

77. ZJAZD CHEMIKOV

1. – 5. september 2025
Vysoké Tatry, Horný Smokovec

HLAVNÍ ORGANIZÁTOR

Slovenská chemická spoločnosť



v spolupraci s Českou společností chemickou



ORGANIZAČNÝ VÝBOR

Predseda: **Monika Jerigová**
Vedecký tajomník: **Ľubomír Švorc**
Hospodárka: **Michaela Halinkovičová**
Výkonný tajomník: **Miroslav Michalka**
Technický tajomník: **Michal Procházka**
Organizátor za ČSCH: **Tomáš Navrátil**

Hlavný sponzor



PROGRAMOVÝ VÝBOR

- Doc. RNDr. Monika Jerigová, PhD. - Slovenská chemická spoločnosť
Prof. Ing. Ľubomír Švorc, DrSc. - Slovenská chemická spoločnosť
Prof. Ing. Peter Šimon, DrSc. - Slovenská chemická spoločnosť
Prof. Ing. Viktor Milata, DrSc. - Slovenská chemická spoločnosť
Doc. Ing. Zuzana Cibulková, PhD. - Slovenská chemická spoločnosť
Prof. RNDr. Renáta Oriňáková, DrSc. - Slovenská chemická spoločnosť
Doc. Ing. Ivan Šalitroš, DrSc. - Slovenská chemická spoločnosť
RNDr. Dalma Gyepesová, CSc. - Slovenská chemická spoločnosť
Doc. RNDr. Andrej Boháč, CSc. - Univerzita Komenského v Bratislave
Mgr. Martin Danko, PhD. - Slovenská akadémia vied v Bratislave
Doc. RNDr. Mária Ganajová, CSc. - Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach
RNDr. Slávka Hamuláková, PhD. - Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach
RNDr. Rastislav Serbin, PhD. - Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach
Ing. Ján Hirsch, DrSc. - Slovenská akadémia vied v Bratislave
Doc. PaedDr. Katarína Kotuláková, PhD. - Trnavská univerzita v Trnave
Ing. Elena Kulichová - Stredná odborná škola Nováky
Doc. Ing. Tomáš Mackulák, PhD. - Slovenská technická univerzita v Bratislave
Prof. RNDr. Martin Putala, PhD. - Univerzita Komenského v Bratislave
Doc. Ing. Milena Reháková, PhD. - Slovenská technická univerzita v Bratislave
Prof. Mgr. Radovan Šebesta, DrSc. - Univerzita Komenského v Bratislave
Doc. Ing. Radko Tiňo, PhD. - Slovenská technická univerzita v Bratislave
Prof. Ing. Michal Uher, DrSc. - Slovenská technická univerzita v Bratislave
Prof. RNDr. Zuzana Vargová, PhD. - Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach
RNDr. Beata Vranovičová, PhD. - Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave

PROGRAM 77. ZJAZDU CHEMIKOV**Pondelok 1. 9. 2015**

- 13:00 – 17:00 Príchod účastníkov a registrácia
- 17:00 – 22:00 Slávnostné otvorenie zjazdu, **plenárna prednáška: Martin Venhart**,
uvítací večierok

Utorok 2. 9. 2015

- 08:30 – 09:20 Pozvaná prednáška: Katarína Furdíková
- 09:40 – 12:00 Prednášky
- 12:00 – 13:30 Obed
- 13:30 – 14:20 Pozvaná prednáška: Lenka Lorencová
- 14:40 – 17:40 Cena Shimadzu, prednášky
- 18:00 – 20:00 Večera
- 20:00 – 24:00 Posterové prezentácie, pivno-vínny večer

Streda 3. 9. 2015

- 08:30 – 09:20 Pozvaná prednáška: Michal Májek
- 09:40 – 12:10 Prednášky
- 12:15 – 13:30 Obed
- 13:30 – 14:20 Pozvaná prednáška: Petr Krtíl
- 14:30 – 17:30 Prednášky
- 18:00 – 20:00 Večera
- 20:00 – 24:00 Odovzdávanie ocenení, vyhodnotenie súťaží, slávností večierok

Štvrtok 4. 9. 2015

- 09:00 – 09:50 Pozvaná prednáška: Erik Sedlák
- 10:00 – 12:40 Prednášky
- 13:00 – 14:00 Obed
- 14:00 – 18:30 Workshop Metrohm
- 18:30 – 20:00 Večera
- 20:00 – 24:00 Večierok Metrohm

Piatok 5. 9. 2015

- 08:30 – 12:45 Workshop Metrohm
- 12:45 – 14:00 Obed

SEKCIE ZJAZDU A GARANTI

1. Analytická chémia a fyzikálna chémia

Garantka: prof. RNDr. Renáta Oriňaková, DrSc.

Ústav chemických vied, PF UPJŠ v Košiciach

2. Anorganická chémia a materiálová chémia

Garant: doc. Ing. Miroslav Boča, DrSc.

Ústav anorganickej chémie SAV, v.v.i.

3. Organická chémia a polyméry

Garant: prof. RNDr. Martin Putala, PhD.

Katedra organickej chémie, PriF UK v Bratislave

4. Vyučovanie, popularizácia a história chémie

Garantka: doc. PaedDr. Katarína Kotuláková, PhD.

Katedra chémie, PdF TRUNI v Trnave

5. Chemprogress - chemické technológie

Garant: prof. Ing. Ján Híveš, PhD.

Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, FCHPT STU v Bratislave

Garant súťaže posterov

doc. Ing. Zuzana Cibul'ková, PhD.

Ústav fyzikálnej chémie a chemickej fyziky, FCHPT STU v Bratislave

PLENÁRNA PREDNÁŠKA

PLP **Martin Venhart** „Bude oganesón posledný?”

ZOZNAM POZVANÝCH PREDNÁŠOK

- | | | |
|-----|---------------------------|---|
| PP1 | Katarína Furdíková | Vinum regum, rex vinorum: Tokaj – skrytý klenot slovenského vinárstva |
| PP2 | Lenka Lorencová | MXény: perspektíva z pohľadu bio/senzorov |
| PP3 | Michal Májek | Reakcie vyvolané prenosom elektrónu – pomocou svetelnej, elektrickej a mechanickej energie |
| PP4 | Petr Krtil | Racionální design (elektro)katalyticky aktivních materiálů – základ energetické koncepce třetího tisíciletí |
| PP5 | Erik Sedlák | Metódy evolúcie proteínov vo vývoji enzýmov |

OBSAH

ZOZNAM PREDNÁŠOK A POSTEROV PODĽA SEKCIÍ

Plenárna prednáška..... 66

BUDE OGANESÓN POSLEDNÝ? <u>Martin Venhart</u>	66
--	----

Pozvané prednášky 66

PP1 VINUM REGUM, REX VINORUM: TOKAJ – SKRYTÝ KLENOT SLOVENSKEHO VINÁRSTVA <u>Katarína Furdíková</u> , Ivan Špánik.....	66
PP2 MXÉNY: PERSPEKTÍVA Z POHLADU BIO/SENZOROV <u>Lenka Lorencová</u>	67
PP3 REAKCIE VYVOLANÉ PRENOSOM ELEKTRÓNU – POMOCO SVETELNEJ, ELEKTRICKEJ A MECHANICKEJ ENERGIE <u>Michal Májek</u>	67
PP4 RACIONÁLNI DESIGN (ELEKTRO)KATALYTICKY AKTIVNÍCH MATERIÁLŮ – ZÁKLAD ENERGETICKE KONCEPCIE TŘETÍHO TISÍCILETÍ <u>Petr Krtil</u>	68
PP5 METÓDY EVOLÚCIE PROTEÍNOV VO VÝVOJI ENZÝMOV <u>Erik Sedlák</u> , Ivana Timková, Veronika Holotová.....	68

Prednášky - Sekcia 1: Analytická chémia a fyzikálna chémia 69

1P01 PILOTNÍ STUDIE ELEKTROCHEMICKÉ REDUKCE VYBRANÝCH NUKLEOTIDŮ A DVOUVLÁKNOVÉ DNA NA NEMODIFIKOVANÝCH MIKROKRISTALICKÝCH DIAMANTOVÝCH ELEKTRODÁCH DOPOVANÝCH BOREM PŘI VELMI NEGATIVNÍCH POTENCIÁLECH <u>Michal Augustín</u> , Vlastimil Vyskočil, Ondrej Szabó, Kateřina Aubrechtová Dragounová, Jiří Barek, Marián Marton, Alexander Kromka	69
1P02 ODSTRANĚNÍ KONTAMINANTŮ Z VOD POMOCÍ AKTIVNÍHO UHLÍ NA BÁZI ŠÍŠEK BOROVICE ČERNÉ <u>Jan Bednárek</u> , Michal Vaštyl, Anna Gavlová, Adam Hruška	69
1P03 VOLTAMETRICKÉ CHOVÁNÍ OXYSTEROLŮ <u>Eva Bláhová</u> , Jana Kubešová, Kristýna Michnová, Karolina Schwarzová-Pecková	70
1P04 ROZLOŽITELNÉ ZINKOVÉ BIOMATERIÁLY S PLA POVLAKOM <u>Viktória Čákyová</u> , Ivan Shepa, Renáta Oriňáková	70
1P05 REDUCTION OF AZO DYES IMMOBILIZED ON THE SURFACE OF BORON DOPED DIAMOND ELECTRODE FOR FURTHER BIOFUNCTIONALIZATION <u>Peter Čambal</u> , Aashutosh Dube, Karolina Schwarzová-Pecková	71

1P06 ŠTÚDIUM ELEKTRODEPOZÍCIE VYBRANÝCH KOVOV Z IÓNOVÝCH KVAPALÍN <u>Michal Fícel</u> , Miroslava Semelová, Kateřina Čubová	71
1P07 DEPOZÍCIA HYDROXYAPATITU NA PRÁŠKOVÝ ZINOK AKO VÝCHODISKOVÝ MATERIÁL PRE PRÍPRAVU BIODEGRADOVATEĽNÝCH IMPLANTÁTOV <u>Radka Gorejová</u> , Ivana Mojžišová, Renáta Oriňaková	72
1P08 THE CARLA PROGRAMS AS A FRAMEWORK FOR MULTIDISCIPLINARY CAREER PATHWAYS IN PHOTONICS <u>Daniel Haško</u> , Jozef Chovan	72
1P09 CHEMICKÉ SLOŽENÍ PODZEMNÍCH VOD V DEMÁNOVSKÉ DOLINĚ JAKO NÁSTROJ PRO HLEDÁNÍ SOUVISLOSTÍ MEZI JESKYNNÍMI SYSTÉMY ŠTEFANOVÁ A DEMÁNOVÁ <u>David Havlíček</u> , Pavel Herich, <u>Kateřina Havlíčková</u>	73
1P10 ON-SITE DETECTION OF SALINOMYCIN USING TUNED AMALGAM PRINTED ELECTRODE PLATFORMS <u>Sofia Ivakh</u> , Jiří Barek.....	73
1P11 VYUŽITIE ZLATÝCH NANOČASTÍC PRI DETEKCII RÔZNYCH BIOANALYTOV <u>Nikola Jašňáková</u> , Jana Shepa, Ivana Šišoláková, Renáta Oriňaková	74
1P12 VALIDÁCIA PRACOVNÉHO POSTUPU NA STANOVENIE UHLÍKA-14 VO VZORKÁCH POCHÁDZAJÚCICH Z JADROVÝCH ZARIADENÍ <u>Dominik Juračka</u> , Oľga Rosskopfová, Michal Galamboš	74
1P13 MATERIÁLY PRO SELEKTIVNÍ ADSORPCI BIOMOLEKUL <u>Samuel Kowalczyk</u> , Václav Slovák.....	75
1P14 LPME AKO ÚČINNÁ TECHNIKA PRE IZOLÁCIU ANALYTOV Z KOMPLEXNÝCH VZORIEK <u>Elena Kupcová</u>	75
1P15 MUCHOVNÍK – ZDROJ ANTIOXIDAČNE AKTÍVNYCH LÁTKO <u>Kristína Masnicová</u> , Ondrej Hruška, František Kreps, Natália Smolárová	75
1P16 FENTANYLY, JEJICH DERIVÁTY A SMĚSI S JINÝMI NÁVYKOVÝMI LÁTKAMI – JEJICH ANALÝZA A FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÉ CHARAKTERIZACE <u>Tomáš Navrátil</u> , Jana Skopalová, Jan Langmaier, Vojtěch Hrdlička.....	76
1P17 OD VANÁDU K ORGANICKÝM MOLEKULÁM: NOVÁ GENERÁCIA ELEKTROLYTOV PRE PRIETOKOVÉ BATÉRIE <u>Veronika Niščáková</u> , Andrea Straková Fedorková, Miroslav Almáši, Nikolas Király, Juan Pascual Asenjo.....	77
1P18 INOVATÍVNE KATALYZÁTORY PRE ELEKTROCHEMICKÝ ROZKLAD VODY <u>Renáta Oriňaková</u> , Magdaléna Strečková, Alexandra Gubóová, Natália Podrojková, Mária Paračková	77
1P19 VÝVOJ A CHARAKTERIZÁCIA VIACPRVKOVÉHO KATALYZÁTORA PRE ALKALICKÚ ELEKTROLÝZU VODY <u>Mária Paračková</u> , Renáta Oriňaková, Magdaléna Strečková, Michal Ivanisko.....	78

1P20 PRECHODNÉ KOVOVÉ FOSFIDY AKO PERSPEKTÍVNE ELEKTROKATALYZÁTORY PRE REAKCIU VYLUČOVANIA VODÍKA <u>Natália Podrojková</u> , Alexandra Gubóová, Magdaléna Strečková, Renáta Oriňaková	78
1P21 REDOX ACTIVITY AND CYTOTOXICITY OF COPPER AND ZINC COMPLEXES WITH A TMS-SUBSTITUTED INDOLO [2,3-C]QUINOLINE-DERIVED SCHIFF BASE <u>Peter Rapta</u>	79
1P22 GLUKÓZOVÉ SENZORY NA BÁZE TiO ₂ MATERIÁLOV <u>Jana Shepa</u> , Richard Filip, Ivan Shepa, Nikolas Király, Ivana Šišoláková, Renáta Oriňaková	79
1P23 ELECTROCHEMICAL CELLS WITH BORON DOPED DIAMOND ANODES FOR OF OXIDATION OF XENOBIOTICS <u>Karolina Schwarzová-Pecková</u> , Lucie Pražáková, Martin Šefčík, Mikuláš Zich, Sanay Prakash, Paweł Lochyński, Andrew Taylor, Jan Fischer	80
1P24 VSÁDZKOVÁ INJEKČNÁ ANALÝZA S ELEKTROCHEMICKOU DETEKCIU AKO UŽITOČNÝ PROSTRIEDOK V POTRAVINÁRSKEJ A FARMACEUTICKEJ PRAXI <u>Ľubomír Švorc</u> , Soňa Slašťanová, Monika Čerňanská, Simona Nutterová, Marek Haško	81

Prednášky - Sekcia 2: Anorganická chémia a materiálová chémia.....	82
---	-----------

