures a high physical contact with the environment. As practically defects-free structures nanofibers have very high strengths and are prospective composites of new generation. The usual methods of production of nanofibers include interfacial polymerization and electrospinning. Recently a new technique of nanofibers production, so-called nanospider technology, has been proposed. In this method a role of positive electrode is played by a metal roller, submerged into a reservoir of polymer solution, and the negative electrode is a textile substrate or another supportive material. The nanospider technology enables fast and cheap creation of nanotextiles – textiles of macroscopic sizes woven from nanofibers.

There are many possible applications of nanotextiles, which can be separated into three large groups. In so-called passive applications the nanotextiles are used as extremely fine filters, which can hold back dust, spores, or even blood cells depending on the task. Semi-active applications utilize different modes of interactions between nanofibers and the environment. For example, microscopic algae are attracted to nanofibers by van der Waals force and do not pass the filter even though the holes in the net are large enough. However, the most interesting and prospective applications of nanotextiles are so-called active ones. In this case nanofibers play role of a supporting structure, of nucleation centers for other types of materials. For example, it is possible to nucleate silver nanoparticles on nylon nanofibers. The resulting material has excellent bactericidal properties.

Recently we have obtained the nanospider device to our disposition and our goal is to study the kinetics of stimulated nucleation on nanofibers. The process of nucleation is significantly influenced by extremely large curvature of nanofibers surface. The free work of cluster formation is quite different from the well-known expression for the flat substrate. Even the question about the nucleus shape is not easy to answer. Only very preliminary attempts are made and there are still many open complex technological, experimental and theoretical problems.

10P-20**TENKÉ AMORFNÍ VRSTVY SYSTÉMU Ge-Ga-S****SILVIE VALKOVÁ^a, TOMÁŠ WÁGNER^a, MIROSLAV BARTOŠ^a, JAN PŘIKRYL^a, MILAN VLČEK^b, BOŽENA FRUMAROVÁ^b, LUDVÍK BENEŠ^b a MILOSLAV FRUMAR^a**^a *Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra obecné a anorganické chemie, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice,* ^b *Společná laboratoř chemie pevných látek Ústavu makromolekulární chemie Akademie věd České republiky a Univerzity Pardubice, Studentská 84, 532 10 Pardubice*
DiValko@seznam.cz

Na katedře obecné a anorganické chemie Univerzity Pardubice jsou studovány amorfní chalkogenidy, např. systém Ga-Ge-S. Tento systém je velmi zajímavý pro své fyzikální vlastnosti jako je např. fotocitlivost, vysoká hodnota T_g , nebo značná možnost dotace dalšími prvky, např. stříbro.

Z objemového vzorku o složení 80 % GeS₂ · 20 % Ga₂S₃ připraveného přímou syntézou byly deponovány tenké vrstvy. K přípravě byly použity dvě metody, termické vakuové napařování a laserová ablace.

Při termickém vakuovém napařování byly použity dva typy lodiček – korundová lodička v platinovém pouzdru a molybdenová vícekomorová lodička.

Termickým vakuovým napařováním za použití korundové lodičky byly deponovány tenké vrstvy o tloušťce 500 nm a při depozici z molybdenové vícekomorové lodičky byly připraveny vrstvy o tloušťce 360 nm. Laserovou ablací byly získány tenké vrstvy o tloušťce 573 nm.

Výsledné tenké vrstvy byly charakterizovány pomocí rentgenové difrakční analýzy, která potvrdila, že všechny připravené vrstvy jsou amorfní. Složení vrstev bylo určeno pomocí energiově dispersní rentgenové spektroskopie.

I přes značnou rychlost termického napařování (5 nm s⁻¹), tenké vrstvy připravené z korundové lodičky obsahovaly mnohem méně galia než výchozí objemový vzorek. Tenké vrstvy deponované z molybdenové vícekomorové lodičky se svým složením od objemového vzorku příliš nelišily.

Tenké vrstvy byly dále studovány pomocí UV/VIS spektrometrie a elipsometrie. Výsledky získané z elipsometrie ukazují na gradaci indexu lomu u všech vrstev připravených metodou termického vakuového napařování.

Rovněž tenké vrstvy připravené laserovou ablací byly charakterizovány rentgenovou difrakční analýzou, energiově dispersní rentgenovou spektroskopií, UV/VIS spektrometrií a elipsometrií. Bylo zjištěno, že vrstvy jsou ve všech případech amorfní a svým složením se velmi blíží složení objemového vzorku. Na rozdíl od napařovaných tenkých vrstev však zde ke gradaci indexu lomu nedošlo.

Na tenkých vrstvách připravených laserovou ablací byla díky dobré shodě složení s objemovým vzorkem a dobré optické homogenitě dále studována fotoindukovaná difuze a rozpuštění stříbra.

Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky MSM0021627501 a Výzkumnému Centru LC523 Univerzity Pardubice za jejich finanční podporu.

11IL-01**THERMAL ANALYSIS IN BUILDING MATERIALS STUDIES FROM POINT OF VIEW OF ENVIRONMENT PROTECTION****ANDRZEJ MALECKI**

AGH University of Science and Technology, Faculty of Materials Science and Ceramics, Al. Mickiewicza 30, 30-059 Krakow malecki@agh.edu.pl

Buildings and constructions using concrete or other building materials have to be considered as intrinsic part of environment, especially if we remember that consumption of building materials reaches many millions ton each year. Production of building materials, their application and finally their degradation (“stages of life” of building materials) have significant influence on environment. Discussion about this influence can be divided into three parts. First part devoted to changes in environment during extracting raw materials and production of building materials. The second part is related to existence of buildings and other constructions in human environment. This concerns for example changes in landscape, changes in microclimate etc. The third part connected with degradation of building materials includes problems related to slow natural wear out as well as rapid processes of degradation for example in result of fire.

On the field of the above pointed “stages of life” of building materials, thermal analysis methods play an important role, as methods of estimation of real and potential risks of introducing some dangerous substances into environment.

In the first stage of life of building materials (production) the thermal analysis (TA) methods can be used for characterization of raw materials including their behavior under thermal conditions corresponding to production process in which these raw materials are used. TG/DTA/DSC and GC (gas chromatography) techniques coupled with evolved gas analysis (EGA) by infrared absorption or mass spectrometry permit on determination of sort and quantity of gaseous substances potentially liberated to environment during technological process.

Applications of thermal analysis (TA) methods related to influence on environment of building and finishing materials (paneling, flooring, carpets, paints, varnishes, plastics, furniture etc.) in their second “stage of life” is limited to identification of VOCs (Volatile Organic Compounds) evolved from the mentioned materials as well as to determination of the kinetic parameters corresponding to VOC liberation rate. The most important and unsolved problems concerning application of TA on that field are relationships between results of a rapid TA tests and real kinetics of VOC liberation inside buildings. In this case isothermal tests performed in different temperatures are carried out very often.

Third “stage of life” of building and finishing materials corresponds to their either slow or rapid degradation (waste utilization, recycling, house fire) which is usually connected with production of many different substances potentially dangerous for environment. At this stage TA methods belong to the most important techniques which permit on determination of risk for environment related to utilization of discussed materials.

REFERENCES

1. Smykatz-Kloss W., Heil A., Kaeding L., Roller E. in book: *Thermal Analysis in the Geosciences, chap. Thermal analysis in environmental studies*, Springer Berlin/Heidelberg 1991.
2. Van Grieken R., Delalieux F., Gysels K.: *Pure Appl. Chem.* 12, 232 (1998).
3. Brown S. K.: *Indoor Air Pollution – Lowering Emissions of Chemicals Released From Manufactured Products, Hazmat2003 Conference*, Stamford Grand, N. Ryde, NSW, Australia, 29.–30.4.2003.
4. Fariborz Haghighat, De Bellis L.: *Building and Environment* 33, 261 (1998).
5. Wolkoff P.: *Sci. Total Environ.* 227, 197 (1999).
6. *InspectAPedia*: http://www.inspectapedia.com/BestPractices/VOC_Guide.htm
7. Hewitt J.: *Sick Building Syndrome*, ed. Lulu.com (2007).
8. Vangipuram Seshachar Ramachandran: *Handbook of thermal Analysis of construction materials*, ed. Noyes publications/William Andrew Publishing Norwich NY.

11IL-02**NOVÁ METODA VYUŽITELNÁ PŘI STUDIU KINETIKY KRYSALIZACE SKLOVITÝCH MATERIÁLŮ****JIRÍ MÁLEK*, ZUZANA ZMRHALOVÁ, JAROSLAV BARTÁK a PAVLA HONCOVÁ**

Katedra fyzikální chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice jiri.malek@upce.cz

Studium kinetiky krystalizace sklovitých materiálů se těší poměrně velké oblibě a každoročně je v této oblasti publikováno více jak 1000 prací v impaktovaných časopisech. Převážná většina těchto prací je založena na aplikaci běžných termoanalytických metod jako například Diferenciální termická analýza (DTA) nebo Diferenciální skenovací kalorimetrie (DSC). Tyto metody jsou velmi efektivní v případech, když je možné spolehlivě měřit tepelné efekty související s krystalizací. V případě velmi rychlých krystalizačních procesů však může dojít k nepříznivému ovlivnění kvality kinetických dat v důsledku tepelné setrvačnosti přístroje. Podobně limitováno je použití klasických metod jako DTA nebo DSC v případě velmi pomalých dějů, kdy naopak tepelný efekt je blízko detekčního limitu přístroje.

Z tohoto pohledu je velmi zajímavé diskutovat alternativní metody pro studium kinetiky krystalizace sklovitých materiálů, které jsou vhodné i v případech, kdy není možno použít běžných termanalytických postupů. Slibnou metodou v tomto směru je například mikroskopické pozorování růstu (případně i nukleace) krystalů ve sklovité matrici. Řada těchto metod má však také jistá omezení. Například přímé pozorování růstu krystalů optickou mikroskopií je limitováno na opticky transparentní materiály¹ nebo na materiály s výrazně odlišnou reflektivitou sklovité matrice a krystalické fáze².

Vyhlédem k tomu, že k růstu nové krystalické fáze ve sklovité matrici obvykle dochází nad teplotou skelné transformace, v prostředí slině podchlazené a vysoce viskózní sklo-

tvorné kapaliny lze očekávat, že postupně rostoucí krystalizací fáze bude zpomalovat viskozitní tok až postupně dojde k jeho zastavení. Tento proces může být sledován s využitím Termomechanického analyzátoru (TMA)³. V přednášce je popsán vývoj nové metody využitelné ke studiu krystalizace sklovitých materiálů založené na principu TMA. Použití metody je ilustrováno na několika chalkogenidových sklech systému $(\text{GeS}_2)_x(\text{Sb}_2\text{S}_3)_{1-x}$, jejichž krystalizaci v některých případech nelze sledovat standardními experimentálními postupy.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 104/08/1021.

LITERATURA

1. Šánělová J., Málek J., Alcalá M. D., Criado J. M.: *J. Non-Cryst. Solids* 351, 527 (2005).
2. Málek J., Švadlák D., Mitsuhashi T., Haneda H.: *J. Non-Cryst. Solids* 352, 2243 (2006).
3. Málek J., Zmrhalová Z., Barták J., Honcová P.: *Thermochim. Acta*, odesláno.

11IL-03

ISOCONVERSIONAL METHODS IN THERMO-ANALYTICAL KINETICS BASED ON NON-ARRHENIAN TEMPERATURE FUNCTIONS

PETER ŠIMON

*Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
peter.simon@stuba.sk*

Mechanisms of the processes in condensed phase are very often unknown or too complicated to be characterised by a simple kinetic model. They tend to occur in multiple steps that have different rates. To describe their kinetics, methods based on the single-step approximation are frequently used¹⁻³.

It is recognized that the rate of the processes in condensed state is generally a function of temperature and conversion. The single-step approximation employs the assumption that the reaction rate can be expressed as a product of two separable functions independent of each other, the first one, $k(T)$, depending solely on the temperature T and the other one, $f(\alpha)$, depending solely on the conversion of the process, α . The rate of the complex multi-step condensed-state process thus can be formally described as¹⁻³

$$\frac{d\alpha}{dt} = k(T)f(\alpha)$$

This equation is mostly called the general rate equation. Indeed, it resembles a single-step kinetics equation, even though it is a representation of the kinetics of a complex condensed-phase process. In general, kinetics of a complex process should be described by a set of rate equations. The single-step approximation thus resides in substituting the set of kinetic equations by the sole single-step kinetics equation¹⁻³. The temperature function is mostly expressed by the Arrhenius

equation. In papers^{2,4} it has been justified that, due to complexity of the processes, the temperature function can hardly be considered the rate constant so that there is no reason to be confined to the Arrhenius temperature function. It has been verified that the results most conforming with reality can be obtained for the following temperature function⁵:

$$k(T) = A_k e^{DT}$$

where A_k and D are parameters.

Isoconversional methods represent probably the most widely employed category of methods applied in thermal analysis. Their basic idea is that the kinetic analysis is carried out over a set of kinetic runs at a fixed value of conversion. Under these conditions, the value of conversion function $f(\alpha)$ is constant and the reaction rate is a function of temperature only.

Combining both equations, after a sequence of manipulations²⁻⁴ one can get the relationship for the dependence of isoconversional temperature, T_α , on the heating rate, β :

$$T_\alpha = \frac{1}{D} \ln(AD\beta + 1)$$

where A and D are adjustable parameters obtained in the procedure of minimizing the sum of squares between the experimental and calculated values of T_α . Knowing the parameters A and D , the isothermal induction period, i.e. the oxidation induction time for a chosen temperature can be assessed as:

$$t_\alpha = Ae^{-DT}$$

A reverse approach is also possible. In the degradation tests we very often observed that the dependence $T_\alpha=f(\beta)$ can be plausibly described by the function

$$T_\alpha = T_\infty \left(1 - \exp\left[-\beta^a\right]\right)$$

where T_∞ is the isoconversional temperature at an infinite heating rate and a is an exponent. It can be derived that the isoconversional time in his case can be assessed as

$$t_\alpha(T) = (T_\infty - T)\alpha \left(\ln \frac{T_\infty}{T_\infty - T}\right)^{\frac{\alpha-1}{a}}$$

The kinetic parameters T_∞ and a are adjustable and they are obtained from the treatment of experimental dependence⁶ $T_\alpha=f(\beta)$.

The isoconversional methods are widely applied in the predictions of material lifetimes⁴. In the presentation, the following case studies will be presented: stability of edible oils; stability of dried milk; stabilization of biodiesels; efficiency of antioxidants in the thermooxidative degradation of rubber; synergism of antioxidants and equivalence between desert and Xenotest stability tests in polyurethane coatings.

The financial support from the Slovak Scientific Grant Agency, grant No. VEGA 1/0660/09, and from the Slovak Research and Development Agency, grant No. APVV-0446-07 is gratefully acknowledged.

REFERENCES

1. Šimon P.: J. Therm. Anal. Calorim. 88, 709 (2007).
2. Šimon P.: J. Therm. Anal. Calorim. 79, 703 (2005).
3. Šimon P.: J. Therm. Anal. Calorim. 82, 651 (2005).
4. Šimon P.: J. Therm. Anal. Calorim. 84, 263 (2006).
5. Šimon P., Hynek D., Malíková M., Cibulková Z.: J. Therm. Anal. Calorim. 93, 817 (2008).
6. Šimon P.: J. Therm. Anal. Calorim. 97, 391 (2009).

11L-01
DSC STUDY OF ANTIOXIDANT ACTIVITY
OF SUBSTITUTED *p*-PHENYLENEDIAMINES
IN STYRENE-BUTADIENE RUBBER

ZUZANA CIBULKOVÁ^a, PETER ŠIMON^a,
JÁN UHLÁR^b, and KAROL KOSÁR^b

^a *Institute of Physical Chemistry nad Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ^b Research Institute of Chemical Technology, Nobelova 34, 836 03 Bratislava*
 zuzana.cibulkova@stuba.sk

Thermooxidative degradation of styrene-butadiene rubber (SBR) with the addition of antioxidants has been studied. Several new potential antioxidants from the group of *p*-phenylene diamines have been prepared. Their stabilizing effect in SBR was characterized using non-isothermal DSC measurements with the aim to find the most suitable structures.

Oxidation of the materials exhibit an induction period. The length of the induction period is usually taken as a measure of the materials stability and can be expressed by the following equation^{1,2}:

$$t_i = Ae^{-DT} \quad (1)$$

where t_i is the length of the induction period, A and D are constants and T is the absolute temperature. In the case of linear increase of temperature, the parameters A and B in Eq. (1) can be obtained by minimizing the sum of squares using Eq. (2):

$$T_i = \frac{1}{D} \ln(AD\beta + 1) \quad (2)$$

The obtained values of t_i enable to calculate the protection factor (PF)^{2,3}:

$$PF = \frac{t_i(\text{SBR}_{\text{stab}})}{t_i(\text{SBR})} \quad (3)$$

where $t_i(\text{SBR}_{\text{stab}})$ and $t_i(\text{SBR})$ are the induction periods of stabilized and non-stabilized SBR. Values of the PFs higher than one for all antioxidants under study indicate their stabilizing effect on SBR.

The financial support from the Slovak Research and Development Agency, grant No. APVV-0446-07, is gratefully acknowledged.

REFERENCES

- Šimon P., Kolman L.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 64, 813 (2001).
- Cibulková Z., Šimon P., Lehocký J., Kosár K., Chochulová A.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 97, 535 (2009).
- Cibulková Z., Šimon P., Lehocký P., Balko J.: *Polym. Deg. Stab.* 87, 479 (2005).

11L-02
MULTIPLE MODE CALORIMETRY (MMC) –
A POWERFUL COMBINATION OF ACCELERATING
RATE CALORIMETRY (ARC) AND DIFFERENTIAL
SCANNING CALORIMETRY (DSC)

EKKEHARD FÜGLEIN

NETZSCH-Gerätebau GmbH, Wittelsbacherstraße 42, 95100 Selb, Germany
 ekkehard.fueglein@netzsch.com

Adiabatic Calorimetry or Accelerated Rate Calorimetry (ARC) is an well known caloric method to study the production of heat during decomposition or chemical reactions under adiabatic conditions. With increasing size of containers or reactors the surface to volume ratio decreases and therefore the sample properties become the most decisive parameter regarding the temperature management of a chemical reaction. With a volume of more than 1000 liters reactors tends to behave almost adiabatic or quasi adiabatic. In order to optimize a chemical reaction and its rate of yield and in order to run reactors safely, worst case studies are necessary. The assumption of no heat exchange from the reactor to the surrounding leads to a reaction which is self-heating or self-accelerating. Regarding process control and cooling capability of a reactor no heat exchange (adiabatic conditions) is a worst case scenario. By means of adiabatic calorimetry such a scenario can be studied for both pure compounds and sample mixtures.

Adiabatic calorimetry offers to study important process parameters such as the adiabatic temperature rise and its rate, the pressure rise and its rate as well as the reaction enthalpy, the time to maximum rate and the temperature of no return. For the setup of production facilities, for process safety and for upscaling of processes these parameters are of enormous relevance.

On the other hand DSC is a well known thermoanalytical method that allows to determine lots of information within a reasonable time. Melting and crystallization, degree of crystallinity, thermal stability, phase transitions, glass transition and specific heat is just a rough collection of accessible sample properties.

Nevertheless, both techniques discussed above also have disadvantages. Adiabatic calorimeters are costly and the measurements are usually of long term. Furthermore, there is a technical limitation which doesn't allow to detect endothermic effects. On the other hand, DSC is limited to small sample amounts (usually 5–10 mg) what makes it difficult to investigate inhomogeneous samples or mixtures. In general liquid samples require special crucibles and even though the pressure increase during a reaction can not be detected.

The new Multiple Mode Calorimeter (MMC) combines the advantages of both techniques and offers a flexible adjustment to the operator needs. Three different exchangeable modules serve for an optimized setup and allow both, adiabatic test work such a heat-wait-search (H-W-S) and scanning tests similar to DSC but with an sample container of 1–2 ml. The patented *VariPhi*TM-option enables direct specific heat measurements and the adjustment of the so called Phi-factor.

11L-03 ROVNOVÁŽNÉ POZADÍ PŘI OHŘEVU V PODMÍNKÁCH ŘÍZENÉ ATMOSFÉRY

PAVEL HOLBA

OSTA, ČSCH, K Lipám 293, 190 00 Praha 9
holbap@gmail.com

Rovnovážným pozadím procesu rozumíme posloupnost rovnovážných stavů vzorku při jednotlivých teplotách dosažených při ohřevu. Posloupnost rovnovážných stavů pro ohřev v řízené atmosféře se však liší od této posloupnosti v uzavřené soustavě. Proto stejný proces – (například tepelný rozklad) může vykazovat zcela odlišnou křivku termické analýzy. Pro určení rovnovážného pozadí je výhodné rozšířit soubor termodynamických potenciálů o hypervolnou energii Z^1 , která je Legendreovou transformací Gibbsovy volné energie G

$$Z = G - \mu_f N_f$$

(kde μ_f a N_f jsou chemický potenciál a počet molů f -té složky – volné složky, kterou sdílí vzorek s atmosférou) a z podmínky jejího minima odvodit potřebné relace – například závislost rovnovážné rozkladné teploty na aktivitě volné složky v řízené atmosféře²:

$$(\partial \ln a_f / \partial (1/T)) = (\Delta_d H_q / R) / \Delta_d Y_f$$

kde a_f je aktivita volné složky f , T – teplota, R – plynová konstanta, $\Delta_d Y_f$ je integrální změna obsahu volné složky a $\Delta_d H_q$ integrální změna entalpie při rozkladu.

Zvlášť významné je určení rovnovážného pozadí v soustavách s nestechiometrickými fázemi (proměnného složení). Pro tepelnou kapacitu nestechiometrické fáze při ohřevu v atmosféře s konstantní aktivitou volné (těkavé) složky platí vztah:

$$C_{p,A,m} = C_{p,Y,m} + (\partial H_q / \partial Y_B)_{P,T} (\partial Y_f / \partial T)_{A,P} / (1 + Y_f),$$

kde $C_{p,A,m}$ je molární (index m) tepelná kapacita fáze při konstantním tlaku (index P) a konstantní aktivitě složky f v atmosféře (index A), $C_{p,Y,m}$ je molární tepelná kapacita při konstantním tlaku a konstantním složení (index Y), $(\partial H_q / \partial Y_B)_{P,T}$ je parciální molární entalpie a Y_f je obsah volné složky vztažený na 1 mol netěkavých složek.

Jsou diskutovány také vlivy složení atmosféry na tvary fázových diagramů a otázky Ehrenfestovy klasifikace fázových přeměn.

LITERATURA

- Holba P.: Czech J. Phys., B 42, 549 (1992).
- Holba P.: *New Thermodynamic Potentials and Clapeyron Equations for Condensed Partly Open Systems Applicable to Nonstoichiometric Phases*, v knize: *Some Thermodynamic, Structural and Behavioral Aspects of Materials Accentuating Non-crystalline States*, s. 98–116 (J. Šesták, M. Holeček, J. Málek, ed.). OPS Nymburk, Plzeň 2009.

11L-04 TEPELNÉ KAPACITY SMĚSNÝCH OXIDŮ V SYSTÉMU Bi-Ta-O

JINDŘICH LEITNER^a, VÍT JAKEŠ^b, ZDENĚK SOFER^b, DAVID SEDMIDUBSKÝ^b, KVĚTOSLAV RŮŽIČKA^c a PAVEL SVOBODA^d

^a Ústav inženýrství pevných látek, ^b Ústav anorganické chemie, ^c Ústav fyzikální chemie, VŠCHT, Technická 5, 166 28 Praha, ^d Katedra fyziky kondenzovaných látek, MFF UK, Ke Karlovu 5, 121 16 Praha
jindrich.leitner@vscht.cz

V systému Bi-Ta-O existuje řada fází – stechiometrických směsných oxidů i tuhých roztoků proměnného složení, z nichž prakticky nejvýznamnější je BiTaO₄ využívaný jako dielektrický materiál v elektronice. V rámci systematického studia termodynamických vlastností směsných oxidů v systému¹ CaO-SrO-Bi₂O₃-Nb₂O₅-Ta₂O₅ byla již dříve² stanovena teplotní závislost tepelné kapacity BiTaO₄ v širokém oboru teplot 2–1200 K. Cílem této práce je proměření tepelných kapacit a relativních entalpií dalších tří stechiometrických oxidů o složení Bi₃TaO₇, Bi₇Ta₃O₁₈ a Bi₄Ta₂O₁₁.

Polykrystalické vzorky studovaných oxidů byly připraveny vysokoteplotní reakcí z binárních oxidů Bi₂O₃ a Ta₂O₅. Pro identifikaci připravených vzorků byla užitá RTG difrakční analýza. Pro měření tepelných kapacit v oblasti teplot cca 2 až 300 K byla použita multifunkční aparatura PPMS (Quantum Design) pracující na principu tepelné pulzní kalorimetrie. Tepelné kapacity v okolí pokojové teploty byly měřeny metodou HF DSC kalorimetrem mikro-DSC (Setaram). Relativní entalpie byly měřeny v oboru teplot cca 620–1270 K metodou vhažovací kalorimetrie v kalorimetru MHTC-96 (Setaram).

Získaná experimentální data byla zpracována ve dvou krocích. Nejprve byla analyzována nízkoteplotní C_{pm} data, která byla fitována kombinací Einsteinovy a Debyovy rovnice pro vibrační příspěvek C_{pm} s empirickou anharmonickou korekcí. Integraci takto získané závislosti ve tvaru C_{pm}/T v mezích 0–298,15 K byly vypočteny hodnoty molárních entropií $S_m(298,15)$. Dále byly simulárně zpracovány hodnoty $C_p(T)$ z DSC měření a relativní entalpie z vhažovací kalorimetrie. Výsledkem jsou parametry teplotních závislostí tepelných kapacit ve tvaru $C_{pm} = A + B \cdot T + C/T^2$.

Získané teplotní závislosti $C_{pm}(T)$ pro $T > 298,15$ K byly porovnány se závislostmi odhadnutými na základě empirického Neumannova-Koppova pravidla. Vypočtené hodnoty $S_m(298,15)$ byly použity pro posouzení věrohodnosti empirické S - V korelace pro pevné oxidy v systému Bi₂O₃-Ta₂O₅.

Tato práce vznikla za finanční podpory GA ČR (grant č. 104/07/1209) a MŠMT ČR (projekty č. MSM6046137302, MSM6046137307 a MSM0021620834).

LITERATURA

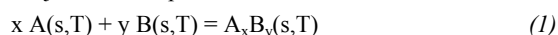
- Leitner J., Hampl M., Sedmidubský D., Růžička K., Svoboda P.: Chem. Listy 104, 147 (2010).
- Hampl M., Strejc A., Sedmidubský D., Růžička K., Hejtmánek J., Leitner J.: J. Solid State Chem. 179, 77 (2006).

11L-05
VYSOKOTEPLTNÍ ROZPOUŠTĚCÍ
KALORIMETRIE SMĚSNÝCH OXIDŮ V SYSTÉMU
Bi-Nb-Ca-Sr-O

MILOŠ NEVRIVA*, JINDŘICH LEITNER a DAVID
 SEDMIDUBSKÝ

Vysoká škola chemicko-technologická Praha, Technická 5,
 166 28 Praha 6
 Milos.Nevriva@vscht.cz

Rozpouštěcí kalorimetrie¹ je jedna z nejvýznamnějších experimentálních metod umožňující získat hodnoty slučovacích entalpií stechiometrických směsných oxidů i směšovací entalpie jejich pevných roztoků. Metoda je založena na měření rozpouštěcího tepla vzorku vhozeného do kelímku s vhodným rozpouštědlem. Provádí-li se za vysokých teplot, mluvíme o vysokotepltní rozpouštěcí kalorimetrii. Při stanovení slučovací entalpie sloučeniny A_xB_y v pevném stavu (A a B jsou prvky nebo binární sloučeniny, např. oxidy) při teplotě T se jedná o entalpii reakce



kteřou vypočítáme jako rozdíl tepla uvolněného resp. spotřebovaného při rozpuštění mechanické směsi $x A + y B$ a při rozpuštění sloučeniny A_xB_y . Pro slučovací teplo $\Delta_f H(A_xB_y)$ pak platí

$$\Delta_f H(A_xB_y, s, T) = \Delta_{sol} H(xA + yB) - \Delta_{sol} H(A_xB_y) \quad (2)$$

Výše uvedená metoda byla použita pro měření rozpouštěcích tepep $\Delta_{sol} H$ fázi přítomných v subsystémech Ca-Nb-O, Sr-Nb-O a Bi-Nb-O, kde existuje několik směsných oxidů, které jsou v současné době předmětem zájmu jako perspektivní materiály pro použití v elektro-optických, pyroelektrických a piezoelektrických zařízeních. Práškové vzorky studovaných směsných oxidů byly připraveny reakcí v pevné fázi, tj. smícháním a rozetřením stechiometrických množství vysoce čistých výchozích látek $CaCO_3$, $SrCO_3$, Bi_2O_3 a Nb_2O_5 v achátové misce, kalcinací při 1073 K po dobu 48 h a finálním žiháním po opětovném rozetření směsi při 1073 až 1273 K po dobu 48–96 h v Pt kelímku na vzduchu. Vzhledem k nízké rozpustnosti studovaných fází v oxidických taveninách je zásadním problémem volba vhodné taveniny. Jako nejvhodnější se ukázala tavenina o složení $3 Na_2O + 4 MoO_3$, ve které se všechny fáze rozpouštěly při teplotách 973–1073 K v relativně krátké době (30–60 min) při poměrech hmotností vzorek/tavenina $\approx 1/250$ –500. Získané výsledky jsou porovnávány s údaji z literatury^{2,3}.

Tato práce vznikla za finanční podpory GA ČR (grant č. 104/07/1209) a MŠMT ČR (projekt č. MSM6046137302).

LITERATURA

1. Marsh K. N., O'Hare P. A. G.: *Solution Calorimetry*. Blackwell Science, 1994.
2. Dneprova V. G., Rezukhina T. N., Gerasimov Y. I.: Dokl. Akad. Nauk SSSR 178, 135 (1968).
3. Raghavan S.: J. Alloys Compds. 179, L25 (1992).

11L-06
TERMICKÁ ANALÝZA A PŘÍPRAVA UHLÍKATÝCH
AEROGELŮ

VÁCLAV SLOVÁK, LUCIE MYSLIKOVJANOVÁ
a JANA ŠTEFELOVÁ

Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava
 vaclav.slovak@osu.cz

Uhlíkaté aerogely představují poměrně novou skupinu uhlíkatých materiálů, které jsou mimořádné díky svým povrchovým vlastnostem, elektrické vodivosti a chemické odolnosti. V každé fázi jejich přípravy (sol-gel polykondenzace, sušení a pyrolýza) lze volbou podmínek do značné míry řídit porézni vlastnosti výsledného materiálu. Termoanalytické metody nachází uplatnění především v poslední fázi přípravy uhlíkatých aerogelů – při pyrolýze organických aerogelů v inertní atmosféře. Cílem tohoto příspěvku je ukázat základní možnosti, které termická analýza (konkrétně termogravimetrie TG) poskytuje.

Byla studována pyrolýza „klasických“ aerogelů na bázi resorcinolu a formaldehydu¹, aerogelů obohacených dusíkem¹ a aerogelů na bázi celulózy² (běžně sušených, tedy ne za superkritických podmínek). Hmotnostní změny byly sledovány při zahřívání v dusíku rychlostí 10 °C min⁻¹ na 500 °C (navážka vzorku 50–100 mg). Pro srovnání byly provedeny analogické experimenty i v laboratorní peci s kontrolovanou atmosférou (10 °C min⁻¹, 500 °C, navážka vzorku 1–3 g, navíc zahřívání na konečné teplotě 1 hodinu). U připravených vzorků byl stanoven měrný povrch (BET).

Výsledky ukázaly, že hmotnostní úbytky (Δm) zjištěné z TG experimentů a při zahřívání v peci jsou v relativně dobré lineární korelaci ($\Delta m(TG) = \Delta m(pec) - 11\%$, $R^2 = 0,92$). To je logické u celulózových aerogelů (pyrolýza ukončena při asi 400 °C), poněkud překvapivé je to u ostatních materiálů, kde rozklad při 500 °C probíhá ještě relativně intenzivně (rychlost úbytku hmotnosti při této teplotě je 1–2 % min⁻¹).

Souvislost hmotnostních úbytků při pyrolýze s měrným povrchem produktu byla sledována u organických aerogelů. S rostoucím Δm obecně klesá povrch uhlíkatých aerogelů. Vysoké hodnoty měrného povrchu (nad 800 m² g⁻¹) byly zjištěny u materiálů, jejichž Δm při pyrolýze nepřesahoval 40 %. Naopak při Δm nad 50 % byly zjištěny povrchy nepatrné. V úzkém rozmezí Δm 40–50 % byly zjištěny hodnoty měrného povrchu 10–600 m² g⁻¹. Právě v této oblasti přináší TG informace umožňující odhalit důvody tak výrazných změn v povrchových vlastnostech výsledných materiálů na základě průběhu změny hmotnosti při ohřevu.

V oblasti celulózových aerogelů byla ověřena i možnost využití TG k posouzení stupně vymytí složek reakčního prostředí z výsledného materiálu.

LITERATURA

1. Gorgulho H. F., Goncalves F., Pereira M. F. R., Figueiredo J. L.: Carbon 47, 2032 (2009).
2. Hoepfner S., Ratke L., Milow B.: Cellulose 15, 121 (2008).

11L-07

SYNTÉZA A STUDIUM SLOUČENIN NA BÁZI Bi_2O_3

PETRA ŠULCOVÁ

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

Na základě metod termické analýzy lze navrhnout podmínky syntézy anorganických pigmentů. Tyto metody jsou pro výzkum nepostradatelné z hlediska testování výchozích surovin, z hlediska přípravy, a také z hlediska zkoumání vlastností anorganických sloučenin. Díky těmto metodám se na našem pracovišti podařilo syntetizovat desítky nových anorganických sloučenin, které mohou najít praktické uplatnění jako barevné pigmenty. Mezi takové sloučeniny lze zařadit také pigmenty na bázi Bi_2O_3 , které při vhodném dopování kubické mřížky Bi_2O_3 mohou poskytovat širokou barevnou škálu od světle žluté barvy až po sytou oranžovou. Konkrétně byla ověřována příprava sloučenin typu $(\text{Bi}_2\text{O}_3)_{0,5}(\text{Ln}_2\text{O}_3)_{0,5}$, kde Ln = Y, Dy, Ho, Er a Lu. U tohoto typu pigmentů právě metody termické analýzy v kombinaci s výsledky rentgenové difrakční analýzy pomohly objasnit princip jejich tvorby.

Příprava pigmentů na bázi Bi_2O_3 spočívá v suché homogenizaci výchozích oxidů, tj. Bi_2O_3 (99 %, Merck, SRN) a Ln_2O_3 (Ln = Er, Y, Dy, Lu a Ho, 99 %, Indian Rare Earths Ltd., Indie) v odpovídajícím poměru. Teplota syntézy se pohybuje v rozmezí 700 až 850 °C. U syntetizovaných sloučenin jsou pak hodnoceny především jejich barevné vlastnosti po aplikaci do organického pojivového systému (Balakom, a.s.). Hlavní pozornost byla zaměřena na syntézu pigmentu, jehož podstatou je Bi_2O_3 , který byl dopován některým lanthanoidem, konkrétně Y, Dy, Ho, Er a Lu, tj. sloučeniny typu $(\text{Bi}_2\text{O}_3)_{0,5}(\text{Ln}_2\text{O}_3)_{0,5}$, které byly připraveny výpalem při teplotě 800 °C. Naším cílem bylo prozkoumat jejich barevné možnosti a ověřit jejich aplikační vlastnosti. Chování reakčních směsí v závislosti na teplotě a také termická stabilita sloučenin byly studovány pomocí metod termické analýzy. Pro měření je využíván přístroj STA 449/C/6/F Jupiter (Netzsch, SRN), který umožňuje simultánní měření TG a DTA v teplotním rozsahu od pokojové teploty až do 1650 °C.

Při vzájemném srovnání DTA záznamů pro Bi_2O_3 a reakční směsi zvolených pigmentů vyplynulo, že na DTA křivkách všech reakčních směsí chybí endotermní pík odpovídající tání $\delta\text{-Bi}_2\text{O}_3$. To je způsobeno tím, že dopování hostitelské mřížky $\delta\text{-Bi}_2\text{O}_3$ ionty lanthanoidů způsobuje zvýšení termické stability pigmentu a na DTA křivce v uvedeném intervalu měření nedochází k jeho tání. Dopování Bi_2O_3 ionty lanthanoidů vede ke zvýšení termické stability takto syntetizovaných sloučenin. Tuto skutečnost potvrdily také výsledky měření, které byly použity pro ověření jejich termické stability. Nejvyšší hodnota byla naměřena pro vzorek obsahující Er, a to 1250 °C, což je výrazný posun, neboť samotný $\delta\text{-Bi}_2\text{O}_3$ taje již při 820 °C.

Tato práce je podporována projektem GA ČR (č. 104/08/0289).

11P-01
TERMICKÁ ANALÝZA SLOUČENIN TYPU
SrCr_xSn_{1-x}O_{3-x/2}

LUCIE ADOLFOVÁ, ŽANETA DOHNALOVÁ, PETRA ŠULCOVÁ a MIROSLAV TROJAN

*Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice
 lucie.adolfova@student.upce.cz*

Perovskity představují významnou skupinu chemických sloučenin z důvodu jejich široké aplikace. Díky svým atraktivním dielektrickým vlastnostem nacházejí uplatnění jako termicky stabilní kondenzátory v elektronickém průmyslu, dále jsou zkoumány jako potenciální materiály pro senzory plynů¹. Mimo jiné se perovskity využívají pro výzkum nových luminoforů při výrobě displejů². Náš zájem byl zaměřen na takové perovskitové sloučeniny, které by byly jednak ekologické, ale také zajímavé z pigmentářského hlediska.

Sloučeniny na bázi perovskitu obsahující chrom jako chromofor v základní struktuře cínicitanu strontnatého byly připraveny klasickou keramickou metodou syntézy. Jako výchozí sloučeniny byly použity Cr₂O₃, SnO₂ a SrCO₃, které byly homogenizovány v achátové misce a poté byly v korundových vypalovacích kelímcích podrobeny dvoustupňové kalcinaci. První kalcinace byla provedena při teplotě 1000 °C po dobu 2 h. Po vychladnutí a vyjmutí z pece byly výpalky opět zhomogenizovány rozdrčením v třecí misce a podrobeny druhé kalcinaci při vyšších teplotách 1300 až 1500 °C po dobu 3 h.

Připravené pigmenty byly následně aplikovány do organického pojivového systému (Balakom, a.s.). Tyto 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)³. Strukturální vlastnosti pigmentů byly studovány pomocí vertikálního difraktometru D8 Advance (Bruker, Velká Británie). Výchozí suroviny a výsledný produkt byly dále podrobeny DTA-TG analýze na přístroji STA Jupiter 449 (NETZSCH GmbH, SRN)³.

Ze záznamů rentgenové difrakční analýzy vyplývá, že již nejnižší teplota výpalu, tj. 1300 °C, vede ke vzniku jednofázového systému. I z hlediska barevnostního lze pigment s obsahem chromu $x = 0,05$ a teplotě výpalu 1300 °C označit jako barevně nejzajímavější s červeně hnědým odstínem.

Tato práce vznikla za podpory GA ČR (č. 104/08/0289) a IGA Univerzity Pardubice (SGFChT04).

LITERATURA

1. Azad A. M., Shyan L. L. W., Pang T. Y.: J. Alloys Compd. 282, 109 (1999).
2. Wang S., Lu M., Zhou G., Zhang H., Zhongsen Y.: J. Alloys Compd. 452, 432 (2008).
3. Šulcová P.: *Vlastnosti anorganických pigmentů a metody jejich hodnocení*, 2. vyd. Univerzita Pardubice, Pardubice 2008.

11P-02
SYNTÉZA A STUDIUM ORTO-
A PYROFOSFOREČNANŮ CHROMU DOPOVANÝCH
LANTHANEM

PETR BĚLINA, PETRA ŠULCOVÁ
a JANA PALARČÍKOVÁ

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

V rámci této práce byly syntetizovány ortofosforečnany a difosforečnany chromu dopované lanthanem jako potenciální anorganické pigmenty s korozně-inhibičními účinky. Cílem bylo ověřit možnost přípravy vybraných sloučenin srážením z vodných roztoků výchozích látek a stanovit jejich základní fyzikálně-chemické vlastnosti.

Připravovány byly následující pigmenty: CrPO₄, LaPO₄, CrPO₄/LaPO₄, Cr₄(P₂O₇)₃, La₄(P₂O₇)₃, Cr₄(P₂O₇)₃/La₄(P₂O₇)₃. Jako výchozí sloučeniny pro přípravu srážením z vodného roztoku byly použity: Cr(NO₃)₃, LaCl₃ a Na₃PO₄, Na₄P₂O₇. Srážení bylo prováděno v temperovaném roztoku (40 °C), postupným přidáváním fosforečné složky za přítomnosti etanolu.

Bylo zjištěno, že připravené sloučeniny vykazují amorfní charakter. Pomocí termické analýzy (Jupiter STA 449C, Netzsch, Německo) byla zjišťována teplota krystalizace produktu. Tato teplota se u všech připravovaných pigmentů pohybovala v rozmezí 950–1050 °C. Následně byly vzorky podrobeny výpalu na teplotu 1000 °C po dobu tří hodin. U připravených vzorků byla jejich struktura studována pomocí rentgen-difrakční analýzy (difraktometr D8 Advance, Bruker, Velká Británie). U difosforečnanů lanthanu bylo prokázáno, že za uvedených podmínek při syntéze podléhají částečné hydrolyze a je preferován vznik ortofosforečnanů na úkor difosforečnanů.

U připravovaných vzorků byly testovány fyzikálně-chemické vlastnosti: hustota, spotřeba oleje, obsah rozpustných látek. Dále byly pigmenty podrobeny mletí v planetárním mlýně tak, aby jejich výsledná střední velikost byla nižší než 5 μm. Dále budou s připravenými vzorky provedeny předběžné korozně-inhibiční testy, tj. měření pH a vodivosti vodných výluhů pigmentů a měření pH a vodivosti vodných výluhů pigmentů s ocelovými plíšky a budou stanoveny parametry plošné koroze pro ocelové plíšky ponořené do suspenze pigmentů.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury ČR, (č. 104/08/0289) a Interní grantové agentury Univerzity Pardubice (projekt č. SGFChT04).

11P-03

STUDIUM SLOUČENINY $\text{Lu}_2\text{Zr}_{1,5}\text{V}_{0,5}\text{O}_7$ S VYUŽITÍM METOD TERMICKÉ ANALÝZY

LENKA BUKOVSKÁ, PETRA ŠULCOVÁ a MICHAL VONDRÁŠEK

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

Oblast výzkumu na katedře anorganické technologie je v současné době zaměřena na přípravu barevných keramických pigmentů na bázi pyrochlorových sloučenin. Základním představitelem těchto pigmentů je pyrochlorová žlut (Pb₂Sb₂O₇), která se však svým složením řadí mezi problematické díky obsahu Pb a také Sb. Pyrochlorové sloučeniny s obecným vzorcem A₂B₂X₇ jsou zajímavou skupinou díky širokým substitučním možnostem, které se mohou uplatňovat jak u míst příslušejících kationům A i B, tak i míst obsazených aniony (X). Právě vhodně zvolené substituce mohou vést k získání celé řady pestrých odstínů žlutých, oranžových až fialových a hlavně způsobí ekologickou bezproblémovost připravených pigmentů¹.

Hlavním cílem výzkumu bylo posoudit vliv způsobu přípravy sloučeniny $\text{Lu}_2\text{Zr}_{1,5}\text{V}_{0,5}\text{O}_7$ na výsledný barevný vzhled pigmentů, přičemž byl použit klasický suchý způsob přípravy, suspenzní mísení surovin a srážení. Kalcinace probíhala v teplotním intervalu 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. Pigmentové aplikace byly objektivně hodnoceny pomocí přístroje ColorQuest XE (HunterLab, USA) v prostoru stejných barevných diferencí CIE L*a*b* (1976). Vedle koloristických vlastností byl také sledován vliv způsobu přípravy a teploty výpalu na velikost pigmentových částic.

Na základě získaných výsledků barevných vlastností bylo ověřeno, že sloučenina připravená srážením a aplikovaná jak do organického pojiva, tak do keramické glazury poskytuje tmavě sytý žlutý odstín. U suspenzního mísení surovin se podařilo snížit optimální teplotu výpalu na 1300 °C v porovnání s ostatními způsoby přípravy, kdy optimální teplota výpalu byla 1500 °C. Způsob syntézy ovlivňuje také velikost pigmentových částic a v tomto případě nejlepší granulometrické složení poskytuje pigment připravený suspenzním mísením (d_{50} se pohybuje v rozmezí 2–5 μm). Z termické analýzy byl potvrzen předpoklad, že pro vznik krystalické pyrochlorové sloučeniny $\text{Lu}_2\text{Zr}_{1,5}\text{V}_{0,5}\text{O}_7$ postačuje teplota výpalu 1300 °C.

Tato práce vznikala za podpory GA ČR č. 104/08/0289 a IGA Univerzity Pardubice (SGFChT04).

LITERATURA

1. Aleshin R., Roy R.: J. Am. Ceram. Soc. 45, 18 (1962).

11P-04

TERMICKÁ ANALÝZA SLOUČENIN TYPU $\text{Bi}_{2-x}\text{Ho}_{x/2}\text{Zr}_{3x/8}\text{O}_3$

PAVEL BYSTRZYCKI, PETRA ŠULCOVÁ a MIROSLAV TROJAN

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice
p.bystrzycki@seznam.cz

Z důvodu zpřísnění ekologických norem je snahou hledat nové sloučeniny v odstínech žluté a oranžové barvy. Jednou z možností jsou pigmenty na bázi Bi_2O_3 , které mají zajímavé barevné odstíny od žlutých po oranžové a jsou ekologicky přijatelné. Intenzivní barvy pigmentů vznikají začleněním chromoforů (zejména lanthanoidů) do mřížky Bi_2O_3 .

Pigmenty typu $\text{Bi}_{2-x}\text{Ho}_{x/2}\text{Zr}_{3x/8}\text{O}_3$ byly syntetizovány suchým způsobem. Jako výchozí suroviny byly použity Bi_2O_3 , Ho_2O_3 a ZrO_2 . Reakční směsi o složení $x = 0,2; 0,6; 1,0$ a $1,2$ byly navázeny v odpovídajícím stechiometrickém množství a homogenizovány v třecí misce. Takto připravené směsi byly kalcinovány v porcelánových kelímcích v elektrické peci při teplotě 800 °C (rychlost ohřevu pece 10 °C min⁻¹) po dobu 3 h.

Připravené pigmenty byly aplikovány do organického pojiva a následně byla jejich barevnost měřena ve viditelné oblasti světla pomocí spektrofotometru ColorQuest XE (HunterLab, USA). Podmínky pro měření barevnosti pigmentů byly následující: měřený vzorek byl osvětlován difúzně a pozorován pod úhlem nepřesahujícím 8° od kolmice (d/8), normalizované denní světlo D65 a 10° doplňkový pozorovatel. Barevné vlastnosti jsou popsány v prostoru CIE L*a*b*, přičemž souřadnice a* (červená-zelená osa) a b* (žlutá-modrá osa) určují barevný odstín. Hodnota L* představuje jas barvy, přičemž L* = 0 odpovídá černé barvě, L* = 50 šedá a L* = 100 bílá. Hodnota S představuje sytost barvy a je vypočtena ze vzorce $S = (a^{*2} + b^{*2})^{1/2}$. Úhel odstínu H° je souřadnice cylindrického barevného prostoru, přičemž H° = 35–70° je odstín oranžové a H° = 70–105° odstín žluté barvy.

Pro studium syntézních podmínek uvedeného typu pigmentů byly použity metody simultánní termické analýzy (TG-DTA). Pomocí těchto metod se podařilo získat informace o teplotním rozsahu, ve kterém začíná docházet ke vzniku požadovaných sloučenin. Pro měření byl využit analyzátor STA 449C Jupiter (Netzsch, SRN), který umožňuje simultánní záznam termoanalytických křivek TG a DTA. Analýza výchozích směsí byla prováděna v rozmezí teplot 100 až 1050 °C, přičemž rychlost ohřevu byla 10 °C min⁻¹. Práškové pigmenty byly dále studovány rentgenovou difrakční analýzou.

Získané výsledky potvrdily, že pro uvedený typ pigmentů je nevhodnější teplota výpalu 800 °C, kdy se podařilo získat vzorky s požadovaným fázovým složením a také barevnými vlastnostmi, neboť bylo dosaženo intenzivní syté žluté oranžové barvy. Při nižší teplotě výpalu jsou barevné odstíny již světlejší a méně syté.

Tato práce vznikala za podpory GA ČR (projekt č. 104/08/0289) a IGA Univerzity Pardubice (SGFChT04).

11P-05

STUDIUM REAKTIVITY OXIDICKÝCH SLOUČENIN TITANU

JAN ČECH, PETRA ŠULCOVÁ, ŽANETA DOHNALOVÁ a MIROSLAV TROJAN

*Katedra anorganické technologie Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice
jan.cech@student.upce.cz*

Rutilové pigmenty lze zařadit do skupiny keramických pigmentů. Pro tyto pigmenty je typická vysoká chemická odolnost vůči působení keramických glazur a schopnost snášet vysoké teploty, které se používají při aplikacích do těchto glazur. Velkou výhodou rutilových pigmentů je jejich jednoduchá příprava a dobrá dostupnost základních surovin. Vzhledem k tomu, že je rutil teplotně stabilní až do jeho teploty tání (1855 °C), otevírá se celá řada možností, jak této stability využít. Jednou z možností je tvorba pevných roztoků se sloučeninami, které v tomto systému působí jako chromofory. Protože se velice často jedná o sloučeniny jinovalentních iontů, které obsahují nabitě substituční poruchy, je nutné tyto poruchy nábojově kompenzovat druhou příměsí. Často používanými příměsími jsou oxidy Sb, W, Mo a Nb (cit.¹).

V této práci byl pro přípravu rutilových pigmentů zvolen klasický suchý způsob přípravy. Jako výchozí suroviny titanu byly zvoleny anatasová pasta ($\text{TiO}_2 \cdot x \text{H}_2\text{O}$) a titanyl sulfát ($\text{TiOSO}_4 \cdot x \text{H}_2\text{O}$), kdy oba lze získat z výroby titanové běloby sulfátovým způsobem. Pro syntézu pigmentů z těchto surovin bylo využito tzv. Hedvalova efektu, kdy anatas přechází na rutil přibližně okolo 800–850 °C. Jako chromofor byl přidán oxid nikelnatý a dále pak výše zmíněné oxidy pro nábojovou kompenzaci. Všechny výchozí suroviny byly důkladně homogenizovány v porcelánové třecí misce a poté podrobeny výpalu na teploty 800, 900, 1000, 1100 a 1200 °C s výdrží 120 min při maximální teplotě. Po vychladnutí byl produkt opět zhomogenizován a rozmělněn, následně byl aplikován do organického pojivového systému. Základní pigmentové-aplikační vlastnosti, jako je např. barevnost, byly sledovány pomocí spektrofotometru ColorQuest XE (HunterLab, USA). Výchozí suroviny titanu a směs všech výchozích oxidů byly dále podrobeny DTA-TG analýze na přístroji STA Jupiter 449 (NETZSCH, SRN)².

Hlavním cílem bylo posoudit vliv dopujících sloučenin a vliv změny výchozí suroviny na výsledný barevný odstín pigmentů a dále pak zjistit vhodnou teplotu pro syntézu těchto sloučenin. Výsledný barevný odstín sloučenin se pohyboval od zeleně žluté až ke khaki.

Tato práce byla podporována projektem GA ČR č. 104/08/0289 a IGA Univerzity Pardubice (SGFChT04).

LITERATURA

1. Sorlí S., Tena M. A., Badenes J. A., Calbo J., Llusar M., Monrós G.: *J. Eur. Ceram. Soc.* 24, 2425 (2004).
2. Šulcová P.: *Vlastnosti anorganických pigmentů a metody jejich hodnocení*, 2. vyd. Univerzita Pardubice, Pardubice 2008.

11P-06

STUDIUM FYZIKÁLNÍHO STÁRNUTÍ CHALKOGENIDOVÝCH SKEL – VLIV EXPERIMENTÁLNÍCH PODMÍNEK

PAVLA HONCOVÁ, ROMAN SVOBODA a JIŘÍ MÁLEK

*^a Katedra anorganické technologie, ^b Katedra fyzikální chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
pavla.honcova@upce.cz*

Anorganické amorfni látky lze nejčastěji připravit rychlým ochlazením taveniny. Vznik skla ochlazením materiálu z rovnovážného stavu kapaliny se projeví na dilatometrických či kalorimetrických křivkách změnou směrnice objem-teplota ($V-T$) či entalpie-teplota ($H-T$). Teplota skelné transformace T_g je definována jako teplota odpovídající průsečíku směrnice závislosti $V-T$ nebo $H-T$ v oblasti „podchlazené kapaliny“ a „skla“. Hodnota T_g závisí na rychlosti chlazení. Amorfni látka připravená rychlým ochlazením taveniny je v termodynamicky nerovnovážném stavu, nad T_g je látka v rovnováze. Pokud budeme sklo temperovat (udržovat při konstantní teplotě) při teplotě pod T_g bude docházet ke změnám vlastností (např. entalpie, entropie, objemu) směrem k rovnovážným hodnotám. Tento proces je obvykle nazýván jako fyzikální stárnutí nebo strukturální relaxace¹.

Fyzikální stárnutí bývá nejčastěji popsáno čtyřparametrovým modelem Tool-Narayanaswamy-Moynihan (TNM) (cit.²), který popisuje závislost fyzikálního stárnutí nejen na teplotě, ale také na struktuře materiálu. Struktura bývá nejčastěji popsána pomocí fiktivní teploty T_f , kterou lze snadno určit postupem dle Moynihana². Informace o průběhu fyzikálního stárnutí se odráží v hodnotách parametrů TNM modelu. Parametry lze získat přímým fitováním experimentálních dat a nebo jejich vhodnou úpravou – pro fitování je vhodnější určit některý z parametrů nezávislou metodou a numericky dohledat zbývající 3 parametry.

V případě fyzikálního stárnutí studovaného pomocí kalorimetrie se proces odráží v ohřevu vzorku v oblasti skelné transformace po předchozím chlazení a nebo temperaci pod T_g . Nejrychlejším typem experimentu je pouze cyklus ohřevů a chlazení, který hlavně umožňuje nezávisle určit hodnotu TNM parametru^{3,4} zdánlivé aktivační energie Δh^* .

Fyzikální stárnutí skla As_2Se_3 bylo studováno pomocí diferenciálního skenovacího kalorimetru (DSC) Pyris 1 metodou cyklů chlazení a následného ohřevu vzorku. Studium bylo zaměřeno na sledování vlivu typu vzorku na získaná experimentální data a na určení parametru Δh^* TNM modelu.

Tato práce vznikla za podpory projektu MŠMT ČR MSM0021627501.

LITERATURA

1. Kovacs A. J.: *Fortschr. Hochpolym. Forsch.* 3, 394 (1963).
2. Moynihan C. T., Easteal A. J., DeBolt M. A., Tucker J.: *J. Am. Ceram. Soc.* 59, 12 (1976).
3. Hodge J. M.: *J. Non-Cryst. Solids* 169, 211 (1994).
4. Hutchinson J. M., Ruddy M.: *J. Polym. Sci., B* 26, 2341 (1988).

11P-07
STUDIUM NUKLEAČNÍCH ČINIDEL
PRO POTLAČENÍ PODCHLAZENÍ
V HEXAHYDRÁTU DUSIČNANU HOŘEČNATÉM

LUCIE ORAVOVÁ, PAVLA HONCOVÁ a VERONIKA
PODZEMNÁ

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

Anorganické látky se řadí mezi jedny z nejdůležitějších materiálů uplatňujících se při akumulaci tepla na základě svého latentního tepla. K akumulaci tepla dochází při tání pevné látky (popř. ohřevu pevné látky či taveniny) a teplo je zpětně uvolňováno během chlazení, kdy látka začne krystalizovat. Množství celkového naakumulovaného tepla do látky je vypočteno ze znalosti tepelné kapacity a entalpie tání dané látky, viz rovnice (1),

$$Q = m \left[\int_{T_{\text{poč}}}^{T_{\text{tání}}} c_{\text{ps}}(T) dT + \Delta_{\text{tání}} H + \int_{T_{\text{tání}}}^{T_{\text{kon}}} c_{\text{pl}}(T) dT \right] \quad (1)$$

kde m je hmotnost látky [g], c_{ps} je tepelná kapacita látky v pevném stavu [$\text{Jg}^{-1}\text{K}^{-1}$], c_{pl} je tepelná kapacita látky v kapalném stavu [$\text{Jg}^{-1}\text{K}^{-1}$] a $\Delta_{\text{tání}} H$ je změna entalpie tání [Jg^{-1}].

Základní požadavky na látky, které se využívají pro akumulaci tepla, jsou vhodná teplota fázové změny a vyšší hodnota entalpie tání. Nicméně tyto podmínky nejsou vždy dostačující pro všechny aplikace a je nezbytné přihlídnout i na další požadavky jako např. vyšší hodnota tepelné kapacity a tepelné vodivosti. Z hlediska praktického použití by látky měly být stabilní během teplotního cyklického zatížení bez výskytu nežádoucích efektů jako je např. podchlazení¹.

Vzhledem k náchylnosti taveniny dusičnanu hořečnatého hexahydrátu k podchlazení, kdy teplota krystalizace látky je až o 30 °C nižší než teplota tání, byla látka testována se třemi nukleačními činidly, a to kaolinitem, uhličitanem vápenatý a oxidem hořečnatým². Směs látky a nukleačního činidla byla testována během 50 teplotních cyklů. Měření bylo provedeno na DSC Pyris 1 (Perkin-Elmer, USA). V rámci měření byla stanovena teplota krystalizace a teplota tání a sledováno, zda-li působením nukleačního činidla dochází k potlačení podchlazení látky. Dále byly z teplotních cyklů vyhodnoceny entalpie tání a entalpie krystalizace pro odhadnutí zda během teplotního namáhání nedochází k degradaci materiálu.

Tato práce vznikla za podpory projektu MŠMT ČR MSM0021627501.

LITERATURA

1. Mehling H., Cabeza L. F.: *Heat and Cold Storage with PCM*. Springer, 2008.
2. Lane G. A.: *Sol. Energ. Mat. Sol.*, C 27, 135 (1992).

11P-08
TERMOCHEMICKÁ STUDIE HYDROXYAPATITU

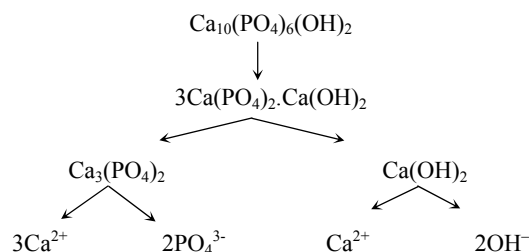
ANNA KOHUTOVÁ, LADISLAV SVOBODA
a VERONIKA PODZEMNÁ

*Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-
 technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565,
 532 10 Pardubice*
 anna.kohutova@student.upce.cz

Fosforečnany vápenaté jsou již řadu let předmětem výzkumů z hlediska svého zastoupení v živých organismech. Velmi úspěšnou oblastí je příprava a vývoj různých kompozitů, v nichž jsou tyto sloučeniny přítomny společně s titánem, keramikou či sklem, a které nacházejí uplatnění ve stomatologii, neurochirurgii a ortopedii^{1,2}. Bioaktivní vrstva kompozitu reaguje s tělní tekutinou, kde na povrchu implantátu dochází k tvorbě hydroxyapatitu ($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$), díky němuž dochází k přizpůsobení cizího implantátu okolním prostředím a vzniku pevných vazeb s živou kostní tkání. Dalším příkladem výskytu vápenatých fosforečnanů v organismu je tvorba tzv. urolitiáz při onemocnění močového systému, což jsou pevné konkrementy, které vznikají během složitých a zatím ne zcela prostudovaných procesů.

Struktura, vlastnosti a způsoby syntéz většiny fosforečnanů jsou dobře známy, ale doposud bylo vypracováno relativně málo termodynamických studií věnovaných těmto sloučeninám a jejich entalpická data jsou vzácná. V příspěvku je prezentován způsob určení experimentální entalpie vzniku hydroxyapatitu.

Entalpie vzniku hydroxyapatitu ΔH_f byla určena pro teploty 25, 37 a 45 °C pomocí reakčního zdvojeného isoperibolického kalorimetru. K určení ΔH_f bylo navrženo následující schéma aditivních rovnic:



Výsledná entalpie byla stanovena pomocí rozpouštěcích reakcí jednotlivých složek ve vhodném rozpouštědle bez vzájemného ovlivnění a reakcí pro zohlednění vazby $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ a $\text{Ca}(\text{OH})_2$ v hydroxyapatitu. Tepelné efekty dějů byly vyhodnoceny z časových závislostí teploty. Uvolněné teplo bylo přímo úměrné rozpuštěnému podílu dané komponenty.

Tato práce byla finančně podpořena z prostředků výzkumného záměru č. MSM 0021627501.

LITERATURA

1. Ito A., Onuma K., v knize: *Crystal Growth Technology*, kap. 16, s. 525. William Andrew Publishing, England 2003.
2. Chen Z. F., Darvell B. W., Leung V. W. H.: *Arch. Oral Biol.* 49, 359 (2004).

11P-09

STUDIUM NEIZOTERMNÍ KRYSTALIZACE As_2Se_3 POMOCÍ TERMOMECHANICKÉ ANALÝZYZUZANA ZMRHALOVÁ*, JIŘÍ MÁLEK a PAVLA HONCOVÁ*Katedra fyzikální chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
z.zmrhal@centrum.cz*

Sklovitý selenid arsenitý patří mezi velmi významné zástupce binárních chalkogenidových skel. Chalkogenidová skla mají velký technický význam, zejména v IČ optice a optoelektronice. Pro charakterizaci a možné použití amorfních chalkogenidů má zásadní význam i znalost jejich termických vlastností, případně kinetiky krystalizace těchto látek. Běžně používanou metodou ke studiu krystalizačního procesu je diferenciální termická analýza (DTA) nebo diferenciální skenovací kalorimetrie (DSC). Další metodou, kterou lze využít pro získání kinetické informací je termomechanická analýza (TMA)¹. Tato metoda se ukázala být vhodnou zejména v případech velmi pomalých krystalizačních dějů, kdy změna tepelného toku za časovou jednotku je menší nebo srovnatelná s limitní citlivostí DTA či DSC přístrojů.

Studium krystalizace pomocí TMA je založeno na viskozitním chování sklotvorných podchlazených tavenin. Během neizotermního měření se sleduje změna výšky vzorku v závislosti na teplotě. S rostoucí teplotou klesá viskozita materiálu, a tím dochází k roztékání vzorku spojeného s poklesem jeho výšky. Vlivem tvorby a růstu krystalů dojde k zastavení roztékání vzorku a tím i zastavení poklesu jeho výšky.

Měření krystalizace As_2Se_3 pomocí TMA bylo provedeno za neizotermních podmínek pro vzorky o původní výšce 1 a 2 mm. Z teplotní závislosti výšky vzorku byla pro různé rychlosti ohřevu určena teplota počátku T_{in} a teplota konce T_{fin} viskózního toku. Ze stanovených teplot T_{fin} byla pomocí Kissingerovy metody určena aktivační energie krystalizačního procesu $E_A = 171 \pm 7 \text{ kJ mol}^{-1}$ pro vzorek o výšce 1 mm resp. $E_A = 170 \pm 12 \text{ kJ mol}^{-1}$ pro vzorek o výšce 2 mm. Tyto hodnoty jsou srovnatelné s hodnotou aktivační energie $E_G = 154 \text{ kJ mol}^{-1}$ získanou přímým sledováním růstu krystalů pomocí mikroskopických metod publikovanou Hendersonem a Astem².

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 104/08/1021.

LITERATURA

1. Málek J., Zmrhalová Z., Barták J., Honcová P.: *Thermochim. Acta*, odesláno.
2. Henderson D. W., Ast D. G.: *J. Non-Cryst. Solids* 64, 43 (1984).

11P-10

EFFECT OF DEACIDIFICATION PROCESSES ON THE LIFETIME OF HISTORICAL NEWSPAPER USING THERMOANALYTICAL METHODS

ANDRÁS PELLER, KATARÍNA VIZÁROVÁ, and PETER ŠIMON*Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
andras.peller@stuba.sk*

Paper information carriers represent a very important part of cultural heritage. Hence, development of the methods for paper stabilization is of vital importance. Paper ageing is a very complex process predetermined not only by the paper structure but also by other factors, among them by the acidity of paper. This is the reason why the deacidification methods play leading role in the paper stabilization and in the providing of sufficient alkaline reserve¹.

In this work, the influence of deacidification processes „Papersave“ and „Neschen“ and the degradation dose, on the historical newspaper is studied by assessing the oxidation induction times of the paper. The kinetic analysis of the reactions exhibiting the induction period² enables to assess the lifetime of organic materials. An advantage of the method is that it is not necessary to know the mechanism of oxidation processes, only the oxidation onset temperatures should be determined from the thermoanalytical DTA records³.

The measurements were carried out using the simultaneous thermoanalyzer (DTA/TG) Shimadzu DTG-60. The purge gas, forming the reaction atmosphere, was air. Oxidation onset temperatures were measured for the heating rates of 1, 3, 5, 7, 10, 15 K min⁻¹. The dependence of oxidation onset temperature on the heating rate was treated by using an isoconversional method based on non-Arrhenian temperature function. The kinetic parameters describing the kinetics of the processes occurring during the induction period have been obtained for each sample. Finally, making use of the kinetic parameters obtained, the oxidation induction time was assessed for the temperature of 23 °C.

The results of the paper lifetime assessment lead to some interesting conclusions: (i) both methods, „Papersave“ and „Neschen“, decrease the lifetime of unaged pristine newspaper, (ii) the stability of aged paper treated by the both methods increases where the method „Papersave“ appeared more efficient⁴.

This study was financially supported by the Slovak Scientific Grant Agency, grant No. VEGA 1/0660/09.

LITERATURA

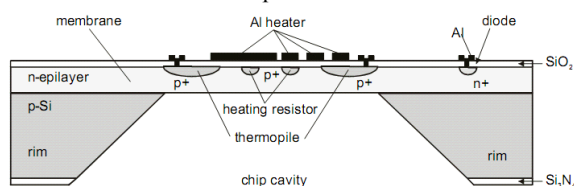
1. Kirschnerová S.: *Ph.D. Thesis*, Slovak University of Technology, Bratislava 2009.
2. Šimon P.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 84, 263 (2006).
3. Šimon P.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 88, 709 (2007).
4. Peller A.: *Diploma thesis*. Slovak University of Technology, Bratislava 2009.