2P01 MECHANOCHEMICKÁ SYNTÉZA HYDROXYAPATITU ZA VYUŽITIA VAJEČNEJ ŠKRUPINY: PREDPOKLADY A PRVÉ EXPERIMENTY <u>Matej Baláž</u> , Fanni Rontová, Bronislava Pokorná, Kamil Szmuc, Yaroslav Shpotyuk, Lenka Luptáková, Eva Petrovová	82
2P02 SYNTHESIS OF Ti ₃ C ₂ T _x MXENE BY ETCHING WITH VARIOUS FLUORIDES <u>Marek Baráth</u> , Barbora Alföldyová, Pavol Farkaš, Andrej Vikartovský, Ľubomír Orovčík, Monika Jerigová, Peter Kasák, Ján Tkáč, Lenka Lorencová	82
2P03 KEY ASPECTS IN CORROSION OF SUPERALLOYS IN MOLTEN FLUORIDE SALTS <u>Miroslav Boča</u> , Viliam Pavlík, Ramu Ambati, Niketan Patel	83
2P04 MAGNETOAKTÍVNE ZLÚČENINY MEDI- CESTA KOVOVÝCH KOMPLEXOV K CIEĽU MOLEKULY DNA <u>Michaela Červeňáková</u> , Ján Titiš	84
2P05 LIGHT-INDUCED ISOMERIZATION OF AZOPHENYL MOIETY IN SCO ACTIVE Fe(II) COMPLEX <u>Oliver Čierny</u> , Alexandra Šagátová, Jakub Orvoš, Ján Moncol', Ivan Šalitraš.....	84
2P06 NEW ACTIVE SITE FOR ACTIVATION OF MOLECULAR OXYGEN BY SPLITTING – NON-PARALLEL NON-AXIAL BINUCLEAR Fe SITES <u>Jiří Dědeček</u> , Štěpán Sklenák.....	85
2P07 OPTIMALIZACE SYNTÉZY MAKROCYKLICKÝCH LIGANDŮ S VYUŽITÍM LINEÁRNÍCH PUMP A PRŮTOČNÉHO REAKTORU <u>Bohuslav Drahoš</u> , Eva Zahradníková	85

2P08 UDRŽATEĽNÁ MODIFIKÁCIA 3D TLAČENÝCH UHLÍKOVÝCH SENZOROV: PLAZMOVÁ DEGRADÁCIA PLA A ELEKTROPOLYMERIZÁCIA VODIVÉHO POLYMÉRU PEDOT <u>Katarína Gregová</u> , Miroslav Kováč, Ľubomír Švorc, Sladana Đurđić, Pavol Gemeiner	86
2P09 VYUŽITIE KVANTOVEJ CHÉMIE PRE VÝSKUM MAGNETIZMU KOMPLEXOV ŽELEZA <u>Radovan Herchel</u>	87
2P10 VYUŽITIE BIOCHARU V SIEŤOTLAČENÝCH ELEKTROCHEMICKÝCH SENZOROCH NA DETEKCIU SARKOZÍNU <u>Miroslav Kováč</u> , Karolína Čolláková, Michal Hatala, Andrej Vikartovský, Lenka Lorencová, Alenka Šišková-Opálková, Martin Nosko, Pavol Gemeiner	87
2P11 SOLUBILITY INVESTIGATION OF SELECTED RE_2O_3 IN (LiF-NaF)EUT vs (LiF-NaF- REF ₃) MOLTEN SYSTEMS <u>Blanka Kubíková</u> , Jarmila Mlynáriková, Zuzana Vasková, Oksana Matselko, Miroslav Boča	88
2P12 SALICYLÁTOMEĎNATÉ KOMPLEXY S FENANTROLÍNOM V SLUŽBÁCH BIOLÓGIE <u>Matúš Lištiak</u> , Rudolf Varga, Flóra Jozefiková, Miriam Malček Šimunková, Miroslava Puchoňová, Ján Moncol'	88
2P13 VRSTVA PORÉZNÍHO UHLÍKU NA KERAMICKÉM NOSIČI Sajida Perveen, <u>Václav Slovák</u>	89
2P14 THERMALLY AND LIGHT-INDUCED SPIN CROSSOVER IN IRON(III) COMPLEXES WITH BENZOPHENONE-BASED PENTA- AND HEXADENTATE SCHIFF BASE LIGANDS Lukáš Pogány, Ján Moncol', Ivan Nemec, <u>Ivan Šalitroš</u>	89
2P15 NOVEL HALF-SANDWICH Rh(III) COMPLEXES AS POTENTIAL ANTICANCER DRUGS <u>Slavomíra Šterbinská</u> , Pavel Štarha	90
2P16 MEĎNATÉ KOMPLEXY SCHIFFOVÝCH ZÁSAD ODVODENÉ OD PYRIDÍN-2- KARBALDEHYDU-N-OXIDU: ŠTÚDIUM ICH INTERAKCIE S BIOMOLEKULAMI (DNA, BSA) A PROTINÁDOROVEJ AKTIVITY <u>Jindra Valentová</u> , Barbora Svitková, Peter Baran	90
2P17 CATALYTIC PERFORMANCE OF MODIFIED MONTMORILLONITES IN THE PRINS REACTION OF INDENE WITH PARALDEHYDE <u>Eva Vrbková</u> , Michaela Hlinková, Eliška Vyskočilová	91
Prednášky - sekcia 3: Organická chémia a polyméry 91	
3P01 SYNTÉZA AMFIFILNÝCH DERIVÁTOV BENZIMIDAZOLU AKO POTENCIÁLNYCH ANTINEOPLASTÍK <u>Dušan Bortňák</u> , Alex Ondruška, Viktor Milata, Daniel Végh	91
3P02 PHOTOSWITCHING OF TRIARYLHYDRAZONES IN THE SOLID STATE <u>Marek Cigán</u> , Bernard Mravec, Šimon Budzák, Miroslav Medved', Lukáš F. Pašteka, Petr Lazar, Eliška Procházková, Aleš Růžicka, Jozef Kožíšek, Karol Vegso, Michal Bodík, Peter Šiffalovič, Peter Švec, Juraj Filo	92

3P03 MECHANOCHEMICAL CROSS-COUPPLINGS OF ORGANOZINC COMPOUNDS <u>Tomáš Čarný</u> , Dominika Mravcová, Barbora Steinhüblová, Radovan Šebesta.....	93
3P04 MOLECULAR IMPRINTING: OPTIMIZING REACTION PARAMETERS FOR TARGETED EXTRACTION <u>Lada Dolejšová Sekerová</u> , Anna Šmídová, Anna Křížová, Eliška Vyskočilová	94
3P05 ENKAPSULÁCIA KYSELINY ASKORBOVEJ PRE POUŽITIE V KOZMETICKOM GÉLI <u>Ondrej Hruška</u> , Kristína Masnicová, František Kreps, Erika Hrašková.....	94
3P06 MODIFIKACE VLASTNOSTÍ A STRUKTURY CHITIN- GLUKANOVÉHO KOMPLEXU S VYUŽITÍM IONTOVÝCH KAPALIN <u>Ivan Kelnar</u> , Miroslav Janata	94
3P07 VZNIK CYTOTOXICKÉHO GAMA-TOKOFLERYLCHINÓNU POČAS VYPRAŽANIA HRANOLIEK V REPKOVOM OLEJI <u>František Kreps</u> , Kristína Masnicová, Ondrej Hruška, Zuzana Krepsová.....	95
3P08 DESIGN OF POLYMER THERANOSTICS FOR HETERONUCLEAR MR IMAGING AND TARGETED CANCER THERAPY <u>Richard Laga</u> , Ladislav Androvič, Lucie Kracíková, Eliška Hrdá, Michal Pechar, Michal Franc, Natalia Ziółkowska, Dominik Havlíček, David Červený, Daniel Jirák	95
3P09 HYBRIDNÉ AKRIDÍN-TIAZOLIDINÓNY: SYNTÉZA, NMR A DFT CHARAKTERIZÁCIA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA <u>Tomáš Ján Liška</u> , Radka Michalková, Ivan Potočník, Erika Samol'ová, Mária Vilková.....	96
3P10 ALDOSE REDUCTASE INHIBITORS – STRUCTURE, MODE OF ACTION, AND SELECTIVITY <u>Magdaléna Májeková</u> , Lucia Kováčiková, Peter Šramel	97
3P11 HALOGENATED PYRIDINIUM OXIMES REACTIVATING ORGANOPHOSPHATES-INHIBITED CHOLINESTERASES <u>David Malinak</u> , Karolina Knittelova, Eliska Prchalova, Zuzana Kohoutova, Sara Benesova, Rudolf Andrys, Kamil Musilek, Tamara Zorbaz, Zrinka Kovarik, Etienne Derat.....	97
3P12 PRÍPRAVA A VYUŽITIE OLIGONUKLEOTIDOV S TERMINÁLNOU DIFOSFÁTOVOU SKUPINOU <u>Ján Matyašovský</u> , Pavol Čekan.....	98
3P13 HETEROARYL ESIPT-BASED HYDRAZONE PHOTOSWITCHES <u>Bernard Mravec</u> , Lea Hegedüsová, Marek Cigán, Juraj Filo, Šimon Budzák, Miroslav Medved'	98
3P14 VYUŽITIE DERIVÁTOV KYNURÉNOVEJ KYSELINY V LIEČBE ALZHEIMEROVEJ CHOROBY <u>Branislav Pavilek</u> , Dana Hajduová, Viktor Milata	99
3P15 STIMULI-RESPONSIVE SUPRAMOLECULAR POLYMER SYSTEMS FOR DRUG AND GENE DELIVERY <u>Michal Pechar</u> , Sára Pytlíková, Rafał Konefał, Robert Pola, Alena Braunová, Miroslav Šlouf, Tomáš Etrych, Richard Laga.....	100
3P16 C–H ARYLATION OF BIARYL SUBSTRATES <u>Martin Putala</u>	100

3P17 MECHANOCHEMICKÉ PALÁDIOM-KATALYZOVANÉ CROSS-COUPLOINGOVÉ A KARBONYLAČNÉ REAKCIE <u>Radovan Šebesta</u>	101
---	-----

Prednášky - sekcia 4: Vyučovanie, popularizácia a história chémie..... 102

4P01 ODBORNÁ SKUPINA CHEMICKÉHO VZDĚLÁVÁNÍ JAKO VÝZNAMNÁ SOUČÁST ČSCH <u>Hana Čtrnáctová</u>	102
4P02 ROZVOJ DIGITÁLNYCH KOMPETENCIÍ BUDÚCICH UČITEĽOV PRÍRODNÝCH VIED <u>Mária Ganajová</u> , Ivana Sotáková, Petra Letošníková	102
4P03 RODOVÉ ROZDIELY V ROZVOJI SPÔSOBILOSTÍ VEDECKEJ PRÁCE <u>Katarína Kotuľáková</u>	103
4P04 VYUŽITÍ CHATGPT PRO TVORBU ÚLOH Z OBLASTI CHEMICKÝCH VÝPOČTŮ <u>Roman Maršálek</u> , Radim Petroš.....	103
4P05 SPOLOČNÉ ZJAZDY SLOVENSKÝCH A ČESKÝCH CHEMIKOV V BANSKEJ ŠTIAVNICI <u>Viktor Milata</u> , Michal Uher, Jozef Čársky.....	103
4P06 OD ZÁŽITKU K POROZUMĚNÍ: AFEKTIVNÍ PŘÍNOS EXKURZÍ VE VÝUCE PRŮMYSLOVÉ CHEMIE <u>Kamila Petrželová</u> , Jana Prášilová.....	104
4P07 JE TRÍHODINOVÁ PŘEDNÁŠKA PŘEŽITKEM? <u>Jana Prášilová</u> , Kamila Petrželová, Helena Mašláňová	104
4P08 UČIT SE UČIT – WEBOVÝ PORTÁL NA PODPORU STUDENTŮ UČITELSTVÍ <u>Veronika Švandová</u> , Kateřina Jarolímková.....	105

Prednášky - sekcia 5 Chemprogress – chemické technológie ... 106

5P01 VLIV SEPARÁTORU NA TRANSPORT HMOTY A NÁBOJE V ALKALICKÉM ELEKTROLYZÉRU VODY: MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ A EXPERIMENTÁLNÍ ANALÝZA <u>Karel Denk</u> , Roman Kodým, Adam Fiedler, Jaromír Hnát, Karel Bouzek	106
5P02 NANOSTRUCTURED BORON-DOPED DIAMOND ELECTRODES FOR HIGH- PERFORMANCE ELECTROCHEMICAL SUPERCAPACITORS <u>Alexander Kromka</u> , Ondrej Szabó, Dhananjay K. Sharma, Rene Pfeifer, Štěpán Stehlík, Štěpán Potocký, Marian Marton, Marian Vojs, Shradha Suman, Kamatchi J. Sankaran	106
5P03 PŘÍPRAVA NIFE LDH KATALYZÁTORU PRO REAKCI VÝVOJE KYSLÍKU POMOCÍ ELEKTRODEPOZICE NA NIKLOVOU PĚNU <u>Michaela Plevová</u> , Jaromír Hnát, Karel Bouzek	107
5P04 PRÍTOMNOST PCB NA SLOVENSKU – SPÔSOB SANÁCIE <u>Renáta Števuľová</u> , Ján Híveš, Ladislav Štibrányi.....	107

5P05 SORPTION EFFICIENCY OF NEW ZEOLITE-MINERAL COMPOSITES, HUMIC PREPARATES, AND BIO-BASED CARBON TYPE PROTOTYPES ON PCBS CONTAINED IN HIGHLY CHLORINATED PREPARATION OF DELOR 106 <u>Štefan Tóth, Ladislav Štibrányi</u>	108
---	-----

5P06 TECHNICKO-EKONOMICKÉ POSOUZENÍ VÝROBY E-METHANOLU <u>Jana Vostrá, Ivan Souček, Jiří Trejbal</u>	108
---	-----

Cena Shimadzu 109

CS01 SÓL-GÉLOVÉ SPOJIVÁ PRE TLAČENÉ KOMPOZITNÉ BIOCHAR/TIO ₂ PROTIELEKTÓDY V INTERIÉROVÝCH FARBIVOM SENZIBILIZOVANÝCH SOLÁRNYCH ČLÁNKOCH <u>Tatiana Buchlová, Pavol Gemeiner, Roberto Speranza, Andrea Lamberti</u>	109
---	-----

CS02 USE OF IR SPECTROELECTROCHEMISTRY AND MASS SPECTROMETRY TO STUDY THE OXIDATION MECHANISMS OF SYNTHETIC SELAGINPULVILINS <u>Lucie Dostálková, Peter Čambal, Tereza Havlíková, Karolina Schwarzová-Pecková, Lukáš Rýček, Romana Sokolová</u>	109
--	-----

CS03 SEPARÁCIA RÁDIOIZOTOPOV Ni A STANOVENIE ICH AKTIVITY VO VZORKE RÁDIOAKTÍVNEHO ODPADU S VYUŽITÍM 3D TLAČE <u>Marek Hupians, Oľga Rosskopfová, Dominik Juračka, Michal Galamboš</u>	110
---	-----