11P-11 POROVNÁNÍ CITLIVOSTI RŮZNÝCH ČIPŮ TYPU NCM-9924

VERONIKA PODZEMNÁ* a LADISLAV SVOBODA

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

V práci jsou diskutovány základní aspekty měření na vsádkovém typu IC-kalorimetru s čipem NCM-9924. V posledních letech došlo ke značnému pokroku v oblasti kalorimetrických měření. Rozvoj mikrosystémových technologií a integrovaných obvodů (IC) umožnil vznik nové řady kalorimetrických zařízení obecně nazývaných jako mikrokalorimetry, jejichž základním rysem je miniaturizovaná konstrukce. IC-kalorimetry jsou navrženy na bázi mikro-čipu s integrovanými termočlánky a ohřivači, jeho uspořádání je znázorněno na obrázku 1. Podle typu mikro-čipu a konstrukce kalorimetru se liší i jejich aplikační možnosti, které lze využít jak při měření směšovacích a zředěvacích entalpií, tak při studiu různých typů chemických reakcí, např. srážecích či enzymatických. V příspěvku je věnována pozornost hlavní měřicí jednotce IC-kalorimetru – čipu NCM-9924. Tento typ mikro-čipu se používá převážně pro měření malých množství kapalných vzorků^{1,2}. Hlavním parametrem vypovídajícím o kvalitě čipu je jeho citlivost³. Jedinečnost každého čipu je jedním z mnoha aspektů ovlivňujících měření. Každý čip je označen šarží a číslem exempláře⁴.



Obr. 1. Čip NCM-9924⁵

Příspěvek je zaměřen na porovnání citlivosti různých exemplářů čipů stejné šarže. Porovnání se provádělo pomocí elektrické kalibrace suchých čipů a čipů se zatížením membrány 8 μ l vody. Bylo zřejmé, že suché čipy vykazují největší citlivost, zatížení membrány daným množstvím vody její citlivost snižuje. Rozdíly v citlivosti jednotlivých exemplářů dokazují, že každý čip je jedinečný a je tedy nutné vždy zjišťovat jeho aktuální citlivost.

Tato práce byla finančně podpořena z prostředků výzkumného záměru č. MSM 0021627501.

LITERATURA

1. Winter W., Höhne G. W. H.: *Thermochim. Acta* 403, 43 (2003).
2. Lerchner J., Wolf G., Auguet C., Torra V.: *Thermochim. Acta* 382, 65 (2002).
3. Podzemná V., Kourková L., Svoboda L., Honcová P., Kohutová A.: *Sci. Pap. Univ. Pardubice, Ser. A* 15, 137 (2009).
4. Van Herwaarden A. W.: Nano-calorimetry [on-line];

poslední aktualizace 1.3.2010 [cit. 17.3.2010]; dostupný z www.xensor.nl/pdf/files/sheets/nanoliq.pdf.

5. Xensor Integration, Nano calorimeters for liquid [on-line]; poslední aktualizace 8.3.2010 [cit. 17.3.2010]; dostupný z <http://www.xensor.nl/pdf/files/sheets/nanoliq.pdf>

11P-12 VYUŽITÍ DTA PRO SYNTÉZU $\text{Ce}_{0,5}\text{Zr}_{0,4}\text{Bi}_{0,1}\text{O}_{1,95}$

LUCIE STRNADLOVÁ, PETRA ŠULCOVÁ a MICHAL VONDRÁŠEK

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

Keramické pigmenty jsou ve své podstatě tuhými roztoky. Základem těchto pigmentů je hostitelská mřížka výchozí sloučeniny, do které jsou v průběhu syntézy včleňovány ionty chromoforu, tj. barvicí komponenty, jejichž zabudování je úzce spojeno s tvorbou různých defektů v krystalické mřížce¹.

Studovaný pigment je založen na včleňování iontů zirkonia a bismutu do hostitelské mřížky CeO_2 , která je fluoritového typu. Zabudování Zr^{4+} iontů do mřížky způsobuje vnitřní napětí, což má vliv na valenční pás O_{2p} . Koexistence Bi^{3+} iontů v mřížce $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$ navíc zvyšuje absorpci v oblasti viditelného světla vytvořením hybridního orbitalu Bi_{6s} a O_{2p} . Mechanismus zbarvení pigmentů na bázi polovodivého CeO_2 spočívá v posunu pásu od O_{2p} ke Ce_{4f} . Tvorba tuhého roztoku může modifikovat vzdálenost mezi valenčním pásem O_{2p} a vodivostním pásem Ce_{4f} , a právě míra vzdálenosti mezi těmito dvěma pásy určuje výsledné zbarvení pigmentu².

Pigment byl připraven klasickou keramickou metodou, tj. reakcí v tuhé fázi a kalcinován při různých teplotách: 1050, 1100, 1150, 1200 $^{\circ}\text{C}$.

Pro stanovení optimálního teplotního rozsahu pro syntézu daného pigmentu byla homogenní výchozí směs podrobena termické analýze. Pro měření byl použit přístroj STA 449/C/6/F Jupiter (Netzsch, SRN), který umožňuje simultánní měření TG a DTA a lze ho používat pro měření v teplotním rozsahu od pokojové teploty až do 1650 $^{\circ}\text{C}$. Studovaný vzorek byl proměřen v teplotním intervalu 20–1400 $^{\circ}\text{C}$. Rychlost ohřevu byla 10 $^{\circ}\text{C min}^{-1}$ a vlastní měření probíhalo ve vzduchové atmosféře. Jako standard byl použit $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (cit.³).

Tato práce vznikla za finanční podpory GA ČR č. 104/08/0289 a IGA Univerzity Pardubice (SGFChT04).

LITERATURA

1. Šulcová P., Trojan M.: *Dyes Pigments* 37, 65 (1998).
2. Masui T., Furukawa S., Imanaka N.: *Chem. Lett.* 35, 1032 (2006).
3. Šulcová P., Trojan M.: *J. Therm. Anal. Cal.* 91, 805 (2008).

11P-13 CRYSTALLIZATION KINETICS OF $\text{Te}_x\text{Se}_{1-x}$ GLASSES

ROMAN SVOBODA and **JIŘÍ MÁLEK**

*Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
roman.svoboda@upce.cz*

Selenium based chalcogenide glasses have gained much importance in the last few decades due to their numerous potential applications. From the technological perspective, pure glassy Se has considerable shortcomings (short lifetime, low sensitivity and thermal instability) and certain additives are commonly used to overcome these limitations. It has been pointed out that Te-Se alloys exhibit some advantages in comparison with pure amorphous Se, i.e. greater hardness, higher conductivity and photosensitivity, higher crystallization temperature and lower ageing effects¹⁻³.

Objective of this work was to describe and compare the crystallization kinetics of chosen compositions ($x = 0.1, 0.2$ and 0.3) in the $\text{Te}_x\text{Se}_{1-x}$ glassy system. The crystallization kinetics of the prepared glasses was studied by differential scanning calorimetry technique under non-isothermal conditions for heating rates $0.5\text{--}30 \text{ K min}^{-1}$. In order to study the influence of particle size on the crystallization process, several powder fractions were prepared for each studied glass. Full kinetic analysis (i.e. determination of the activation energy of the crystallization process, suggestion of an appropriate kinetic model, and determination of the pre-exponential kinetic factor) was done for all measured samples. The experimental data were interpreted in terms of the Johnson-Mehl-Avrami (JMA) nucleation-growth model⁴⁻⁶.

This work has been supported by the Czech Science Foundation under grant No: 104/08/1021.

REFERENCES

1. Bureau B., Danto S., Ma H. L., Boussard-Plédel C., Zhang X. H., Lucas J.: *Solid State Sci.* 10, 427 (2008).
2. Shukla R. K., Swarup S., Kumar A., Nigam A. N.: *Phys. Stat. Sol.* 115, K105 (1989).
3. Yang H., Wang W., Min S.: *J. Non-Cryst. Sol.* 80, 503 (1986).
4. Avrami M.: *J. Chem. Phys.* 7, 1103 (1939).
5. Avrami M.: *J. Chem. Phys.* 8, 212 (1940).
6. Avrami M.: *J. Chem. Phys.* 9, 177 (1941).

11P-14 PHENOMENOLOGICAL DESCRIPTION OF STRUCTURAL RELAXATION FOR NON-CRYSTALLINE MATERIALS

ROMAN SVOBODA, **PAVLA HONCOVÁ**,
and **JIŘÍ MÁLEK**

*Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
roman.svoboda@upce.cz*

The introduced work deals with structural relaxation of non-crystalline materials. The materials investigated within the framework of this research were the amorphous selenium, $\text{Ge}_2\text{Se}_{98}$, $\text{As}_2\text{Se}_{98}$, and polyvinyl acetate. These materials were chosen due to their similar polymeric nature and also for being typical representatives of the respective groups of materials. Two types of relaxation – volume and enthalpy – were studied by using mercury dilatometry and differential scanning calorimetry. The relaxation of the studied materials was described on the basis of the Tool-Narayanaswamy-Moynihan (TNM)¹⁻³ and Adam-Gibbs-Scherer (AGS)⁴⁻⁶ models.

The main objective of this work was to describe and compare the volume and enthalpy relaxation of glassy Se, $\text{Ge}_2\text{Se}_{98}$, $\text{As}_2\text{Se}_{98}$ and PVAc. It was found that in case of all these materials the apparent activation energy of the relaxation process Δh^* was similar for both, volume and enthalpy relaxation. Moreover, the value of Δh^* was found to be close to the activation energy of viscous flow E_{η} determined in the glass transition area. Approximate relations between the volumetric and enthalpic as well as between the TNM and AGS model parameters were determined and hold for all the studied materials.

Second objective of this research was to review and compare the results of non-fitting methods of the TNM parameters estimation with the results obtained from curve-fitting. Four non-fitting methods were tested – the inflectional analysis, the peak-shift method and the estimation of Δh^* from classic and intrinsic cycles. A good agreement between the estimates and curve-fitting results was obtained for all studied materials; the only exception was the Δh^* evaluation from classic cycles which provided an inconsistently high value compared to that from curve-fitting.

This work has been supported by the Czech Science Foundation under grant No: 106/10/P035.

REFERENCES

1. Tool A. Q.: *J. Am. Ceram. Soc.* 29, 240 (1946).
2. Narayanaswamy O. S.: *J. Am. Ceram. Soc.* 54, 491 (1971).
3. Moynihan C. T., Eastal A. J., DeBolt M. A., Tucker J.: *J. Am. Ceram. Soc.* 59, 12 (1976).
4. Adam G., Gibbs J. H.: *J. Chem. Phys.* 43, 139 (1965).
5. Scherer G. W.: *J. Am. Ceram. Soc.* 69, 374 (1986).
6. Hodge I. M.: *Macromolecules* 19, 936 (1986).

**11P-15
SYNTÉZA A STUDIUM SLOUČENINY PrFeO₃****VERONIKA BLOVSKÁ, PETRA ŠULCOVÁ* a JANA LUXOVÁ***Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice
petra.sulcova@upce.cz*

Výzkum pracoviště je zaměřen na přípravu pigmentů, které nacházejí své uplatnění nejen při vybarvování různých pojiv. Mezi takové sloučeniny se řadí perovskity s obecným vzorcem ABO₃, které představují zajímavou skupinu sloučenin především z hlediska řady substitučních možností.

Pozornost byla věnována syntéze pigmentu PrFeO₃, kdy byl studován především vliv teploty výpalu na barevné vlastnosti uvedené sloučeniny, kdy pigment byl syntetizován klasickým suchým způsobem z výchozích oxidů (Pr₆O₁₁ a Fe₂O₃), které byly smíchány v odpovídajícím poměru. Připravené reakční směsi byly kalcinovány v peci při teplotách 1000, 1100 a 1200 °C, kdy doba výdrže byla 2 hodiny.

Vzorky byly aplikovány do organického pojiva a u těchto aplikací byly hodnoceny koloristické vlastnosti, dále u práškových pigmentů byla měřena velikost jejich částic a bylo ověřováno také fázové složení připravených sloučenin.

Bylo prokázáno, že u pigmentů dochází s rostoucí teplotou výpalu ke zvyšování příspěvku žlutého i červeného odstínu v konečné barvě pigmentů, která je čokoládově hnědá. Stejný trend je patrný také u sytosti, která je nejvyšší při teplotě výpalu 1200 °C. S rostoucí teplotou kalcinace došlo k postupnému zvyšování střední velikosti částic, která se pohybuje v intervalu cca 3 až 4,5 μm.

Výsledky rentgenové difrakční analýzy potvrdily, že připravené pigmenty jsou při obou teplotách výpalu (1000 a 1100 °C) třífázové, kdy vedle PrFeO₃ byly vždy přítomné ještě zbytky výchozích oxidů Pr₂O₃ a Fe₂O₃, přičemž při vyšší teplotě výpalu byl obsah těchto volných oxidů nižší.

K ověření teploty výpalu pro syntézu uvedeného typu sloučeniny byly také využity metody termické analýzy, konkrétně simultánní měření TG-DTA. Ze záznamu měření reakční směsi pro syntézu pigmentu PrFeO₃ vyplynulo, že se na DTA křivce objevuje řada endotermních efektů, které souvisí se změnami ve výchozím oxidu praseodymu Pr₆O₁₁, který je ve skutečnosti směsným oxidem 4PrO₂·Pr₂O₃. Exotermní efekt s maximem při 995 °C pak odpovídá vzniku sloučeniny PrFeO₃, což potvrdila také rentgenová difrakční analýza. Poslední endotermní efekt na DTA křivce reakční směsi pro syntézu sloučeniny PrFeO₃ již souvisí s částečnou redukcí iontů trojmocného železa.

Z výsledků je tedy zřejmé, že teplota výpalu 1200 °C je maximálně použitelná, neboť následné změny oxidačního stavu železa budou způsobovat výrazné změny v barevném odstínu této sloučeniny, což je nežádoucí z koloristického hlediska.

Tato práce je podporována projektem GA ČR (č. 104/08/0289) a IGA Univerzity Pardubice (SGFChT04).

**11P-16
CHARAKTERIZÁCIA CELULÓZY A NIEKTORÝCH JEJ DERIVÁTOV TERMICKOU ANALÝZOU A FT-IR****JOZEF TURJAN^a, MILAN DRÁBIK^b a PETER CAPEK^a***^a Chemický ústav, Centrum pre Glykomiku, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, ^b Ústav anorganické chémie, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava
chemtur@savba.sk*

Rastlinné polysacharidy tvoria jednu z najrozšírejších organických látok na našej planéte. Predstavujú heterogénnu skupinu prírodných makromolekul rozdielneho zloženia z hľadiska monosacharidového zastúpenia, typu a konfigurácie väzieb, molekulovej hmotnosti a z toho vyplývajúci aj rozdielných fyzikálno-chemických vlastností. Z polysacharidov má nezastupiteľné miesto celulóza, ako vystúžny komponent rastlinných bunkových stien a je aj najrozšírenejším prírodným karbohydrátovým polymérom. Celulóza ako surovina zohráva rozhodujúcu úlohu v mnohých technických priemyselných odvetviach (textilná a papierenská) a má preto obrovský význam v spoločenskej praxi. Keďže celulóza je kvôli svojej lineárnej štruktúre a usporiadaniu polymérnych reťazcov nerozpustná vo všetkých rozpúšťadlách, nedá sa bez derivatizácie charakterizovať dostupnými fyzikálno-chemickými metódami. S pomedzi jej derivátov najmä karboxymetyl derivát (CMC) má spolu so škrobom široké uplatnenie v potravinárstve^{1,2}. Je zatiaľ jedným z polysacharidov využívaným v detergentoch. Jeho identifikácia v nich je však neľahký problém. Preto vhodnými technikami na identifikáciu CMC v detergentoch môže byť infračervená spektrometria (FT-IR) ako nedeštruktívna metóda a termická analýza (TA), ktorá je však založená na postupnom rozklade polymérnych ako i monomérnych jednotiek a je charakteristická pre daný derivát polysacharidu.

Účelom tejto práce je získanie informácií o profile termických dekompozícií celulózy aj jej carboxymetylovaného derivátu (CMC) popr. iných derivátov akým sú sulfátované (SC), metylhydroxymetylovaný (MHCC) derivát a hybridné sulfátované deriváty S-CMC a S-MHCC za účelom ich možnej identifikácie v rôznych priemyselných kompozitoch. Termogravimetrické štúdiá celulózy a jej rôznych derivátov ukázali charakteristické degradačné profily individuálnych derivátov líšiacich sa v termickej stabilite. Tieto profily a ich rozdiely budú diskutované s dôrazom na vplyv substitúcie na termickú stabilitu derivátov celulózy. Ďalej bude diskutovaný efekt funkčných skupín na rozdielnosti ich FT-IR spektier.

Práca bola financovaná agentúrami VEGA, grant č. 2/0155/08, 2/0055/08 a APVV, grant č. 0030-08.

LITERATÚRA

1. Britto D., Assis O. B. G.: *Thermochim. Acta* 494, 115 (2009).
2. Capek P., Drábik M., Turjan J.: *J. Therm. Anal. Cal.* 99, 667 (2009).

12IL-01

RHIZOSFERA ROSTLIN JAKO AKTIVNÍ SOUČÁST ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ V BIOREMEDIACI TOXICKÝCH LÁTEK

ONDŘEJ UHLÍK^{a,b}, MARTINA MACKOVÁ^{a,b}, JIŘÍ KOUBEK^a, LUCIE MUSILOVÁ^a, MARCELA HOLEČKOVÁ^b, KATEŘINA DEMNEROVÁ^a a TOMÁŠ MACEK^{a,b}

^a Ústav biochemie a mikrobiologie, Fakulta potravinářské a biochemické technologie, VŠCHT Praha, Technická 3, 166 28 Praha, ^b Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i., Společná laboratoř ÚOCHB a VŠCHT Praha, Flemingoovo nám. 2, 166 10 Praha
tomas.macek@vscht.cz

V životním prostředí se postupně hromadí množství toxických látek. Odstranit tyto látky z prostředí fyzikálně chemickými metodami je drahé a náročné na provedení. Odstranění polutantů biologicky, použitím mikroorganismů, rostlin a jejich konsorcií, je finančně výhodnější a šetrnější k životnímu prostředí. Při výběru mikroorganismů vhodných k odstranění daných polutantů bylo nejdříve nutné identifikovat mikroorganismy vyskytující se v daném kontaminovaném prostředí, schopné přežít v přítomnosti daného polutantu a schopné jej i odbourávat. K odstranění polutantů z prostředí je možné využít také samotné rostliny a především jejich vzájemnou spolupráci (fytoremediace a rhizoremediace). Rostliny jsou schopny škodlivé látky z prostředí absorbovat, převést na nefytotoxickou formu a ukládat je ve svých tkáních. Rostliny mají pozitivní vliv na rhizosféru mikroflóry, prokysličují půdu, vylučují látky, které rhizosféru mikroorganismy mohou využívat jako zdroje uhlíku a energie. Různé rostliny uvolňují do prostředí i molekuly podporující mikrobiální aktivitu a indukci některých bakteriálních degradačních enzymů, z čehož těží remediační výzkum. Nedávná zjištění, že rostliny aktivně ovlivňují zastoupení mikroorganismů v konsorciích ve své kořenové oblasti vedlo k využití metagenomiky pro charakterizaci populací a výběr rostlin selektivně podporujících vhodné degradační kmeny mikroorganismů.

Polychlorované bifenyls (PCB) jsou obtížně odbouratelné a pro mnohé organismy toxické. Jedna z možností jejich odstranění spočívá ve využití rostlin a v jejich spolupráci s rhizosféry mikroorganismy. My studujeme vliv rostlin a některých sekundárních metabolitů rostlin, limonenu, naringinu a kyseliny kávové, na odstranění PCB, složení bakteriálních populací, a přítomnost degradačních genů. Bylo zjištěno, že některé z vybraných rostlinných druhů významně ovlivňují rhizosféru degradaci PCB, což je s největší pravděpodobností dáno vlivem na mikrobiální diversitu. Totéž se potvrdilo i s jednotlivými sekundárními metabolity. Ke stanovení mikrobiální diverzity ve vzorcích byly použity metody T-RFLP a analýza genové knihovny. Ty prokázaly, že společenstva pod vlivem různých rostlin jsou odlišná navzájem i od kontrolní zeminy, a umožnily identifikaci dominantních populací bakterií pomocí určení sekvence 16S rRNA genů.

Tato práce vznikla za podpory grantu MŠMT NPVII 2B06156, MSM 6046137305a GA ČR 525/09/1058.

12IL-02

TLAKOVÉ MEMBRÁNOVÉ PROCESY A JEJICH VYUŽITÍ V OBLASTI LIKVIDACE ODPADNÍCH VOD

PETR MIKULÁŠEK

Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
petr.mikulasek@upce.cz

Názvem tlakové membránové procesy se zpravidla označují čtyři typy separačních technik: mikrofiltrace (MF), ultrafiltrace (UF), nanofiltrace (NF) a reverzní osmóza (RO). Jejich společným znakem je kromě použití polopropustné membrány jako separačního elementu aplikace tlakového rozdílu jako hnací síly transportu membránou. Vzájemná odlišnost spočívá ve velikostech používaných tlakových rozdílů, vlastnostech membrán (zejména velikosti pórů) a převládajícím transportním mechanismem. Separační účinek mikrofiltračních a ultrafiltračních membrán se zjednodušeně vysvětluje jako dělení částic na základě různých velikostí a tvaru separovaných částic a pórů membrány. Částice, které mají velikost větší než je velikost pórů membrány jsou membránou zachytávány, zatímco částice menší membránou procházejí. Při nanofiltraci a reverzní osmóze je již situace složitější; kromě velikosti nabývají na významu i náboj povrchu membrány a náboj a difuzivita separovaných částic. Dochází pak například k odpuzování stejně nabitých povrchů (a tím k zabránění průniku některých menších částic póry membrány) nebo k přednostní difúzi některých komponent materiálem membrány.

Při mikrofiltraci jsou membránou zachytávány velmi jemné heterogenní částice o velikosti v rozmezí od 0,05 do 10 μm . Ultrafiltrací se separují makromolekulární látky o relativní molekulové hmotnosti 1 až 1000 kDa. Nanofiltrační membrány zadržují částice o relativní molekulové hmotnosti v rozmezí 0,2–1 kDa. Reverzně osmotickými membránami lze navíc z vody odstranit i většinu částic iontového charakteru^{1,2}.

Mezi úspěšně průmyslově realizované aplikace v oblasti tlakových membránových procesů patří např. mikrofiltrace a ultrafiltrace oplachových vod z výroby používajících elektroforetické nanášení nátěrových hmot, odpadních vod obsahujících různé typy vodných disperzí polymerů, použitých chladicích emulzí z obrobů kovů, příp. oplachových vod po odmašťování kovových součástí před jejich lakování nebo galvanickým pokovováním. Úspěšnou aplikací je rovněž odstraňování iontů kovů a nízkomolekulárních látek z vodných roztoků pomocí nanofiltrace a reverzní osmózy.

Reverzní osmóza, příp. nanofiltrace jsou v oblasti povrchových úprav kovů vhodným řešením pro čištění oplachových vod, příp. čištění odpadních vod. V případě této aplikace lze účinně v jedné operaci vyřešit současně s čištěním oplachové vody také navrácení výnosů z lázně zpět do provozní galvanické lázně. Současně lze provádět i doplňování lázně demineralizovanou vodou, protože její množství se vlivem odpařování snižuje.

Vlastní reverzně-osmotické jednotky pro čištění oplachových vod z povrchové úpravy kovů jsou konstruovány jako s recirkulací retentátu, tak i jako přímá průtočná uspořádání

s několika sadami membránových modulů. Při čištění oplachových vod z povrchové úpravy kovů je dominantní průtočné uspořádání, jehož základní výhodou je, že při něm nedochází k vysokému zatížení membrán vodou s vyšším obsahem rozpuštěných látek. V tomto případě je dosahováno jak vyšších výkonů tak i vyšší čistoty upravené vody. Zanedbatelná není ani vyšší životnost membrán a nižší četnost jejich čištění.

Odstraňování nežádoucích nízkomolekulárních složek z vodných roztoků je často naléhavým požadavkem i při zneškodňování průmyslových odpadních vod. Nanofiltrací a reverzní osmózou lze z odpadních vod odstraňovat organická barviva, povrchově aktivní látky, soli těžkých kovů, toxické organické látky atd. Aplikace jsou proto možné v mnoha odvětvích chemického průmyslu, v hydrometalurgii a v neposlední řadě i při povrchových úpravách kovů. Nanofiltrace, příp. reverzní osmóza, může také doplňovat běžné postupy biologického čištění odpadních vod, zvláště tehdy, jsou-li přítomny látky, které mají škodlivý vliv na mikroorganismy aktivovaného kalu. Vhodným uplatněním NF a RO může být i odstraňování sice netoxických, avšak těžko biologicky odbouratelných látek, které se shromažďují v povrchových vodách a tak je znehodnocují. Ve všech těchto případech lze očekávat úspory vynaložené energie, a to i tehdy, kdy je závěrečná fáze zahušťování (před konečnou likvidací, např. spalováním) provedena klasickým termickým postupem, tj. odpařováním.

Další velmi perspektivní a provozně ověřenou variantou aplikace mikrofiltrace a ultrafiltrace je jejich použití k separaci kalů vznikajících při srážení odpadních vod s obsahem těžkých kovů^{3,4}. Koagulační proces je veden stejným způsobem jako v případě použití lamelových sedimentačních nádrží či průtočných (horizontálních či vertikálních) usazováků. Na rozdíl od těchto separačních postupů je suspenze oddělována od vyčištěné vody (permeátu) membránou a je tak zcela vyloučen únik kalů do odtoku. Permeát je pak možno vést přímo na specifické iontoměniče.

Příklady využití tlakových membránových procesů naznačují jen některé z mnohých možností použití membránových separačních metod a jejich začlenění do složitějších technologických celků, jejich ekonomické výhody a metody pro nalezení optimálních provozních parametrů v příslušných technologiích.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru MSM0021627502.

LITERATURA

1. Ho W. S. W., Sirkar K. K.: *Membrane Handbook*. Van Nostrand Reinhold, New York 1992.
2. Mulder M.: *Basic Principles of Membrane Technology*. 2. vyd. Kluwer Academic Publishers, London 1996.
3. Caetano A., De Pinho M.N., Drioli E., Muntau H.: *Membrane Technology: Applications to Industrial Wastewater Treatment*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht 1995.
4. Scott K.: *Handbook of Industrial Membranes*. Elsevier Science Publishers, Oxford 1995.

12IL-03

AKTUÁLNÍ MOŽNOSTI VYBRANÝCH ELEKTROCHEMICKÝCH PRINCIPŮ, ČIDEL, MODULÁRNÍCH I USB-KOMPATIBILNÍCH SYSTÉMŮ V OBLASTI OCHRANY VOD A PROSTŘEDÍ

LADISLAV NOVOTNÝ

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

Elektrochemické techniky^{1,2} patří do skupiny metod těšících se v oblasti ochrany vod, prostředí a zdraví pozornosti a stále rostoucímu zájmu. Důvodem je především jejich specifická, nezastupitelná, účinná a přitom dostupná aplikovatelnost, jak pro hodnocení stavu a vlastností sledovaného prostředí nebo jeho složek, tak pro elegantní uplatnění příslušných elektrotechnologických procesů. Zmíněné techniky jsou tedy využívány zvláště ve dvou směrech – ve sféře elektrotechnologií a v oblasti elektroanalýzy. Základem jsou specifické principy, uspořádání, materiály, pracovní režimy a postupy.

Mezi využívanými mezifázovými elektrochemickými principy, na které je toto sdělení zaměřeno, lze např. uvést: elektrochemickou polarizaci a depolarizaci, reverzibilní/irreverzibilní redox procesy a jejich charakteristiky, elektrodegradace, elektrokatalýzu, elektrokapilaritu a elektrotenzometrii, elektrosorpci, potenciometrii, potenciostatické a galvanostatické režimy, elektrosepaci, elektrodekontaminace.

Tyto principy mohou být uplatněny ve vhodné kombinaci s vhodnými elektrodovými materiály, elektrodovým uspořádáním, funkčními režimy a postupy. Dokumentují to následující příklady současných i perspektivních variant uplatnění:

1. Vytváření polarizovaných stavů je předpokladem jedné z možností selektivní separace a/nebo stanovení elektrochemicky aktivních složek prostředí. K jeho realizaci slouží např. potenciostatická zapojení. Výsledkem jsou pak buď technologická uspořádání v podobě ovládnutí elektrochemických reaktorů nebo elektrodekontaminačních jednotek, nebo v podobě odpovídajících elektrochemických analyzátorů jako jsou polarografické, voltametrické a jim příbuzné.
2. Poznatky a charakteristiky týkající se reverzibilních a irreverzibilních elektrochemických procesů, polarizačních křivek apod. poskytují základní informace pro návrh vhodných elektrodových materiálů, složení roztoků, potenciálových rozsahů atp. Vyplývají z nich i údaje o přepětí, vhodných přísadách a/nebo rušivých složkách.
3. Pomocí výše zmíněných poznatků lze dále navrhovat i elektrokatalyticky účinné systémy, v nichž sehrává roli katalyzátoru buď přímo povrch elektrody nebo látky na něm adsorbované popř. navázané.
4. Podmínky pro elektrodegradaci sledovaných složek lze pak nalézt např. experimentálně, s využitím voltametrických měření za volených podmínek. Výchozí resp. orientační informace poskytuje zpravidla dostupná odborná literatura, vědecké publikace ap.
5. Využitelnost elektrokapilarity/electrotenzometrie patří mezi méně známé, i když perspektivní možnosti. S její

pomocí mohou být nalezeny např. podmínky pro elektrosorpční separace nebo pro sledování převažující ionogenity povrchově aktivních látek ve vodách.

6. Elektrosorpce studovaná nejčastěji pomocí elektrokapilarity, voltametrie, AC-měření nebo kapacitních měření poskytuje významné speciální informace o chování sledovaných látek a umožňuje navrhnout i vhodné technologické zařízení např. pro separaci konkrétních škodlivin z vod.
7. Principy potenciometrie, potenciostatických a galvanostatických režimů jsou rozsáhle využívány jak v elektroanalýze, tak v elektrolytických uspořádáních.
8. Komplexně jsou elektrodegradční, elektrooxidační, elektrokoagulační a elektroflotační procesy využívány například při elektrochemickém čištění odpadních vod. Na elektrodách např. ze železa, hliníku aj. probíhají zpravidla tyto procesy souběžně, což zvyšuje účinnost čisticích procesů.
9. Komplexní elektrodentaminační uspořádání lze využít též při dekontaminaci půd, odpadů, stavební sutě, stavebních parcel apod.

K realizaci zmíněných principů jsou využívána jak odpovídající technologická a analytická zařízení, tak i terénní řešení. Zařízení jsou často navrhována jako modulární systémy, buď autonomní (bez periférií), nebo v kombinaci s perifériemi (pro registraci, signalizaci, přenos dat, zpětnovazební řízení) a s příslušnými řídicími jednotkami – podle potřeby i s USB-kompatibilními (USB-moduly, notebooky apod.). Důležitou součástí jsou i čidla a elektrodové systémy a jejich materiálová a konstrukční provedení. Příkladem posledně uvedených řešení může být další vývoj voltametrického/polarografického (ETP) systému²⁻⁴, připojitelného ke stolnímu PC nebo přes USB-modul k notebooku, doplněný obvyklými i miniaturizovanými elektrodami, se skleněným, plastovým (event. vyměnitelným) či jiným ústím, na bázi různých materiálů – uhlíku, rtuti, amalgamů, kompozitů, hybridních materiálů (amalgam), různých kovů či oxidů, povrchových modifikací atd. Vedle naznačených příkladů bylo by možno zmínit i řadu dalších, využívajících elektromigračních, membránových, polovodičových a jiných principů, které však nebyly předmětem pozornosti tohoto sdělení.

Tato práce vznikla za podpory grantů MŠMT ČR LC06035 a VZ 0021627502.

LITERATURA

1. Štulík K., Kalvoda R. (ed.): *Electrochemistry for Environment Protection*. UNESCO ROSTE, Venice 1996.
2. Novotný L.: *Dr.Sc.-dížeční práce*. AV ČR, Praha 2002.
3. Novotný L.: *Chem. Listy* 102, 701 (2008).
4. Novotný L.: Čs. užit. vzor PUV 2006-18100; *Obecná a aplikovaná elektrochemie pro ŽP - výukové materiály*.

12IL-04

SYNTECKÉ VONNÉ LÁTKY A JEJICH STANOVENÍ VE VODNÍM EKOSYSTÉMU

**MILADA VÁVROVÁ^a, KRISTÝNA KUBÍČKOVÁ^b,
LIBOR ZOUHAR^a, LUDMILA MRAVCOVÁ^a a JOSEF
ČÁSLAVSKÝ^a**

^a *Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno,* ^b *Fakulta veterinární hygieny a ekologie, Veterinární a farmaceutická univerzita Brno
vavrova@fch.vutbr.cz*

Syntetické vonné látky neboli musk sloučeniny („white musk“) lze zařadit mezi antropogenní kontaminanty, které jsou uvolňovány do životního prostředí již desítky let. Ve velkém množství jsou obsaženy v přípravcích pro osobní hygienu. Z chemického hlediska to jsou nepolární, lipofilní kontaminanty, se schopností kumulace ve složkách životního prostředí. Patří mezi perzistentní prioritní polutanty. Mají potenciální karcinogenní vlastnosti a v mnoha oblastech světa se usiluje o jejich omezení až zákaz používání¹.