CS04 ANALÝZA MIERY ROZLOŽITEĽNOSTI VLNČENÝCH UTIEROK <u>Martina Illášová, Lenka Lorencová, Monika Jerigová, Andrej Vikartovský</u>	110
---	-----

CS05 A NEW METHOD FOR DETECTING TRAZODONE IN BIOLOGICAL FLUIDS <u>Oleksandra Labzova, Vojtěch Hrdlička, Tomáš Navrátil, Oleksandr Matvieiev, Renáta Šelešovská</u> ...	111
---	-----

CS06 MONITOROVÁNÍ DEGRADACE LÉČIV: SROVNÁNÍ ON-LINE A OFF-LINE PŘÍSTUPU <u>Lucie Pražáková, Martin Šefčík, Jan Fischer, Anna Kubičková</u>	112
---	-----

CS07 STUDIUM KOMPLEXAČNÍCH VLASTNOSTÍ MOČOVINOVÝCH RECEPTORŮ PREORGANIZOVANÝCH AZACALIXARENÝMI NOSIČI <u>Karolína Salvadori, Olivier Siri</u>	112
--	-----

CS08 POROVNANIE ZEOLITOV A KYSLÝCH IÓNOMENIČOV AKO KATALYZÁTOROV PRE PRÍPRAVU ADITÍVA DO DIESELOVÝCH PALÍV <u>Zuzana Silná, Tomáš Soták, Anastasiia Kuzina</u>	113
---	-----

CS09 ADSORPTIVE REMOVAL OF RADIOACTIVE ¹³³ BA USING MXENE-BASED MATERIAL: INFLUENCE OF PH AND CONTACT TIME <u>Vesaj Singh, Vipul Vilas Kusumkar, Shalu Atri, Eva Viglašová, Michal Galamboš</u>	113
---	-----

Postery - sekcia 1 Analytická chémia a fyzikálna chémia..... 114

1Po01 MODELLING THE TERNARY COMPLEX AND ACTIVE SITE DYNAMICS OF GALACTOFURANOSYL TRANSFERASE 2 FOR RATIONAL DRUG DESIGN <u>Yasir Ali, Monika Ďuračková, Barbora Stratilová, Stanislav Kozmon</u>	114
---	-----

1Po02 SEASONAL OXIDATIVE DYNAMICS AND ISOTOPIC FRACTIONATION OF NO _x AND SO ₂ IN OSTRAVA, CZECH REPUBLIC: INSIGHTS FROM STABLE ISOTOPE ANALYSIS <u>František Buzek</u> , Bohuslava Cejkova, Ivana Jackova, Radim Seibert, Jan Curik, František Veselovsky, Daniel A. Petrash	115
1Po03 STABILIZATION EFFECT OF SEVERAL ANTIOXIDANTS IN NATURAL RUBBER STUDIED BY NONISOTHERMAL DSC Zuzana Cibulková, Tibor Dubaj	115
1Po04 ANTHRAQUINONE DERIVATIVES IN <i>HYPERICUM</i> SPECIES FROM THE LC-MS POINT OF VIEW <u>Richard Čmelík</u> , Dana Moravcová, Lenka Svojanovská, Miroslava Bálintová, Katarína Bruňáková ...	116
1Po05 VOLTAMETRICKÉ CHARAKTERIZACE ORGANOKOVOVÝCH GLYKOMIMETIK Marek Zelinka, Lucie Žaloudková, Vojtěch Hamala, Jindřich Karban, Veronika Ostatná, <u>Aleš Daňhel</u>	116
1Po06 APTAMER SEQUENCES AS POTENTIAL FORMERS OF G-QUADRUPLEX <u>Michaela Dobrovolná</u> , Anne Cucchiari, Václav Brázda, Jean-Louis Mergny	117
1Po07 DEGREE OF CONVERSION IN THERMOANALYTICAL KINETICS <u>Tibor Dubaj</u> , Zuzana Cibulková, Peter Šimon	117
1Po08 THE EXPERIMENTAL AND THEROETICAL DFT ANALYSIS OF SPIN-SPIN INTERACTION CONSTANTS OF KERATAN SULPHATE AND IOTA- AND KAPPA-CARRAGEENANS Michal Hricovíni, <u>Miloš Hricovíni</u>	118
1Po09 SIMS CHARAKTERIZÁCIA PEROVSKITOVÝCH VRSTIEV PRE ICH APLIKÁCIU V SOLÁRNYCH ČLÁNKOCH <u>Monika Jerigová</u> , Dominik Sarvaš	118
1Po10 IDENTIFIKÁCIA ANTIOXIDANTOV V ČAJOCH <i>CAMELLIE SINENSIS</i> <u>Terézia Kelemenová</u> , Monika Jerigová	119
1Po11 THERMOOXIDATIVE STABILITY OF NATURAL RUBBER AFTER ACCELERATED AGEING STUDIED BY NONISOTHERMAL DSC Zuzana Cibulková, <u>Tatiana Klempová</u> , Tibor Dubaj	119
1Po12 ANALÝZA PROFILU TĚKAVÝCH LÁTEK V PLODECH BRUSNICE BORŮVKY (<i>VACCINIUM MYRTILLUS</i>) BĚHEM ZRÁNÍ METODOU HS-SPME-GC-MS <u>Pavlaína Knapovská</u> , Eva Vítová	120
1Po13 IN SILICO SCREENING OF POTENTIAL INHIBITORS OF THE GAS2P ENZYME <u>Stanislav Kozmon</u> , Barbora Stratilová	120
1Po14 STANOVENIE REZÍDUÍ PESTICÍDOV V POTRAVINÁCH NA POČIATOČNÚ A NÁSLEDNÚ VÝŽIVU DOJČIAT METÓDAMI LC-MS/MS A GC-MS/MS <u>Miroslava Kuzniarová</u> , Martina Micháliková, Milena Dömötöröová	121

1Po15 ZÁVISLOST KATALYTICKÉ AKTIVITY NANOČÁSTIC ZLATA NA JEJICH VELIKOSTI <u>Libor Kvítek</u> , Radka Pocklanová, Jan Stehlík, Lucie Suchánková, Jan Navrátil, Aleš Panáček, Robert Prucek.....	121
1Po16 ELUCIDATING THE INTERACTION OF BOVINE SERUM ALBUMIN WITH NON- STEROIDAL ANTI-INFLAMMATORY AND ANTIBACTERIAL DRUGS USING A MULTI-TECHNIQUE APPROACH <u>Hira Lal</u> , Martin Pisárčík	122
1Po17 FARADAYOV OPTICKÝ JAV V MXÉNOCH DEKOROVANÝCH MAGNETICKÝMI NANOČASTICAMI <u>Dušan Lorenc</u> , Eva Noskovičová, Peter Kasák, Monika Jerigová, Monika Stupavská, Ľubomír Orovčík, Lenka Lorencová.....	122
1Po18 ELEKTROCHEMICKÁ DETEKCIA GENTAMICÍNU NA MODIFIKOVANÝCH UHLÍKOVÝCH ELEKTRODACH PRIPRAVENÝCH METÓDOU SIEŤOTLAČE <u>Ivana Mojžišová</u> , Jana Demeterová, Jana Shepa, Ivana Šišoláková, Renáta Oriňaková	123
1Po19 ABSORPČNÁ SPEKTROSKOPIA TENKÝCH VRSTIEV PEROVSKITU $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PBI}_{3x}\text{CL}_x$ <u>Eva Noskovičová</u> , Dominik Sarvaš, Jaroslav Bruncko, Monika Jerigová	123
1Po20 ŠTÚDIUM VPLYVU ANTISOLVENTU NA MORFOLÓGIU PEROVSKITOVÝCH VRSTIEV <u>Dominik Sarvaš</u> , Daniel Haško, Monika Jerigová.....	124
1Po21 ELEKTROCHEMICKÉ SENZORY NA BÁZE MEDI PRE STANOVENIE INZULÍNU <u>Laura Slabejová</u> , Jana Shepa, Ivana Šišoláková, Renáta Oriňaková.....	124
1Po22 VLIV REDOXNÍHO STAVU GALEKTINU NA JEHO LEKTINOVOU AKTIVITU <u>Peter Šebest</u> , Veronika Ostatná, Roman Hrstka, Vojtěch Hamala, Jindřich Karban, Aleš Daňhel.....	125
1Po23 DIFFERENCE BETWEEN THE KINETIC AND THERMOANALYTICAL DEGREES OF CONVERSION <u>Peter Šimon</u> , Tibor Dubaj, Zuzana Cibulková	125
1Po24 VÝVOJ ELEKTROCHEMICKÉHO MULTISENZORA PRE RÝCHLU DETEKCIU BIOANALYTOV V KLINICKEJ DIAGNOSTIKE <u>Ivana Šišoláková</u> , Jana Shepa, Pavol Jarčuška, Ondrej Zahornacký, Soňa Király, Renáta Oriňaková ..	126
1Po25 OPTIMIZATION OF CONDITIONS FOR DETERMINING PROLYL OLIGOPEPTIDASE ACTIVITY <u>Šárka Štěpánková</u> , Daniela Zachrdlová	126
1Po26 VYUŽITÍ GC/MS PRO IDENTIFIKACI A DŮKAZ OXIDAČNÍCH PRODUKTŮ FENTANYLU <u>Dana Štolbová</u> , Radek Jerga, Jana Skopalová, Petr Barták.....	127
1Po27 <i>CHLORELLA</i> V HRE O BUDÚCNOSŤ – POTENCIÁLNY PRÍNOS PRE ENVIRONMENTÁLNE APLIKÁCIE <u>Monika Takácsová</u> , Monika Jerigová	127

1Po28 SENZOR NA BÁZE $\text{NB}_4\text{C}_3\text{T}_x$ MXÉN@NI KOMPOZITU PRE ELEKTROCHEMICKÚ DETEKCIU DOPAMÍNU <u>Andrej Vikartovský</u> , Lenka Lorencová, Marek Baráth, Ľubomír Orovčík, Monika Jerigová, Peter Kasák, Ján Tkáč	128
1Po29 KOMPOSTOVÁNÍ ODPADNÍ BIOMASY ZA VZNIKU SUBSTRÁTŮ S VYŠŠÍM OBSAHEM HUMINOVÝCH KYSELIN A OPTIMALIZOVANOU SCHOPNOSTÍ ZADRŽOVAT VODU <u>Lucie Řepečká</u> , Daniel Vrábl, Anna Gavlová, Kateřina Smutná, Jitka Pavlíková, Martina Vráblová...	128
1Po30 CHEMICAL AND STRUCTURAL STABILITY OF ZnO ELECTRON TRANSPORT LAYERS DEPOSITED BY LASER ABLATION FOR PEROVSKITE PHOTOVOLTAICS <u>Monika Stupavská</u> , Dominik Sarvaš, Jaroslav Bruncko, Monika Jerigová	129
1Po31 PROBLEMATIKA PŘÍTOMNOSTI ANTIBIOTIK A GENŮ ANTIBIOTICKÉ REZISTENCE V KOMUNÁLNÍCH ODPADNÍCH VODÁCH <u>Martina Vráblová</u> , Lucie Řepečká, Tereza Stachurová, Jan Bednárek, Anna Gavlová, Kateřina Smutná.....	129
1Po32 NIR-LIGHT ABSORBING AZA-BRIDGED DIKETOPYRROLOPYRROLES WITH TERMINAL ARYLAMINE-FUNCTIONALIZED BENZOTHAZOLES DISPLAYING LARGE TWO-PHOTON ABSORPTION CROSS-SECTIONS <u>Rajmohan Rajamani</u> , Kenji Kamada, Erik Rakovský, Peter Hrobárik.....	130
1Po33 BENZOTHAZOLE HEPTAMETHINE CYANINE DYES WITH TERMINAL AMINE SUBSTITUENTS: TARGETED PROBES FOR FLUORESCENCE IMAGING AND PHOTODYNAMIC THERAPY USING ONE- AND TWO-PHOTON ABSORPTION IN NEAR-INFRARED REGION <u>Babiola Annes Sesuraj</u> , Rajmohan Rajamani, Jozef Noga, Peter Hrobárik.....	131

Postery - sekcia 2 Anorganická chémia a materiálová chémia... 132

2Po01 CHARAKTERIZACE TENKÝCH VRSTEV OXIDU WOLFRAMOVÉHO PŘIPRAVENÝCH METODOU BRICK-AND-MORTAR <u>Tomáš Blecha</u> , Petr Dzik, Marcela Králová, Michal Veselý.....	132
2Po02 PHASE FORMATION IN ALKALI AND AMMONIUM FLUOROSCANDATE SYSTEMS UNDER MILD HYDROTHERMAL CONDITIONS <u>Veronika Demovics Silliková</u> , Oksana Matselko, Blanka Kudíková, Zuzana Netriová, Miroslav Boča	132
2Po3 MESOPORIZATION OF *BEA ZEOLITE BY HOT LIQUID WATER AND ITS MECHANISM <u>Jiří Dědeček</u> , Věnceslava Tokarová, Stanislava Stiborová, Martina Urbanová	133
2Po4 CATALYTIC AND ADSORPTIVE PROPERTIES OF RARE-EARTH OXIDES WITH EMPHASIS ON CERIUM OXIDE <u>Jakub Ederer</u> , Jiří Henych, Viktorie Neubertová.....	133
2Po5 SNÍMÁNÍ FLUORESCENČNÍCH ZNAČEK POMOCÍ PRŮMYSLOVÉ KAMERY <u>Denisa Filipi</u> , Michal Veselý.....	134