Syntetické vonné látky se obecně dělí do čtyř skupin: lineární musk sloučeniny, makrocyclické musk sloučeniny, polycyclické musk sloučeniny a nitromusk sloučeniny. Běžně se začaly syntetické vonné látky objevovat na trhu počátkem dvacátého století; objem jejich produkce v posledních padesáti letech postupně vzrůstá^{2,3}. Nejvýznamnějšími musk sloučeninami ze skupiny polycyclických sloučenin jsou Galaxolid (HHCB) a Tonalid (AHTN), z nitromusk sloučenin jsou to pak Musk xylen, Musk keton a Musk ambrette. V posledních letech se výrazně snižuje produkce nitromusk sloučenin, tj. sloučenin, v jejichž struktuře je zakomponována jedna nebo více nitro skupin; uvedená skupina látek patří mezi látky velmi ohrožující životní prostředí. Naproti tomu narůstá produkce polycyclických a lineárních syntetických vonných látek, které jsou méně toxické. Poslední dvě zmíněné skupiny jsou používány nejčastěji a přidávají se zejména jako vonné látky do produktů osobní hygieny, do čisticích a dezinfekčních přípravků, průmyslových čisticích prostředků, do osvěžovačů vzduchu⁴ atd.

Studie zabývající se přítomností syntetických vonných látek prováděné na čistírnách odpadních vod prokázaly, že dominantními látkami v odpadních vodách jsou Tonalid, Galaxolid a jeho metabolit HHCB-lakton. Protože Galaxolid a Tonalid se dobře sorbují na pevné částice, byla jejich vysoká koncentrace prokázána v čistírenských kalcích. Aplikací těchto kalů na zemědělské půdy může docházet ke kontaminaci terestriálního ekosystému. Koncentrace sloučenin Galaxolidu a Tonalidu se mění v závislosti na počtu ekvivalentních obyvatel. Rozhodující je rovněž typ odpadní vody (odpadní voda z domácností, průmyslová odpadní voda, voda z městské čistírny odpadních vod atd.) a způsob čištění odpadní vody⁴.

Tato studie byla zaměřena na sledování devíti vybraných musk sloučenin v odpadních vodách odebraných z čistírny odpadních vod Brno-Modřice. Nejprve byla provedena optimalizace sorpčně desorpční metody izolace analytu pomocí SPME (solid phase microextraction). Pomocí přímé SPME byly sledovány analyty sorbované na PDMS/DVB vlákno (polydimethylsiloxan/divinylbenzen). Optimalizace byla zaměřena na výběr vhodného typu vlákna a na stanovení

teploty vodní lázně po dobu sorpce analytů na SPME vlákno. Pro optimalizaci byla izolace analytů provedena sorpčně desorpční metodou SPME, a to ze vzorků modelové vody. Pomocí přímého ponoření SPME vlákna do vzorku této vody s přidavkem zásobního roztoku standardů byla zjišťována odezva sledovaných analytů.

Na začátku každého dne byl připraven nový zásobní roztok standardů musk sloučenin. Zásobní roztok byl ředěn do acetonu pro plynovou chromatografii (Merk, Německo). Získané hodnoty byly odečteny z chromatogramů na základě získaných retenčních časů a typických iontů (m/z).

Pro analýzu byla vytvořena metoda stanovení pomocí plynového chromatografu s hmotnostním detektorem (GC Hewlett-Packard 6890N, Agilent, USA; hmotnostní detektor MSD 5973N, Agilent, USA; software Enhanced ChemStation (Agilent Technologies, USA) [knihovna spekter: NIST05.L]). Byla použita kapilární kolona se stacionární fází DB-5MS; rozměry: 20 m × 0,180 mm × 0,18 μm; limit teplot: –60 °C až 325 °C (Agilent Technologies, USA).

Tabulka I

Průměrné koncentrace musk sloučenin za měsíc únor v ng l⁻¹ a účinnost čištění (%) na ČOV Brno-Modřice

MUSK	Surová OV [ng l ⁻¹]	Odtok [ng l ⁻¹]	Účinnost čištění OV [%]
PH	3,18	1,984	37,6
TRAS	33,479	14,92	55,4
HHCB	2284	1231	46,1
AHTN	422,8	143,6	66,0
MX	91,56	20,22	77,9
MK	90,59	55,22	39,0
AMB	4,972	nd	99,9
MOS	nd	nd	nd
TIB	nd	nd	nd

Z průměrných koncentrací sledovaných analytů vyplývá, že nejvíce se v odpadní vodě vyskytují polycyklické musk sloučeniny. Z nitromusk sloučenin nebyly v odpadních vodách detekovány Musk tibeten a Musk mosken. Musk ambrette byl detekován ve velmi nízkých koncentracích. Zjištěné hodnoty Musk ambrette ležely ve většině případů pod mezí stanovitelnosti dané metody. Zjištění, že se nitromusk sloučeniny vyskytují v nižších koncentracích než polycyklické musk sloučeniny, souvisí s omezením používání nitromusk sloučenin vzhledem k jejich nebezpečným vlastnostem.

LITERATURA

1. Červený L., Chem. Listy 412, 93 (1999).
2. Rimkus G. G.: Toxicol Letters 37, 111 (1999).
3. Luckenbach T., Epel D.: EHP 17, 113 (2005).
4. Horii Y., Reiner J. L., Loganathan B. G., Kumar K. S., Sajwan K., Kannan K.: Chemosphere 2011, 68 (2007).

12IL-05 VYSOCE ÚČINNÉ TECHNOLOGIE ČIŠTĚNÍ PRO OPĚTOVNÉ VYUŽÍVÁNÍ ODPADNÍCH VOD

JIRÍ WANNER

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

Od prvních počátků v čištění odpadních vod v Anglii v 19. století převažoval přístup, že takto soustředěné vody představují pouze zdroj znečištění. Posun v myšlení lidí a v přístupu lze pozorovat v posledních cca 20. letech. V anglicky mluvících zemích se už upouští i od termínu „wastewater“ (odpadní voda), neboť voda je cennou surovinou a ani ve znečištěném stavu není odpadem. Nově se používají termíny jako „water reuse“ nebo „water reclamation“ či „water recycling“. Čistírný odpadních vod, budované v posledních letech v rozvinutých zemích nejsou zakončeny troubou odvádějící odtok do recipientu. Odtok je veden k dalšímu použití, a to buď přímo či po předchozí akumulaci¹. I v České republice existují důvody zabývat se problematikou opětovného využívání vyčištěných odpadních vod:

- Rostoucí cena pitné vody v systémech veřejného zásobování.
- Přesto, že výroba pitné vody je u nás založena z 60 % na vodě povrchové, jejíž bilance je stále kladná, objevují se problémy s obnovováním zásob podzemní vody.
- Současné čistírenské technologie včetně metod terciárního čištění dosahují již takové kvality odtoku, že je v podstatě nesmyslné tuto vodu vypouštět přímo do recipientů, kde se získaná vysoká kvalita ztratí bez využití.

Vodu vyčištěnou běžnými postupy, tedy biologickými procesy, fyzikálními procesy, chemickými procesy nebo jejich kombinací lze použít v omezeném okruhu případů, především v průmyslu jako technologickou vodu nebo v zemědělství pro závlahu technických a energetických plodin. Pro další oblasti opětovného využití je nutno odpadní vody podrobit terciárnímu stupni. Z metod terciárního dočištění se nejčastěji používají filtrace na pískových filtrech nebo mikrosítech, hygienické zabezpečení, sorpce zbytkových organických látek, iontová výměna a různé formy membránové filtrace².

Pro bezpečné opětovné využití odpadních vod je rozhodující dokonalé hygienické zabezpečení. Vhodným dezinfekčním prostředkem je chlór pro jeho nízkou cenu a dobrou dostupnost. Je nutné dávkovat dostatečné množství a zajistit dostatečnou reakční dobu, což zajistí požadovanou kvalitu vody. Obsah chlóru dále zabraňuje vzniku povlaků v rozvodném potrubí či působí preventivně proti sekundárnímu růstu mikroorganismů. V případě, že zbytkový chlór v dalším využití není žádoucí, přidávají se dechlorační činidla.

Jiným procesem použitelným k dezinfekci a hygienizaci vody je využití UV záření. Záření narušuje strukturu buněčné stěny a tím brání reprodukci. Účinnost je dána intenzitou záření a dobou expozice, vzhledem k nízkému průniku záření vodním prostředím je třeba, aby voda byla vystavena záření v tenkém filmu. I přes relativně vysoké náklady se metoda dezinfekce UV zářením stává nejrozšířenější metodou při terciárním čištění odpadních vod pro účely jejich opětovného

využití. Dalším vhodným dezinfekčním činidlem je ozon, který jakožto silné oxidační činidlo je velmi efektivní při destrukci virů a bakterií. Náklady na ozonozaci však silně diskvalifikují tuto metodu pro praktické použití.

Jako membránové filtrační technologie se označují takové metody, které vhodně kombinují odstranění zbytkových polutantů a hygienizaci odtoku. Lze tak dosáhnout vysoké kvality odtoku vyčištěné odpadní vody. Z hlediska zachytu částic na filtru lze rozlišit membránové technologie:

- Mikrofiltrace (MF), kde průměr pórů je 0,1–1 μm , odstraňuje tedy většinu částic velikosti bakterií.
- Ultrafiltrace (UF), s velikostí pórů 0,01–0,1 μm , zachycuje bakterie, viry a větší molekuly.
- Reverzní osmóza (RO), umožňuje odstranit i volné ionty a získat tak demineralizovanou vodu. Rozhodující je tlak působící na čištěnou odpadní vodu, který musí být vyšší než příslušný tlak osmotický.
- Nanofiltrace (NF), pracuje obdobně jako reverzní osmóza, ale při nižším tlaku a tudíž i úroveň zachycení je nižší.

Příklady opětovného využití odpadních vod³

Prvním úspěšným projektem opětovného využití odpadních vod byl již v 70. letech 20. století Windhoek Goreangab Reclamation Plant v Namibii, kde vzhledem k nedostatečným zdrojům pitné vody se postupně vytvořil systém složený ze zdrojů vody z přehrad, vrtů a produktů čištění odpadních vod. V kalifornském systému s nerovnoměrně rozloženými zdroji vody, kde jsou limitní zásoby povrchové i podzemní vody, byla vytvořena centrální stoková síť s následným čištěním. Vyčištěná odpadní voda se využívá především pro závlahu městské zeleně a k zemědělským účelům. Obdobným způsobem funguje opětovné používání odpadních vod i v Austrálii, ve státech Victoria a Southern Australia, kde je vyčištěná odpadní voda akumulována v lagunách pro použití v době sucha. V Barceloně dosahují vysoké kvality vyčištěné odpadní vody díky jednotkám terciárního čištění a vodu využívají pro závlahové systémy, nadlepení průtoku řek a jako bariéru proti průniku slané vody do podzemní po doupravě reverzní osmózou. Využití vyčištěné odpadní vody pro výrobu pitné vody je známo ze Singapuru jako tzv. Newater, kde mělo její zavedení velký úspěch.

Tato práce vznikla v rámci Vědecko výzkumného záměru MŠMT ČR, MSM 6046137308.

LITERATURA

1. Asano T., Levine A.: Wastewater Reclamation, Recycling and Reuse: Introduction. In: Asano, T. (ed.), *Wastewater Reclamation and Reuse*, s. 1–55. CRC Press, Boca Raton 1988.
2. Wanner J., Pečenka M.: Vyčištěná odpadní voda – odpad nebo zdroj vody? Sb. konf. *CzWA Nové metody a postupy při provozování ČOV XIV. Moravská Třebová, 7.–8. dubna 2009*, VHOS a.s.
3. Wanner J.: Možnosti opětovného používání vyčištěných odpadních vod. Sb. konf. *Nové trendy v čistírenství a vodárenství. Soběslav, 11. listopadu 2009*, ENVI-PUR s.r.o.

12L-01
PRODUKCIA VODÍKA KATALYZOVANOU
PYROLÝZNOU DEGRADÁCIU ZMESÍ
POLYMÉROV

PETER BOBER^{*a}, ANDREJ ORIŇÁK^b, RENÁTA
ORŇÁKOVÁ^b, PETR ZAMOSTNÝ^c a JURAJ
LADOMERSKY^a

^a Katedra environmentálneho inžinierstva, Fakulta ekológie a environmentalistiky, Technická Univerzita vo Zvolene, T.G. Masaryka 24, 960 53 Zvolen, ^b Katedra fyzikálnej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesová 11, 041 54 Košice, ^c Ústav organickej technológie, Fakulta chemickej technológie, Vysoká škola chemicko-technologická v Prahe, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice
 bober.peter9@gmail.com

Na štúdium prípravy vodíka katalyzovanou pyrolýznou degradáciou polymérov (polyetylénu, polymetylmetakrylátu) bola použitá metóda pyrolýznej plynovej chromatografie (Py-GC) v spojení s hmotnostnou spektrometriou (MS). Zvýšením teploty pyrolýzy sa pri tepelnej degradácii plastov zvyšuje množstvo uhl'ovodíkových plynov a znižuje množstvo oleja/vosku¹. V pyrolyzáte vzniká aj metán, ktorého katalyzovanou konverziou sa obohacuje plynná fáza vodíkom, čo zvyšuje účinnosť jeho prípravy. Pre tento účel boli skúmané rôzne metalické katalyzátory pri rozklade plyných a kvapalných uhl'ovodíkov. Obzvlášť Ni katalyzátory mali vysokú katalytickú aktivitu v konverzii vodíka a produkcii pri teplotách pyrolýzy 500–700 °C (cit.²). Niektoré z bimetalických katalyzátorov zložených z Fe, Ni, Pd, Cu kovov vyprodukovali viac H₂ v porovnaní s monometalickými katalyzátormi^{3,4}. V tejto štúdii boli použité kovové aditíva (práškové Fe častice s elektrolyticky depozitovaným Ni-Co povlakom), aditívum č. 1 – Ni (43 %), Co (26,3 %), Fe (30,7 %) a aditívum č. 2 – Ni (17 %), Co (6 %), Fe (77 %). Najväčšie množstvo H₂ sme získali pri pyrolýznej teplote 815 °C a pomere HDPE:PMMA = 1:4 (3,62 hm.%). Vplyv pyrolýznej teploty 815 °C na produkciu H₂ bol väčší (v priemere 82% nárast množstva H₂) v porovnaní s pyrolýznou teplotou 700 °C. Porovnaním pomerov zmesí polymérov HDPE:PMMA = 4:1 a HDPE:PMMA = 1:4 boli zaznamenané minimálne rozdiely (5% rozdiel) v množstve získaného H₂. Kovové aditíva č. 1 a 2 nemali žiaden vplyv na konverziu vodíka, kde sme zaznamenali pokles jeho hmotnosti, v dôsledku tepelnej adsorpcie kovového aditíva počas pyrolýznej degradácie zmesí polymérov. Okrem skúmaného vodíka sme sledovali obsah metánu, kde maximálne množstvo CH₄ sa získalo pri teplote 815 °C a pomere HDPE:PMMA = 1:4 (približne 42 hm.%). Preto ďalší výskum bol zameraný na produkciu H₂ pyrolýznou degradáciou CH₄ použitím Ni metalických katalyzátorov.

Autori ďakujú agentúre VEGA za finančnú podporu grantom č. 1/0134/10.

LITERATÚRA

1. Mastral F.J., Esperanza E., Garcia P., Juste M.: *Pyrolysis of high-density polyethylene in a fluidised bed reactor*. Influence of the temperature and residence time, Department of Chemical and Environmental Engineering, Uni-

versity of Zaragoza, Zaragoza 2001.

2. Parmon V.: Presented at the *ICS Meeting on Technologies for Hydrogen Production and Fuel Cells, Trieste, Italy, March 2005*.
3. Shah N., Panjala D., Huffman G.: *Energy Fuels* 15, 1528 (2001).
4. Wang Y., Shah N., Huffman G.: *Catal. Today* 99, 359 (2005).

12L-02

THE USE OF BALANCED SCORECARD IN THE STRATEGIC PLANNING OF RENEWABLE ENERGY SUPPLY IN THE REGIONAL LEVEL

Abstract of seminars presented at: (1) 9th International Business Week on Renewable Energy and Environmental Industries at the School of Economics and Management of University of Minho, 3–7 May 2010, and (2) Workshop on Renewable Energy Sources in Azores, 17–21 May 2010

TICIANO COSTA JORDÃO

*Institute of Public Administration and Law, Faculty of Economics and Administration, University of Pardubice, Studentská 84, 532 10 Pardubice
 Ticiano.costa-jordao@upce.cz*

This contribution suggests a model based on balanced scorecard (BSC) that enables to identify the related economic, social and environmental benefits from renewable energy sources. The regional energy strategic objectives are grouped into four perspectives of performance metrics which includes the four conventional BSC perspectives (financial, customer, internal processes, and learning and growth) and a new one, named non-market perspective, which brings out the non-market issues, such as the benefits and the potential socio-economic and environmental impacts of each alternative energy source for a specific region. The overall analysis shows for a particular location which renewable energy technology is the best for the environment, for the society and for the bottom line. The solution may vary depending on customer type, geographic location, government incentives, and so forth. The model may also allow one to find the markets which are good for specific renewable energy technologies that provide strong economic drivers for its customers. Four types of renewable energy technologies can be analyzed through the BSC tool: photovoltaic and thermal solar power, wind power, biomass thermal and gasification, geothermal, and biofuels. Some location-specific variables are considered such as: fuel availability, electricity and gas prices, heating and cooling loads, utility rates, and rebates and tax incentives. The model combine several key sources of information including energy output of the technology, prevailing energy rates, market size and energy load factors on an area basis.

REFERENCES

1. Möller A., Schaltegger S.: *J. Ind. Ecol.* 73, 9 (2005).
2. Dillon J., Blagus R., Parr S., Iyer V., Houghton A.: *Renewable energy calculator*. Patent Appl. Publ. US 0313083, 17 December 2009.

- Krumdieck S., Hamm A.: *Energ. Policy.* 37, 3301 (2009).
- Thórhallsdóttir T. E.: *Environ. Impact Asses. Rev.* 27, 545 (2007).
- Bach N., Calais P., Calais M.: *Renew. Energ.* 22, 211 (2001).
- Lund H.: *Renewable Energy Systems: The Choice and Modeling of 100% Renewable Solutions.* Elsevier Inc., USA 2010.

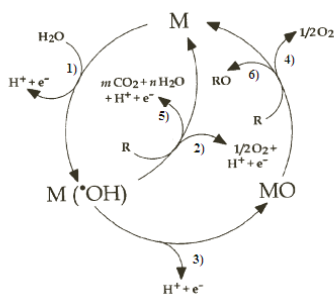
12L-03 POKROKOVÉ OXIDAČNÍ PROCESY VHODNÉ PRO ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD

LIBOR DUŠEK

Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
libor.dusek@upce.cz

Pokrokové oxidační procesy (známé pod zkratkou AOP) využívají často reaktivní hydroxylový radikál OH[•]. Jelikož se atak OH[•] se vyznačuje nízkou selektivitou, je zde předpoklad pro jeho široké uplatnění v oxidačních technologiích při předúpravě průmyslových odpadních vod s obsahem toxické organické matrice. Výhodou tohoto agresivního oxidovačla je možnost vygenerovat OH[•] různým reakčním mechanismem. AOP probíhají za normální teploty a tlaku, což s sebou přináší energetické úspory a jelikož činidla potřebná pro tvorbu OH[•] radikálů jsou dosud drahá (O₃, H₂O₂), je ekonomické využívat procesy AOP na odpadní vody s hodnotou CHSK respektive TSK < 5000 mg l⁻¹, nebo je kombinovat s aerobním biologickým stupněm. Jinou možností je generovat OH[•] prostřednictvím přímé elektrochemické oxidace¹.

Probíhá-li elektrochemická oxidace polutantu na povrchu anody prostřednictvím fyzikálně adsorbovaného hydroxylového radikálu nebo chemicky sorbovaného aktivního kyslíku (jde o kyslík vázaný ve struktuře oxidu kovu elektrody MO_{x+1}) hovoříme o anodické nebo také o přímé oxidaci a může podle podmínek vést k úplné mineralizaci organického polutantu nebo k selektivní oxidaci za vzniku produktu (obr. 1)²⁻⁴.



Obr. 1. Schéma reakčního mechanismu přímé elektrochemické oxidace

Práce vznikla v rámci výzkumného záměru Univerzity Pardubice – MSM 0021627502.

LITERATURA

- Dušek L.: *Chem. Listy*, v tisku.
- Chen G.: *Sep. Purif. Technol.* 38, 11 (2004).
- Comninellis Ch.: *Electrochem. Acta* 39, 1857 (1994).
- Feng J., Johnson D. C.: *Electrochem. Soc.* 137, 507 (1990).

12L-04 MONITOROVÁNÍ HLADINY FYTOCHELATINŮ V BILOGICKÉM MATERIÁLU S VYUŽITÍM BRDIČKOVY REAKCE NA RTUŤOVÝCH A AMALGAMOVÝCH ELEKTRODÁCH

MILOSLAVA FOJTOVÁ^{a,b}, PAVLÍNA VIDLÁKOVÁ^a,
LENKA BANDŽUCHOVÁ^c, LUDEK HAVRAN^a, MIROSLAV FOJTA^a a RENÁTA ŠELEŠOVSKÁ^{a,c}

^a Biofyzikální ústav AVČR, v.v.i., Královopolská 135, 612 65 Brno, ^b Oddělení FGP, Přírodovědecká fakulta MU, Kotlářská 2, 611 37 Brno, ^c Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
fojtova@ibp.cz, renata.selesovska@upce.cz

Fytochelatiny (PC) jsou peptidy o obecném vzorci (γ-Glu-Cys)_n-Gly (kde n>1), jež hrají klíčovou roli při detoxikaci těžkých kovů u rostlin. Jejich syntéza je indukovaná expozicí rostlin nebo rostlinných buněk iontům těžkých kovů (např. kadmnatým) a tyto ionty jsou vyvazovány do stabilních komplexů s PC prostřednictvím koordinace příslušného iontu thiolovými skupinami periodicky se opakujících cysteinových zbytků. Vzhledem k těmto vlastnostem jsou PC, podobně jako metalothioneiny v živočišných systémech, považovány za biomarkery znečištění životního prostředí těžkými kovy¹.

Vysoký relativní obsah cysteinu v molekulách PC udílí těmto peptidům výhodné vlastnosti pro jejich elektrochemickou analýzu na rtuťových a amalgamových elektrodách^{1,2}. V přítomnosti iontů kobaltu poskytují PC na visící rtuťové kapkové elektrodě (HMDE) výraznou Brdičkovy reakci s charakteristickým tvarem voltametričkových a chronopotenciometrických záznamů, jímž se liší jak od prekurzoru jejich syntézy glutathionu (γ-Glu-Cys-Gly), tak od vysokomolekulárních buněčných proteinů. Díky tomu lze PC indukované těžkými kovy snadno elektrochemicky stanovit přímo v buněčných lyzátech bez dalších purifikačních kroků, čehož bylo využito pro monitorování hladiny PC v rostlinných suspenzích kultuřích vystavených sub-cytotoxickým a cytotoxickým koncentracím kadmnatých iontů¹. Na elektrodách z pevného stříbrného amalgámu (AgSAE) modifikovaných rtuťovým meniskem nebo filmem vykazují PC v zásadě stejné chování jako na HMDE. Naproti tomu na leštěném AgSAE byl v přítomnosti kobaltnatých iontů a PC, stejně jako v přítomnosti glutathionu nebo cysteinu, pozorován pouze jediný výrazný pík². S tím související ztráta selektivity pro PC byla je však v tomto případě vyváжена výrazně vyšší citlivostí jejich stanovení. Jak rtuťové, tak amalgamové elektrody byly úspěšně využity pro detekci PC nejen v suspenzích kultuřích, ale i v semenáčcích vystavených kadmnatým iontům.

Tato práce vznikla za podpory grantů MŠMT ČR LC06035

a MSM0021622415.

LITERATURA

1. Fojta M., Fojtová M., Havran L., Pivoňková H., Dorčák V., Šestaková I.: *Anal. Chim. Acta* 558, 171 (2006).
2. Šelešovská-Fadrná R., Fojta M., Navrátil T., Chýlková J.: *Anal. Chim. Acta* 582, 344 (2007).

12L-05

**VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ THALIA
VE SLOŽKÁCH ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ
S VYUŽITÍM STRÍBRNÉ PEVNÉ AMALGÁMOVÉ
ELEKTRODY**
RENÁTA ŠELEŠOVSKÁ* a JAROMÍRA CHÝLKOVÁ

Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
renata.selesovska@upce.cz

Thalium je stopový prvek, vyskytující se v zemské kůře v rozmezí 0,45–1 g/t (cit.¹). Toxikologicky je velmi významné, protože otravy jeho sloučeninami byly v minulosti velmi četné. Akutní otrava může vyvolat křeče, delirium až smrt¹. Antropogenními zdroji thalia jsou těžba a úprava rud, spalování uhlí, aplikace pesticidů, odpady z výroby a použití tohoto kovu, jeho slitin a sloučenin (sklářství, elektronika, aj.) a spalování odpadů. Toxickým účinkům jsou vystaveni pracovníci zmíněných provozů. Neprofesionální expozice obyvatelstva je nízká s výjimkou okolí uhelných elektráren a tepláren, spaloven odpadů a míst aplikace TI-pesticidů¹.

V literatuře byla popsána řada voltametrických metod stanovení thalia s využitím visící rtuťové kapkové elektrody (HMDE) v různých typech vzorků (např. voda, půda, popílek, struska apod.). Vzhledem k toxicitě kapalné rtuti však roste tlak na omezení jejího využití. Stříbrná pevná amalgámová elektroda (AgSAE) představuje velmi dobrou alternativu ke rtuťovým elektrodám; kombinuje výhody rtuťových a pevných elektrod. Byly popsány různé modifikace AgSAE^{2,3}, zahrnující rtuťovým meniskem modifikovanou (m-AgSAE), rtuťovým filmem modifikovanou (MF-AgSAE) a leštěnou (p-AgSAE) stříbrnou pevnou amalgámovou elektrodu. Příprava AgSAE je velice jednoduchá a byla podrobně popsána v literatuře⁴.

Ukázalo se, že amalgámové elektrody jsou vhodné ke stanovení thalia v životním prostředí, protože umožňují dosažení dostatečně nízkých detekčních limitů v řádu 10^{-10} M (při akumulaci 300 s). Pro reálné vzorky byly navrženy postupy loužení a mineralizace. Jako příklad lze uvést stanovení thalia ve výluhu vzorku popela. S využitím jednotlivých testovaných pracovních elektrod byly stanoveny obsahy TI 1,98 mg kg⁻¹ (HMDE), 1,89 mg kg⁻¹ (m-AgSAE) a 1,95 mg kg⁻¹. Relativní směrodatná odchylka při opakovaném stanovení TI v reálných vzorcích ani u jedné elektrody nepřekročila hranici 5 %.

Tato práce vznikla za podpory Výzkumného záměru MSM 0021627502, Výzkumného centra LC06035 a projektu MŽP SP/4i2/60/07.

LITERATURA

1. Trebichavský J., Havrdová D., Blohberger M., v knize: *Škodliviny I – Toxické kovy*, kap. 19, s. 367. NSO – Ing. František Nekvasil, Praha 1998.
2. Novotný L., Yosypchuk B.: *Chem. Listy* 1118, 94 (2000).
3. Yosypchuk B., Novotný L.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 141, 32 (2002).
4. Yosypchuk B., Novotný L.: *Electroanalysis* 1733, 14 (2002).

12L-06

**ČIŠTĚNÍ VOD KONTAMINOVANÝCH
HALOGENOVANÝMI AROMATICKÝMI
SLOUČENINAMI S POUŽITÍM KOVOVÝCH SLITIN**
TOMÁŠ WEIDLICH* a ANNA KREJČOVÁ

Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
tomas.weidlich@upce.cz

Je známo, že halogenované aromatické sloučeniny jsou biologicky mnohem hůře odbouratelné než odpovídající dehalogenované sloučeniny¹. Pro dehalogenace alifatických halogenderivátů rozpuštěných ve vodách se v poslední době s oblibou používá metodika založená na působení velkého přebytku železa ve formě pilin². Je ale známo, že tento postup není aplikovatelný pro dehalogenaci aromatických halogenderivátů, protože reakční doba je za laboratorní teploty neúnosně dlouhá³. Proto jsme se pro snižování obsahu AOX ve vodách pokusili použít kovové slitiny, které jsou mnohem účinnějšími redukčními činidly než elementární kovy. Při testování účinnosti různých kovových slitin jsme se zaměřili na dehalogenaci halogenovaných anilinů, sloučenin ve vodě dobře rozpustných, které jsou častým kontaminantem odpadních vod z chemického a farmaceutického průmyslu.

V experimentech jsme prokázali, že velmi účinným dehalogenačním činidlem je Raneyova slitina hliníku s niklem. Rychlost dehalogenace halogenovaných anilinů byla studována v prostředí pufrů v celém rozsahu pH. Dokázali jsme, že pro účinnou dehalogenaci působením Al-Ni slitiny je nutné použít alkalické prostředí s hodnotou pH > 10 (schéma 1). Výhodou uvedeného postupu je použití malého přebytku redukčního činidla, mírné reakční podmínky a velmi krátké reakční časy. Nerozpuštěný podíl lze snadno oddělit dekantací. Obsah kovových iontů ve filtrátech lze výrazně snížit neutralizací. Prokázali jsme, že tuto metodu lze aplikovat na

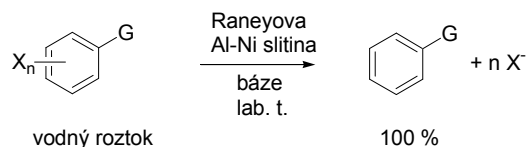


Schéma 1. Reduktivní dehalogenace aromatických halogenderivátů rozpuštěných ve vodě

širokou škálu aromatických halogenderivátů jako jsou halogenované fenoly, halogenované benzoové, fenoxycetové i benzensulfonové kyseliny a halogenované benzeny.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA ČR 203/07/P248 a výzkumného záměru MSM 0021627502.

LITERATURA

1. Tixier C., Sancelme M., Ait-Aissa S., Widehem P., Bonnemoy F., Cuer A., Truffaut N., Veschambre H.: *Chemosphere* 46, 519 (2002).
2. Vašek P., Bížová J., Janda V.: *Chem. Listy* 98, 985 (2004).
3. Ebert M., Kober R., Parbs A., Schafer D., Dahmke A.: *Environ. Sci. Technol.* 40, 2004 (2006).

12P-01
VOLTAMETRICKÉ STANOVENÍ KYSELINY
LISTOVÉ VE VITAMÍNOVÝCH PŘÍPRAVCÍCH
S VYUŽITÍM STŘÍBRNÉ PEVNÉ AMALGÁMOVÉ
ELEKTRODY

LENKA BANDŽUCHOVÁ*, **RENÁTA ŠELEŠOVSKÁ**
a JAROMÍRA CHÝLKOVÁ

Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta
 chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská
 573, 532 10 Pardubice
 lenka.bandzuchova@student.upce.cz

Kyselina listová (FA) a od ní odvozené foláty jsou velmi důležité esenciální látky, které patří do skupiny vitamínů B. Kyselina listová je v organismu enzymaticky přeměňována na její aktivní formu tetrahydrofolát, který se zúčastňuje přenosu jednonukleotidových zbytků pro syntézu bazí DNA a metylačních pochodů. Nedostatek FA v potravě se podílí na vzniku anémie a v případě nedostatku FA v těhotenství na defektech neurální trubice^{1,2}.

Stříbrná pevná amalgámová elektroda modifikovaná rtuťovým meniskem (m-AgSAE) je jednou z modifikací stříbrných amalgámových elektrod, které byly popsány v literatuře^{3,4}. Výhody stříbrných amalgámových elektrod spočívají především ve snadné elektrochemické regeneraci jejich povrchu, vysokém vodíkovém přepětí, vysoké citlivosti, nízkém nebo žádném obsahu kapalné rtuti a mechanické stabilitě a jednoduchosti⁵.

Všechna měření byla provedena v 3-elektrodevém zapojení (m-AgSAE pracovní elektroda) metodou DPV v prostředí acetátového pufru o pH 5. V tomto prostředí poskytuje FA pouze jeden charakteristický pík okolo potenciálu –400 mV. Pomocí standardního roztoku FA byly stanoveny statistické parametry: relativní směrodatná odchylka z 11-ti opakovaných měření ($RSD_M=1,18\%$), relativní směrodatná odchylka z 5-ti opakovaných stanovení ($RSD_S=2,7\%$) a limit detekce ($LOD=4,4\cdot 10^{-10}M$). Obsah FA byl stanoven ve třech druzích vitamínových přípravků metodou standardního přídatku. Hodnota stanoveného obsahu FA se ve všech případech lišila max. o 5 % od hodnoty deklarované výrobcem. Lze říci, že m-AgSAE je vhodným nástrojem ke stanovení obsahu FA ve vitamínových přípravcích.

Tato práce vznikla za podpory výzkumného záměru MSM 0021627502 a výzkumného centra LC 06035.