2Po6	CYTOTOXICKÁ AKTIVITA REDUKOVANÝCH SCHIFFOVÝCH BÁZ A ICH KOMPLEXOV SO ZINKOM A MEĎOU <u>Ladislav Habala</u> , Jana Hricovíniová, Jindra Valentová, Bianka Oboňová, Miroslava Litecká, Ľudmila Pašková.....	134
2Po07	COMPOSITE FILAMENT BASED ON PHARMACEUTICAL GLASS WASTE FOR ADDITIVE MANUFACTURING OF NEW LIVE-CYCLE PRODUCTS <u>Zora Hajdúchová</u> , Martina Ferancová, Michaela Benköová, Jozef Feranc, Marián Janek	135
2Po08	APLIKÁCIA KOMPLEXOV STRIEBRA S POTENCIÁLNOU BIOLOGICKOU AKTIVITOU V LOKÁLNEJ TERAPII PROSTREDNÍCTVOM KRÉMOV A GÉLOV <u>Kristína Harbuláková</u> , Zuzana Vargová, Simona Sovová	135
2Po09	ELECTROSPUN POLYURETHANE/PALLADIUM NANOFIBROUS MEMBRANE FOR HYDROGEN SORPTION <u>Jakub Hoskovec</u> , Pavla Čapková, Petr Ryšánek, Dániel Gardenö, Karel Friess, Jaroslava Jarolímková, Viktor Greguš, Pavel Kaule, Tereza Dušková, Magda Škvorová, Václav Šicha, Oldřich Benadada	136
	<u>Jaroslava Jarolímková</u> , Viktorie Neubertová, Filip Mamoň, Zdeňka Kolská.....	136
2Po11	FROM CRYSTAL STRUCTURES TO CYTOTOXICITY: PALLADIUM(II) COMPLEXES WITH BIDENTATE 8-HYDROXYQUINOLINE LIGANDS <u>Martina Kepeňová</u> , Michaela Benediková, Martin Kello, Viktória Medvecová, Erika Samoľová, Miroslava Litecká, Mária Vilková, Ivan Potočník	137
2Po12	NANOKOMPOZITY PRO POTENCIÁLNÍ VYUŽITÍ V MNOHA APLIKACÍCH <u>Zdeňka Kolská</u> , Václav Švorčík, Jaroslava Jarolímková, Viktorie Neubertová	138
	<u>Lucie Kořená</u> , Václav Slovák, Samantha L. Flores-López, Ana Arenillas	138
2Po14	STRUCTURE AND THE BIOLOGICAL ACTIVITY OF THE NEW COPPER(II)- COUMARIN BASED COMPLEXES <u>Jakub Kurjan</u> , Zuzana Jendželovská, Viktória Dečmanová, Nikolína Kastratovic, Vladislav Volarevic, Lukáš Smolko, Romana Smolková, Miroslava Litecká, Rastislav Jendželovský, Ivan Potočník	139
2Po15	THERMODYNAMICS OF ¹³⁷ CS ADSORPTION ON PLA, PET, AND PVC MICROPLASTICS <u>Vipul Kusumkar</u> , Süleyman İnan, Michal Galambos, Eva Viglasova	139
2Po16	DETERMINATION OF SPECIFIC SURFACE AREAS AND TEXTURAL PROPERTIES OF CLAY MINERALS <u>Miloslav Lhotka</u> , Barbora Doušova.....	140
2Po17	SYNTÉZA, ŠTRUKTÚRA A BIOLOGICKÉ AKTIVITY MEĎNATÝCH KOMPLEXOV REDUKOVANÝCH SCHIFFOVÝCH BÁZ ODVOZENÝCH OD METOXYBENZYLAMÍNŮV <u>Lucia Lintnerová</u> , Peter Herich, Barbora Svitková, Jindra Valentová	140
2Po18	HIGHLY EFFICIENT SINGLET OXYGEN GENERATING RE(I) COMPLEXES WITH ONE- AND TWO-PHOTON EXCITATION <u>Anitha Mathradan</u> , Patrik Osuský, Rajmohan Rajamani, Kenji Kamada, Peter Hrobárik	141

2Po19	APLIKÁCIA POVRCHOVO MODIFIKOVANÉHO MATERIÁLU UiO-66-NH_2 KYSELINOU LISTOVOU PRE CIELENÝ TRANSPORT PROTINÁDOROVÝCH LIEČIV <u>Alexandra Migasová</u> , Veronika Huntošová, Xu Li, Marco Andreana, Angelika Unterhuber, Miroslav Almáši	142
2Po20	DO SCHIFF BASES DERIVED FROM TRIAZOLE DERIVATIVES EXHIBIT BIOLOGICAL RELEVANCE AS LIGANDS IN COORDINATION COMPOUNDS? <u>Katarína Micheľová</u> , Lucia Hudáková, Svitlana Vitushkina, Rastislav Jendželovský, Juraj Kuchár	142
2Po21	EFFECT OF NDF_3 AND ND_2O_3 ADDITIVES ON THE PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES OF CRYOLITE-BASED MELTS <u>Jarmila Mlynáriková</u> , František Šimko.....	143
2Po22	ZIF-8 FUNCTIONALIZED WITH THYMOL AND EUCALYPTOL FOR ANTIBACTERIAL APPLICATIONS <u>Viktorie Neubertová</u> , Zuzana Kodešová, Zdeňka Kolská	143
2Po23	SYNTÉZA NANOČÁSTIC STRÍBRA A ZLATA S LADITELNÝMI PLAZMONICKÝMI VLASTNOSTMI PRO SVĚTLEM INDUKOVANOU PROTINÁDOROVOU TERAPII <u>Aleš Panáček</u> , Lucie Válková, Lucie Hochvaldová, Anastasiya Pedan, Hana Kolářová, Libor Kvítek	144
2Po24	CÍLENÁ PROTINÁDOROVÁ FOTOTERMÁLNÍ TERAPIE POMOCÍ NANOČÁSTIC ZLATA <u>Anastasiya Pedan</u> , Lucie Válková, Aleš Panáček	144
2Po25	PREPARATION AND CHARACTERISATION OF ANTIMICROBIAL NANOMATERIAL BASED ON LAYERED SILICATE AND PHLOXINE B <u>Marek Pribus</u> , Katarína Bilská, Helena Bujdáková, Juraj Bujdák	145
2Po26	PRÍPRAVA A CHARAKTERIZÁCIA HETEROŠTRUKTÚR DICHALKOGENIDOV PRECHODOVÝCH KOVOV <u>Lenka Pribusová Slušná</u> , Peter Nádaždy, Michaela Sojková, Jana Hrdá, Martin Human.....	145
2Po27	ANTIBAKTERIÁLNI ÚPRAVA POLYMERNÍCH FÓLIÍ PEEK POMOCÍ LASEREM VÁZANÝCH STRÍBRNÝCH NANOČÁSTIC <u>Jakub Siegel</u> , Monika Valovičová, Jana Pryjmaková, Miroslav Šlouf	146
2Po28	IMPLICATIONS OF SILVER NANOPARTICLES FOR <i>HELICOBACTER PYLORI</i> INFECTION: VIRULENCE FACTOR AND SIGNALING <u>Lucie Suchánková</u> , Gernot Posselt, Silja Wessler, Libor Kvítek, Aleš Panáček	147
2Po29	ČASOVĚ ROZLIŠENÁ <i>IN-SITU</i> TRANSFORMACE AMORFNÍHO UHLÍČITANU VÁPENÁTÉHO <u>Radek Ševčík</u> , Petra Mácová, Lucie Zárybnická, Eva Soukupová, Martin Olbert, Vilém Neděla	147
2Po30	QUASI-QUADRUPOLEAR FURAN- AND THIOPHENE-CORED DERIVATIVES FUNCTIONALIZED WITH BENZOTHAZOLO-OXADIAZABORININE UNITS AS POTENTIAL TWO-PHOTON ABSORBING DYES <u>Mayuri Karanth Thalekela</u> , Rajmohan Rajamani, Peter Hrobárik.....	148

2Po31 VPLYV HIERARCHICKEJ PÓROVITOSTI MATERIÁLU HKUST-1 A JEJ DOPAD NA KATALYTICKE VLASTNOSTI V KNOEVENAGELOVEJ KONDENZÁCII <u>Nikola Vargová</u> , Nikolas Király, Rastislav Serbin, Gabriela Zelenková, Tomáš Zelenka, Vladimír Zeleňák, Miroslav Almáši.....	148
2Po32 CATALYTIC PERFORMANCE OF Fe-LOADED ZEOLITE BETA IN FINE CHEMICAL SYNTHESIS: ACETALIZATION, CYCLIZATION AND ESTERIFICATION STUDIES <u>Martin Zapletal</u> , Eliška Vyskočilová, Eva Vrbková	149
2Po33 VLIV TYPU PLNIVA NA MECHANICKÉ VLASTNOSTI GEOPOLYMERŮ VYSTAVENÝCH TEPELNÉMU ZATĚŽOVÁNÍ <u>Lucie Zárybnická</u> , Ivana Perná, Petra Mácová, Radek Ševčík, Monika Šupová.....	149
2Po34 COMPOSITE MATERIALS BASED ON MMM-UiO-66-Zr AND MMM-UiO-66-NH ₂ -ZR FOR AMOXICILLIN DELIVERY <u>Lucie Zelená</u> , Ľuboš Zauška, Eva Kinnertová, Tomáš Zelenka, Miroslav Almáši.....	150
2Po35 USE OF ALUMINOSILICATE-FLY ASH COMPOSITES IN WATER TREATMENT <u>Barbora Doušová</u> , Eva Bedrnová, Miloslav Lhotka, Kateřina Maxová, Lukáš Pilař, David Koloušek .	150
2Po36 COVALENT SURFACE FUNCTIONALIZATION OF BLACK PHOSPHORUS WITH COBALT(II) MACROCYCLIC SMMs <u>Eva Zahradníková</u> , Ivan Nemec	151

Postery - sekcia 3 Organická chémia a polyméry..... 152

3Po01 TRIMEDOXIME ANALOGS AS PROMISING CANDIDATES FOR REACTIVATING CHOLINESTERASES INHIBITED BY ORGANOPHOSPHATES <u>Sara Benesova</u> , Adela Fuchsova, Zuzana Kohoutova, Barbora Krizova, Rudolf Andrys, Kamil Musilek, David Malinak	152
3Po02 MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS OF AZASULFONES <u>Rahul Das</u> , Samuel Andrejčák, Michal Májek	152
3Po03 DESIGN AND APPLICATION POTENTIAL OF UNSYMMETRICAL DIARYLETHENES IN ADVANCED MATERIALS <u>Juraj Filo</u> , Lenka Dzurňáková, Martin Kovalčín, Sofia Huliar, Peter Magdolen, Ivica Sigmundová, Marek Cigán	153
3Po04 PRÍPRAVA (KO)POLYMÉROV NA BÁZE FURÁNU POMOCOUI RIADENEJ RADIKÁLOVEJ FOTOPOLYMERIZÁCIE <u>Mária Gurská</u> , Anita Eckstein-Andicsová, Ivana Šurinčíková, Anna Vykydalová, Katarína Mosnáčková, Jaroslav Mosnáček	153
3Po05 POLYMERIC MEMBRANES AND COMPOSITES FOR CO ₂ CAPTURE AND SEPARATION <u>Kateřina Hamalová</u> , Viktorie Neubertová, Zdeňka Kolská.....	154
3Po06 SIGNIFICANT INCREASE IN CYTOTOXICITY AND ANTIFUNGAL ACTIVITY OF QUINAZOLINONE LIGANDS UPON Cu(II) COORDINATION Jana Hricovíniová, Peter Hergott, Renáta Vadkertiová, Eva Horváthová, <u>Zuzana Hricovíniová</u>	154
3Po07 BINAPHTYL AZOSWITCHES WITH A THREE-ATOM BRIDGE <u>Lukáš Huska</u> , Iveta Kmentová, Martin Putala.....	155

3Po08 MECHANOCHEMICAL SITE-SELECTIVE BROMINATION OF ACTIVATED NAPHTHALENES <u>Subhro Chatterjee</u> , Pramod Kumar, Martin Putala	155
3Po09 SYNTHESIS OF [5]HELICENE DERIVATIVES WITH EXTENDED SCAFFOLD EXHIBITING CONFIGURATIONAL STABILITY <u>Lukáš Kerner</u> , Maksym Serdiuk, Martin Putala	156
3Po10 NEJČASTĚJŠÍ PATOGENNÍ VARIANTY VE FIBRINOGENU V ČESKÉ REPUBLICE A JEJICH VLIV NA VLASTNOSTI MOLEKULY A FIBRINOVÝ POLYMER <u>Roman Kotlín</u> , Eliška Ceznerová, Žofie Sovová, Jiří Suttner, Michael Pasák, Marek Havlíček, Tereza Sklenářová, Ingrid Hrachovinová, Dana Provazníková, Alžběta Hlaváčková	157
3Po11 FILAMENTY S „NEVŠEDNÝMI“ PLNIVAMI PRE 3D TLAČ <u>Mária Kováčová</u> , Michaela Sedníčková, Adriana Hvizdošová Annušová, Daniel Truchan, Zdenko Špitálský	157
3Po12 BAREVNOST JAKO INDIKÁTOR TEPELNÉ DEGRADACE DŘEVA: REFERENČNÍ MODEL PRO HODNOCENÍ KARBONIZACE <u>Petra Máčová</u> , Lucie Zárybnická, Radek Ševčík, Barbora Mayer, Jozef Ráhel'	158
3Po13 NEGISHIHO KAPLING <i>IN SITU</i> GENEROVANÝCH ZN-ENOLÁTOV V PODMIENKACH MECHANICKEJ AKTIVÁCIE Tomáš Čarný, <u>Dominika Mravcová</u> , Barbora Steinhüblova, Radovan Šebesta.....	158
3Po14 SYNTHESIS OF NOVEL AMINOBENZOCOUMARIN FLUORESCENT MATERIALS <u>Jakub Orság</u> , Henrieta Stankovičová, Martin Putala	159
3Po15 SYNTHESIS OF HETEROARYL-NAPHTHALENE COMPOUNDS BY C-H ACTIVATION <u>Madhav Pathak</u> , Iveta Kmentova, Martin Putala.....	159
3Po16 AZA-MICHAELOVA ADÍCIA PYRAZOLU NA RÔZNE TYPY AKCEPTOROV <u>Tibor Peňaška</u> , Mária Mečiarová, Radovan Šebesta.....	160
3Po17 MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS OF (BENZO)COUMARINS <u>Karin Schniererová</u> , Henrieta Stankovičová, Martin Putala.....	161
3Po18 3D TISKNUTELNÉ BIO-KOMPOZITY Z BAKTERIÁLNÍ CELULÓZY <u>Radim Stráž</u> , Patrycja Bober, Helena Hudečková, Adriana Kovalčík.....	161
3Po19 Mn(III)-PORFYRÍNY V BOJI PROTI NEURODEGENERATÍVNÝM OCHORENIAM A RAKOVINE Ladislav Šoltés, Jürgen Arnhold, Peter Rapta, Matúš Šedivý, Petr Neugebauer, Svetlana Hrouzková, Agneša Szarka, Mojmír Mach, <u>Katarína Valachová</u>	162
3Po20 SULFATAČNÉ FLAVONOIDY POMOCÍ MIKROBIÁLNÍ ARYLSULFOTRANSFERASY: CESTA K LIDSKÝM METABOLITŮM <u>Jiří Vrba</u> , Veronika Zapletalová, Barbora Papoušková, Kateřina Valentová	162
3Po21 CONTROLLING TRIARYLHYDRAZONE PHOTOSWITCHING EFFICIENCY THROUGH STRUCTURAL VARIATION IN HETEROARYL UNITS <u>Lea Hegedúsová</u> , Šimon Budzák, Miroslav Medved', Lukáš F. Pašteka, Juraj Filo, Bernard Mravec, Anna M. Grabarz, Marek Cigán	163

3Po22 PRÍPRAVA A CHARAKTERIZÁCIA POVLAKOV POLYMÉRNEHO NITRIDU UHLÍKA <u>Sylvia Patakyová</u> , Michael Kubát, Petr Dzik	163
--	-----

3Po23 ENZÝMOVÁ PRÍPRAVA ALKYLGLYKOZIDOV <u>Lucia Černáková</u> , Peter Haluz, Mária Mastihubová, Vladimír Mastihuba	164
--	-----

Postery - sekcia 4 Vyučovanie, popularizácia a história chémie 165

4Po01 DIGITÁLNE ZDROJE VO VÝUČBE AKO JEDNA Z OBLASTÍ ROZVOJA DIGITÁLNYCH KOMPETENCIÍ UČITEĽOV CHÉMIE <u>Ivana Sotáková</u> , Petra Letošníková, Mária Ganajová	165
--	-----

Postery - sekcia 5 Chemprogress – chemické technológie..... 165

5Po01 PRÍPRAVA KOVOVÝCH NANOČASTÍČ POMOCO PULZNEJ LASEROVEJ ABLÁCIE V KVAPALNOM PROSTREDÍ Jaroslav Bruncko, <u>Miroslav Michalka</u>	165
--	-----

5Po02 EFFECT OF THE TYPE OF PHOTOCATALYST ON THE EFFICIENCY OF PHOTOCATALYTIC DEGRADATION <u>Jiří Palarčík</u> , Natálie Tesařová	166
---	-----

5Po03 PROVOZNÍ PODMÍNKY MOBILNÍHO ZDROJE ENERGIE S PEM PALIVOVÝM ČLÁNKEM Martin Paidar, Martin Prokop, Francesco Mazzeo, Lukáš Polák, <u>Michaela Plevová</u>	166
---	-----

Autorský index..... 168

Program prednášok..... 174

PLENÁRNA PREDNÁŠKA

BUDE OGANESÓN POSLEDNÝ?