LITERATURA

- Murray R. K., Granner D. K., Mayes P. A., Rodwell V. W, v knize: *Harperova Biochemie*, kap. 52, s. 615. Nakladatelství H+H, Jihlava 2002.
- Czeizel A. E.: *J. Pediatr. Gastroenter. Nutr.* 20, 4 (1995).
- Yosypchuk B., Novotný L.: *Chem. Listy* 94, 1118 (2000).
- Mikkelsen O., Schroder K. H.: *Electroanalysis* 15, 679 (2003).
- Yosypchuk B., Novotný L.: *Electroanalysis* 14, 1733 (2002).

12P-02
BIOSORPCIA Fe Z HETEROCYKlickÝCH Fe(III)
KOMPLEXOV S NIKOTÍNAMIDOM ZELENÝMI
RIASAMI

AGÁTA FARGAŠOVÁ

Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave,
 Mlynská dolina, 842 15 Bratislava
 fargasova@fns.uniba.sk

Železo je biogénnym a jedným z najčastejších prvkov na zemskom povrchu. Vo vodnom prostredí sa objavuje v oxidačnom stupni II a III. Jeho biologicky dostupné formy sa dajú zaradiť do dvoch kategórií: hemové Fe, kedy je Fe chelátované porfyrínom a nehemové Fe, keď Fe tvorí množstvo chemicky veľmi heterogénnych zlúčenín a dochádza predovšetkým k väzbe Fe na bielkoviny. Heterocyklické dusíkaté zlúčeniny zohrávajú veľmi významnú úlohu v mnohých biologických systémoch a najmä deriváty pyridínu sú zložkou mnohých vitamínov a liečiv. Nikotínamid (nia) je prirodzene sa vyskytujúci alkaloidom, ktorý sa používa ako antipetardgické a antihyperlipidické činidlo.

V práci sa sledovala absorpčná a akumulácia schopnosť zelenej riasy *Desmodesmus quadricauda*. Hodnotila sa biosorpcia a bioakumulácia Fe z heterocyklických komplexov s nia (**I** - $FeCl_3(nia)_3$, **II** - $Fe(H_2O)_2(nia)_3(ClO_4)_3$, **III** - $Fe_2O(ac)_2(nia)_6[Cl_2 \cdot 3 H_2O]$, **IV** - $Fe(NO_3)_3(nia)_3 \cdot 3 H_2O$, **V** - $Fe(Cl_2ac)_3(nia)_3$ (ac = acetát, Cl_2ac = dichloroacetát) a porovnávaná sa robili vzhľadom k $FeCl_3 \cdot 6 H_2O$. Koncentrácia Fe v médiu s jednotlivými komplexmi kovov bola ($\mu g Fe/l$): **I** - 50,2; **II** - 55,8; **III** - 156,4; **IV** - 61,4, **V** - 39,1; **FeCl₃** - 72,6 a tento obsah zodpovedal 50% inhibičnej koncentrácii pre rast riasovej suspenzie. Štruktúra testovaných komplexov pripravených na FCHPT STU v Bratislave sa stanovila IR spektrami, ktoré potvrdili, že vo všetkých komplexoch je nia koordinovaný s Fe cez atóm N v jeho heterocyklickom kruhu. Kým **II** a **IV** majú v štruktúre koordinovanú vodu, **I** a **V** sú bezvodé. Atómy Cl v **I** sú koordinované s atómom Fe a dichloroacetátové skupiny v **V** a nitrátové skupiny v **IV** sú väzbou koordinované na Fe atóm cez atóm kyslíka. Predpokladáme, že **III** sa skladá z chloridových aniónov a komplexného katiónu $[Fe_2O(ac)_2(nia)_6]^{2+}$, v ktorom sú dva atómy Fe premostené dvomi acetátmi a jednou oxo skupinou.

Biosorpcia a bioakumulácia Fe na povrch a do buniek rias bola najnižšia z komplexu **I** (2,45 a 1,55 $\mu g Fe/mg DW$), pri ktorom biokoncentračný faktor (BCF) dosahoval hodnotu 3,09. V najväčšom množstve sa v bunkách rias akumulovalo Fe z komplexu **III** (10,78 $\mu g Fe/mg DW$) a biokoncentračný faktor dosahoval hodnotu 6,89. Absorpcia a penetrácia Fe z komplexu **IV** bola 2 a 2,6 krát vyššia ako pri komplexe **I** a presiahla absorpciu a akumuláciu Fe z komplexov **II** a **V**. Hodnota biokoncentračného faktora pre komplex **IV** bola 6,6. Najvyšší biokoncentračný faktor, ktorý vyjadroval pomer obsahu Fe v kultivačnom médiu k jeho obsahu nakumulovanému v bunkách rias, sa stanovil pri Fe(III) komplexe **V** (BCF = 8,4) a najnižší pre porovnávacej zlúčenine **FeCl₃**, kde dosahoval len hodnotu 0,76.

12P-03
ZNIŽOVANIE OBSAHU ORGANICKÝCH
POLUTANTOV MODIFIKOVANÝMI ZEOLITICKÝMI
SORBENTAMI

LUBICA FORTUNOVÁ^a, MÁRIA REHÁKOVÁ^a
a STANISLAVA NAGYOVÁ^b

^a Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, 041 54 Košice, ^b Katedra fyziky, Elektrotechnická fakulta, Technická Univerzita, 042 00 Košice
 lubica.fortunova@upjs.sk

Zeoadsorbenty na báze med'natých foriem syntetického zeolitu ZSM5 a prírodného zeolitu typu klinoptilolitu boli študované z hľadiska ich využitia pri odstraňovaní derivátov pyridínu s hlbším zameraním na 2-chlórpyridín a 2-etylpyridín z plynnej a kvapalnej fázy. Pyridín a jeho deriváty sa dostávajú do prostredia odpadovými vodami a emisiami z rôznych priemyselných odvetví ako farmaceutický, priemysel farbív, výroba pesticídov, herbicídov, spracovanie ropy a uhlia¹. Majú nepriaznivý vplyv na ľudský organizmus, pretože sú toxické, karcinogénne, a teratogénne. Súčasnú štúdiu zeolitických materiálov je príspevkom pre výskum a vývoj materiálov využiteľných v environmentálnej oblasti pri znižovaní obsahu toxických látok. Naväzuje na naše predchádzajúce štúdiu organomodifikovaných med'natých foriem ZSM5².

Pripravené modifikované zeolitické produkty boli charakterizované CHN analýzami, metódami termickej analýzy (TG, DTA, DTG), RTG, XPS, IČ, NMR spektroskopiou a metódami stanovením merného povrchu a objemov pórov nízkotepeľnou adsorpciou dusíka cieľené k posudzovaniu sorpcie a desorpcie. Výsledky analýz potvrdili sorpciu derivátov syntetickými i prírodnými zeolitickými sorbentami. Výsledky termickej analýzy a IČ spektroskopie výrazne prispeli ku charakterizácii procesu sorpcie derivátov pyridínu vrátane posúdenia charakteru ich interakcie so zeolitickou štruktúrou. Na IČ spektrách boli pásy valenčných vibrácií pyridínového kruhu v intervale 1400–1650 cm⁻¹ používané na charakterizáciu koncentrácie Brönstedových a Lewisových kyslých centier³. Metódami termickej analýzy, XPS a CHN analýzy sa určil obsah derivátov pyridínu sorbovaných zeosorbentami. Obsah sorbovaného množstva derivátov pyridínu bol rôzny a závisel jednak od experimentálnych podmienok prípravy modifikovanej formy syntetického aj prírodného zeosorbentu, ako aj od podmienok počas sorpčného procesu. Výsledky termickej analýzy a IČ spektroskopie boli v dobrej zhode s výsledkami ostatných použitých metód.

Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA č. 1/0107/08.

LITERATÚRA

1. Fetzner S.: Appl. Microbiol. Biotechnol. 49, 237 (1998).
2. Čuvanová S., Reháková M., Finocchiaro P., Pollicino A., Bastl Z., Nagyová S., Fajnor V. Š.: Termochim. Acta 452, 13 (2007).
3. Jin F., Li Y.: Cat. Today 145, 101 (2009).

12P-04
VYUŽITÍ MAGNETICKY MODIFIKOVANÝCH
AKTIVNÍCH UHLÍ K EXTRAKCI ORGANICKÝCH
LÁTEK Z VODY

KAREL KOMÁREK^a, PETRA KNITTLVÁ^a,
MICHAELA ELCNEROVÁ^a a MIRKA ŠAFAŘÍKOVÁ^b

^a Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Katedra analytické chemie, Studentská 573, 532 10 Pardubice, ^b Oddělení biomagnetických technik, Institut systémové biologie a ekologie AV ČR, Na Sádkách 7, 370 05 České Budějovice
 petraknittlova@centrum.cz

Mezi nově se rozvíjející alternativní jednoduché, rychlé a nenákladné metody extrakce organických látek z vody rozhodně patří extrakce magnetickou tuhou fází (Magnetic Solid Phase Extraction)¹. Je založena na stejném principu jako statická SPE, ale s tím rozdílem, že je používán magneticky modifikovaný adsorbent, který se se sorbovanými organickými látkami oddělí od vyextrahované vody ne filtrací, ale pomocí magnetického pole. Dobře se hodí pro extrakci vzorků vod z havárií a technologických procesů, které jsou kontaminovány i tuhými jemnými částicemi.

K extrakci je možné použít komerčně dostupné sorbenty a nebo si je laboratorně připravit magnetickou modifikací např. aktivních uhlí, která se používají v laboratořích a nebo v průmyslové praxi^{2,3}. Tyto sorbenty byly použity k extrakci tenzidů²⁻⁴, alkylfenolů^{5,6}, halogenovaných aromatických sloučenin⁷ a směsné motorové nafty⁸.

LITERATURA

1. Šafaříková M., Šafařík I.: J. Magn. Magn. Mater. 194, 108 (1999).
2. Komárek K., Šafaříková M., Ptáčková L., Hubka T., Šafařík I.: Zborník prednášok XXXVII. seminára o tenzidoch a detergentech, Bojnice, 2004, str. 65.
3. Šafaříková M., Kibříková I., Ptáčková L., Hubka T., Komárek K., Šafařík I.: J. Magn. Magn. Mater. 293, 377 (2005).
4. Šafaříková M., Luňáčková P., Komárek K., Hubka T., Šafařík I.: J. Magn. Mater. 311, 405 (2007).
5. Komárek K., Šafaříková M., Hubka T., Šafařík I., Kandelová M., Kujalová H.: Chromatographia 69, 133 (2009).
6. Komárek K., Hubka T., Šafaříková M., Elcnerová M., Šafařík I., Kujalová H.: Sci. Pap. Univ. Pardubice, A 14, 21 (2008).
7. Knittlová P., Komárek K., Elcnerová M., Šafaříková M., Šafařík I.: Sborník přednášek Odpadové fórum 2009, Milovy, 2009, str. 3583.
8. Elcnerová M., Komárek K., Knittlová P.: Sborník 3. konference HYDROANALYTIKA 2009, Hradec Králové, 2009, str. 215.

12P-05

HODNOTENIE RECIPROČNÉHO ÚČINKU Se(IV), Se(VI) A As(III) NA RAST RIASY *Desmodesmus quadricauda***ZUZANA KRAMAROVÁ a AGÁTA FARGAŠOVÁ***Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava
kramarovaz@fns.uniba.sk*

Účinok chemických látok, vrátane (polo)kovov, sa vo vodnom prostredí zvyčajne prejavuje ako účinok ich vzájomných kombinácií, ktorý sa často výrazne odlišuje od účinkov jednotlivých látok. Hodnoteniu interakčných vzťahov sa v súčasnosti venuje čoraz väčšia pozornosť, nakoľko realnejšie odrážajú procesy prebiehajúce v prostredí. Ich interpretácia je zvyčajne značne komplikovaná, lebo vzťahy medzi (polo)kovmi v zmesiach sú výrazne ovplyvňované nielen faktormi prostredia ale aj pomerom koncentrácií v akých do interakcií vstupujú.

Cieľom práce bolo hodnotenie interakčných vzťahov medzi Se(IV) a Se(VI) (Na_2SeO_4 a $\text{Na}_2\text{SeO}_3 \cdot x \text{H}_2\text{O}$) a As(III) (NaAsO_2) prostredníctvom testov na sladkovodnej riasy *Desmodesmus quadricauda*. Interakcie sa vyhodnocovali matematickým modelom podľa Wanga a spol.¹ a hodnoteným parametrom bol rast riasovej suspenzie. Riasy sa kultivovali v médiu (*Bristol's medium*) so zníženým obsahom fosforečnanov a síranov po dobu 14 dní. Testované zlúčeniny sa pridávali do kultivačného média v koncentráciách ekvivalentných EC_{30} , EC_{50} a EC_{70} hodnotám pre inhibíciu rastu riasovej suspenzie (tab. I).

Tabuľka I

EC_x hodnoty a ich 95 % CI pre inhibíciu rastu riasy *D. quadricauda* [mg prvku/l]

	EC_x (95 % CI) [mg prvku/l]		
	EC_{30}	EC_{50}	EC_{70}
Se(IV)	5,80 (4,61–7,22)	12,24 (9,77–15,30)	25,84 (20,64–32,28)
Se(VI)	0,28 (0,25–0,34)	0,44 (0,38–0,50)	0,69 (0,59–0,80)
As(III)	31,39 (30,23–32,54)	35,43 (34,16–36,76)	40,06 (38,61–41,56)

Výsledky získané pri hodnotení interakčných vzťahov potvrdili ako pre kombináciu As(III)-Se(IV) tak aj pre kombináciu As(III)-Se(VI) recipročný synergický účinok.

Práca bola finančne podporená grantom KEGA 3/7234/09.

LITERATÚRA

1. Wang J., Zhang M., Xu J., Wang Y.: *Wat. Res.* 29, 209 (1995).

12P-06

MOŽNÉ INDIKATIVNÍ ZMĚNY DRUHÉ REDUKČNÍ VLNY (PÍKU) KYSLÍKU ZA PŘÍDAVKU ZVOLENÉ SLOŽKY ROZTOKU**LADISLAV NOVOTNÝ^a a PETRA POLÁŠKOVÁ^b***^a Ústav environmentálního a chemického inženýrství, ^b Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice
nvt.l@seznam.cz*

Redukční vlna nebo píky kyslíku patří v polarografii/voltametrické mezi první analytické signály, které byly těmito metodami zaznamenány¹. Důvodem je stálá přítomnost rozpuštěného vzdušného kyslíku ve vodných roztocích za běžných podmínek. Je při tom známo, že zmíněná redukce probíhá ve dvou simultánních krocích s peroxidem vodíku jako meziproduktem, podle schématu $\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2$ (odpovídající signálu I) a $\text{H}_2\text{O}_2 \rightarrow \text{OH}^-$ (odpovídající signálu II). Výzkumy však ukázaly^{2,3}, že tyto elektrodové reakce neprobíhají ve skutečnosti tímto jednoduchým mechanismem, ale jejich průběh je složitější. Mimo jiné dospěly k předpokladu, že jejich součástí jsou meziprodukty radikálového charakteru (např. HO_2^{\cdot}) obsahující kyslíkové atomy. Chování signálu I bývá přitom poněkud odlišné od chování signálu II. Z dřívějších pozorování na kapající rtuťové kape vyplývalo, že se někdy průběh polarografických křivek proud I vs. potenciál E s přidávkou některých látek nemění, jindy dochází k jeho snížení. Masové rozšíření obnovovaných visících rtuťových kapkových elektrod HMDE^{3,4} zpřístupnilo velké množství příslušných voltametrických měření. Bylo pozorováno, že za těchto podmínek se chování signálu I výrazně liší od chování signálu II. Na rozdíl od signálu I závisely I-E křivky redukce H_2O_2 na přidávkách řady látek. Některé vyvolávaly i výrazné zvýšení signálu II, které mohlo být způsobeno deaktivací radikálových meziproduktů jejich reakcemi s přidávanými složkami.

V průběhu uplynulých 15 let došlo k dalšímu rozšíření sortimentu pracovních voltametrických elektrod³⁻⁶ (např. na bázi amalgam, kapilárních elektrod, elektrod s plastovým vyměnitelným ústím) a k prohloubení poznatku o přítomných elektrochemických dějích. Ukázalo se proto užitečné získat další poznatky o možnosti využití druhého redukčního signálu kyslíku v kombinaci se zmíněnými vybranými typy senzorů.

Tato práce vznikla za podpory grantů MŠMT ČR LC06035 a VZ 0021627502.

LITERATURA

1. Heyrovský J., Kůta J.: *Základy polarografie*. NČSAV, Praha 1962.
2. Novotný L., Navrátil T.: *Chem. Listy* 90, 121 (1996).
3. Novotný L.: *Dr.Sc. dizertační práce*. AV ČR, Praha 2002.
4. Novotný L.: *Chem. Listy* 102, 701 (2008).
5. Yosypchuk B., Novotný L.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 32, 141 (2002).
6. Novotný L.: PUV 1997-7103; 2007-19501; PV 2001-1.

12P-07**URČENÍ OPTIMÁLNÍ PROVOZNÍ TEPLoty
SENZOROVÉ VRSTVY****MARTIN STUHLÍK**

*Ústav environmentálního a chemického inženýrství,
Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Stu-
dentská 573, 532 10 Pardubice
martin.stuchlik@student.upce.cz*

Senzorové vrstvy, připravené na bázi anorganických oxidů, jsou v mnoha případech citlivé na rozsáhlou řadu plynů s oxidačními nebo redukčními vlastnostmi. Odezvy vrstev jsou závislé nejen na druhu a koncentraci plynu interagujícího s vrstvou, ale také na provozní teplotě vrstvy¹. Znamená to tedy, že volbou vhodné pracovní teploty senzorové vrstvy je možné zvýšit selektivitu pro konkrétní vrstvu a plyn.

Nejběžněji se ke sledování interakce vrstvy s plynem využívá tzv. interdigitálních elektrod, konstruovaných např. platinou, zlatem či uhlíkem na keramický podklad. Senzorové vrstvy jsou nanášeny na elektrodách a mezi elektrodami jsou sledovány změny elektrických vlastností ovlivněné interakcí vrstvy s plynem.

Postup pro určení optimální pracovní teploty senzorové vrstvy, byl vypracován na vrstvě tvořené směsí oxidů SnO₂+In₂O₃. Uvedená vrstva byla vystavena prostředí syntetického vzduchu a následně byla sledována změna elektrických vlastností vrstvy v závislosti na změně teploty keramického podkladu. Totéž bylo provedeno pro plynný amoniak ve směsi se syntetickým vzduchem. Při porovnání obou získaných závislostí bylo zjištěno, že v průběhu zvyšování teploty dochází na obou křivkách ke vzniku maximální odezvy vrstvy, která s největší pravděpodobností odpovídala hodnotě provozní teplotě vrstvy. Optimální teplota určená výše uvedeným postupem odpovídala teplotě zjištěné obvykle používaným postupem, uvedeným v práci Jaswinderu Kaura². Výhodou našeho postupu je přesnější určení optimální teploty spojené s časovou úsporou a zjištění teploty desorpce v prostředí daného plynu.

LITERATURA

1. Ahlers S., Müller G., Doll T.: Sens. Actuators, B 107, 587 (2005)
2. Kaur J., Roy S. C., Bhatnagar M. C.: Sens. Actuators, B 123, 1090 (2007).

12P-08**JSOU OBAVY Z MIGRACE RADIONUKLIDŮ
Z HLUBINNÝCH ÚLOŽIŠŤ OPRÁVNĚNÉ?****JAN KRMELA a IRENA ŠPENDLÍKOVÁ**

*Katedra jaderné chemie, ČVUT v Praze – FJFI, Břehová 7,
115 19 Praha 1
SpendlikovaIrena@gmail.com*

Jaderné elektrárny jsou nejenom zdrojem elektrické energie, ale také vysoce aktivních odpadů, které představují potenciální nebezpečí jak pro lidstvo, tak pro životní prostře-

dí. Jedním z neaktuálnějších veřejných témat je díky tomu problematika nakládání s vyhořelým jaderným palivem (VJP). Kromě možnosti přepracování VJP je zvažováno i jeho uložení do hlubinných úložišť.

Objev a podrobný výzkum přírodních jaderných reaktorů nalezených v oblasti Oklo v Gabonu (západní rovníková Afrika) by mohl odpovědět na některé ožehavé otázky týkající se možného vlivu ukládání VJP na životní prostředí. Jelikož v oblasti Oklo probíhaly samovolné řetězové reakce přibližně před 2 miliardami let, jsou zbytky těchto reaktorových zón neocenitelným zdrojem informací o dlouhodobé míře migrace jednotlivých štěpných a aktivačních produktů v zemské kůře.

Izotopové studie vzorků odebraných z reaktorových zón ukazují, že většina radionuklidů (Pu, U, prvky vzácných zemin, Ru) byla zadržena v samotné zóně po 2 miliardy let a malá množství zbylých radionuklidů, které chyběly v zónách, bylo nalezeno v okolních horninách velmi blízko samotného reaktoru¹. Přírodní štěpné reaktory spolu se svým okolím v oblasti Oklo představují koncept tzv. mnohonásobné bariéry pro uložení radioaktivních odpadů, podle kterého jsou moderní úložiště navrhována.

Shromážděné poznatky ukazují, že hlubinná úložiště nejsou problémem inženýrským, ale spíše politickým, a koncepty hlubinných úložišť nejsou přívětivě přijímány zejména kvůli nedostatečné informovanosti veřejnosti.

LITERATURA

1. Hagemann R., Roth E.: Radiochim. Act. 25, 241 (1978).

SEZNAM PLENÁRNÍCH PŘEDNÁŠEK

PL-01	<i>H. Cölfen</i>	Polymers and crystals – a happy marriage
PL-02	<i>M. Graetzel</i>	Mesoscopic electrodes for generation and storage of electric power from sunlight
PL-03	<i>J. Lucas</i>	Glasses for seeing beyond the visible
PL-04	<i>J. Michl</i>	Molecular rotors and bubbles
PL-05	<i>H. W. Roesky</i>	Interstellar molecules – models for new chemistry

SEZNAM PŘÍSPĚVKŮ PODLE SEKČÍ

Sekce 1 - Anorganická chemie

Zvané přednášky

11L-01	<i>R. Boča</i>	Magnets based upon coordination compounds
11L-02	<i>J. Plešek, V. Šícha, V. Král, P. Cígler, M. Kožíšek, J. Pokorná, P. Řezáčová, J. Konvalinka, H.-G. Kräusslich, B. Grüner</i>	Anorganické inhibitory HIV-proteasy
11L-03	<i>P. Hermann</i>	Přehlížené ionty kovů: gallité a skandité komplexy pro biomedicínské aplikace

Sekce 1 - Anorganická chemie

Přednášky

11L-01	<i>T. Dědourková, J. Vinklárek, J. Honzíček</i>	Příprava a charakterizace vanadocenových komplexů s aminokyselinami obsahujícími sekundární aminoskupinu
11L-02	<i>T. Michalowski</i>	Various approaches to synthesis of fluorosulphuric phases containing mixed-valent silver +1/+2
11L-03	<i>J. Moncol, M. Korabik, D. Valigura</i>	Supramolekulové syntóny ako prostriedok zvyšovania dimenzionality karboxylátomeďnatých komplexov
11L-04	<i>R. Novotná, I. Popa, P. Babula, Z. Trávníček</i>	Kinetin a jeho deriváty jako ligandy v komplexech zinku a mědi
11L-05	<i>J. Pavlik, A. Bousseksou, R. Boča, I. Nemeč, R. Herchel</i>	Spinové prechody v kooperatívnych dvojjadrových systémoch s výmennou interakciou
11L-06	<i>H. Vaňkátová, T. Chlupatý, R. Olejník, Z. Padělková, A. Růžička</i>	Srovnání chemie různých tetrylenů
11L-07	<i>T. Řezníček, R. Jambor</i>	Příprava a reaktivita hyper-koordinovaných fosfiniminů
11L-08	<i>P. Segla, V. Kuchtanin, P. Polakovičová, D. Mikloš, J. Moncol, J. Švorec</i>	Synthesis, spectral and magnetic properties and crystal structures of carboxylatecopper(II) complexes with <i>N</i> -heterocyclic ligands
11L-09	<i>T. Strašák, J. Čermák</i>	Karbosilanové dendrimery funkcionalizované cyklopentadienylovými komplexy titanu
11L-10	<i>J. Švorec, D. Dvoranová, M. Mazúr, V. Brezová, M. Melník, M. Valko</i>	Detailed EPR study and SOD-like activity of copper (II) complexes with selected NSAID ligands
11L-11	<i>P. Štarha, L. Dvořák, Z. Dvořák, Z. Trávníček</i>	<i>In vitro</i> cytotoxicita Pt(II) a Pd(II) oxalato a cyklobutan-1,1-dikarboxylato komplexů s <i>N</i> -donorovými ligandy na bázi <i>N</i> 6-benzy1-9-isopropyladeninu

Sekce 1 - Anorganická chemie

Postery

- 1P-01 *M. Bakardžiev, J. Holub, B. Štíbr, I. Císařová* Příprava C-substituovaných *t*-BuNH-8,9-R,R'-nido-7,8,9-C₃B₈H₉ (R,R' = H,H; Me,H; Me,Me; Ph,H a Ph,Ph) trikarbolidových sloučenin a jejich tautomerní přeměny. Efekt substituentů na tautomerní rovnováhu mezi neutrální a zwitteriontovou formou
- 1P-02 *V. Š. Fajnor, P. Billik, M. Drábik, J. Hrachová* Objasnenie genézy štruktúry montmorillonitu hydrotermálnou syntézou
- 1P-03 *V. Š. Fajnor* Hydrotermálna syntéza montmorillonitu zo systému oxidov kremičitého, hlinitého, horečnatého a titaničitého
- 1P-04 *V. Langer, P. Mach, D. Gyepesová, L. Andrezálová, M. Kohútová* Some structural aspects of mononuclear and binuclear copper(II) ionic compound containing Schiff base
- 1P-05 *L. Habala, A. Rompel* Komplexy prírodných polyfenolov
- 1P-06 *D. Halamová, V. Zeleňák* Využitie mezopórovitej siliky SBA-16 ako matrice pre kontrolované uvoľňovanie indometacínu
- 1P-07 *J. Haníková, J. Kuchár, J. Černák* Vodíkové väzby v koordinačných zlúčeninách Cu(II) s fluorido aniónmi a *N*-metylderivátmi etán-1,2-diamínu
- 1P-08 *J. Holub, B. Štíbr, A. Růžička* Dvě nové struktury mateřských trikarboranových aniontů
- 1P-09 *I. Kočanová, J. Černák, J. Kuchár* Cu-Ni heterobimetalické koordinačné zlúčeniny na báze kyanido ligandov
- 1P-10 *J. Maroszová, Z. Vasková, J. Moncol, Z. Padělková, D. Valigura* Supramolekulové štruktúry nitrobenzoátomeďnatých komplexov s 2,6-pyridindimetanolom
- 1P-11 *J. Medvecká, M. Stoličková, J. Moncol, D. Valigura* Chlórbenzoátomeďnaté komplexy s dietylnikotínamidom
- 1P-12 *J. Miklovič, I. Mitasová, D. Mikloš, V. Kuchtanin, P. Segľa* Synthesis, crystal structure and spectral properties of copper(II) 5-nitrofurán-2-carboxylates
- 1P-13 *A. Růžička, Z. Padělková* Aktivace Si-OH skupin pomocí stannylenu
- 1P-14 *Z. Repická, J. Moncol, M. Korabik, M. Puchoňová, D. Valigura* Metyl a metoxy-salicylátomeďnaté komplexy s antiferomagnetickou interakciou sprostredkovanou vodíkovými mostíkmi
- 1P-15 *T. Svoboda, L. Dostál* Organoantimonité a organobismutité fosforečnany stabilizované NCN chelatujícím ligandem
- 1P-16 *T. Šilha, Z. Šindelář, Z. Trávníček* Syntéza a studium polyjaderných kyanidokomplexů vybraných přechodných kovů
- 1P-17 *M. Vavra, I. Potočňák, E. Čížmár* Polymorfne modifikácie [Cu(*men*)₂][Pt(CN)₄] (*men* = *N*-metyl-etán-1,2-diamín)
- 1P-18 *P. Vranec, I. Potočňák, M. Sabol* Štvorcovoplanárne komplexy paládia s biologicky aktívnymi ligandami

Sekce 2 - Organická chemie

Zvané přednášky

- 2IL-01 *D. Berkeš, A. Ďuriš, D. Moravčíková, L. Slížik* Stereoselektivna Mannichova reakcia v syntéze derivátov α -aminokyselín
- 2IL-02 *F. Bureš, J. Kulhánek, O. Pytela* Organické chromofory s vnitřním přenosem náboje: design, syntéza, vlastnosti
- 2IL-03 *M. Kotora* Enantioselektivní allylace aldehydů a její aplikace v organické syntéze
- 2IL-04 *M. Sedláč* Směřované konjugáty amfotericinu B

Sekce 2 - Organická chemie

Přednášky

2L-01	<i>M. Bella, V. Milata</i>	Syntéza <i>N</i> -etylovaných selenadiazolo-chinolónov
2L-02	<i>L. Červenková Šťastná</i>	„Nízko“ a „vysoce“ fluorované silylcyklopentadieny
2L-03	<i>J. Imrich, L. Janovec, J. Ungvarský, M. Kožurková, D. Sabolová, H. Paulíková</i>	Syntéza, cytotoxicita a DNA interkalácia 3,6-bis(substituovaných amino) akridínov – nových analogov proflavínu
2L-04	<i>B. Kratochvíl, K. Bulíaková, J. Rohlíček</i>	Krystalové formy dermatologika alaptidu
2L-05	<i>Š. Marchalín, J. Žúžiová, P. Šafář</i>	Stereoselektivná syntéza nových alkyldolizidindiolov
2L-06	<i>V. Milata</i>	Activated enoethers – their preparation, properties and utilization of bioactive compounds
2L-07	<i>M. Putala, A. Kicková, P. Kasák</i>	Chiroptické molekulové prepínače na báze binaftalénu
2L-08	<i>O. Pytela</i>	Program MassChecker jako nástroj ověření struktury z hmotnostních spekter
2L-09	<i>M. Huřka, Š. Toma, R. Šebesta</i>	Studies of organocatalytic Michael addition towards tamiflu derivatives
2L-10	<i>J. Váňa, J. Hanusek, M. Sedlák</i>	Výrazné ovlivnění průběhu transformační reakce <i>S</i> -ftalid-3-yl isothiuroniových solí methyl substitucí
2L-11	<i>K. Waissner, E. Petrlíková</i>	Nová heterocyklická antituberkulotika

Sekce 2 - Organická chemie

Postery

2P-01	<i>M. Berková, R. Buffa, M. Pravda, V. Velebný</i>	Příprava derivátů kyseliny hyaluronové za užití rhodaminu jako ligandu
2P-02	<i>J. Cszmadiová, M. Mečiarová</i>	Ferocénové kombinované fosfánové ligandy v asymetrické katalýze
2P-03	<i>Z. Eliáš, S. Luňák Jr., A. Lyčka, J. Vyňuchal, K. Vyňuchalová, R. Hrdina</i>	Pyrrrolinonová barviva
2P-04	<i>A. Halama, P. Lustig, J. Jirman, J. Rymeš</i>	Netradiční redukce dvojnás vazby mezi uhlíky vedoucí k léčivům hyperglykémie
2P-05	<i>M. Cigl, F. Hampl, J. Svoboda, N. Podoliak, M. Glogarová</i>	Nové kapalně krystalové s laterální substitucí jádra
2P-06	<i>P. Hrdlovič, M. Danko, J. Kulhánek, F. Bureš</i>	Spectral properties of push – pull fluorophores based on imidazol-4,5-dicarbonitrile; comparison in solution and in polymer matrices
2P-07	<i>H. Kotoučová, R. Cibulka, O. Solníčka, R. Jurok</i>	Syntéza a studium vlastností ortho-substituovaných 3-fenylisoalloxazinů
2P-08	<i>A. Krupková, J. Čermák, Z. Walterová, J. Horský</i>	Charakterizace defektů ve struktuře polyallylkarbosilanových dendrimerů a odvozených polyolů
2P-09	<i>L. Červenková Šťastná, M. Kurfürst, T. Strašák, J. Sýkora</i>	Syntéza a fluorofilní chování fluorovaných dichlorotitanocenů
2P-10	<i>A. Latika, J. Reháček, H. Brath, J. Durmis</i>	Využití Michaelových adicí při přípravě prekurzoru oseltamviru a jeho analogů
2P-11	<i>T. Ehlová, V. Leierová, V. Velebný</i>	Kinetika degradace hyaluronanu při kyselé a zásadité hydrolyze
2P-12	<i>A. Marek, J. Kulhánek, Š. Štěpánková</i>	Syntéza a biologické vlastnosti nových derivátů cyklofanů
2P-13	<i>M. Medvecký, M. Sabolová, L. Fišera</i>	Preparation and use of polyhydroxylated bicyclic isoxazolidines