Martin Venhart*Fyzikálny ústav SAV, v.v.i., Dúbravská cesta 9, 845 11 Bratislava, martin.venhart@savba.sk*

Bude lawrencium ($Z = 103$) posledné? Túto otázku si v roku 1964 položili autori knihy „Od vodíka po... lawrencium?“. V roku 2025 má periodická sústava 118 prvkov a ja si kladím otázku: „Bude oganesón ($Z = 118$) posledný?“. V prednáške bude predstavená celá sága hľadania transuránov a transaktinoidov. Od projektu Manhattan, cez experimenty na jadrových reaktoroch, prvých urýchľovačoch protónov alebo alfa častíc, až po najväčšie termojadrové explózie v atmosfére a experimenty s urýchlenými ťažkými iónmi. Špecificky budú predstavené experimenty v GSI Darmstadt, kde zanechala významnú stopu skupina profesora Šára z Univerzity Komenského. Špecificky sa budeme venovať definitívnemu potvrdeniu existencie prvku so $Z = 112$ [1] v roku 2007 v Darmstadte. V závere popíšem jeden z najväčších podvodov v dejinách vedy, ktorý súvisel s „objavom“ chemického prvku so $Z = 118$ [2]. Mnohé informácie, ktoré odznejú v prednáške pochádzajú od priamych aktérov, dnes už historických udalostí, tak ako mi ich rozprávali. K tomu pridám aj moje priame skúsenosti. Väčšinu z týchto skutočností nie je možné nájsť v nijakej literatúre.

[1] Hofmann S. et al.: *Eur. Phys. J. A* 32, 251-260 (2007).

[2] Dalton R.: *Nature* 418, 261 (2002).

POZVANÉ PREDNÁŠKY

PP1

VINUM REGUM, REX VINORUM: TOKAJ – SKRYTÝ KLENOT SLOVENSKEHO VINÁRSTVA

Katarína Furdíková, Ivan Špánik*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, katarina.furdikova@stuba.sk*

Tokaj je výnimočná stredoeurópska vinárska apelácia, ktorej história siaha do 13. storočia. Je kolískou výnimočných vín, ktoré odzrkadľujú nielen špecifické geografické podmienky tejto lokality ale aj veľmi špecifický výrobný postup. Vinohradnícka oblasť Tokaj bola oficiálne vymedzená v roku 1737, receptúry na výrobu tokajských putňových výberov sú však o viac ako sto rokov staršie. Základnými prvkami formujúcimi kvalitu tradičných tokajských vín sú odrody viniča Furmint, Lipovina a Muškát žltý a zrenie v dreve v špecifických podmienkach tufových pivníc. Prírodne sladké tokajské vína navyše vyžadujú cibéby – hrozienka napadnuté ušľachtilou hnilobou vláknitej huby *Botrytis cinerea*. Tento obávaný fytopatogén svojou aktivitou spúšťa kaskádu procesov, ktoré kompletne pozmenia chemický profil bobule hrozna. Vďaka vhodným klimatickým podmienkam však nedochádza k jeho znehodnoteniu, ale k zušľachteniu. Všetky prvky využité v rámci procesu výroby tokajských vín zanechávajú v hotovom víne svoju chemickú stopu. Medzi špecifické markery patria látky typické pre tokajské odrody viniča, metabolity vznikajúce ušľachtilou hnilobou, látky vznikajúce oxidáciou a starnutím aj látky pochádzajúce z drevených sudov. Ide o rozmanitú skupinu látok, ktorá zahŕňa rôzne estery, vyššie alkoholy, karbonylové zlúčeniny, terpenoidy, polyfenoly, prchavé fenoly, laktóny, furanoidy a rôzne organické kyseliny. Tieto látky formujú typické sensorické vlastnosti tokajských vín, ale možno ich využiť aj pri autentifikácii týchto produktov.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-21-0211.

PP2**MXÉNY: PERSPEKTÍVA Z POHLADU BIO/SENZOROV**Lenka Lorencová

Chemický ústav Slovenskej akadémie vied, v. v. i.,
Dúbravská cesta 5807/9, 845 38 Bratislava,
Lenka.Lorencova@savba.sk

MXény predstavujú veľkú skupinu dvojrozmerných karbidov a/alebo nitridov prechodných kovov so všeobecným vzorcom $M_{n+1}X_nT_x$, kde M predstavuje prechodný kov, X predstavuje uhlík alebo dusík a T_x sú funkčné skupiny na povrchu vrstiev, $n = 1, 2, 3$ alebo 4 . MXény so svojou vrstevnatou štruktúrou poskytujú množstvo alternatív v zložení, s tým že môžu obsahovať viaceré prechodné kovy v usporiadaných alebo náhodných kombináciách, čo následne umožňuje prispôsobiť ich vlastnosti pre rozličné aplikácie – do roku 2022 bolo experimentálne pripravených štyridsaťšesť typov MXénov a ďalšie stále pribúdajú [1, 2].

Pri našej práci, v ktorej chceme uplatniť MXén pri vývoji citlivých elektrochemických biosenzorov, sa snažíme zúžitkovať jeho fascinujúce vlastnosti, akými sú hydrofilný charakter, vodivosť podobná kovom, ľahko laditeľná štruktúra a veľká plocha povrchu [1,2]. V pilotnej štúdii sme poukázali na tvorbu oxidov prechodného kovu na povrchu MXénu $Ti_3C_2T_x$ po jeho vystavení anodickému potenciálovému oknu. $Ti_3C_2T_x$ preukázal pozoruhodnú elektrokatalytickú aktivitu pri redukcii peroxidu vodíka [3].

V snahe aplikovať MXén pri príprave biosenzorov a naviac potlačiť nešpecifické interakcie sme modifikovali rozhrania MXénu využitím aryldiazóniových solí s derivátmi nesúcimi sulfo-alebo karboxybetaínovú skupinu. Biosenzorom na báze MXénových rozhraní modifikovaných betaínmi sme dokázali detegovať potenciálny biomarker rakoviny prsníka na klinicky relevantnej úrovni a rovnako i kolorektálny karcinóm. Naviac sme vyvinuli miniaturizovaný jednorazový MXénový nanobiosenzor s imobilizovaným enzýmom sarkozín oxidázou na detekciu sarkozínu, potenciálneho markera rakoviny prostaty v moči. Taktiež sme ako prví použili MXén, aby sme efektívne obohatili glykány z komplexných vzoriek séra, ktoré súvisia s vývojom alebo progresiou rakoviny. Navrhnuté MXénové rozhrania budú pravdepodobne vynikať i v glykoprolifácii rakovinových biomarkerov.

Práca vznikla vďaka finančnej podpore z projektu Agentúry na podporu výskumu a vývoja (APVV-22-

0345). Táto práca bola podporená finančnými prostriedkami získanými zo spoločnej výzvy V4-Kórea 2023.

- [1] Lorencová L., Kasák P., Košútová N., Jerigová M., Noskovičová E., Vikartovská A., Baráth M., Farkaš P., Tkáč J.: *Microchim. Acta* 191, 88 (2024).
- [2] Vikartovský A., Košútová N., Lorencová L., Kasák P., Bertók T., Tkáč J.: *ChemElectroChem*, v tlači (2025).
- [3] Lorencová L., Bertók T., Došeková E., Holazová A., Paprčková D., Vikartovská A., Sasinková V., Filip J., Kasák P., Jerigová M., Velič D., Mahmoud K.A., Tkáč J.: *Electrochim. Acta* 235, 471-479 (2017).

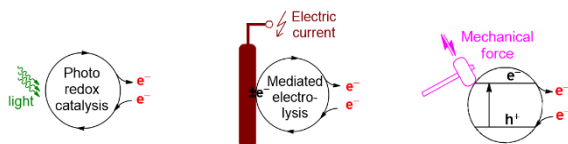
PP3**REAKCIE VYVOLANÉ PRENOSOM ELEKTRÓNU – POMOCOU SVETELNEJ, ELEKTRICKEJ A MECHANICKEJ ENERGIE**Michal Májek

Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta
Univerzity Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842
15 Bratislava IV, michal.majek@uniba.sk

Moderné spôsoby aktivácie organických molekúl sú aktuálnou témou pri vývoji novej syntetickej metodológie. Popri kovovej katalýze, organokatalýze a enzymatickej katalýze, ktoré si už našli svoje miesto v syntetickom diapazóne sa stáva čoraz populárnejšia redoxná aktivácia molekúl [1]. Pôvodne boli na vyvolanie prenosu elektrónu používané stechiometrické oxidanty a reduktanty.

Cieľom tejto prednášky je predstaviť alternatívy, ktorý využívajú na prenos elektrónu energiu svetla, elektrického poľa, či mechanochémiu (Obr. 1). Svetelná energia v spojení s foto-redoxnými katalyzátormi vyvolala búrlivý záujem o fotochémiu v posledných 15 rokoch. Organická elektrosyntéza je známa už od 19. storočia, avšak dnes zažíva tiež nebývalý rozmach. Nakoniec, podobné procesy vieme uskutočniť aj kombináciou piezoelektrických materiálov a mechanickej sily, či najnovšie mechanickou aktiváciou charge-transfer komplexov.

V prednáške si predstavíme nie len nové syntetické procesy, ale zameriame sa aj na štúdium ich mechanizmov a technické prevedenie takýchto reakcií [2].



Obr. 1 Nové možnosti ako vyvolať transfer elektrónu.

Financované EÚ (ERC, CAPELE, 101078608 a POO 09I01-03-V04-00018).

- [1] Májek M.: Modern Organic Photochemistry and Electrochemistry, Vydavateľstvo UK (2025).
- [2] Andrejčák S., Dudáš P., Májek M.: Synlett. 36, 1397-1402 (2025).

PP4

RACIONÁLNÍ DESIGN (ELEKTRO)KATALYTICKÝ AKTIVNÍCH MATERIÁLŮ – ZÁKLAD ENERGETICKÉ KONCEPCIE TŘETÍHO TISÍČLETÍ

Petr Krtil

Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského, AVČR,
v.v.i., Dolejšková 3, 18223 Praha, ČR
petr.krti@jh-inst.cas.cz

Defosilizace energetiky je určujícím trendem definujícím moderní společnost ve 21. století. Dostupnost nových energetických vektorů je v současnosti předmětem intenzivního výzkumu. (Elektro)katalytické procesy jsou klíčové pro energetickou transformaci, protože tyto procesy jsou nezbytné pro výrobu potravin, syntézu materiálů a výrobu paliv. Koncept bezfosilní společnosti předpokládá využití vodíku jako energetického vektoru, což zdůrazňuje důležitost elektrolytické výroby vodíku.

Elektrolytická produkce vodíku může demonstrovat přístup potřebný pro definovaný, kontrolovaný design škálovatelných katalyzátorů. Elektrolyza vody je kineticky řízena vylučováním kyslíku (OER). Složitost čtyř elektronového OER vylučuje použití konvenčních postupů designu katalyzátorů. V tomto případě je přístup „pokus-omyl“ nutno nahradit racionálním postupem, kdy je návrh katalyzátoru podporován fundamentálním pochopením elektrodového procesu založeným na kvantově chemickém modelování předcházejícím syntéze perspektivních katalyzátorů.

Design založený na racionálním přístupu bude demonstrován na třech základních případech: vysokoteplotní oxidy, alternativní iridiové oxidy pro OER v kyselém prostředí a kontrola selektivity OER v prostředí obsahujícím chloridy.

Prezentovaný výzkum byl podpořen Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy v rámci Operačního programu Jan Amos Komenský v rámci výzvy Špičkový výzkum v rámci projektu CZ.02.01.01/00/22_008/0004617.

PP5

METÓDY EVOLÚCIE PROTEÍNŮ VO VÝVOJI ENZÝMOV

Erik Sedlák^{1,2}, Ivana Timková¹, Veronika Holotová¹

¹Centrum interdisciplinárnych biovied Technologický a inovačný park UPJŠ, Jesenná 5, 041 54 Košice,
erik.sedlak@upjs.sk

²Katedra biochémie, Prírodovedecká fakulta UPJŠ,
Moyzesova 11, 041 54 Košice

Metódy modifikácie proteínov možno rozdeliť na racionálny dizajn a riadenú evolúciu. Zatiaľ čo racionálny dizajn vychádza z *in silico* analýz známych štruktúr, riadená evolúcia využíva experimentálne techniky založené na stratégii selekcie vyhovujúcich variantov z veľkých knižníc (až do 10^{12} variantov). K základným metódam racionálneho dizajnu patria displejové techniky, ako fágový, ribozómový či kvasinkový displej [1]. V našej práci sme sa zamerali na aplikáciu ribozómového displeja (RD) pri vývoji haloalkánových dehalogenáz (HLDs), ktoré sú perspektívnymi, no často suboptimálnymi biokatalyzátormi [2]. Ako modelový enzým sme použili variant DhaA_115-H272N, z ktorého sme pripravili knižnicu pomocou error-prone PCR. Táto knižnica bola vystavená štyrom kolám RD selekcie voči imobilizovanému substrátu (biotinylovaný HaloTag-ligand). Následný skrining vyselektovanej knižnice viedol k identifikácii dvoch variantov s pozmenenými vlastnosťami v porovnaní s originálnym variantom. Získané varianty (RD4-32 a RD4-37) vykazovali oproti DhaA_115-H272N zníženú termostabilitu (stanovenú CD a DSC), avšak vykazovali vyššiu enzymatickú aktivitu voči 1-chlórbutánu. Získané originálne výsledky potvrdzujú, že RD umožňuje výber stabilných a funkčných enzýmov bez potreby štruktúrnych údajov, čím predstavuje efektívny nástroj riadenej evolúcie pri vývoji biokatalyzátorov pre priemyselné aplikácie.

This work was supported by the EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No. 09I03-03-V04-00112 and by the grant agency of the Ministry of Education, Science, Research, and Sport of the Slovak Republic (grant no. VEGA 1/0074/22).

- [1] Plückthun A.: *Methods Mol. Biol.* 805, 3-28 (2012).
- [2] Nagata Y., Ohtsubo Y., Tsuda M.: *Appl. Microbiol. Biotechnol.* 99, 9865-9881 (2015).

PREDNÁŠKY - SEKCIA 1: ANALYTICKÁ CHÉMIA A FYZIKÁLNA CHÉMIA

1P01

PILOTNÍ STUDIE ELEKTROCHEMICKÉ REDUKCE VYBRANÝCH NUKLEOTIDŮ A DVOUVLÁKNOVÉ DNA NA NEMODIFIKOVANÝCH MIKROKRISTALICKÝCH DIAMANTOVÝCH ELEKTRODÁCH DOPOVANÝCH BOREM PŘI VELMI NEGATIVNÍCH POTENCIÁLECH

Michal Augustín¹, Vlastimil Vyskočil², Ondrej Szabó¹,
Kateřina Aubrechtová Dragounová¹, Jiří Barek²,
Marián Marton³, Alexander Kromka¹

¹Fyzikální ústav Akademie věd ČR, Cukrovarnická
10/112, 162 00, Praha 6, Česká republika,
augustin@fzu.cz

²Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta,
Katedra analytické chemie, UNESCO Laboratoř
environmentální chemie, Albertov 6, 128 43 Praha 2,
Česká republika

³Ústav elektroniky a fotoniky, Fakulta elektrotechniky
a informačních technologií, Slovenská technická
univerzita v Bratislavě, Ilkovičova 3, 812 19
Bratislava, Slovensko

Poprvé v historii byla umožněna elektrochemická redukce vybraných purinových nukleotidů – Guanosin-5'-monofosfátu (GMP), 2'-Deoxyguanosin-5'-monofosfátu (dGMP), Adenosin-5'-mono/di/trifosfátu (AMP/ADP/ATP) a pyrimidinových nukleotidů – cytidin-5'-monofosfátu (CMP), thymidin-5'-monofosfátu (TMP), jakož i nízkomolekulární dvouvláknové DNA (dsDNA) za použití nemodifikované bórem-dopované mikrokristalické diamantové elektrody – (B-MCDE). Samotná redukce byla monitorována pomocí lineární voltametrie (LSV) při velmi negativních potenciálech (v rámci nebo těsně blízkosti oblasti evoluce vodíku) a to s ohledem na oba testované typy povrchů elektrod – „H-terminovaná“ B-MCDE (H-B-MCDE) a „O-terminovaná“ B-MCDE (O-B-MCDE). Výsledky prokázali, že elektrochemická redukce všech analytů (kromě GMP) je možná na povrchu H-B-MCDE. Naproti tomu elektrochemická redukce všech vybraných analytů (kromě dsDNA) byla umožněna na O-B-MCDE. Okolní kyslík a krok preadsorpce látky (inkubací senzoru v roztoku analytu po dobu 30 s) měly zásadní vliv na opakovatelnost výsledků a v případě H-B-MCDE také na velikost voltametrických signálů a možnost redukce dGMP na jejím povrchu. Třeba zdůraznit že i v případě voltametrického stanovení vysokých koncentrací byla zaznamenána vysoká opakovatelnost experimentů, což

naznačuje minimální náchylnost k pasivaci pracovních elektrod. Z uvedeného je možné usuzovat, že tyhle i jiné excelentní vlastnosti B-MCDE mohou v budoucnu významně pomoci k rozvoji oblastí snímání a konstrukce elektrochemických biosenzorů za pomoci jiných biologicky významných molekul jako jsou například enzymy nebo protilátky.

1P02

ODSTRANĚNÍ KONTAMINANTŮ Z VOD POMOCÍ AKTIVNÍHO UHLÍ NA BÁZI ŠÍŠEK BOROVICE ČERNÉ

Jan Bednárek, Michal Vaštyl, Anna Gavlová, Adam Hruška

Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava,
Centrum energetických a environmentálních
technologií, Institut environmentálních technologií, 17.
listopadu 2172/15, 708 00 Ostrava-Poruba, Česká
republika, jan.bednarek@vsb.cz

Voda je nezbytnou složkou pro veškerý život na zemi a její znečištění tak patří mezi nejvýznamnější problémy moderní doby. Počet sledovaných skupin látek neustále narůstá. Patří mezi ně různé anorganické (těžké kovy) i organické (léčiva, pesticidy, PFAS) kontaminanty, mikroplasty, bakterie, apod. Zdaleka ne všechny znečišťovatele lze odstranit konvenčním čištěním odpadních vod, proto jsou studovány a vyvíjeny různé metody dočišťování vod.

Mezi tyto metody lze zařadit i adsorpci na aktivní uhlí. Uhlíkaté materiály se osvědčily při odstraňování různých typů kontaminantů díky svým vlastnostem, jako jsou např. přítomnost mikro- a mezopórů nebo vhodných povrchových funkčních skupin. V tomto příspěvku byly připraveny vzorky aktivního uhlí aktivací šišek borovice černé různými činidly (NaOH, Na₂CO₃, KOH, K₂CO₃). Tyto vzorky pak byly využity pro odstranění tří druhů léčiv (metformin, kofein, telmisartan) a tří druhů těžkých kovů (olovo, kadmium, měď).

Metformin se nejlépe sorboval na aktivní uhlí připravené za využití draselných aktivátorů, zatímco telmisartan a kofein a lépe sorbovaly na uhlí na bázi sodných sorbentů. Pro odstranění těžkých kovů se nejlépe jevil sorbent aktivovaný Na₂CO₃. Z kovů se nejlépe sorbovalo olovo a měď, kadmium bylo v kompetitivní sorpci odstraněno ve výrazně menší míře.

Tato práce vznikla za podpory projektu REFRESH – Research excellence for REgion Sustianability and High-tech Industries, reg.č. CZ.10.03.01/00/22_003/0000048 je spolufinancován Evropskou unií z operačního programu Spravedlivá transformace.

Experimentální výsledky byly získány s využitím velké výzkumné infrastruktury ENREGAT, podporované MŠMT, č. projektu LM 2023056.

1P03

VOLTAMETRICKÉ CHOVÁNÍ OXYSTEROLŮ

Eva Bláhová, Jana Kubešová, Kristýna Michnová, Karolina Schwarzová-Pecková

Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie, UNESCO laboratoř životního prostředí, Hlavova 8, 128 00 Praha 2, Česká republika, blahovaev@natur.cuni.cz

Oxysteroly jsou oxidované formy cholesterolu nebo jeho prekurzorů. Jde o biologicky aktivní látky, které se podílejí na metabolismu cholesterolu, tvorbě žlučových kyselin a syntéze steroidních hormonů. Jsou rovněž spojovány s řadou onemocnění, např. Neurodegenerativními chorobami nebo aterosklerózou. Detekce oxysterolů je složitá, avšak důležitá, jelikož mohou sloužit jako biomarkery nemocí. Také je nutné sledovat jejich obsah v potravinách kvůli negativním účinkům na lidské zdraví [1,2].

Cílem práce bylo studium voltametrického chování oxysterolů (7 α -, 7 β -, 25-hydroxycholesterolu a 7-ketcholesterolu) na elektrodě z borem dopovaného diamantu v přítomnosti silné kyseliny v acetonitrilu, která působí jako dehydratační činidlo. Oxysteroly, stejně jako jiné steroidní sloučeniny neobsahující aromatický kruh ani konjugované dvojné vazby, mohou být oxidovány pouze při vysoce pozitivních potenciálech v nevodném prostředí [3]. Oxysteroly v tomto prostředí poskytují ireverzibilní anodickou odezvu: 7 α - a 7 β -hydroxycholesterol se oxidují při potenciálu cca +0,8 V, 25-hydroxycholesterol při cca +1,5 V a 7-ketcholesterol při cca +1,9 V. Byl zkoumán vliv obsahu vody a koncentrace kyseliny na odezvu oxysterolů.

Byla vyvinuta metoda separace oxysterolů, cholesterolu a jeho prekurzorů (lanosterol, lathosterol) pomocí HPLC na reverzní fázi s elektrochemickou a spektrofotometrickou detekcí, přičemž nejlepší separace a odezva byly dosaženy v mobilní fázi složené z 50 mmol·l⁻¹ chloristanu sodného s 6% obsahem vody.

Tato práce vznikla za finanční podpory Grantové Agentury Univerzity Karlovy (projekt GAUK 172823) a Specifického vysokoškolského výzkumu (projekt SVV 260690).

- [1] Brzeska M., Szymczyk K., Szterk A.J.: *Food Sci.* 81, R2299-R2308 (2016).
- [2] Otaegui-Arrazola A., Menéndez-Carreño M., Ansorena D., Astiasarán I.: *Food Chem. Toxicol.* 48, 3289-3303 (2010).
- [3] Klouda J., Barek J., Nesměrál K., Schwarzová-Pecková K.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 47, 384-404 (2017).

1P04

ROZLOŽITELNÉ ZINKOVÉ BIOMATERIÁLY S PLA POVLAKOM

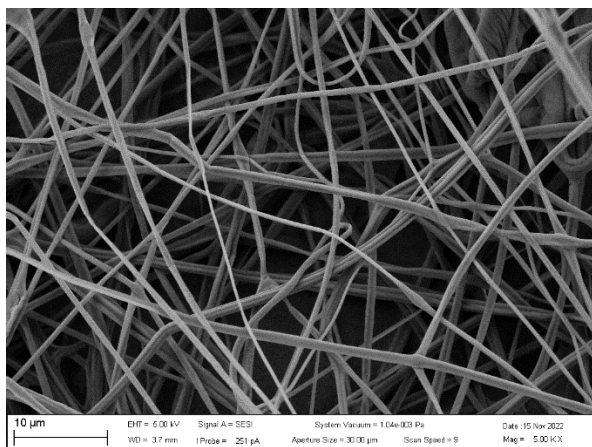
Viktória Čákyová¹, Ivan Shepa², Renáta Oriňaková¹

¹Katedra fyzikálnej chémie, Ústav chemických vied, PF UPJŠ v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice, viktoria.cakyova@student.upjs.sk

²Ústav materiálového výskumu, Slovenská akadémia vied, Watsonova 47, 040 01 Košice

V poslednom desaťročí sa biologicky odbúrateľné materiály na báze zinku (Zn) čoraz viac zvažujú ako alternatíva k tradičným implantátom, a to vďaka rovnováhe medzi mechanickou stabilitou a kontrolovanou degradáciou. Na rozdiel od materiálov na báze horčíka (Mg), ktoré sa rozkladajú veľmi rýchlo a uvoľňujú nadbytočné množstvo vodíka, zinkové zliatiny vykazujú nižšiu rýchlosť korózie za vzniku biologicky odbúrateľných produktov [1]. Lokálne zvýšená koncentrácia uvoľňovaných iónov zinku však môže vo fyziologickom prostredí nepriaznivo ovplyvniť regeneráciu kostného tkaniva a biokompatibilitu. Jedným z možných riešení týchto výziev je povrchová modifikácia substrátu, ktorá umožňuje regulovať uvoľňovanie iónov, podporiť biologickú odpoveď a zlepšiť osteointegráciu [2]. Kyselina polylaktická (PLA) patrí medzi najčastejšie používané biodegradovateľné polyméry – rozkladá sa na netoxické produkty a vytvára vhodné prostredie pre kontakt s bunkami [3]. V tejto práci bol pripravený 5 % roztok PLA polyméru, ktorý bol nanosený vo forme vlákien na povrch Zn substrátov metódou elektrostatického zvlákňovania (Obr. 1). Korózne správanie zinkových materiálov s PLA povlakom bolo skúmané metódou potenciodynamickej polarizácie. Rýchlosť korózie zinkového substrátu s PLA povlakom bola stanovená na 0,716 mm/rok, čo je takmer dvojnásobok oproti nemodifikovanému Zn substrátu s rýchlosťou

korózie 0,391 mm/rok. PLA povlak účinne zvyšuje rýchlosť degradácie Zn, čo je žiaduce pre aplikácie vyžadujúce kontrolovanú a včasnú resorpciu implantovaného materiálu.



Obr. 1 SEM snímka elektrostaticky pripravených PLA vlákien pri 5000-násobnom zväčšení.

Príspevok vznikol s podporou Agentúry na podporu výskumu a vývoja APVV-20-0278 a vnútorného vedeckého grantového systému PF UPJŠ [VVGs-2025-3485].

- [1] Hussain M., Ullah S., Raza M.R., Abbas N., Ali A.: *J. Funct. Biomater.* 14, 1 (2023).
- [2] Saberi A. et al.: *Coatings* 11, 747 (2021).
- [3] Mo X. et al.: *Corros. Sci.* 184, 109398 (2021).

1P05

REDUCTION OF AZO DYES IMMOBILIZED ON THE SURFACE OF BORON DOPED DIAMOND ELECTRODE FOR FURTHER BIOFUNCTIONALIZATION

Peter Čambal, Aashutosh Dube, Karolina Schwarzová-Pecková

Charles University, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, Albertov 6, 128 00 Prague, Czech Republic, cambal@natur.cuni.cz

Boron doped diamond (BDD) is an ideal candidate for applications in electrochemistry due a large variety of beneficial properties [1]. However, modification of the BDD surface is often required to create a rational design and enhance its properties for biosensor applications [2].

Various approaches for modification of BDD surface have been described, however covalent modification offers higher stability, reproducibility of the surface functionalization, and lesser non-specific adsorption, than other types of modification. Electrochemical grafting is a quick and robust method for covalent

modification, which enables attachment of organic molecules, bearing various functional groups [3].

In this work, electrochemical grafting of GBC diazonium salt introducing azo functional groups onto the BDD surface was investigated. The presence of organic film after grafting was confirmed by cyclic voltammetry and electrochemical impedance spectroscopy measurements and with inner sphere redox probe $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-/4-}$. Furthermore, two approaches to reduce azo group to amino group were studied – electrochemical reduction and reduction by Ti^{3+} . Confirmation of the presence of amino group was attempted by CV measurements with $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-/4-}$ in a solution of pH 1 – 7 to observe differences in its electron transfer kinetics, while the amino group on the BDD surface is protonated ($-\text{NH}_3^+$) or non-protonated ($-\text{NH}_2$).

Financial support from the Czech Science Foundation (project GAČR 23-05688S), Grant Agency of Charles University (project 80124), and Specific Scientific Research at Charles University (SVV 260690) is gratefully acknowledged.

- [1] Yang N., Yu S., Macpherson J.V., Einaga Y., Zhao H., Zhao G., Swain G.M., Jiang X.: *Chem. Soc. Rev.* 48, 157-204 (2019).
- [2] Svítková J., Ignat T., Švorc L., Labuda J., Barek J.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 46, 248-256 (2016).
- [3] Bélanger D., Pinson J.: *Chem. Soc. Rev.* 40, 3995-4048 (2011).