- 2P-14 *M. Mešková, M. Putala* Syntéza a využitie objemných fosfánových ligandov na báze binaftylu
- 2P-15 *E. Petrliková, K. Waisser, P. Jílek, V. Buchta, I. Dufková, J. Kaustová* *N*-Benzylsalicylthioamidy: sloučeniny s antifungálním a antibakteriálním účinkem
- 2P-16 *O. Ponomarov, J. Hanusek* Kinetika sulfurizace trifenyl-fosfitu substituovanými 5-fenoxy-1,2,4-dithiazol-3-ony
- 2P-17 *J. Storch, J. Karban, J. Sýkora* Využití tandemové cykloisomerace k syntéze helikálních molekul
- 2P-18 *M. Svobodová, P. Šimůnek, V. Macháček* β -Enaminoestery a jejich reakce s 4-substituovanými benzendiazonium-tetrafenylboráty
- 2P-19 *E. Tóthová, P. Šafář, J. Žůžiová, E. Švorc, Š. Marchalín* Highly diastereoselective approach to phenylindolizidinols based on a benzo[*b*]thiophene reductive desulfurization
- 2P-20 *J. Šebestík, Z. Zawada, M. Šafařík, J. Hlaváček* Konvergentní syntéza lidského prionového peptidu 106-126 s využitím chemické ligace a desulfurace-deselenace
- 2P-21 *I. Šnajdr, Z. Janoušek, J. Jindřich, M. Kotora* Cross-metathese allyl-karboranů s allyl- β -cyklodextriny
- 2P-22 *P. Šafář, J. Žůžiová, Š. Marchalín* An efficient synthesis of novel benzothieno analogous of tylophorine

Sekce 3 - Analytická chemie

Zvané přednášky

- 3IL-01 *M. Volný, K. Lemr, M. Hajdúch, V. Vidová, M. Šulc, M. Kuzma, O. Benada, V. Havlíček* Současné trendy hmotnostní spektrometrie
- 3IL-02 *P. Jandera* Vícerozměrná kapalinová chromatografie

Sekce 3 - Analytická chemie

Přednášky

- 3L-01 *J. Barek, A. Daňhel, I. Jiránek, O. Yosypchuk, J. Fischer, V. Vyskočil, K. Pecková* Pokroky v environmentální elektroanalýze organických polutantů
- 3L-02 *H. Dejmková, J. Zima, J. Barek* Voltametric and amperometric determination of selected aminonitrophenols
- 3L-03 *M. Fojta* Využití katalytického vylučování vodíku na rtuťových a amalgámových elektrodách při analýze biopolymerů
- 3L-04 *M. Holčapek, M. Lisa, E. Čáňová, K. Netušilová* Lipidomická analýza s využitím hmotnostní spektrometrie
- 3L-05 *M. Koperska, J. Łojewska* Preserving dyes in art materials. Is anoxia the solution?
- 3L-06 *L. Krčmová, D. Solichová, L. Urbánek, M. Kašparová, L. Sobotka, P. Solich* Modern HPLC technologies for biomedical analysis
- 3L-07 *T. Liptaj* Moderné metody NMR v analytickej chémii
- 3L-08 *M. Nádherná, F. Opekar, J. Reiter* Solid-state elektrochemický sensor pro NO₂ s elektrolytem s iontovou kapalinou
- 3L-09 *Z. Navrátilová, B. Taraba, R. Maršálek* Uhlíková pastová elektroda modifikovaná uhlím
- 3L-10 *P. Smejkal, S. Abele, O. Yavorska, T. Piasecki, F. Foret, M. Macka* Comparison of enzyme reactors based on three different columns
- 3L-11 *J. Sýkora* LC-NMR – aplikace
- 3L-12 *M. Volný, V. Vidová, P. Novák, M. Strohal, J. Pól, V. Havlíček* Matrix free laser desorption-ionization mass spectrometry imaging coupled to FT-ICR

- 3L-13 *V. Vyskočil, J. Labuda, J. Barek* Voltametrické stanovení genotoxických nitro- a oxoderivátů fluorenu
 3L-14 *J. Zima* Uhlíkové pasty v analýze biologicky aktivních organických sloučenin

Sekce 3 - Analytická chemie

Postery

- 3P-01 *L. Barsová* Quantitative determination of platinum group elements in ombrotrophic peat profile (Brdy highland, Czech Republic)
 3P-02 *J. Rollová* Fyzikálně-chemické studium zátěže cementárny Králův Dvůr u Berouna na půdy v jejím okolí
 3P-03 *D. Deýlová, J. Barek, B. Chládková* Voltametrické stanovení 5-nitrobenzimidazolu na špičkové amalgamové pastové elektrodě
 3P-04 *P. Distler, J. John* Využití BTBP sloučenin pro separaci minoritních aktinoidů při recyklaci vyhořelého jaderného paliva
 3P-05 *B. Dvořák, K. Ventura* Možnosti stanovení alkylnitrátů v motorové naftě
 3P-06 *Z. Ferenčíková, M. Meloun* Protonační rovnováhy methotrexátu
 3P-07 *S. Ružičková, V. Boková, M. Revťáková, B. Fioová* Moderná spektrometrická metoda pri analýze sedimentov
 3P-08 *J. Fischer, J. Ječmínková, J. Barek* Voltametrické stanovení chloramfenikolu na bórem dopované diamantové filmové elektrodě
 3P-09 *O. Fryš, K. Ventura* Použití nových netoxických látek jako stabilizátorů do bezdýmných prachů
 3P-10 *M. Galamboš, O. Roszkopfová, P. Rajec* Metodika stanovenia rádionuklidov
 3P-11 *I. Jiranek, J. Barek, F. M. Matysík* Voltammetric determination of 5-amino-quinoline using carbon screen printed electrode
 3P-12 *F. Kačík, I. Čabalová, M. Laurová, J. Sivák* ATR-FTIR a HPLC charakterizácia historických papierových dokumentov
 3P-13 *F. Kaftan, J. Cvačka, M. Volný* Hmotnostní spektrometrie s desorpční elektrosprejovou ionizací: konstrukce iontového zdroje a jeho optimalizace
 3P-14 *T. Kroupa, B. Jankovicová, L. Hernichova, Z. Bilkova* Comparison of methods for specific isolation of phosphopeptides by immobilized metal ion affinity chromatography (IMAC)
 3P-15 *M. Lešková, J. Petrovaj, Y. Bazel, H. Sklenářová, P. Solich* Comparison of classical and sequential injection spectrophotometric method for determination of molybdenum using styryl dye 2-[(E)-2-(4-dipropylamino-phenyl)-1-ethenyl]-1, 3, 3-trimethyl-3H-indolium chloride
 3P-16 *J. Petrovaj, T. Gondová, P. Kutschy, Z. Čurillová, A. Salayová, M. Lešková* Štúdium stereoselektívnej separácie nových analógov indolových fytoalexínov
 3P-17 *J. Micova, V. Patoprsty, L. Skultety, S. Vlckova* ESI MASS spectrometry study of some diglycosylamines
 3P-18 *J. Musilová, J. Barek, K. Pecková* Voltametrické a amperometrické stanovení nitrofenolů pomocí bórem dopované diamantové filmové elektrody
 3P-19 *L. Němcová, J. Zima, J. Barek* Voltametrické a amperometrické stanovení resveratrolu
 3P-20 *K. Netušilová, M. Lísa, M. Holčapek* Analýza mastných kyselin v lidské plazmě
 3P-21 *F. Novák, M. Šestauberová, F. Bůžek* ¹³C Isotopic discrimination in humic substances
 3P-22 *V. Novotný, J. Barek* Voltammetric determination of aclofenfen at a silver solid amalgam electrode and a carbon paste electrode
 3P-23 *H. Dejmková, L. Maixnerová, J. Zavázalová, J. Barek, K. Pecková* Ampérometrická detekce genotoxických aminoderivátů polycyklických aromatických uhlovodíků s využitím platinových a bórem dopovaných diamantových elektrod

3P-24	<i>V. Polan, K. Vytřas</i>	Tištěné uhlíkové elektrody modifikované alkohol dehydrogenasou a oxidem rhodičitým
3P-25	<i>J. Sochor, O. Zítka, Z. Gazdík, B. Krška, A. Horna, R. Kizek</i>	Využití CoulArray elektrochemického detektoru pro sledování antioxidační kapacity u meruněk
3P-26	<i>J. Sochor, O. Zítka, Z. Gazdík, B. Krška, A. Horna, R. Kizek</i>	Vyžití tandemové detekce HPLC-UV-VIS-ED pro stanovení fenolického profilu v plodech hybridů meruněk
3P-27	<i>K. Týčová, M. Sedlák, P. Jílek, K. Ventura</i>	Stanovení amfotericinu B pomocí HPLC, zjištění farmakokinetického profilu a účinnosti konjugátu amfotericinu B s polyethylenglykoly
3P-28	<i>H. Velínská, M. Lisa, M. Holčapek</i>	HPLC/MS analýza živočišných tuků

Sekce 3 - Analytická chemie

Cena Shimadzu

3S-01	<i>A. Daňhel</i>	Nové typy stříbrných amalgamových elektrod a jejich využití
3S-02	<i>M. Halašiová, R. Bodor, D. Kaniansky</i>	Automatizovaná analýza v spájení izotachoforéza-zónová elektroforéza v kapilárah
3S-03	<i>M. Horčíčiak, R. Chudoba, M. Masár, D. Kaniansky</i>	Elektroforetické stanovenie dusičnanov a dusitanov v mozgovomiechovom moku na čípe s vodivostnou detekciou
3S-04	<i>P. Jungová, O. Peš, T. Vaculovič, J. Navrátilová, J. Šmarda, V. Kanický, J. Preisler</i>	Analýza biologických vzorků pomocí laserové desorpce za účasti substrátu ve spojení s hmotnostní spektrometrií s indukčně vázaným plazmatem
3S-05	<i>A. Pankráčová, K. Syslová, P. Kačér</i>	Multimarkerový screening tělních tekutin pro stanovení nemocí oxidativního stresu
3S-06	<i>P. Pavlíková, P. Dobiáš, M. Adam, K. Ventura</i>	Analýza silic v bylinných nápojích s využitím techniky mikroextrakce jednou kapkou
3S-07	<i>M. Procházková, J. Havliš, V. Kanický</i>	Separace metaloproteinů v nativním stavu metodou RP-HPLC se stacionární fází na bázi monolitu
3S-08	<i>M. Stupavská, M. Aranyosiová, D. Velič</i>	Úloha matrice pri analýze organických látok v hmotnostnej spektrometrii sekundárnych iónov
3S-09	<i>K. Šimková, K. Syslová, P. Kačér</i>	Příprava magnetických částic pro separaci biomarkerů z tělních tekutin
3S-10	<i>H. Vlčková, M. Bláha, P. Solich</i>	Vývoj metody UHPLC-MS/MS a mikro-extrakce na tuhé fázi pro stanovení atorvastatinu a jeho derivátů v biologickém materiálu

Sekce 4 - Fyzikální, teoretická a počítačová chemie

Zvané přednášky

4IL-01	<i>M. Allan, O. May, D. Kubala, B. C. Ibanescu</i>	Chemistry and spectroscopy with free electrons
4IL-02	<i>A. Antušek, M. Jaszunski, K. Jackowski</i>	Nuclear magnetic dipole moments from NMR spectra
4IL-03	<i>J. Michl</i>	Singletové štěpení pro solární články
4IL-04	<i>P. Rapta</i>	EPR a UV-VIS-NIR spektroeletrochemické štúdie koordinačných zlúčenín obsahujúcich meď, nikel alebo zinok v rôznych oxidačných stupňoch
4IL-05	<i>R. Derian, M. Dubencký, L. Mitás, I. Štich</i>	Electronic structure of molecular systems: a bridge between quantum Monte-Carlo and quantum chemistry

- 4IL-06 *D. Dvoranová, V. Brezová, M. Valko* EPR spektroskopie komplexu Cu(II) s protirakovinovým léčivem kamptotecín
- 4IL-07 *P. Neogrady, M. Pitoňák, M. Melicherčík, P. Hobza, M. Urban* Properties of molecular systems using large-scale CC calculations

Sekce 4 - Fyzikální, teoretická a počítačová chemie

Přednášky

- 4L-01 *P. Cifra, T. Bleha* Makromolekuly v kanáloch a dutinách
- 4L-02 *P. Bouř* Výpočetní metody pro interpretaci vibračních spekter
- 4L-03 *J. Bujdák* Supramolekulové systémy organických farbiv v systémech s vrstevnými kremičitanmi
- 4L-04 *L. Juha* Rentgenové lasery v radiační chemii a fyzice
- 4L-05 *A. Vitek, L. Ličmanová, I. Paidarová, R. Kalus* Fázové přechody v molekulových klastrech
- 4L-06 *L. Kavan* Spectroelectrochemistry of carbon nanostructures
- 4L-07 *P. Košinová, T. Herdychová, M. Otyepka, P. Jurečka, J.-L. Duroux, P. Trouillas* Interaction of polyphenols with lipid membranes: a molecular dynamic point of view
- 4L-08 *M. Kovářová, K. Komers, Š. Štěpánková* Inhibice hydrolýzy acetylcholinu pomocí enzymu acetylcholinesterasy
- 4L-09 *J. Málek, R. Svoboda* Strukturální relaxace a viskozitní chování podchlazených sklotvorných systémů
- 4L-10 *I. Nezbeda* Problems of molecular simulations of fluid mixtures: intermolecular potential models and combining rules
- 4L-11 *L. Rábara, M. Aranyosiová, D. Velič* Interpretácia hmotnostných spektier cyklodextrínových vrstiev
- 4L-12 *Z. Samec, A. Trojánek, J. Langmaier* Elektrokatalýza na kapalných rozhraních
- 4L-13 *V. Sklenář* Quo vadis NMR?
- 4L-14 *I. Tvaroška* QM/MM exkurzia do nanosveta zlata
- 4L-15 *B. Vlčková* Spektroskopie povrchem zesíleného Ramanova rozptylu a možnosti detekce jedné molekuly
- 4L-16 *R. Bulánek, I. Voleská, P. Nachtigall* Combined FTIR and DFT study of Co/Ca-FER adsorption complex
- 4L-17 *P. Voňka, K. Řehák* Problematika výpočtu fázové a chemické rovnováhy heterogenních systémů

Sekce 4 - Fyzikální, teoretická a počítačová chemie

Postery

- 4P-01 *O. May, J. Fedor, M. Allan* Isotope effect in dissociative electron attachment cross sections in acetylene
- 4P-02 *M. Allan* Electron collisions with formic acid monomer and dimer
- 4P-03 *E. Baďurová, R. Bulánek* Vliv předúpravy na katalytickou aktivitu Fe-silikalitu v amoxidaci propanu
- 4P-04 *J. Balej* Aktivitní koeficienty vodných roztoků peroxodisíranů a síranů v rozmezí 0–50 °C
- 4P-05 *Z. Barbieriková, M. Bella, V. Milata, S. Jantová, V. Brezová* Photochemical and photobiological studies on selenadiazoloquinolones

- 4P-06 Š. Botková, L. Smoláková, L. Čapek, T. Grygar, R. Bulánek Analysis of Fe species active in ODH of ethane / propane over Fe-zeolites with N₂O
- 4P-07 M. Černoch, F. Skopal, M. Hájek Některé důležité korelace po ethanolýze řepkového oleje
- 4P-08 D. Dvoranová, M. Bobeničová, V. Brezová, L. Bučinský, M. Valko Photochemical transformations of irinotecan in the presence of transition metal ions
- 4P-09 S. Halászová, M. Aranyosiová, O. Vollárová, J. Benko Štúdium interakcií dvojmocných kationov s acetonitrilom metódou SIMS
- 4P-10 L. Husáriková, Z. Repická, L. Martiška, D. Valigura, M. Valko, M. Mazúr Computer simulation of Cu(II) EPR spectra of powders, fluid and frozen solutions
- 4P-11 E. Jáné, M. Žitňan, V. Szöcs, T. Pálszegi, I. Bugár, O. Grančičová, D. Velič Fluorescenčná spektroskopía systému kumarín/ β-cyklodextrín/ micela
- 4P-12 J. Jůza, I. Fortelný, B. Dimzowski, M. Šlouf Koalescenční čas u elipsoidních viskózních částic
- 4P-13 M. Kamas, D. Novotná, E. Tesařová, I. Matulková, H. Turčičová, J. Huynh, O. Novák, V. Shestivska, M. Polášek, J. Cihelka, S. Civiš, L. Juha Chemické projevy plazmatu vytvořeného na povrchu molekulárních ledů pulzním výkonovým laserem
- 4P-14 S. Keďžuch, O. Demel, J. Pittner, J. Noga Multireference R12 coupled cluster theory
- 4P-15 E. Kozubek, M. Kozubková, M. Bojko, S. Bartusek Modelování chemicko-technologických procesů pomocí software Ansys-Fluent
- 4P-16 P. Platoš, S. Bartusek, E. Kozubek, M. Kozubková Dynamické modelování distribuce polutantů s využitím letových měření
- 4P-17 J. Kwiecien, F. Skopal, M. Hájek Vliv demethanolizace na složení reakční směsi po výrobě methylesterů z řepkového oleje
- 4P-18 L. Ličmanová, A. Vítek, I. Paidarová, R. Kalus DFT a empirické modely interakcí v Monte Carlo simulacích klastrů molekul vody
- 4P-19 M. Lofaj, I. Bugár, D. Velič Fluorescencia kumarínu v prostředí hydratovaných solí NaCl a LiCl
- 4P-20 K. Lušpai, P. Rapta, A. Vargová, S. Luňák Jr., J. Vyňuchal, L. Havel, R. Hrdina, M. Vala, M. Weiter *In situ* ESR and UV-VIS spectroelectro-chemistry of diketo-pyrrolo-pyrrole derivatives
- 4P-21 P. Priezel, L. Čapek, D. Kubička Characterization of Ni and Mo species in NiMo-alumina catalysts for hydrodeoxygenation of rapeseed oil
- 4P-22 M. Procházka, M. Stupavská, M. Aranyosiová, D. Velič Degradácia cholesterolu na fotokatalyzátore TiO₂: SIMS – štúdia
- 4P-23 L. Smoláková, T. Grygar, L. Čapek, R. Zbořil Speciation of Fe(III) in Fe-zeolites
- 4P-24 P. Svrčková, A. Vítek, R. Kalus Ionizační potenciály klastrů vzácných plynů
- 4P-25 J. Šepelák, I. Bugár, D. Haško, G. Čík, D. Lorenc, D. Velič Dynamika fluorescencie tenkých filmov oligotiofénov a jej závislosť od morfológie
- 4P-26 D. Šmejkalová, M. Hermannová, T. Ehllová, V. Velebný Aplikace DOSY NMR spektroskopie na studium hydrodynamického chování nativního a modifikovaného hyaluronanu
- 4P-27 M. Trenčanová, E. Jáné, D. Velič Fluorescencia systémov kumarín C153/ β-cyklodextrín, kumarín C153/ silylovaný β-cyklodextrín a kumarín C153/tiolovaný β-cyklodextrín
- 4P-28 L. F. Pašteka, M. Urban Electric and spectroscopic properties of low-lying excited states of acetone

- 4P-29 *T. Zacher, M. Janek* Příprava nových nano – materiálů s fluorescenčními vlastnostmi na bázi interkalovaného kaolinitu
- 4P-30 *D. Zich, I. Černušák, M. Matejdes, I. Bugár, M. Janek* Štúdium jednoduchých zlúčenín pomocou terahertzovej spektroskopie v ďalekej infračervenej oblasti

Sekce 5 - Anorganické, kompozitní a polymerní materiály

Zvané přednášky

- 5IL-01 *D. Bakoš* Anorganické, kompozitné a polymérne biomateriály pre tkanivové inžinierstvo
- 5IL-02 *D. Sedmidubský* Výpočty termodynamických vlastností pevných látek z prvních principů
- 5IL-03 *V. Švorčík, J. Siegel, P. Slepíčka, O. Lyutakov, Z. Kolská* Příprava Au nano-struktur na skle a polymeru

Sekce 5 - Anorganické, kompozitní a polymerní materiály

Přednášky

- 5L-01 *M. Alberti, J. Přihoda, Z. Voráč, I. Kotek, V. Špaček, M. Kaška, F. Socha, L. Dastychová* Fosfazený
- 5L-02 *A. Fedorková, R. Oriňáková, A. Oriňák, A. Heile, D. Kaniansky, H. F. Arlinghaus* Enhanced electrochemical properties of LiFePO₄ cathode material by PPy/PEG coating
- 5L-03 *B. Hlaváček, A. Kalendová, D. Veselý* Fázové přechody amorfních látek ve skelném a kapalném stavu
- 5L-04 *P. Koutník, O. Bortnovsky, P. Antoš, P. Roubíček* Příprava a vlastnosti umělých pískovců na bázi geopolymerních pojiv
- 5L-05 *J. Melar, V. Bednařík, M. Vondruška* Kontinuální sledování konduktivity při reakci mezi křemičitanem a hydroxohlinitanem ve vodném roztoku
- 5L-06 *M. Milichovský* Klíčová role vody v chytrých bioaktivních polymerních systémech termo-responzivního charakteru
- 5L-07 *I. Novák, A. Asadinezhad, M. Lehocý, I. Chodák, M. Števiar, A. Popelka, A. Kleinová* Antibacterial polyvinyl chloride pre-treated by barrier discharge plasma
- 5L-08 *J. Opravilová, R. Slavík, V. Bednařík, M. Vondruška* Využití teplotenské strusky a kalu z leštění a broušení skla při přípravě geopolymérů
- 5L-09 *N. Peřinka, M. Držková, J. Klíma* The possible applications of optical spectroscopy and photoacoustics for evaluation of printed conductive thin layers
- 5L-10 *J. Pflieger, K. Halašová, O. Dammer, S. Kazim, A. Sharf* Optické a elektrické vlastnosti kompozitů polovodivých polymerů s plasmonovými nanočásticemi
- 5L-11 *M. Porubská, O. Szöllös, D. Babić, I. Janigová, K. Jomová, I. Chodák* Effects of some radiation energies on polyamide 6 and glass fiber-reinforced polyamide 6
- 5L-12 *F. Potůček, S. Arora, J. Miklík* Vytěšňovací praní sulfátové buničiny
- 5L-13 *J. Reiter, M. Nádherná, R. Dominko* Iontové kapaliny – elektrolyty pro bezpečné lithno-iontové baterie
- 5L-14 *E. Ružinská* Modification of fibre-forming polymers for preparation special composite materials
- 5L-15 *J. Schwarz, H. Tichá* Skla systému Ga₂O₃ – PbO – P₂O₅

5L-16	<i>P. Sysel, J. Hrib, M. Fryčová, E. Minko</i>	Příprava a charakterizace polyimidových pěn
5L-17	<i>E. Schmidová, P. Švanda, D. Veselý, A. Kalendová</i>	Hodnocení mechanické odolnosti pigmentovaných nátěrů v definovaném deformačním poli
5L-18	<i>M. Tejkl</i>	Technologie inkjet tisku na katedře polygrafie a fotofyziky
5L-19	<i>D. Tesařová, P. Čech, A. Ansorgová</i>	Acrylic monomers emitted by coating films of water borne lacquers and paints
5L-20	<i>M. Vlček</i>	Chalkogenidová skla – materiály pro fotoniku
5L-21	<i>V. Zima, J. Svoboda, K. Melánová, L. Beneš, M. Trchová, J. Brus</i>	Vrstevnaté organofosfonáty kovů: nové perspektivní anorganicko-organické hybridní materiály

Sekce 5 - Anorganické, kompozitní a polymerní materiály

Postery

5P-01	<i>M. Elias, L. Zajičková, P. Synek, O. Jašek, N. R. Panyala, G. Tejral, M. Alberti, J. Havel, M. Klíma</i>	Derivatization and analysis of carbon nanotubes
5P-02	<i>T. Bazyláková, D. Ondrušová, M. Pajtašová, S. Lalíková, M. Olšovský, P. Počarovský</i>	Study of physical-mechanical properties of rubber compound with addition of monoions forms of clinoptilolite
5P-03	<i>P. Benda, A. Kalendová</i>	Antikoroziční pigmenty typu core-shell $Me_xZn_{1-x}Fe_2O_4/Zn$ v organických povlácích
5P-04	<i>Z. Blechová, M. Černý, L. Burgert</i>	Vliv prostředí na redukcí kypových barviv pro barvení celulosových materiálů
5P-05	<i>Z. Cihlár, J. David, J. Kučerík</i>	Vývoj hydrogelů na bázi huminových kyselin
5P-06	<i>J. Ďurfinová, I. Capek, I. Novák, J. Jurčiová, M. Lacko, R. Jurík</i>	Využitie ekologických zmäkčovadiel v gumárenskej praxi a sledovanie ich vplyvu na fyzikálno-mechanické vlastnosti vulkanizátov
5P-07	<i>M. Exnerová, Z. Rozlívková, M. Trchová, J. Stejskal</i>	Nové materiály na bázi karbonizace polyanilinu
5P-08	<i>E. Smrčková, L. Pach, J. Gabčová, P. Fellner</i>	Příprava a vlastnosti zrážaného hydroxidu horečnatého
5P-09	<i>V. Hejlová, M. Milichovský</i>	Vliv složení oxidované celulosy na její houževnatosti
5P-10	<i>M. Horáková, J. Kunstová, A. Hybnerová, L. Burgert</i>	Vývoj samosekvestrujících tenzidů a hodnocení jejich vlastností
5P-11	<i>J. Podjuklová, K. Hrabovská, K. Pelikánová, L. Dobrovodská, T. Laník, V. Bártek</i>	Vliv velikosti částic jílu na funkční vlastnosti sklovitých smaltových povlaků
5P-12	<i>T. Hubáček, K. Šupová, A. Řezníčková, J. Siegel, V. Švorčík</i>	Biokompatibilita napařených uhlíkových vrstev na polymerním substrátu
5P-13	<i>A. Chaloupka, A. Vasina, A. Řezníčková, T. Hubáček</i>	Roubování Au nanočástic na polymery
5P-14	<i>V. Jašková, D. Veselý, A. Kalendová</i>	Antikoroziční vlastnosti nátěrových hmot s obsahem pigmentů na bázi modifikovaných fosforečnanů
5P-15	<i>P. Fellner, J. Híveš, J. Jurišová, L. Pach</i>	Příprava hydroxidu horečnatého jako plniva do polymérov
5P-16	<i>N. Slepíčková Kasálková, M. Pařízek, P. Slepíčka, P. Řezanka, S. Rimpelová, L. Bačáková, V. Švorčík</i>	Vliv nanočástic na biokompatibilitu polymerů
5P-17	<i>J. Kocík, P. Ctibor, V. Brožek</i>	Reaktivní impregnace plazmově deponované keramiky

- 5P-18 Z. Kolská, A. Řezníčková, V. Švorčík Charakterizace povrchů polymerů modifikovaných plazmou
- 5P-19 J. Krajčí, J. Jurčiová, I. Chodák Sledovanie priebehu vodivosti počas jednoosej mechanickej deformácie a následnej relaxácie vodivej polymérnej zmesi
- 5P-20 H. Kukačková, J. Stejskal, A. Kalendová Vliv povrchové úpravy pigmentů vodivými polymery na korozně – inhibiční vlastnosti při aplikaci v nátěrových hmotách
- 5P-21 J. Kunstová, M. Horáková, L. Křištofiková, L. Burgert K otázce biodegradability samosekvestrujících tenzidů
- 5P-22 O. Kvítek, V. Švorčík, J. Siegel, O. Lyutakov, P. Slepíčka Tepelně namáhané tenké vrstvy Au na skle
- 5P-23 S. Lalíková, M. Pajtašová, D. Ondrušová, T. Bazyláková, M. Olšovský, P. Počarovský Investigation of natural rubber composites with organomontmorillonite filler as a substitute of carbon black
- 5P-24 Z. Makajová, N. Slepíčková-Kasálková, L. Bačáková, V. Švorčík Studium povrchových vlastností a biokompatibility polymeru roubovaného PEG
- 5P-25 E. Matějková, Š. Obrdlík, A. Kalendová, D. Veselý Příprava jádrových antikorozních pigmentů s obsahem Mo a W pro nátěrové hmoty
- 5P-26 P. Menc, D. Veselý Vliv derivátů ferrocenu a anorganických pigmentů na zasychání vysokosušného alkydového pojiva
- 5P-27 J. Miklík, F. Potůček Vytěšňovanie čierneho lúhu z vrstvy vlákien buničiny
- 5P-28 J. Narewska, R. Strzelczyk, R. Podsiadły, J. Sokolowska Novel dyes derivatives of 12-phenylquinoxalino[2,3-b][1,4]benzo-thiazine as photoinitiators of cationic polymerization
- 5P-29 M. Nešetřilová, Z. Černošek, P. Kalenda Vliv *N,N*-dimethylanilinu a jeho derivátů na vytvrzování nenasycené polyesterové pryskyřice
- 5P-30 Š. Obrdlík, E. Matějková, A. Kalendová Studium antikorozních vlastností pigmentů s perovskitovou strukturou
- 5P-31 R. Otáhal, P. Kalenda, V. Zima Studium vlastností zpěňovatelných nátěrových hmot
- 5P-32 H. Příbylová, K. Pálka, M. Vlček Rozdíly ve složení tenkých vrstev a výchozího materiálu při vakuovém napařování GeSe₂
- 5P-33 V. Parchanski, B. Frumarová Struktura a vlastnosti objemových skel systému GeS₂-SbSI
- 5P-34 P. Počarovský, I. Capek, I. Novak, J. Jurčiová, J. Kršková, S. Lalíková, T. Bazyláková Účinek povrchovo-aktivních látek v elastomernej zmesi na fyzikálno-mechanické vlastnosti vulkanizátov
- 5P-35 A. Popelka, I. Novák, J. Kronek, A. Kleinová, M. Števiar, I. Chodák Povrchová úprava nízkohustotného polyetylénu poly(2-etyl-2-oxazolinom) s využitím vysokotlaké plazmy
- 5P-36 H. Příbylová, M. Vlček, S. Schroeter, R. Poehlmann Přímý zápis laserem do tenkých vrstev systému As-Ge-Se
- 5P-37 H. Přichystalová, J. Vytřasová, R. Hrdina, L. Burgert Hodnocení fungicidních a antimikrobiálních úprav celulosových materiálů
- 5P-38 T. Uhlířová, P. Barath, J. Reiter Nanostrukturní oxid manganičitý pro palivové články
- 5P-39 I. Rösslerová, L. Koudelka, J. Holubová Studium fosfátových skel olovnatých dotovaných oxidem molybdenovým
- 5P-40 E. Ružinská, A. Danihelová Modification of lignins from kraft black liquors for preparation of perspective wood composite materials
- 5P-41 A. Řezníčková, A. Vasina, P. Sajdl, Z. Kolská, V. Švorčík Povrchové vlastnosti polymerů modifikovaných Ar plazmatem
- 5P-42 J. Siegel, P. Slepíčka, V. Švorčík Au vrstvy na nano-strukturovaném PET
- 5P-43 P. Slepíčka, J. Siegel, V. Švorčík Periodické struktury na povrchu PET
- 5P-44 P. Slivková, J. Hyršl, P. Kalenda, A. Kalendová Vliv fyzikálních parametrů pojiva na antikorozi vlastnosti organického povlaku

- 5P-45 *J. Svoboda, V. Zima, K. Melánová, L. Beneš, Ya-Ching Yang, Sue-Lein Wang* Syntéza a struktura nových arylfosfonátů mědi s auxiliárními ligandy
- 5P-46 *P. Tichá, A. Sveshnikov, P. Demo, Š. Hošková, D. Ladman* Nukleační model vzniku portlanditu v raném stádiu hydratace portlandského cementu
- 5P-47 *D. Ladman, P. Tichá, P. Demo, P. Semerák* Měření elektrické vodivosti cementových malt v počátcích tuhnutí
- 5P-48 *M. Toufarová, V. Hájková, T. Burian, J. Chalupský, V. Vorlíček, L. Juha* Rozklad a síťování PMMA – poly(methyl methakrylátu) více pulzy rentgenového laserového záření pod ablačním prahem
- 5P-49 *L. Tylšová, T. Syrový, M. Kaplanová* Využití síťotisku v tištěné elektronice
- 5P-50 *A. Vasina, P. Slepíčka, V. Švorčík, P. Sajdl, Z. Kolská* Vliv výkonu Ar na povrchové vlastnosti modifikovaného polypropylenu
- 5P-51 *L. Prokůpek, M. Večeřa, L. Svoboda, R. Chudomský* Vliv modifikace epoxidových pryskyřic pomocí akrylátových core-shell kopolymerů na vlastnosti a jejich strukturu
- 5P-52 *K. Vosejpková, P. Mošner, L. Koudelka* Vliv přídavku GeO₂ na strukturu a vlastnosti zinečnatých fosfátových skel

Sekce 6 - Přírodní látky

Zvané přednášky

- 6IL-01 *J. Vacek, P. Kosina, E. Vrublová, M. Kubala, J. Ulrichová, V. Šimánek* Hmotnostní spektrometrie a vybrané fyzikálně-chemické metody ve výzkumu isochinolinových alkaloidů a jejich interakcí s DNA
- 6IL-02 *Z. Wimmer* From steroids to functional molecules

Sekce 6 - Přírodní látky

Přednášky

- 6L-01 *R. Gažák, K. Purchartová, D. Biedermann, P. Marhol, V. Křen* Nové přístupy k získání opticky čistých stereoisomerů silybinu a 2,3-dehydrosilybinu

Sekce 6 - Přírodní látky

Postery

- 6P-01 *D. Biedermann, R. Gažák, Ch. Lambert, V. Křen* Synthesis of silybin sulfates
- 6P-02 *A. Jantovská, K. Ventura, P. Lysková, J. Mazurová, K. Mencl* Antibacterial effects of carvacrol and thymol on strains *Klebsiella pneumoniae* and *Staphylococcus aureus* resistant to antibiotics
- 6P-03 *P. Kolářová, D. Biedermann, E. Tesařová, V. Křen* Preparativní dělení diastereomerů silybinu a jeho sulfátů
- 6P-04 *K. Rochová, M. Sajfrtová, H. Sovová, M. Bártlová* Superkritická extrakce β-sitosterolu z kořene kopřivy
- 6P-05 *M. Sajfrtová, R. Pavela, J. Karban, H. Sovová* Superkritická extrakce a insekticidní aktivita hluchavkovitých rostlin
- 6P-06 *K. Pěničková, J. Urbanová, J. Gregorová, E. Táborská* Srovnání obsahu isochinolinových alkaloidů v jednoleté a víceleté kultuře *Macleaya microcarpa*