1P06

ŠTÚDIUM ELEKTRODEPOZÍCIE VYBRANÝCH KOVOV Z IÓNOVÝCH KVAPALÍN

Michal Fícel, Miroslava Semelová, Kateřina Čubová

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha 1, ČR, michal.ficel@jfifi.cvut.cz

Iónové kvapaliny sú látky s unikátnymi fyzikálno-chemickými vlastnosťami, ako sú nízky tlak pár, vysoká tepelná a radiačná stabilita, a v kombinácii s vhodnými extrakčnými činidlami, poskytujú alternatívu k bežne používaným prchavým organickým rozpúšťadlám, ako je napríklad chloroform. V procese kvapalinovej extrakcie predstavujú perspektívne médium pre extrakciu štiepných a aktivačných produktov, ako sú napríklad kobalt a molybdén. Cieľom tejto práce bola pomocou cyklickej voltametrie sledovaná zmena zloženia vodnej a organickej fázy v procese kvapalinovej extrakcie. Z dôvodu snahy o zvýšenie ekonomickej efektívnosti a

environmentálnej udržateľnosti procesu bola skúmaná aj možnosť regenerácie iónových kvapalín prostredníctvom elektrodepozície extrahovaných kovových kontaminantov. Elektrochemické experimenty boli realizované s využitím rôznych materiálov elektród a pri rôznych hodnotách prúdu a napätia, s cieľom optimalizovať podmienky pre účinné odstránenie kovov a následné opätovné použitie iónovej kvapaliny.

1P07

DEPOZÍCIA HYDROXYAPATITU NA PRÁŠKOVÝ ZINOK AKO VÝCHODISKOVÝ MATERIÁL PRE PRÍPRAVU BIODEGRADOVATEĽNÝCH IMPLANTÁTOV

Radka Gorejová, Ivana Mojžišová, Renáta Oriňaková

Katedra fyzikálnej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta Univerzity Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Dr. Kostlivého 1, 040 01 Košice, radka.gorejova@upjs.sk

Zinok (Zn) predstavuje novú a atraktívnu alternatívu k súčasne využívaným kovom ako je železo (Fe) a horčík (Mg), z ktorých sú pripravované medicínske biodegradovateľné materiály [1]. Tie majú slúžiť ako dočasná opora poškodeného kostného tkaniva počas doby jeho regenerácie priamo v tele pacienta, z ktorého sa samovoľne vylúčia po ukončení svojej podpornej funkcie. Nakoľko však lokálna zvýšená koncentrácia uvoľnených Zn^{2+} iónov vedie k nechcenej toxickkej reakcii [2], je potrebné tento kov, aj napriek jeho mnohým výhodám, modifikovať tak, aby sa zamedzilo jeho nežiadúcim biologickým účinkom po implantácii. Preto boli v tejto práci vyvíjané Zn kovové prášky modifikované keramickou vrstvou hydroxyapatitu (HAp), ktoré majú slúžiť ako vstupný materiál pre prípravu biodegradovateľných implantátov. Prídavok keramickej vrstvy má mať za následok riadené spomalenie degradácie materiálu, čo má viesť k potlačeniu toxického efektu degradačných produktov a zlepšeniu osteogenézy [3]. Kovové prášky modifikované HAp boli pripravené dvoma spôsobmi, a to bezprúdovou biomimetickou cestou z roztoku simulovaných telesných tekutín (SBF) a elektrochemickou depozíciou z roztoku obsahujúceho $Ca(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$ a $NH_4H_2PO_4$. Cieľom práce bolo optimalizovať podmienky prípravy HAp povlakovaných práškov (pH, elektrochemické parametre, zloženie elektrolytu, a.i.) a následne ich charakterizovať.

Financované EÚ NextGenerationEU prostredníctvom Plánu obnovy a odolnosti SR v rámci projektu ZETA č. 09I03-03-V04-00010.

[1] Lichen Z. et al.: *J. Mater. Sci.* 58, 8275-8316 (2023).

[2] Liu Q. et al.: *Funct. Mater.* 14, 206 (2023).

[3] Yang H. et al.: *Acta Biomater.* 71, 200-2014 (2018).

1P08

THE CARLA PROGRAMS AS A FRAMEWORK FOR MULTIDISCIPLINARY CAREER PATHWAYS IN PHOTONICS

Daniel Haško, Jozef Chovan

Slovak Centre of Scientific and Technical Information - International Laser Centre, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava, Slovak Republic, carla@cvtisr.sk

The CARLA initiative, funded by the EU's Horizon Europe program, tackles the shortage of skilled professionals in photonics - a fast-growing sector with over 430,000 employees in Europe. Challenges include limited education, low career awareness, rapid tech changes, aging workforce, and lack of diversity, especially affecting SMEs. CARLA targets university students and early researchers from photonics and other STEM fields, offering insights into technical and market trends, career opportunities, and connections across academia, industry, and peers. So far has held 13 Career Camps and 8 Capsules, engaging over 2000 participants, 207 companies, and 81 institutions, with high satisfaction and near gender balance.

Building on this success, 360 CARLA [1] expands the concept to a broader, multidisciplinary audience by focusing on photonics market applications in four key areas: Manufacturing/Industry 4.0, Health, Biotech & Medical Photonics, Quantum Technologies & Communications, and Energy, Environment & Sustainability. The program incorporates symposiums, networking and mentorship, technical and transversal training, and innovation and entrepreneurship experiences. In total, 360 CARLA will deliver 50 distinct activities, providing a comprehensive, application-focused career development pathway in photonics. By inspiring and equipping a diverse new generation of talent, project contributes to sustaining Europe's leadership in photonics innovation and industry.

In Bratislava, the 360 CARLA - Health: Biotech and Medical Photonics Careers Symposium will be held as a one-day event during Science and

Technology Week in Slovakia. It highlights career paths in photonics and its crucial role in healthcare innovation, helping attendees explore opportunities in academia and industry and plan their future careers. Detailed information's are on the website [1].

This project has received funding from the European Union Horizon Europe research and innovation program under grant agreement No 101135838.

[1] 360 CARLA website, <https://carlahub.eu/> (11 August 2025)

1P09

CHEMICKÉ SLOŽENÍ PODZEMNÍCH VOD V DEMĀNOVSKÉ DOLINĚ JAKO NÁSTROJ PRO HLEDÁNÍ SOUVISLOSTÍ MEZI JESKYNNÍMI SYSTÉMY **ŠTEFANOVÁ A DEMĀNOVÁ**

David Havlíček¹, Pavel Herich^{2,3}, Kateřina Havlíčková⁴

¹*Katedra anorganické chemie Př.F.UK, Albertov 6, Praha 2, Česká republika, havlicek@natur.cuni.cz*

²*Slovenská speleologická spoločnosť, Speleologický klub Demänovská dolina, Ploštín, Slovensko*

³*Štátna ochrana prírody Slovenskej republiky, Správa slovenských jaskýň, Liptovský Mikuláš, Slovensko*

⁴*Výzkumný ústav lesního hospodářství a myslivosti, Straný, Česká republika*

Přesné chemické analýzy podzemních vod mohou být užitečným nástrojem pro získání různých informací o studovaném jeskynním systému. Pokud jsou vzorky odebírány přibližně ve stejnou dobu a za stálého počasí, kdy se průtok nemění a doba potřebná k průtoku vody z jednoho odběrného místa do druhého není příliš dlouhá (řádově hodiny), můžeme předpokládat, že chemické složení podléhá významným změnám pouze v důsledku smíchání vod různého složení díky jejich odlišnému původu. Výsledky lze využít ještě lépe než výsledky klasických trasovacích experimentů a s menším úsilím pro jeskyňáře provádějící práci v jeskyních. V laboratoři je samozřejmě zapotřebí práce mnohem více. V posledních letech jsme tuto metodu používali k hledání souvislostí v největším jeskynním systému na Slovensku na základě vod z různých zdrojů. V tomto případě jsme sestavili sadu směšovací rovnic vyjadřujících bilanci následujících ukazatelů: hydrogenuhličitanů, vápník, hořčík, sírany, chloridy a dusičnany. Po výpočtu jsme získali relativní průtoky různých zdrojů. Pokud je zvolený model správný, získáme z různých sad ukazatelů (v tomto konkrétním případě zde

prezentovaném z hydrogenuhličitanů a síranů, z vápníku a síranů, a z hořčíku a síranů) přibližně stejné relativní průtoky. Pokud se průtoky liší, případně sada směšovacích rovnic nemá řešení, model je špatný. Porovnáním našich výsledků s naměřenými průtoky se předpokládaný model potvrdil.

1P10

ON-SITE DETECTION OF SALINOMYCIN USING TUNED AMALGAM PRINTED ELECTRODE PLATFORMS

Sofiia Ivakh, Jiří Barek

Charles University, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Hlavova 8, 128 43 Prague 2, Czech Republic, ivakhs@natur.cuni.cz

Monitoring veterinary pharmaceuticals in animal products and the environment is essential to protect public health and ensure compliance with safety regulations. Salinomycin, a widely used ionophore antibiotic in livestock, poses risks due to its potential toxicity and accumulation in the food chain. Therefore, rapid and accurate methods for detecting its residues are in increasing demand.

This study presents an electrochemical approach utilizing modified silver-based printed electrodes tailored for the sensitive detection of salinomycin. By enhancing the electrochemical window of the electrode surface, we enabled the direct voltammetric detection of this compound under mild, field-relevant conditions. Several fabrication routes were tested to identify the most efficient and reproducible sensor configuration.

The optimized system offers a promising balance between sensitivity, cost-effectiveness, and portability. The platform was successfully applied in the detection of trace amounts of salinomycin, supporting its potential use in on-site screening tools. This work shows how thoughtfully engineered printed electrodes can be adapted for real-world monitoring of pharmaceutical contaminants.

This research was supported by the Grant Agency of Charles University (GAUK project 176424) and the Specific University Research (SVV) at Charles University.

1P11**VYUŽITIE ZLATÝCH NANOČASTÍC PRI DETEKcii RÔZNYCH BIOANALYTŮV**

Nikola Jašňáková, Jana Shepa, Ivana Šišoláková,
Renáta Oriňáková

*Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ
v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice,
nikola.jasnakova@upjs.sk*

Elektrochemické senzory predstavujú kľúčovú technológiu pre rýchlu a presnú detekciu bioanalytov spojených so širokou škálou ochorení, ako je napríklad diabetes mellitus. Súčasný výskum sa sústreďuje na integráciu pokročilých materiálov, ako nanomateriály alebo rôzne kompozity, s cieľom zvýšiť selektivitu, stabilitu a miniaturnosť zariadení [1]. Vďaka tomu sú moderné senzory schopné detekcie bioanalytov aj pri extrémne nízkych koncentráciách a v rôznych fyziologických podmienkach. V tejto práci sa orientujeme na stanovenie glukózy v spojení s inými analytmi za účelom vytvorenia spojeného senzora pre viacero analytov. Za účelom dosiahnutia čo najlepších detekčných vlastností bol povrch elektród modifikovaný zlatými nanočasticami, ktoré boli pripravené elektrodepozíciou na povrch pracovnej elektródy. Uhlíková elektróda pripravená metódou sieťotlačie modifikovaná zlatými nanočasticami predstavuje vhodnú platformu pre stanovenie glukózy v požadovanom koncentračnom rozsahu od 1 mM do 30 mM, čo korešponduje s požiadavkami kladenými na bežne dostupné glukózové senzory. Zároveň, tieto nanočastice sú sľubným kandidátom pre stanovenie bioanalytov ako napríklad močová kyselina, askorbová kyselina alebo dopamín. Tieto analyty sú študované za účelom vytvorenia jednoduchého multisenzora pre širokospektrálne použitie v lekárskej alebo domácej praxi.

Financované EÚ NextGenerationEU prostredníctvom Plánu obnovy a odolnosti SR v rámci projektu č. 09-I05-03-V02-00047.

[1] Zhi Y. et al.: *Clin. Chim. Acta* 571, 120221 (2025).

1P12**VALIDÁCIA PRACOVNÉHO POSTUPU NA STANOVENIE UHLÍKA-14 VO VZORKÁCH POCHÁDZAJÚCICH Z JADROVÝCH ZARIADENÍ**

Dominik Juračka, Oľga Rosskopfová, Michal Galamboš

*Katedra jadrovej chémie, Prírodovedecká fakulta,
Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842
15 Bratislava, dominik.juracka@uniba.sk*

Uhlík-14 je aktivačný produkt s dlhou dobou polpremeny (5730 r), ktorý vzniká predovšetkým zachytnom neutrónov v atónoch dusíka a kyslíka. Patrí medzi analyticky náročné a ťažko merateľné rádionuklidy z dôvodu nízkej energie beta žiarenia (156,469 keV) a jeho prítomnosti v rôznych chemických formách. Aktivita C-14 sa stanovuje najmä v kvapalných a tuhých matriciach životného prostredia (voda, vodné rastliny, poľnohospodárske produkty) a v kvapalných a tuhých odpadoch pochádzajúcich z jadrových zariadení. Pri monitorovaní plyných vypustí z jadrových zariadení sa hodnotí a bilancuje aktivita C-14 vo vzorkách, ktoré sa získajú zachytnom plyných chemických foriem uhlíka do roztoku NaOH. Cieľom práce bolo optimalizovať a validovať metódu na stanovenie aktivity C-14 v kvapalných matriciach plyných vypustí s využitím kvapalinovej scintilačnej spektrometrie. Vzorka bola rozložená za kyslých podmienok, pričom vzniknutý CO₂ bol priamo zachytený do absorpčného média Carbosorb E a následne zmiešaný so scintilačným koktejlom. Metóda bola úspešne overená v rámci medzilaboratorného porovnávacieho testu „Environmental Radioactivity Proficiency Test Exercise 2021“ v Skúšobnom laboratóriu rádiochemickej analýzy KJCH PriF UK, ktoré je držiteľom akreditácie podľa STN EN ISO/IEC 17025:2017. Aplikácia na reálne vzorky z plyných vypustí jadrovej elektrárne potvrdila, že metóda spĺňa všetky požiadavky normy.

Tento príspevok bol podporený Excelentným grantom Univerzity Komenského v Bratislave GUKE 3184/2024 a projektom SK-SRB-23-0057.

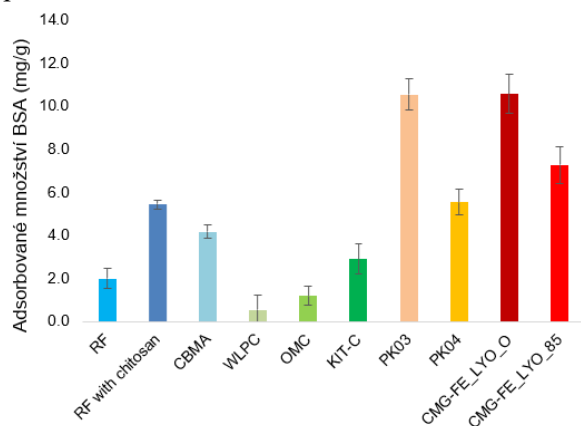
1P13 MATERIÁLY PRO SELEKTIVNÍ ADSORPCI BIOMOLEKUL

Samuel Kowalczyk, Václav Slovák

*Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, 30.
dubna 22, 701 03 Ostrava, Česká republika,
samuel.kowalczyk@osu.cz*

Cílem této studie bylo prozkoumat adsorpční schopnosti porézních uhlíkatých materiálů vůči modelovému proteinu (hovězí sérový albumin, BSA) a následně tyto materiály dále modifikovat technikami, jako je změna povrchového náboje, molekulární imprinting (MIPs) nebo nanášení funkčních vrstev (coating), s cílem dosáhnout cílené separace vybraných biomolekul ze složitých směsí. Zkoumána byla souvislost mezi adsorpční kapacitou a fyzikálně-chemickými vlastnostmi materiálů, jako je distribuce pórů, povrchový náboj a další parametry.