Sekce 7 - Chemické vzdělávání, historie a popularizace chemie

Zvané přednášky

7IL-01	<i>M. Bílek</i>	Chemické vzdělávání: současnost a perspektivy
7IL-02	<i>M. Klečková</i>	Jak popularizovat chemii
7IL-03	<i>J. Šesták</i>	Role osobností v badatelském a edukačním vývoji nauky o teple

Sekce 7 - Chemické vzdělávání, historie a popularizace chemie

Přednášky

7L-01	<i>M. Adamec, P. Beneš, H. Kotoučová, F. Liška</i>	Jak silná a stabilní je kyselina uhličitá
7L-02	<i>M. Feszterová</i>	BOZP v chemickom laboratóriu - uplatňovanie teoretických vedomostí v praxi
7L-03	<i>J. Grégr, M. Slavík</i>	Učíme chemii nechemiky na VŠ
7L-04	<i>L. Held</i>	Význam histórie chémie pre chemické vzdelávanie
7L-05	<i>P. Koloros</i>	Postavení školního chemického pokusu v současné výuce
7L-06	<i>M. Slavík, J. Grégr, B. Jodas</i>	Komplexní využití ICT ve VŠ výuce chemie
7L-07	<i>K. Stejskalová</i>	Příspěvek vědců z ÚFCH J. Heyrovského AV ČR, v.v.i. k výchově lidských zdrojů pro vědu a výzkum
7L-08	<i>M. Jambrich, M. Uher, V. Milata, M. Revús</i>	Chemický priemysel v zrkadle dejín Slovenska – história rozvoja vlákien a vláknitých materiálov
7L-09	<i>J. Uhlár, V. Andrušková, P. Lehocký</i>	Trinášť rokov výroby Dusantoxu L
7L-10	<i>K. Urbanová, H. Čtrnáctová</i>	Problematika obecné chemie z hlediska chemického vzdělávání
7L-11	<i>M. Vlček, V. Vlčková</i>	Výuka obecné a anorganické chemie na FCHT Univerzity Pardubice
7L-12	<i>Š. Wenchich, S. Podmanický, L. Muntágová, M. Peterka</i>	História a súčasnosť výskumu a výroby benzotiazolsulfénamidových urýchľovačov v SR

Sekce 7 - Chemické vzdělávání, historie a popularizace chemie

Postery

7P-01	<i>M. Bílek, P. Skalická</i>	Possibilities and limits of virtual measuring in early chemistry education
7P-02	<i>R. Cibulka, B. Kořata, H. Kotoučová, F. Liška</i>	Interaktivní elektronické testy z organické chemie
7P-03	<i>M. Feszterová</i>	Chemické vzdelávanie v študijnom programe environmentalistika
7P-04	<i>M. Galamboš, V. Džugasová</i>	Význam vedeckých podujatí pre študentov
7P-05	<i>J. Kalafutová, M. Ganajová</i>	Nové a obnovitelné zdroje energie v projektovém vyučování
7P-06	<i>K. Stejskalová, M. Heyrovský, R. Kalvoda</i>	Příběh kapky: cesta k Nobelově ceně přes padající rtuťové kapičky
7P-07	<i>M. Vasileská, R. Šulcová, B. Zákostelná</i>	Vývoj a monitorování chemických testových úloh pro státní maturitu v ČR

Sekce 8 - Průmyslová chemie

Zvané přednášky

8IL-01	<i>M. Bajus</i>	Nové pyrolýzne technológie na zhodnocovanie biomasy
8IL-02	<i>L. Novák</i>	Konkurenceschopný chemický průmysl v České republice, ano, či ne?
8IL-03	<i>F. Rypáček</i>	Soužití základního a aplikovaného výzkumu v akademické vědecké instituci

- 8IL-04 *Z. Sobalík, B. Wichterlová, P. Sazama, K. Svoboda* Vývoj katalyzátorů pro selektivní katalytickou redukci NO_x amoniakem a rozklad N₂O - zkušenosti s přenosem výsledků základního výzkumu do průmyslové realizace

Sekce 8 - Průmyslová chemie

Přednášky

- 8L-01 *E. Benčíková, M. Berešík* Vplyv biokompatibility na povrchovú úpravu inovačných materiálov v zdravotníckych zariadeniach
- 8L-02 *K. Bouzek, R. Kodým, T. Bystroň, V. Jiříčný, J. Křišťál* Mikrostrukturovaný reaktor pro elektroorganickou syntézu – vývoj a charakterizace
- 8L-03 *V. Danielik, M. Mravčáková* Elektrochemické vylučovanie volfrámu z tavenín
- 8L-04 *J. Hanika, J. Lederer, V. Tukač, V. Veselý* Produkce vodíku parciální oxidací řepkového šrotu a ropných zbytků
- 8L-05 *J. Híveš, L. Hrnčiariková, K. Kerekeš, J. Kamenár* Železany v taveninách
- 8L-06 *P. Lizák, J. Legerská, L. Mrvová* Softwarová analýza merania pórovitosti textílií
- 8L-07 *P. Lizák, J. Legerská* Vplyv pórovitosti na prestup tepla textíliou
- 8L-08 *D. Markiewicz* Analysis of innovation development in chemical
- 8L-09 *I. Marková* Korelácia hasiacej účinnosti inertných plynov CO₂ a N₂ pri eliminácii homogénneho horenia
- 8L-10 *K. Štefušová, P. Raschman, A. Fedoročková* Porovnanie analytických metód pomocou bilančného modelu lúhovania magnezitu
- 8L-11 *V. Veselý, J. Hanika* Chemická recyklace polyethylentereftalátu
- 8L-12 *M. Zemanová, M. Krivosudská, M. Chovancová* Zliatinové povlaky Ni-W vylúčené z vodných elektrolytov

Sekce 8 - Průmyslová chemie

Postery

- 8P-01 *R. Gabor, J. Seidlerova* Charakterizace a možnosti zpracování zaolejovaných kovových kalů
- 8P-02 *I. Kubovský, F. Kačík, D. Kačíková* Zmena farby javorového dreva vplyvom teploty
- 8P-03 *M. Laurová, F. Kačík* Stanovenie sacharidov v hydrolyzátach po horúcovodnej predúprave dreva
- 8P-04 *A. Murárová, Z. Murárová, J. Legerská* Wellness textílie
- 8P-05 *E. Ružinská, I. Marková* Viacúčelové využitie odpadových sulfátových výluhov
- 8P-06 *R. Snop, M. Zemanová, V. Tukač* Studium vlivu periodické modulace tlaku na hydrogenaci dienu
- 8P-07 *S. Šustek, L. Svoboda, M. Matoušková* Studium vlastností biodegradabilního hydrogelu
- 8P-08 *J. Videnský, D. Gabriš, I. Sedlářová, M. Drakselová* Vliv použitého druhu apatitu na reakci s kyselinou dusičnou

Sekce 9 - Potravinářská chemie

Přednášky

- 9L-01 *L. Kokoška* Antimikrobiální, antioxidantní a protizánětlivý účinek chinonů ze semen černuchy seté

- 9L-02 S. Sekretár, Š. Schmidt, J. Hlásniková, I. Kolesárová Stabilization of fats exposed to microwave heating
- 9L-03 F. Šeršeň, P. Chowaniec Antioxidačná aktivita niektorých malokarpatských odrodových vín

Sekce 9 - Potravinářská chemie

Postery

- 9P-01 L. Babák, P. Šupinová, E. Vítová Vývoj sýřících vlastností mléka
- 9P-02 J. Bystrická, A. Vollmannová, I. Čičová, J. Musilová Dynamika obsahu těžkých kovů v anatomických částech pohánky jedle (*Fagopyrum esculentum* Moench.)
- 9P-03 P. Dobiáš, P. Pavlíková, M. Adam, K. Ventura Využití extrakce nadkritickou tekutinou a extrakce v Soxhletově extraktoru pro izolaci a stanovení vybraných antioxidantů v bylinách
- 9P-04 K. Duroňová, J. Ferdová, I. Márová, M. Čertík Study of molecular changes in surface layers of apples stored in different conditions
- 9P-05 E. Hýsková, R. Mokáňová, E. Vítová, J. Zemanová Identifikace senzoryicky aktivních látek v bezu černém (*Sambucus nigra*)
- 9P-06 A. Lichnová, H. Vondráčková, I. Márová Determination of phenolic compounds in cereal products
- 9P-07 J. Musilová, J. Bystrická, J. Tomáš Kumulácia Cd a Pb v zemiakoch a ich vplyv na obsah lipidov
- 9P-08 V. Oslovičová, M. Chňapek, M. Tomka, Z. Gálová Zásobné bielkoviny ako markery technologickej kvality zrna *Triticum spelta* L., *Triticum durum* Desf. a *Hordeum vulgare* L.
- 9P-09 E. Palenčárová, Z. Gálová Detekcia celiakálnych agens imunochemickou metódou
- 9P-10 S. Petrik, A. Hároníková, T. Dvořáková, I. Márová Analysis of carotenoids produced by several red yeast strains using different types of waste substrates
- 9P-11 Š. Schmidt, F. Kreps, S. Sekretár, J. Hlásniková Stability of lipid fraction of soybean spreads containing linseed
- 9P-12 P. Šupinová, L. Babák Studium životaschopnosti probiotik z komerčních preparátů
- 9P-13 J. Tomáš, J. Čéry, J. Árvay Zraniteľnosť pôdy v oblasti strážske z pohľadu jej ekologických funkcií vzhľadom na Cd, Pb a Ni
- 9P-14 T. Tóth, J. Bystrická, A. Vollmannová, P. Trebichalský, J. Tóth Zdroje ortuti v potravinách
- 9P-15 P. Trebichalský, J. Molárová, A. Vollmannová, J. Bystrická Obsah kobaltu, niklu a chrómu vo vybraných odrodách jačmeňa siateho v závislosti od racionalizačných systémov hospodárenia
- 9P-16 E. Vítová, E. Hýsková, R. Mokáňová, J. Zemanová Složení mastných kyselin tavených sýrových analogů
- 9P-17 A. Vollmannová, M. Timoracká, J. Daniel, M. Medvecký Odrodová závislost obsahu fenolových kyselin v plodech čučoriedky chocholíkatej a brusnice pravej
- 9P-18 D. L. Vu, L. Červenka Moisture adsorption characteristics of dried berries at various temperatures
- 9P-19 Ž. Gojković, Z. Mikulíková, L. Zouharová, S. Obruča, I. Márová Possible use of chicken skin tissue as alternative source of type I collagen

Sekce 10 - Nanotechnologie

Zvané přednášky

- 10IL-01 M. Frumar, T. Wágner, B. Frumarová, P. Němec, V. Parchanski Amorfní chalkogenidy – zajímavé anorganické polymery i „high-tech“ materiály pro řadu aplikací

- 10IL-02 *D. Plachá, G. S. Martynková, M. Valášková* Význam jílu a jílových minerálů v nanotechnologiích
- 10IL-03 *D. Rafaja* Microstructure characterisation of nanomaterials using XRD, TEM and EELS
- 10IL-04 *M. Šupová* "Nano" v biomateriálech pro obnovu kostní tkáně

Sekce 10 - Nanotechnologie

Přednášky

- 10L-01 *J. Gutwirth, T. Wágner, P. Bezdička, M. Vlček, S. O. Kasap, M. Frumar* Study of laser induced crystallization processes of (Ag)-Sb-S thin films
- 10L-02 *S. Holešová, M. Samlíková, M. Valášková, E. Pazdziora* Příprava a charakterizace antibakteriálních organovermikulitů
- 10L-03 *J. Kolář, T. Wágner, V. Zima, Š. Stehlik, B. Frumarova, L. Beneš, M. Vlček, M. Frumar* Iontově vodivá chalcogenidová skla systému LiI-Ga₂S₃-GeS₂
- 10L-04 *P. Košťál, J. Málek* Viscosity of chalcogenide glass-forming melts and its connection with configurational entropy
- 10L-05 *L. Kvítek, R. Prucek, A. Panáček, M. Vandlíčková, R. Zbořil* Mechanismus vzniku nanočástic stříbra při redukci v alkalickém prostředí
- 10L-06 *M. Matejdes, M. Janek* Štúdium disperzií a tenkých filmov na báze montmorillonitu a fluorescenčních farbív
- 10L-07 *L. Neuwirthová, K. Mamulová Kutlákova, T. Cetynkaya* Nanokompozity s TiO₂ nanočásticemi připravené z TiCl₄
- 10L-08 *A. Panáček, L. Kvítek, R. Prucek, M. Kolář, R. Zbořil* Biologická aktivita nanočástic stříbra
- 10L-09 *R. Prucek, L. Kvítek, A. Panáček, R. Zbořil* Příprava vodných disperzí nanočástic mědi v přítomnosti polyakrylátů
- 10L-10 *J. Seidlerová, E. Gryčová, P. Štrympl* Studium přítomnosti mikro a nanočástic kovů v lidském organismu
- 10L-11 *Š. Stehlik, T. Wágner, V. Zima, M. Vlček, M. Frumar* Electric properties and phase separation in Ag_x(As_{0.33}S_{0.67})_{100-x} glass system
- 10L-12 *T. Wagner, S. Stehlik, M. Bartos, V. Zima, M. Frumar* Ag-conducting chalcogenide glasses, their properties important for potential application as CBRAM nanomaterials
- 10L-13 *M. Weiter, M. Vala, I. Ouzzane, S. Luňák Jr., J. Vyňuchal, L. Kubáč* Tailoring of properties of diketopyrrolopyrroles derivatives for organic electronic and photonics
- 10L-14 *M. Wójcik, M. Kołpaczyńska, M. Góra, D. Pocięcha, E. Górecka, J. Mieczkowska* Structure-property relationships in smectic and columnar gold nanoparticles. Shape-adaptive model for mesophases made by gold nanoparticles
- 10L-15 *M. M. Zaitz, M. Molenda, M. Baran, L. Chmielarz, A. Rafalska-Easocha, B. Dudek, Z. Piwowarska, R. Dziembaj* Nanostructural ceria based materials as catalysts for oxidation of volatile organic compounds
- 10L-16 *L. Zajoncová, K. Pospíšková, M. Pečová, M. Šebela, Z. Marková, K. Poláková, D. Jančík, R. Zbořil* Studium vlastností hydrolas imobilizovaných na superparamagnetických nanočásticích

Sekce 10 - Nanotechnologie

Postery

- 10P-01 *J. Gutwirth, M. Bartoš, T. Wágner, P. Bezdička, J. Přikryl, M. Hrdlička, M. Vlček, M. Frumar* Application potential of RF magnetron sputtered Se-doped Ge-Sb-Te thin films for data storage
- 10P-02 *E. Bretšnajdrová, L. Svoboda, J. Zelenka* Příprava a hodnocení vlastností nanočástic ZnO
- 10P-03 *A. Fargašová, R. Prucek* Příprava nanočástic stříbra dvoustupňovou syntézou
- 10P-04 *L. Hromádko, P. Němec, M. Bartoš, M. Vlček, L. Beneš, M. Frumar* Optical and electrical properties of Sb-rich thin films from Sb-In-Te system
- 10P-05 *M. Hundáková, M. Valášková, E. Pazdziora* Ag-montmorillonit a Ag-vermikulit a jejich antibakteriální účinek
- 10P-06 *A. Kališová, K. Barabaszová* Mechanická syntéza a charakterizace definovaných částic
- 10P-07 *M. Karlíková, L. Kvítek* Studium adsorpce nanočástic stříbra na vybraných adsorbentech
- 10P-08 *P. Koziel, J. Přikryl, M. Frumar* Příprava a fyzikálně chemické vlastnosti vybraných vzorků systému Ag-Sb-Pb-Ge-Te
- 10P-09 *E. Mináriková, R. Prucek* Studium syntézy nanočástic mědi
- 10P-10 *V. Pěnkavová, J. Tihon, O. Wein* Reologie a stabilita mikrod disperzí TiO₂
- 10P-11 *K. Pospíšilová, L. Zajoncová, M. Pospíšilová, Z. Marková, M. Pečová, K. Poláková, D. Jančík, R. Zbořil, M. Šebela* Imobilizace hydrolas na magnetické nosiče
- 10P-12 *J. Přikryl, M. Hrdlička, M. Pavlišta, J. Orava, T. Kohoutek, M. Vlček, L. Beneš, M. Frumar* The preparation of amorphous thin films of multi-element chalcogenides
- 10P-13 *J. Ren, T. Wagner, J. Oswald, B. Frumarova, M. Frumar* The effects of metal iodide on near- and middle-IR luminescence of Dy³⁺-doped chalcogenide glasses based on Ge-Ga-Se
- 10P-14 *P. Majorová, J. Seidlerová, G. S. Martynková* Interakce vermikulitu s kyselinou šťavelovou
- 10P-15 *M. Setnička, P. Čičmanec, R. Bulánek, A. Kalužová* Influence of the preparation method to the population of various VO_x species over mesoporous support
- 10P-16 *M. Sivera, L. Kvítek, A. Panáček* Studium stabilizace nanočástic stříbra roztoky želatiny
- 10P-17 *B. Stepanov, T. Wágner, M. Frumar, M. Churbanov, Y. Chigirinsky* The influence of silver and sodium ions on the optical properties of tungsten-tellurite glasses
- 10P-18 *L. Střížík, J. Gutwirth, T. Wágner, P. Bezdička, M. Vlček, M. Frumar* Thin films from Ge-Sb-Te ternary system prepared by RF magnetron sputtering
- 10P-19 *A. Sveshnikov, P. Tichá, P. Demo, Š. Hošková* Preliminary study of stimulated nucleation on polymer nanofibers
- 10P-20 *S. Valková, T. Wágner, M. Bartoš, J. Přikryl, M. Vlček, B. Frumarová, L. Beneš, M. Frumar* Tenké amorfní vrstvy systému Ge-Ga-S

Sekce 11 - Termická analýza a kalorimetrie

Zvané přednášky

- | | | |
|---------|--|--|
| 11IL-01 | <i>A. Malecki</i> | Thermal analysis in building materials studies from point of view of environment protection |
| 11IL-02 | <i>J. Málek, Z. Zmrhalová, J. Barták, P. Honcová</i> | Nová metoda využitelná při studiu kinetiky krystalizace sklovitých materiálů |
| 11IL-03 | <i>P. Šimon</i> | Isoconversional methods in thermo-analytical kinetics based on non-Arrhenian temperature functions |

Sekce 11 - Termická analýza a kalorimetrie

Přednášky

- | | | |
|--------|---|---|
| 11L-01 | <i>Z. Cibulková, P. Šimon, J. Uhlár, K. Kosár</i> | DSC study of antioxidant activity of substituted <i>p</i> -phenylenediamines in styrene-butadiene rubber |
| 11L-02 | <i>E. Füglein</i> | Multiple mode calorimetry (MMC) – a powerful combination of accelerating rate calorimetry (ARC) and differential scanning calorimetry (DSC) |
| 11L-03 | <i>P. Holba</i> | Rovnovážné pozadí při ohřevu v podmínkách řízené atmosféry |
| 11L-04 | <i>J. Leitner, V. Jakeš, Z. Sofer, D. Sedmidubský, K. Růžička, P. Svoboda</i> | Tepelné kapacity směsných oxidů v systému Bi-Ta-O |
| 11L-05 | <i>M. Nevřiva, J. Leitner, D. Sedmidubský</i> | Vysokoteplotní rozpouštěcí kalorimetrie směsných oxidů v systému Bi-Nb-Ca-Sr-O |
| 11L-06 | <i>V. Slovák, L. Myslikovjanová, J. Šteflová</i> | Termická analýza a příprava uhlíkatých aerogelů |
| 11L-07 | <i>P. Šulcová</i> | Syntéza a studium sloučenin na bázi Bi ₂ O ₃ |

Sekce 11 - Termická analýza a kalorimetrie

Postery

- | | | |
|--------|---|--|
| 11P-01 | <i>L. Adolfová, Ž. Dohnalová, P. Šulcová, M. Trojan</i> | Termická analýza sloučenin typu SrCr _x Sn _{1-x} O _{3-x/2} |
| 11P-02 | <i>P. Bělina, P. Šulcová, J. Palarčíková</i> | Syntéza a studium orto- a pyrofosforečnanů chromu dopovaných lanthanem |
| 11P-03 | <i>L. Bukovská, P. Šulcová, M. Vondrášek</i> | Studium sloučeniny Lu ₂ Zr _{1,5} V _{0,5} O ₇ s využitím metod termické analýzy |
| 11P-04 | <i>P. Bystrzycki, P. Šulcová, M. Trojan</i> | Termická analýza sloučenin typu Bi _{2-x} Ho _{x/2} Zr _{3x/8} O ₃ |
| 11P-05 | <i>J. Čech, P. Šulcová, Ž. Dohnalová, M. Trojan</i> | Studium reaktivity oxidických sloučenin titanu |
| 11P-06 | <i>P. Honcová, R. Svoboda, J. Málek</i> | Studium fyzikálního stárnutí chalkogenidových skel – vliv experimentálních podmínek |
| 11P-07 | <i>L. Oravová, P. Honcová, V. Podzemná</i> | Studium nukleačních činidel pro potlačení podchlazení v hexahydrátu dusičnanu hořečnatém |
| 11P-08 | <i>A. Kohutová, L. Svoboda, V. Podzemná</i> | Termochemická studie hydroxyapatitu |
| 11P-09 | <i>Z. Zmrhalová, J. Málek, P. Honcová</i> | Studium neizotermní krystalizace As ₂ Se ₃ pomocí termomechanické analýzy |
| 11P-10 | <i>A. Peller, K. Vizárová, P. Šimon</i> | Effect of deacidification processes on the lifetime of historical newspaper using termoanalytical methods |

11P-11	<i>V. Podzemná, L. Svoboda</i>	Porovnání citlivosti různých čipů typu NCM-9924
11P-12	<i>L. Strnadlová, P. Šulcová, M. Vondrášek</i>	Využití DTA pro syntézu $\text{Ce}_{0,5}\text{Zr}_{0,4}\text{Bi}_{0,1}\text{O}_{1,95}$
11P-13	<i>R. Svoboda, J. Málek</i>	Crystallization kinetics of $\text{Te}_x\text{Se}_{1-x}$ glasses
11P-14	<i>R. Svoboda, P. Honcová, J. Málek</i>	Phenomenological description of structural relaxation for non-crystalline materials
11P-15	<i>V. Blovská, P. Šulcová, J. Luxová</i>	Syntéza a studium sloučeniny PrFeO_3
11P-16	<i>J. Turjan, M. Drábik, P. Capek</i>	Charakterizácia celulózy a niektorých jej derivátov termickou analýzou a FT-IR

Sekce 12 - Environmentální inženýrství

Zvané přednášky

12IL-01	<i>O. Uhlík, M. Macková, J. Koubek, L. Musilová, M. Holečková, K. Demnerová, T. Macek</i>	Rhizosfera rostlin jako aktivní součást životního prostředí v bioremediaci toxických látek
12IL-02	<i>P. Mikulášek</i>	Tlakové membránové procesy a jejich využití v oblasti likvidace odpadních vod
12IL-03	<i>L. Novotný</i>	Aktuální možnosti vybraných elektrochemických principů, čidel, modulárních i USB-kompatibilních systémů v oblasti ochrany vod a prostředí
12IL-04	<i>M. Vávrová, K. Kubičková, L. Zouhar, L. Mravcová, J. Čáslavský</i>	Syntetické vonné látky a jejich stanovení ve vodním ekosystému
12IL-05	<i>J. Wanner</i>	Vysoce účinné technologie čištění pro opětovné využívání odpadních vod

Sekce 12 - Environmentální inženýrství

Přednášky

12L-01	<i>P. Bober, A. Oriňák, R. Oriňáková, P. Zamostný, J. Ladomerský</i>	Produkcia vodíka katalyzovanou pyrolýznou degradáciou zmesí polymérov
12L-02	<i>T. C. Jordão</i>	The use of balanced scorecard in the strategic planning of renewable energy supply in the regional level
12L-03	<i>L. Dušek</i>	Pokrokové oxidační procesy vhodné pro čištění odpadních vod
12L-04	<i>M. Fojtová, P. Vidláková, L. Bandžuchová, L. Havran, M. Fojta, R. Šelešovská</i>	Monitorování hladiny fytochelatinů v biologickém materiálu s využitím Brdičkovy reakce na rtuťových a amalgamových elektrodách
12L-05	<i>R. Šelešovská, J. Chýlková</i>	Voltametrické stanovení thalia ve složkách životního prostředí s využitím stříbrné pevné amalgámové elektrody
12L-06	<i>T. Weidlich, A. Krejčová</i>	Čištění vod kontaminovaných halogenovanými aromatickými sloučeninami s použitím kovových slitin

Sekce 12 - Environmentální inženýrství

Postery

12P-01	<i>L. Bandžuchová, R. Šelešovská, J. Chýlková</i>	Voltametrické stanovení kyseliny listové ve vitamínových přípravcích s využitím stříbrné pevné amalgámové elektrody
--------	---	---

- | | | |
|--------|--|--|
| 12P-02 | <i>A. Fargašová</i> | Biosorpcia Fe z heterocyklických Fe(III) komplexov s nikotínamidom zelenými riasami |
| 12P-03 | <i>L. Fortunová, M. Reháková, S. Nagyová</i> | Znižovanie obsahu organických polutantov modifikovanými zeolitickými sorbentami |
| 12P-04 | <i>K. Komárek, P. Knittlová, M. Elcnerová, M. Šafaříková</i> | Využití magneticky modifikovaných aktivních uhlí k extrakci organických látek z vody |
| 12P-05 | <i>Z. Kramarová, A. Fargašová</i> | Hodnotenie recipročného účinku Se(IV), Se(VI) a As(III) na rast riasy <i>Desmodesmus quadricauda</i> |
| 12P-06 | <i>L. Novotný, P. Polášková</i> | Možné indikativní změny druhé redukční vlny (píku) kyslíku za přídavku zvolené složky roztoku |
| 12P-07 | <i>M. Stuchlík</i> | Určení optimální provozní teploty senzorové vrstvy |
| 12P-08 | <i>J. Krmela, I. Špendlíková</i> | Jsou obavy z migrace radionuklidů z hlubinných úložišť oprávněné? |

AUTORSKÝ REJSTŘÍK

- Abele S. 3L-10
 Adam M. 3S-06, 9P-03
 Adamec M. 7L-01
 Adolfová L. 11P-01
 Alberti M. 5L-01, 5P-01
 Allan M. 4IL-01, 4P-01, 4P-02
 Andrežalová L. 1P-04
 Andrušková V. 7L-09
 Ansorgová A. 5L-19
 Antoš P. 5L-04
 Antušek A. 4IL-02
 Aranyosiová M. 3S-08, 4L-11, 4P-09, 4P-22,
 Arlinghaus H. F. 5L-02
 Arora S. 5L-12
 Árvay J. 9P-13
 Asadinezhad A. 5L-07
- Babák L. 9P-01, 9P-12
 Babić D. 5L-11
 Babula P. 1L-04
 Bačáková L. 5P-16, 5P-24
 Baďurová E. 4P-03
 Bajus M. 8IL-01
 Bakardžiev M. 1P-01
 Bakoš D. 5IL-01
 Balej J. 4P-04
 Bandžuchová L. 12L-04, 12P-01
 Barabaszová K. 10P-06
 Baran M. 10L-15
 Barath P. 5P-38
 Barbieriková Z. 4P-05
 Barek J. 3L-01, 3L-02, 3L-13, 3P-03, 3P-08, 3P-11, 3P-18, 3P-19, 3P-22, 3P-23
 Barsová L. 3P-01
 Barták J. 11IL-02
 Bártek V. 5P-11
 Bártlová M. 6P-04
 Bartos M. 10L-12, 10P-01, 10P-04, 10P-20
 Bartusek S. 4P-15, 4P-16
 Bazel' Y. 3P-15
 Bazyláková T. 5P-02, 5P-23, 5P-34
 Bednařík V. 5L-05, 5L-08
 Bělina P. 11P-02
 Bella M. 2L-01, 4P-05
 Benada O. 3IL-01
 Benčíková E. 8L-01
 Benda P. 5P-03
 Beneš L. 5L-21, 5P-45, 10L-03, 10P-04, 10P-12, 10P-20
 Beneš P. 7L-01
 Benko J. 4P-09
 Berešík M. 8L-01
 Berkeš D. 2IL-01
 Berková M. 2P-01
- Bezdička P. 10L-01, 10P-01, 10P-18
 Biedermann D. 6L-01, 6P-01, 6P-03
 Bílek M. 7IL-01, 7P-01
 Bilková Z. 3P-14
 Billik P. 1P-02
 Bláha M. 3S-10
 Bleha T. 4L-01
 Blechová Z. 5P-04
 Blovská V. 11P-15
 Bobeničová M. 4P-08
 Bober P. 12L-01
 Boča R. 11L-01, 1L-05
 Bodor R. 3S-02
 Bojko M. 4P-15
 Boková V. 3P-07
 Bortnovsky O. 5L-04
 Botková Š. 4P-06
 Bouř P. 4L-02
 Bousseksou A. 1L-05
 Bouzek K. 8L-02
 Brath H. 2P-10
 Bretšnajdrová E. 10P-02
 Brezová V. 1L-10, 4IL-06, 4P-05, 4P-08
 Brožek V. 5P-17
 Brus J. 5L-21
 Bučinský L. 4P-08
 Buffa R. 2P-01
 Bugár I. 4P-11, 4P-19, 4P-25, 4P-30
 Buchta V. 2P-15
 Bujdák J. 4L-03
 Bukovská L. 11P-03
 Buláněk R. 4L-16, 4P-03, 10P-15, 4P-06
 Buliaková K. 2L-04
 Bureš F. 2IL-02, 2P-06
 Burgert L. 5P-04, 5P-10, 5P-21, 5P-37
 Burian T. 5P-48
 Bůžek F. 3P-21
 Bystrická J. 9P-02, 9P-07, 9P-14, 9P-15
 Bystroň T. 8L-02
 Bystrzycki P. 11P-04
- Capek I. 5P-06, 5P-34
 Capek P. 11P-16
 Cetynkaya T. 10L-07
 Cibulka R. 2P-07, 7P-02
 Cibulková Z. 11L-01
 Cifra P. 4L-01
 Cigl M. 2P-05
 Cígler P. 11L-02
 Cihelka J. 4P-13
 Cihlár Z. 5P-05
 Císařová I. 1P-01
 Civiš S. 4P-13
 Cölfen H. PL-01
- Csizmadiová J. 2P-02
 Ctibor P. 5P-17
 Cvačka J. 3P-13
- Čabalová I. 3P-12
 Čáňová E. 3L-04
 Čapek L. 4P-06, 4P-21, 4P-23
 Čáslavský J. 12IL-04
 Čech J. 11P-05
 Čech P. 5L-19
 Čermák J. 1L-09, 2P-08
 Čermák J. 1P-07, 1P-09
 Černocho M. 4P-07
 Černošek Z. 5P-29
 Černušák I. 4P-30
 Černý M. 5P-04
 Čertík M. 9P-04
 Červenka L. 9P-18
 Červenková Šťastná L. 2L-02, 2P-09
 Čéry J. 9P-13
 Čičmanec P. 10P-15
 Čičová I. 9P-02
 Čík G. 4P-25
 Čížmár E. 1P-17
 Čtrnáctová H. 7L-10
 Čurillová Z. 3P-16
- Dammer O. 5L-10
 Daňhel A. 3L-01, 3S-01
 Daniel J. 9P-17
 Danielik V. 8L-03
 Danihelová A. 5P-40
 Danko M. 2P-06
 Dastychová L. 5L-01
 David J. 5P-05
 Dědourková T. 1L-01
 Dejmková H. 3L-02, 3P-23
 Demel O. 4P-14
 Demnerová K. 12IL-01
 Demo P. 5P-46, 5P-47, 10P-19
 Derian R. 4IL-05
 Deýlová D. 3P-03
 Dimzoski B. 4P-12
 Distler P. 3P-04
 Dobiáš P. 3S-06, 9P-03
 Dobrovodská L. 5P-11
 Dohnalová Ž. 11P-01, 11P-05
 Dominko R. 5L-13
 Dostál L. 1P-15
 Drábik M. 1P-02, 11P-16
 Drakselová M. 8P-08
 Držková M. 5L-09
 Dubencký M. 4IL-05
 Dudek B. 10L-15
 Dufková I. 2P-15
 Ďurfinová J. 5P-06
 Ďuriš A. 2IL-01

- Durmis J. 2P-10
 Duroňová K. 9P-04
 Duroux J.-L. 4L-07
 Dušek L. 12L-03
 Dvoranová D. 1L-10, 4IL-06, 4P-08
 Dvořák B. 3P-05
 Dvořák L. 1L-11
 Dvořák Z. 1L-11
 Dvořáková T. 9P-10
 Dziembaj R. 10L-15
 Džugasová V. 7P-04
- Ehlová T. 2P-11, 4P-26
 Elcnerová M. 12P-04
 Elias M. 5P-01
 Eliáš Z. 2P-03
 Exnerová M. 5P-07
- Fajnor V. Š. 1P-02, 1P-03
 Fargašová A. 10P-03, 12P-02, 12P-05
 Fedor J. 4P-01
 Fedorková A. 5L-02
 Fedoročková A. 8L-10
 Fellner P. 5P-08, 5P-15
 Ferdová J. 9P-04
 Ferenčíková Z. 3P-06
 Feszterová M. 7L-02, 7P-03
 Fioóová B. 3P-07
 Fischer J. 3L-01, 3P-08
 Fišera L. 2P-13
 Fojta M. 3L-03, 12L-04
 Fojtová M. 12L-04
 Foret F. 3L-10
 Fortelný I. 4P-12
 Fortunová E. 12P-03
 Frumar M. 10IL-01, 10L-03, 10L-01,
 10L-11, 10L-12, 10P-01, 10P-04,
 10P-08, 10P-12, 10P-13, 10P-17,
 10P-18, 10P-20
 Frumarová B. 5P-33, 10IL-01, 10L-03,
 10P-13, 10P-20
 Fryčová M. 5L-16
 Fryš O. 3P-09
 Füglein E. 11L-02
- Gabčová J. 5P-08
 Gabor R. 8P-01
 Gabriš D. 8P-08
 Galamboš M. 3P-10, 7P-04
 Gálová Z. 9P-08, 9P-09
 Ganajová M. 7P-05
 Gazdík Z. 3P-25, 3P-26
 Gažák R. 6L-01, 6P-01
 Glogarová M. 2P-05
 Gojkovic Ž. 9P-19
 Gondová T. 3P-16
 Góra M. 10L-14
 Górecka E. 10L-14
 Graetzl M. PL-02
 Grančičová O. 4P-11
 Gregorová J. 6P-06
- Grégr J. 7L-03, 7L -06
 Grüner B. 11L-02
 Gryčová E. 10L-10
 Grygar T. 4P-06, 4P-23
 Gutwirth J. 10L-01, 10P-01, 10P-18
 Gyepesová D. 1P-04
- Habala L. 1P-05
 Hajdúch M. 3IL-01
 Hájek M. 4P-07, 4P-17
 Hájková V. 5P-48
 Halama A. 2P-04
 Halamová D. 1P-06
 Halászová S. 4P-09
 Halašiová M. 3S-02
 Halašová K. 5L-10
 Hampf F. 2P-05
 Hanika J. 8L-04, 8L-11
 Haníková J. 1P-07
 Hanusek J. 2L-10, 2P-16
 Hároníková A. 9P-10
 Haško D. 4P-25
 Havel J. 5P-01
 Havel L. 4P-20
 Havlíček V. 3IL-01, 3L-12
 Havliš J. 3S-07
 Havran L. 12L-04
 Heile A. 5L-02
 Hejlová V. 5P-09
 Held L. 7L-04
 Herdychová T. 4L-07
 Herchel R. 1L-05
 Hermann P. 11L-03
 Hermannová M. 4P-26
 Hernichova L. 3P-14
 Heyrovský M. 7P-06
 Híveš J. 5P-15, 8L-05
 Hlásníková J. 9L-02, 9P-11
 Hlaváček B. 5L-03
 Hlaváček J. 2P-20
 Hobza P. 4IL-07
 Holba P. 11L-03
 Holčapek M. 3L-04, 3P-20, 3P-28
 Holečková M. 12IL-01
 Holešová S. 10L-02
 Holub J. 1P-01, 1P-08
 Holubová J. 5P-39
 Honcová P. 11IL-02, 11P-06, 11P-07,
 11P-09, 11P-14
 Honzíček J. 1L-01
 Horáková M. 5P-10, 5P-21
 Horčičiak M. 3S-03
 Horna A. 3P-25, 3P-26
 Horský J. 2P-08
 Hošková Š. 10P-19, 5P-46
 Hrabovská K. 5P -11
 Hrachová J. 1P-02
 Hrdina R. 2P-03, 4P-20, 5P-37
 Hrdlička M. 10P-12, 10P-01
 Hrdlovič P. 2P-06
 Hrib J. 5L-16
- Hrnčiariková L. 8L-05
 Hromádka L. 10P-04
 Hubáček T. 5P-12, 5P-13
 Hundáková M. 10P-05
 Husáriková L. 4P-10
 Huťka M. 2L-09
 Huynh J. 4P-13
 Hybnerová A. 5P-10
 Hyršl J. 5P-44
 Hýsková E. 9P-05, 9P-16
- Chaloupka A. 5P-13
 Chalupský J. 5P-48
 Chigirinsky Y. 10P-17
 Chládková B. 3P-03
 Chlupatý T. 1L-06
 Chmielarz L. 10L-15
 Chňapek M. 9P-08
 Chodák I. 5L-07, 5L-11, 5P-19, 5P-35
 Chovancová M. 8L-12
 Chowanec P. 9L-03
 Chudoba R. 3S-03
 Chudomský R. 5P-51
 Churbanov M. 10P-17
 Chýlková J. 12L-05, 12P-01
- Ibanescu B. C. 4IL-01
 Imrich J. 2L-03
- Jackowski K. 4IL-02
 Jakeš V. 11L-04
 Jambor R. 1L-07
 Jambrich M. 7L-08
 Jančík D. 10L-16, 10P-11
 Jandera P. 3IL-02
 Jáné E. 4P-11, 4P-27
 Janek M. 4P-29, 4P-30, 10L-06
 Janigová I. 5L-11
 Jankovicová B. 3P-14
 Janoušek Z. 2P-21
 Janovec L. 2L-03
 Jantová S. 4P-05
 Jantovská A. 6P-02
 Jaszunski M. 4IL-02
 Jašek O. 5P-01
 Jašková V. 5P-14
 Ječmínková J. 3P-08
 Jílek P. 2P-15, 3P-27
 Jindřich J. 2P-21
 Jiranek I. 3L-01, 3P-11
 Jirman J. 2P-04
 Jiříčný V. 8L-02
 Jodas B. 7L -06
 John J. 3P-04
 Jomová K. 5L-11
 Jordão T. C. 12L-02
 Juha L. 4L-04, 4P-13, 5P-48
 Jungová P. 3S-04
 Jurčiová J. 5P-06, 5P-19, 5P-34
 Jurečka P. 4L-07
 Jurík R. 5P-06

- Jurišová J. 5P-15
 Jurok R. 2P-07
 Jůza J. 4P-12
- Kačer P. 3S-05, 3S-09
 Kačík F. 3P-12, 8P-02, 8P-03
 Kačíková D. 8P-02
 Kaftan F. 3P-13
 Kalafutová J. 7P-05
 Kalenda P. 5P-29, 5P-31, 5P-44
 Kalendová A. 5L-03, 5L-17, 5P-03, 5P-14, 5P-20, 5P-25, 5P-30, 5P-44
 Kališová A. 10P-06
 Kalus R. 4L-05, 4P-18, 4P-24
 Kalužová A. 10P-15
 Kalvoda R. 7P-06
 Kamas M. 4P-13
 Kamenár J. 8L-05
 Kaniansky D. 3S-02, 3S-03, 5L-02
 Kanický V. 3S-04, 3S-07
 Kaplanová M. 5P-49
 Karban J. 2P-17, 6P-05
 Karlíková M. 10P-07
 Kasák P. 2L-07
 Kasap S. O. 10L-01
 Kaška M. 5L-01
 Kašparová M. 3L-06
 Kaustová J. 2P-15
 Kavan L. 4L-06
 Kazim S. 5L-10
 Kedžuch S. 4P-14
 Kerekeš K. 8L-05
 Kicková A. 2L-07
 Kizek R. 3P-25, 3P-26
 Klečková M. 7IL-02
 Kleinová A. 5L-07, 5P-35
 Klíma J. 5L-09
 Klíma M. 5P-01
 Knittlová P. 12P-04
 Kocík J. 5P-17
 Kočanová I. 1P-09
 Kodým R. 8L-02
 Kohoutek T. 10P-12
 Kohutová A. 11P-08
 Kohútová M. 1P-04
 Kokoška L. 9L-01
 Kolář J. 10L-03
 Kolář M. 10L-08
 Kolářová P. 6P-03
 Kolesárová I. 9L-02
 Koloros P. 7L-05
 Kołpaczyńska M. 10L-14
 Kolská Z. 5IL-03, 5P-18, 5P-41, 5P-50
 Komárek K. 12P-04
 Komers K. 4L-08
 Konvalinka J. 1IL-02
 Koperska M. 3L-05
 Korabik M. 1L-03, 1P-14
 Kosár K. 11L-01
 Kosina P. 6IL-01
 Košata B. 7P-02
- Košinová P. 4L-07
 Košťál P. 10L-04
 Kotek I. 5L-01
 Kotora M. 2IL-03, 2P-21
 Kotoučová H. 2P-07, 7L-01, 7P-02
 Koubek J. 12IL-01
 Koudelka L. 5P-39, 5P-52
 Koutník P. 5L-04
 Kovářová M. 4L-08
 Koziel P. 10P-08
 Kozubek E. 4P-15, 4P-16
 Kozubková M. 4P-15, 4P-16
 Kožíšek M. 1IL-02
 Kožurková M. 2L-03
 Krajčí J. 5P-19
 Král V. 1IL-02
 Kramarová Z. 12P-05
 Kratochvíl B. 2L-04
 Kräusslich H.-G. 1IL-02
 Krčmová L. 3L-06
 Krejčová A. 12L -06
 Kreps F. 9P-11
 Krištofiková L. 5P-21
 Krivosudská M. 8L-12
 Krmela J. 12P-08
 Kronek J. 5P-35
 Kroupa T. 3P-14
 Krška B. 3P-25, 3P-26
 Kršková J. 5P-34
 Krupková A. 2P-08
 Křen V. 6L-01, 6P-01, 6P-03
 Křišťál J. 8L-02
 Kubáč L. 10L-13
 Kubala D. 4IL-01
 Kubala M. 6IL-01
 Kubička D. 4P-21
 Kubičková K. 12IL-04
 Kubovský I. 8P-02
 Kučerík J. 5P-05
 Kuchár J. 1P-07, 1P-09
 Kuchtanin V. 1L-08, 1P-12
 Kukačková H. 5P-20
 Kulhánek J. 2IL-02, 2P-06, 2P-12
 Kunstová J. 5P-10, 5P-21
 Kurfürst M. 2P-09
 Kutschy P. 3P-16
 Kuzma M. 3IL-01
 Kvítek L. 10L-05, 10L-08, 10L-09, 10P-07, 10P-16
 Kvítek O. 5P-22
 Kwiecien J. 4P -17
- Labuda J. 3L-13
 Lacko M. 5P-06
 Ladman D. 5P-46, 5P-47
 Ladomersky J. 12L-01
 Ľalíková S. 5P-02, 5P-23, 5P-34
 Lambert C. 6P-01
 Langer V. 1P-04
 Langmaier J. 4L-12
 Laník T. 5P -11
- Latika A. 2P-10
 Laurová M. 3P-12, 8P-03
 Lederer J. 8L-04
 Legerská J. 8L-06, 8L-07, 8P-04
 Lehocký P. 7L-09
 Lehocký M. 5L-07
 Leierová V. 2P-11
 Leitner J. 11L-04, 11L-05
 Lemr K. 3IL-01
 Lešková M. 3P-15, 3P-16
 Ličmanová L. 4L-05, 4P-18
 Lichnová A. 9P-06
 Liptaj T. 3L-07
 Lísa M. 3L-04, 3P-20, 3P-28
 Liška F. 7L-01, 7P-02
 Lizák P. 8L-06, 8L-07
 Lofaj M. 4P-19
 Łojewska J. 3L-05
 Lorenc D. 4P-25
 Lucas J. PL-03
 Luňák S. Jr. 2P-03, 4P-20, 10L-13
 Lustig P. 2P-04
 Lušpai K. 4P-20
 Luxová J. 11P-15
 Lyčka A. 2P-03
 Lysková P. 6P-02
 Lyutakov O. 5IL-03, 5P-22
- Macek T. 12IL-01
 Macka M. 3L-10
 Macková M. 12IL-01
 Mach P. 1P-04
 Macháček V. 2P-18
 Maixnerová L. 3P-23
 Majorová P. 10P-14
 Makajová Z. 5P-24
 Malecki A. 11IL-01
 Málek J. 4L-09, 10L-04, 11IL-02, 11P-06, 11P-09, 11P-13, 11P-14
 Mamulová Kutlákova K. 10L-07
 Marek A. 2P-12
 Marhol P. 6L-01
 Marchalín Š. 2L-05, 2P-19, 2P-22
 Markiewicz D. 8L-08
 Marková I. 8L-09, 8P-05
 Marková Z. 10L-16, 10P-11
 Maroszová J. 1P-10
 Márová I. 9P-04, 9P-06, 9P-10, 9P-19
 Maršálek R. 3L-09
 Martiška L. 4P-10
 Martynková G. S. 10IL-02, 10P-14
 Masár M. 3S-03
 Matejdes M. 4P-30, 10L-06
 Matějková E. 5P-25, 5P-30
 Matoušková M. 8P-07
 Matulková I. 4P-13
 Matysik F. M. 3P-11
 May O. 4IL-01, 4P-01
 Mazúr M. 1L-10, 4P-10
 Mazurová J. 6P-02
 Mečiarová M. 2P-02

- Medvecká J. 1P-11
 Medvecký M. 2P-13, 9P-17
 Melánová K. 5L-21, 5P-45
 Melar J. 5L-05
 Melicherčík M. 4IL-07
 Melník M. 1L-10
 Meloun M. 3P-06
 Menc P. 5P-26
 Mencl K. 6P-02
 Mešková M. 2P-14
 Micova J. 3P-17
 Mieczkowska J. 10L-14
 Michałowski T. 1L-02
 Michl J. PL-04, 4IL-03
 Miklík J. 5L-12, 5P-27
 Mikloš D. 1L-08, 1P-12
 Miklovič J. 1P-12
 Mikulášek P. 12IL-02
 Mikulíková Z. 9P-19
 Milata V. 2L-01, 2L-06, 4P-05, 7L-08
 Milichovský M. 5L-06, 5P-09
 Mináriková E. 10P-09
 Minko E. 5L-16
 Mitas L. 4IL-05
 Mitasová I. 1P-12
 Mokáňová R. 9P-05, 9P-16
 Molárová J. 9P-15
 Molenda M. 10L-15
 Moncol J. 1L-03, 1L-08, 1P-10, 1P-11, 1P-14
 Moravčíková D. 2IL-01
 Mošner P. 5P-52
 Mravcová L. 12IL-04
 Mravčáková M. 8L-03
 Mrvová L. 8L-06
 Muntágová Ľ. 7L-12
 Murárová A. 8P-04
 Murárová Z. 8P-04
 Musilová J. 3P-18, 9P-02, 9P-07
 Musilová L. 12IL-01
 Myslíkovjanová L. 11L-06

 Nádherná M. 3L-08, 5L-13
 Nagyová S. 12P-03
 Nachtigall P. 4L-16
 Narewska J. 5P-28
 Navrátilová J. 3S-04
 Navrátilová Z. 3L-09
 Němcová L. 3P-19
 Nemeč I. 1L-05
 Nemeč P. 10IL-01, 10P-04
 Neogrady P. 4IL-07
 Nešetřilová M. 5P-29
 Netušilová K. 3L-04, 3P-20
 Neuwirthová L. 10L-07
 Nevřiva M. 11L-05
 Nezbeda I. 4L-10
 Noga J. 4P-14
 Novák F. 3P-21
 Novák I. 5L-07, 5P-06, 5P-34, 5P-35
 Novák L. 8IL-02

 Novák O. 4P-13
 Novák P. 3L-12
 Novotná D. 4P-13
 Novotná R. 1L-04
 Novotný L. 12IL-03, 12P-06
 Novotný V. 3P-22

 Obrdlík Š. 5P-25, 5P-30
 Obruča S. 9P-19
 Olejník R. 1L-06
 Olšovský M. 5P-02, 5P-23
 Ondrušová D. 5P-02, 5P-23
 Opekar F. 3L-08
 Opravilová J. 5L-08
 Orava J. 10P-12
 Oravová L. 11P-07
 Oriňák A. 5L-02, 12L-01
 Oriňáková R. 5L-02, 12L-01
 Oslovičová V. 9P-08
 Oswald J. 10P-13
 Otáhal R. 5P-31
 Otyepka M. 4L-07
 Ouzzane I. 10L-13

 Padělková Z. 1L-06, 1P-10, 1P-13
 Pach L. 5P-08, 5P-15
 Páidarová I. 4L-05, 4P-18
 Pajtášová M. 5P-02, 5P-23
 Palarčíková J. 11P-02
 Palenčárová E. 9P-09
 Pálka K. 5P-32
 Pálszegi T. 4P-11
 Panáček A. 10L-05, 10L-08, 10L-09, 10P-16
 Pankráčová A. 3S-05
 Panyala N. R. 5P-01
 Parchanski V. 5P-33, 10IL-01
 Pařízek M. 5P-16
 Pašteka L. F. 4P-28
 Patoprsty V. 3P-17
 Paulíková H. 2L-03
 Pavela R. 6P-05
 Pavlík J. 1L-05
 Pavlíková P. 3S-06, 9P-03
 Pavlišta M. 10P-12
 Pazdziora E. 10L-02, 10P-05
 Pecková K. 3L-01, 3P-18, 3P-23
 Pečová M. 10L-16, 10P-11
 Pelikánová K. 5P-11
 Peller A. 11P-10
 Pěnčíková K. 6P-06
 Pěnkavová V. 10P-10
 Peřinka N. 5L-09
 Peš O. 3S-04
 Peterka M. 7L-12
 Petrik S. 9P-10
 Petřílková E. 2L-11, 2P-15
 Petrovaj J. 3P-15, 3P-16
 Pflieger J. 5L-10
 Piasecki T. 3L-10
 Pitoňák M. 4IL-07

 Pittner J. 4P-14
 Piwowarska Z. 10L-15
 Plachá D. 10IL-02
 Platoš P. 4P-16
 Plešek J. 11L-02
 Pociecha D. 10L-14
 Počarovský P. 5P-02, 5P-23, 5P-34
 Podjuklová J. 5P-11
 Podmanický S. 7L-12
 Podoliak N. 2P-05
 Podsiadły R. 5P-28
 Podzemná V. 11P-07, 11P-08, 11P-11
 Poehlmann R. 5P-36
 Pokorná J. 11L-02
 Pól J. 3L-12
 Poláková K. 10L-16, 10P-11
 Polakovičová P. 1L-08
 Polan V. 3P-24
 Polášek M. 4P-13
 Polášková P. 12P-06
 Ponomarov O. 2P-16
 Popa I. 1L-04
 Popelka A. 5L-07, 5P-35
 Porubská M. 5L-11
 Pospíšilová M. 10P-11
 Pospíšková K. 10L-16, 10P-11
 Potočňák I. 1P-17, 1P-18
 Potůček F. 5L-12, 5P-27
 Pravda M. 2P-01
 Preisler J. 3S-04
 Prieceľ P. 4P-21
 Procházka M. 4P-22
 Procházková M. 3S-07
 Prokůpek L. 5P-51
 Pruček R. 10L-05, 10L-08, 10L-09, 10P-03, 10P-09
 Příbylová H. 5P-32, 5P-36
 Příhoda J. 5L-01
 Přichystalová H. 5P-37
 Přikryl J. 10P-01, 10P-08, 10P-12, 10P-20
 Puchoňová M. 1P-14
 Purchartová K. 6L-01
 Putala M. 2L-07, 2P-14
 Pytela O. 2IL-02, 2L-08

 Rábara L. 4L-11
 Rafaja D. 10IL-03
 Rafalska-Łasocha A. 10L-15
 Rajec P. 3P-10
 Rapta P. 4IL-04, 4P-20
 Raschman P. 8L-10
 Reháč J. 2P-10
 Reháková M. 12P-03
 Reiter J. 3L-08, 5L-13, 5P-38
 Ren J. 10P-13
 Repická Z. 1P-14, 4P-10
 Revťáková M. 3P-07
 Revús M. 7L-08
 Rimpelová S. 5P-16
 Roesky H. W. PL-05

- Rohlíček J. 2L-04
 Rochová K. 6P-04
 Rollová J. 3P-02
 Rompel A. 1P-05
 Rosskopfová O. 3P-10
 Rösslerová I. 5P-39
 Roubíček P. 5L-04
 Rozlívková Z. 5P-07
 Růžička A. 1L-06, 1P-08, 1P-13
 Růžička K. 11L-04
 Ružičková S. 3P-07
 Ružinská E. 5L-14, 5P-40, 8P-05
 Rymeš J. 2P-04
 Rypáček F. 8IL-03

 Řehák K. 4L-17
 Řezáčová P. 11L-02
 Řezanka P. 5P-16
 Řezníček T. 1L-07
 Řezníčková A. 5P-12, 5P-13, 5P-18, 5P-41

 Sabol M. 1P-18
 Sabolová D. 2L-03
 Sabolová M. 2P-13
 Sajdl P. 5P-41, 5P-50
 Sajfřtová M. 6P-04, 6P-05
 Salayová A. 3P-16
 Samec Z. 4L-12
 Samlíková M. 10L-02
 Sazama P. 8IL-04
 Sedlák M. 2IL-04, 2L-10, 3P-27
 Sedlářová I. 8P-08
 Sedmidubský D. 5IL-02, 11L-04, 11L-05
 Segřa P. 1L-08, 1P-12
 Seidlerová J. 8P-01, 10L-10, 10P-14
 Sekretář S. 9L-02, 9P-11
 Semerák P. 5P-47
 Setnička M. 10P-15
 Sharf A. 5L-10
 Shestivska V. 4P-13
 Schmidová E. 5L-17
 Schmidt Š. 9L-02, 9P-11
 Schroeter S. 5P-36
 Schwarz J. 5L-15
 Siegel J. 5IL-03, 5P-12, 5P-22, 5P-42, 5P-43
 Sivák J. 3P-12
 Sivera M. 10P-16
 Skalická P. 7P-01
 Sklenář V. 4L-13
 Sklenářová H. 3P-15
 Skopal F. 4P-07, 4P-17
 Skultety L. 3P-17
 Slavík M. 7L-03, 7L-06
 Slavík R. 5L-08
 Slepíčka P. 5IL-03, 5P-16, 5P-22, 5P-42, 5P-43, 5P-50
 Slepíčková Kasálková N. 5P-16, 5P-24
 Slivková P. 5P-44

 Slížik L. 2IL-01
 Slovák V. 11L-06
 Smejkal P. 3L-10
 Smoláková L. 4P-06, 4P-23
 Smrčková E. 5P-08
 Snop R. 8P-06
 Sobalík Z. 8IL-04
 Sobotka L. 3L-06
 Sofer Z. 11L-04
 Socha F. 5L-01
 Sochor J. 3P-25, 3P-26
 Sokolowska J. 5P-28
 Solich P. 3L-06, 3P-15, 3S-10
 Solichová D. 3L-06
 Solnička O. 2P-07
 Sovová H. 6P-04, 6P-05
 Stehlík Š. 10L-03, 10L-11, 10L-12
 Stejskal J. 5P-07, 5P-20
 Stejskalová K. 7L-07, 7P-06
 Stepanov B. 10P-17
 Stoličková M. 1P-11
 Storch J. 2P-17
 Strašák T. 1L-09, 2P-09
 Strnadlová L. 11P-12
 Strohaln M. 3L-12
 Strzelczyk R. 5P-28
 Stržizík L. 10P-18
 Stuchlík M. 12P-07
 Stupavská M. 3S-08, 4P-22
 Svешnikov A. 5P-46, 10P-19
 Svoboda J. 2P-05, 5L-21, 5P-45
 Svoboda K. 8IL-04
 Svoboda L. 5P-51, 8P-07, 10P-02, 11P-08, 11P-11
 Svoboda P. 11L-04
 Svoboda R. 4L-09, 11P-06, 11P-13, 11P-14
 Svoboda T. 1P-15
 Svobodová M. 2P-18
 Svorec J. 1L-10
 Svrčková P. 4P-24
 Sýkora J. 2P-09, 2P-17, 3L-11
 Synek P. 5P-01
 Syrový T. 5P-49
 Sysel P. 5L-16
 Syslová K. 3S-05, 3S-09
 Szöcs V. 4P-11
 Szöllös O. 5L-11

 Šafář P. 2L-05, 2P-19, 2P-22
 Šafařík M. 2P-20
 Šafaříková M. 12P-04
 Šebela M. 10L-16, 10P-11
 Šebesta R. 2L-09
 Šebestík J. 2P-20
 Šelešovská R. 12L-04, 12L-05, 12P-01
 Šepelák J. 4P-25
 Šeršeň F. 9L-03
 Šesták J. 7IL-03
 Šestauberová M. 3P-21
 Šicha V. 11L-02

 Šilha T. 1P-16
 Šimánek V. 6IL-01
 Šimková K. 3S-09
 Šimon P. 11IL-03, 11L-01, 11P-10
 Šimůnek P. 2P-18
 Šindelář Z. 1P-16
 Šlouf M. 4P-12
 Šmarda J. 3S-04
 Šmejkalová D. 4P-26
 Šnajdr I. 2P-21
 Špaček V. 5L-01
 Špendlíková I. 12P-08
 Štarha P. 1L-11
 Štefelová J. 11L-06
 Štefušová K. 8L-10
 Štěpánková Š. 2P-12, 4L-08
 Števiar M. 5L-07, 5P-35
 Štíbr B. 1P-01, 1P-08
 Štich I. 4IL-05
 Štrympl P. 10L-10
 Šulc M. 3IL-01
 Šulcová P. 11L-07, 11P-01, 11P-02, 11P-03, 11P-04, 11P-05, 11P-12, 11P-15
 Šulcová R. 7P-07
 Šupinová P. 9P-01, 9P-12
 Šupová K. 5P-12
 Šupová M. 10IL-04
 Šustek S. 8P-07
 Švanda P. 5L-17
 Švorc E. 2P-19
 Švorčík V. 5IL-03, 5P-12, 5P-16, 5P-18, 5P-22, 5P-24, 5P-41, 5P-42, 5P-43, 5P-50
 Švorec J. 1L-08

 Táborská E. 6P-06
 Taraba B. 3L-09
 Tejkl M. 5L-18
 Tejral G. 5P-01
 Tesařová D. 5L-19
 Tesařová E. 4P-13, 6P-03
 Tihon J. 10P-10
 Tichá H. 5L-15
 Tichá P. 5P-46, 5P-47, 10P-19
 Timoracká M. 9P-17
 Toma Š. 2L-09
 Tomáš J. 9P-07, 9P-13
 Tomka M. 9P-08
 Tóth J. 9P-14
 Tóth T. 9P-14
 Tóthová E. 2P-19
 Toufarová M. 5P-48
 Trávníček Z. 1L-04, 1L-11, 1P-16
 Trebichalský P. 9P-14, 9P-15
 Trenčanová M. 4P-27
 Trchová M. 5L-21, 5P-07
 Trojan M. 11P-01, 11P-04, 11P-05
 Trojáněk A. 4L-12
 Trouillas P. 4L-07
 Tukač V. 8L-04, 8P-06

- Turčičová H. 4P-13
Turjan J. 11P-16
Tvaroška I. 4L-14
Týčová K. 3P-27
Tylšová L. 5P-49
- Uher M. 7L-08
Uhlár J. 7L-09, 11L-01
Uhlík O. 12IL-01
Uhlířová T. 5P-38
Ulrichová J. 6IL-01
Ungvarský J. 2L-03
Urban M. 4IL-07, 4P-28
Urbánek L. 3L-06
Urbanová J. 6P-06
Urbanová K. 7L-10
- Vacek J. 6IL-01
Vaculovič T. 3S-04
Vala M. 10L-13, 4P-20
Valašková M. 10IL-02, 10L-02, 10P-05
Valigura D. 1L-03, 1P-10, 1P-11, 1P-14, 4P-10
Valko M. 4IL-06, 1L-10, 4P-08, 4P-10
Valková S. 10P-20
Váňa J. 2L-10
Vandlíčková M. 10L-05
Vaňkátová H. 1L-06
Vargová A. 4P-20
Vasileská M. 7P-07
Vasina A. 5P-13, 5P-41, 5P-50
Vasková Z. 1P-10
Vavra M. 1P-17
Vávrová M. 12IL-04
Večeřa M. 5P-51
Velebný V. 2P-01, 2P-11, 4P-26
Velič D. 3S-08, 4L-11, 4P-11, 4P-19, 4P-22, 4P-25, 4P-27
Velínská H. 3P-28
Ventura K. 3P-05, 3P-09, 3P-27, 3S-06, 6P-02, 9P-03
- Veselý D. 5L-03, 5L-17, 5P-14, 5P-25, 5P-26
Veselý V. 8L-04, 8L-11
Vídenský J. 8P-08
Vidláková P. 12L-04
Vidová V. 3IL-01, 3L-12
Vinklárek J. 1L-01
Vítek A. 4L-05, 4P-18, 4P-24
Vitová E. 9P-01, 9P-05, 9P-16
Vizárová K. 11P-10
Vlckova S. 3P-17
Vlček M. 10L-01, 10L-03, 10L-11, 10P-01, 10P-04, 10P-12, 10P-18, 10P-20
Vlček Mir. 5L-20, 5P-32, 5P-36, 7L-11
Vlčková B. 4L-15
Vlčková H. 3S-10
Vlčková V. 7L-11
Voleská I. 4L-16
Vollárová O. 4P-09
Vollmannová A. 9P-02, 9P-14, 9P-15, 9P-17
Volný M. 3IL-01, 3L-12, 3P-13
Vondráčková H. 9P-06
Vondrášek M. 11P-03, 11P-12
Vondruška M. 5L-05, 5L-08
Voňka P. 4L-17
Voráč Z. 5L-01
Vorlíček V. 5P-48
Vosejpková K. 5P-52
Vranec P. 1P-18
Vrublová E. 6IL-01
Vu D. L. 9P-18
Vyňuchal J. 2P-03, 4P-20, 10L-13
Vyňuchalová K. 2P-03
Vyskočil V. 3L-01, 3L-13
Vytřas K. 3P-24
Vytřasová J. 5P-37
- Wágner T. 10IL-01, 10L-01, 10L-03, 10L-11, 10L-12, 10P-01, 10P-13, 10P-17, 10P-18, 10P-20
- Waisser K. 2L-11, 2P-15
Walterová Z. 2P-08
Wang S.-L. 5P-45
Wanner J. 12IL-05
Weidlich T. 12L-06
Wein O. 10P-10
Weiter M. 4P-20, 10L-13
Wenchich Š. 7L-12
Wichterlová B. 8IL-04
Wimmer Z. 6IL-02
Wójcik M. 10L-14
- Yang Y.-C. 5P-45
Yavorska O. 3L-10
Yosypchuk O. 3L-01
- Zacher T. 4P-29
Zaitz M. M. 10L-15
Zajíčková L. 5P-01
Zajoncova L. 10L-16, 10P-11
Zákostelná B. 7P-07
Zámostný P. 12L-01
Zavázalová J. 3P-23
Zawada Z. 2P-20
Zbořil R. 4P-23, 10L-05, 10L-08, 10L-09, 10L-16, 10P-11
Zeleňák V. 1P-06
Zelenka J. 10P-02
Zemanová J. 9P-05, 9P-16
Zemanová M. 8L-12, 8P-06
Zich D. 4P-30
Zima J. 3L-02, 3L-14, 3P-19,
Zima V. 5L-21, 5P-31, 5P-45, 10L-03, 10L-11, 10L-12
Zítka O. 3P-25, 3P-26
Zmrhalová Z. 11IL-02, 11P-09
Zouhar L. 12IL-04
Zouharová L. 9P-19
- Žitňan M. 4P-11
Žúžiová J. 2L-05, 2P-22, 2P-19

OBSAH		CONTENTS	
Úvodník	397	Editorial	397
Plenární přednášky	401	Plenary Lectures	401
Sekce 1	403	Section 1	403
Sekce 2	421	Section 2	421
Sekce 3	441	Section 3	441
Sekce 4	469	Section 4	469
Sekce 5	498	Section 5	498
Sekce 6	537	Section 6	537
Sekce 7	543	Section 7	543
Sekce 8	556	Section 8	556
Sekce 9	570	Section 9	570
Sekce 10	582	Section 10	582
Sekce 11	603	Section 11	603
Sekce 12	618	Section 12	618
Seznam příspěvků	632	Contents	632
Autorský rejstřík	653	Author's Index	653

CHEMICKÉ LISTY • ročník/volume 104 (2010), čís./no. 6 • LISTY CHEMICKÉ, roč./vol. 134, ČASOPIS PRO PRŮMYSL CHEMICKÝ, roč./vol. 120 • 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), 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: M. Černá, L. Červený, E. Dibuszová, J. Hanika, Z. Havlas, I. Kadlecová, J. Káš, M. Koman, 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. Šulcová, T. Wágner, M. Frumar, R. Svoboda • TISK: Rodomax s.r.o., Rezecká 1164, 549 01 Nové Město nad Metují; SAZBA, ZLOM: ČSCH, Chemické listy • Copyright © 2010 Chemické listy/Česká společnost chemická • Cena výtisku 170 Kč, roční plně předplatné 2010 (12 čísel) 1730 Kč, individuální členské předplatné pro členy ČSCH 865 Kč. Roční předplatné ve Slovenské republice 92 EUR (doručování via SCHS), individuální členské předplatné pro členy ČSCH 70 EUR (doručování via SCHS), 258 EUR (individuální doručování), ceny jsou uvedeny včetně DPH • DISTRIBUTION ABROAD: KUBON & SAGNER, POB 34 01 08, D-80328 Munich, FRG; Annual subscription for 2010 (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 zasílány 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: P. Holý • Dáno do tisku 26.5.2010.