Dosavadní adsorpční experimenty byly provedeny ve vodném prostředí bez pufru, čímž byl minimalizován vliv iontové síly. Výsledky ukázaly významné rozdíly mezi jednotlivými vzorky (viz Obr. 1) a potvrdily přínos některých úprav, například kombinace uhlíkatého materiálu s chitosanem (změna náboje). V navazující fázi bude hodnocena selektivita sorbentů v pufrovaných systémech a při adsorpci dalších proteinů.



Obr. 1 Shrnutí adsorpce molekuly BSA na vybraných materiálech.

Děkujeme kolegyním Lucii Kořeně, Alžbětě Parchaňské a Evě Kinertové za poskytnutí vybraných vzorků.

1P14 LPME AKO ÚČINNÁ TECHNIKA PRE IZOLÁCIU ANALYTOV Z KOMPLEXNÝCH VZORIEK

Elena Kupcová

*Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita
Mateja Bela v Banskej Bystrici, Tajovského 40, 974 01
Banská Bystrica, elena.kupcova@umb.sk*

Koncept mikroextrakcie kvapalnou fázou (LPME), ktorý vychádza z klasickej extrakcie kvapalina-kvapalina (LLE), bol predstavený v 90. rokoch 20. storočia [1] a odvtedy si našiel široké uplatnenie ako účinná a udržateľná alternatíva ku konvenčným extrakčným technikám. Medzi hlavné výhody LPME patrí výrazné zníženie spotreby organických rozpúšťadiel, skrátenie extrakčného času, minimalizácia odpadu a zároveň zvýšenie extrakčnej účinnosti. Optimalizáciou extrakčných podmienok a vhodnou modifikáciou postupu LPME možno túto techniku prispôbiť vlastnostiam analytov a charakteru vzorky, čo umožňuje jej uplatnenie v klinickej analýze, kontrole bezpečnosti potravín či monitoringu polutantov v životnom prostredí. V rámci prednášky budú predstavené vybrané aplikácie LPME v spojení s HPLC analýzou, zamerané na stanovenie rôznych skupín analytov v komplexných vzorkách.

[1] Rutkowska M., Płotka-Wasyłka J., Sajid M., Andruch V.: *Microchem. J.* 149, 103989 (2019).

1P15 MUCHOVNÍK – ZDROJ ANTIOXIDAČNE AKTÍVNYCH LÁTOK

Kristína Masnicová, Ondrej Hruška, František Kreps,
Natália Smolárová

*Slovenská technická univerzita, FCHPT, Radlinského
9, 812 37 Bratislava, kristina.masnicova@stuba.sk*

Muchovník je v Európe zriedkavou a pestovateľsky nenáročnou rastlinou vzhľadom podobnou čučoriedke. Avšak obsahom antokyanínov a polyfenolov ju prevyšuje približne dvojnásobne. Tieto zlúčeniny majú preukázanú schopnosť pomáhať pri prevencii rozvoja rakoviny [1], a zároveň ich možno pridávať do potravinových produktov bez potreby ďalšieho spracovania, čo znižuje výrobné náklady.

Cieľom štúdie bolo poukázať na výživovú hodnotu muchovníka, predovšetkým na obsah antokyanínov. Charakterizáciu extraktov vodno-etanolových extraktov (1 g/10 ml) zo 4 odrôd muchovníka (Martin, Smoky, Thiesen, Nortline)

sme uskutočnili pomocou série spektrofotometrických a chromatografických analýz. Chromatografická analýza kyanidín-3-glukozidu (C-3-glc) a kyanidín-3-galaktozidu (C-3-gal) sa uskutočnila pomocou HPLC-DAD pri 520 nm na kolóne SunShell C18 s gradientovou elúciou použitím mobilnej fázy A (2 % kyselina mravčia) a B (acetonitril) [2].

Pre muchovník sme stanovili hodnotu antioxidačnej aktivity na 50 mg Troloxu/g vzorky, v porovnaní s alfa-tokoferolom s 522 mg Troloxu/g vzorky. Túto schopnosť zabezpečujú prítomné polyfenolické zlúčeniny. Rôzne odrody muchovníka obsahovali 64,24 – 90,70 mg polyfenolov/100 g čerstvej hmotnosti (FWT) a 3,39 – 9,14 mg/100 g FWT antokyanínov. Dominantnými antokyanínmi boli C-3-gal s obsahom 6,1 – 16,3 mg/kg a C-3-glc s 3,1 – 9,1 mg/100 g FWT. Všetky extrakty vykazujú vhodné vlastnosti ako zdraviu prospešné zložky v potravinových produktoch, ako sú gumové cukríky, nápoje alebo džemy.

Výskum bol podporený Vedeckou grantovou agentúrou MŠVVaM SR a SAV (VEGA) na základe zmluvy č. 1/0141/23.

- [1] Donno D., Cerutti A.K., Mellano M.G., Prgomet Z., Beccaro G.L.: *J. Funct. Foods* 26, 157-166 (2016).
 [2] Bąkowska-Bartczak A.M., Kołodziejczyk P.: *J. Agric. Food Chem.* 56, 9933-9940 (2008).

1P16 FENTANYLY, JEJICH DERIVÁTY A SMĚSI S JINÝMI NÁVYKOVÝMI LÁTKAMI – JEJICH ANALÝZA A FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÉ CHARAKTERIZACE

Tomáš Navrátil¹, Jana Skopalová², Jan Langmaier¹,
Vojtěch Hrdlička¹

¹Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.,
Dolejškova 3, 182 00 Praha 8, Česká Republika,
tomas.navratil@jh-inst.cas.cz

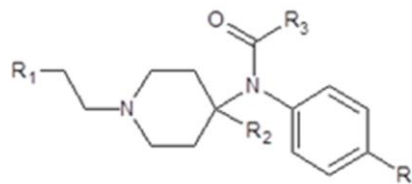
²Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká
fakulta, Katedra analytické chemie, 17. listopadu
1192/12, 771 46 Olomouc, Česká Republika

Opioidy (přírodní, polosyntetické i syntetické) hrají v medicíně klíčovou roli pro léčbu bolesti, avšak jsou také náchylné ke zneužívání a těžkým závislostem, zdravotním problémům a úmrtím z předávkování. Pro masové zneužívání syntetických opioidů odvozených od fentanylů (Obr. 1.A) [1] se vžilo označení „opioidní epidemie“. V posledních letech byly v Evropě zjištěny doposud neprostudované nitazení

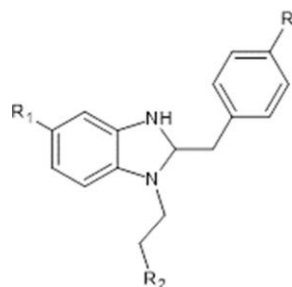
(Obr. 1.B), nové, vysoce účinné opioidy (až 1000krát účinnější než morfin) [2]. Přídavek nitazenů k fentanylům zvyšuje riziko vážného poškození zdraví a značně zvyšuje riziko předávkování. Jejich užívání je velmi nebezpečné a vedlo již k mnoha smrtelným předávkováním. Proto se jeví rychlá spolehlivá detekce/stanovení uvedených návykových látek jako velmi žádoucí [3].

V případě fentanylu a jeho analogů lze s výhodou využít jejich elektrochemickou reaktivitu. Přestože již byla vyvinuta řada jejich elektrochemických senzorů, stále existuje jen velmi málo znalostí o povaze analyticky používaných elektrochemických reakcí, o produktech elektrochemické oxidace piperidinu, který je primární elektroaktivní složkou ve struktuře fentanylů, a dalších reakčních produktů. Elektrochemické reakce N-substituovaných piperidinů navíc dosud nebyly systematicky studovány.

Ani elektrochemické chování nitazenů dosud nebylo studováno, chybí informace týkající se jejich redoxních vlastností, protolytického chování a lipofilicity. Pouze pro některé nitazení jsou k dispozici předpokládané disociační konstanty a hodnoty rozdělovacích koeficientů.



Obr. 1.A Obecná struktura fentanylů.



Obr. 1.B Obecná struktura nitazenů.

Autoři děkují za podporu poskytnutou projektem AMULET, podpořeným MŠMT ČR (CZ.02.01.01/00/22_008/0004558, spolufinancováno EU) a interním projektem a Ústavem fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i. (projekt č. 997125).

- [1] Langmaier J., Skopalová J., Zajacova Cechova M., Kahankova T., Jerga R., Bartak P., Samec Z., Navratil T.: *Electrochim. Acta* 441, 141848 (2023).

- [2] Ujvary I., Christie R., Evans-Brown M., Gallegos A., Jorge R., de Moraes J., Sedefov R.: *ACS Chem. Neurosci.* 12, 1072-1092 (2021).
- [3] Choinska M.K., Sestakova I., Hrdlicka V., Skopalova J., Langmaier J., Maier V., Navratil T.: *Biosensors-Basel* 12, 26 (2022).

1P17

OD VANÁDU K ORGANICKÝM MOLEKULÁM: NOVÁ GENERÁCIA ELEKTROLYTOV PRE PRIETOKOVÉ BATÉRIE

Veronika Niščáková¹, Andrea Straková Fedorková¹, Miroslav Almáši², Nikolas Király², Juan Pascual Asenjo³

¹Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Katedra Fyzikálnej chémie, Moyzesova 11, 041 54 Košice, veronika.niscakova@upjs.sk

²Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Katedra Anorganickej chémie, Moyzesova 11, 041 54 Košice

³INO-HUB Energy, Tomášiková 30, 821 01 Bratislava

Obnoviteľné zdroje sa rýchlo rozširujú, ale vzhľadom na ich nestálosť si vyžadujú účinné, lacné a ekologické riešenia skladovania. Redoxné prietokové batérie (RFB) ponúkajú vysokú účinnosť, dlhú životnosť a stabilitu siete, vďaka čomu sú vhodné pre rozsiahle použitie [1]. Vanádiová redoxná prietoková batéria patrí medzi najčastejšie využívané RFB a odlišuje sa od iných systémov pokročilou technológiou, všestranným využitím, minimálnymi nárokmi na údržbu a predĺženou životnosťou. Dôležitým komponentom je elektrolyt, ktorý nielen uľahčuje transport iónov, ale pôsobí aj ako aktívny materiál - je teda rozhodujúcim faktorom pri určovaní hustoty energie, stability a celkového výkonu systému. Avšak náklady na elektrolyt na báze vanádu (najmä V_2O_5) predstavujú najväčší podiel celkových nákladov [2]. Skúmajú sa nové systémy využívajúce organické elektroaktívne materiály. Tieto materiály sú atraktívne pre svoju obnoviteľnosť, štruktúrnu laditeľnosť a nízke náklady. Karbonylové zlúčeniny boli prvými organickými materiálmi používanými v RFB. Chinóny, aloxazíny a fenazíny slúžia ako bežné anolyty. Viologény a nitroxidové radikály sa tiež široko používajú pre ich vysokú rozpustnosť a rýchle redoxné správanie [3].

V tejto práci boli pripravené a otestované 3 druhy viologénov, ktoré by mohli slúžiť ako náhrada za súčasne využívaný vanádiový elektrolyt v RFB. Testované boli ich redoxné vlastnosti metódou cyklickej voltampérometrie pri rôznych

rýchlostiach zaťaženia. Všetky tri testované zlúčeniny vykazovali dobrú stabilitu a pozorovaný bol reverzibilný dvojelektrónový proces.

Táto publikácia vznikla vďaka podpore EÚ NextGenerationEU prostredníctvom Plánu obnovy a odolnosti SR v rámci projektu SUNFLOWERS č. 09I02-03-V01-00022 a vďaka podpore Kutúrnej a edukačnej grantovej agentúry Ministerstva školstva, výskumu, vývoja a mládeže Slovenskej republiky KEGA 002UPJŠ-4/2024.

- [1] Arevalo-Cid P., Dias P., Mendes A., Azevedo J.: *Sustain. Energy Fuels* 5, 5366-5419 (2021).
- [2] Huang Z., Mu A., Wu L., Wang H.: *J. Energy Storage* 45, 103526 (2022).
- [3] Yang G. et al.: *Adv. Mater.* 35, 1-28 (2023).

1P18

INOVATÍVNE KATALYZÁTORY PRE ELEKTROCHEMICKÝ ROZKLAD VODY

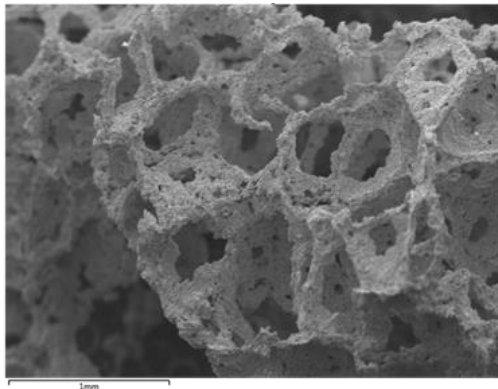
Renáta Oriňáková¹, Magdaléna Strečková², Alexandra Gubóová², Natália Podrojková¹, Mária Paračková¹

¹Katedra fyzikálnej chémie, Ústav chemických vied, PF UPJŠ v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice, renata.orinakova@upjs.sk

²Ústav materiálového výskumu, Slovenská akadémia vied, Watsonova 47, 040 01 Košice

Vodík je nízkoemisný nosič energie s potenciálom dekarbonizácie priemyselných odvetví s vysokými emisiami a je považovaný za palivo budúcnosti [1]. Pre zelenú výrobu vodíka prostredníctvom elektrolýzy vody sú nevyhnutné vysokoaktívne katalyzátory, ktoré optimalizujú priebeh reakcie znižovaním energetických nákladov. Súčasné platinové katalyzátory sú vysoko účinné, ale drahé a vzácne [2]. Naliehavá potreba nákladovo efektívnych a hojne dostupných alternatív k drahým platinovým katalyzátorom podnietila výskum v oblasti vysokoúčinných a stabilných katalyzátorov na báze fosfidov prechodných kovov [3]. Katalyzátory na báze fosfidov prechodných kovov si získali značnú pozornosť vďaka výhodným interakciám medzi atómami fosforu a kovu, ktoré vedú k zvýšenej vodivosti, vynikajúcej odolnosti voči korózii a pozoruhodnej katalytickej aktivite. Napriek ich potenciálu je katalytická aktivita fosfidov prechodných stále nižšia ako aktivita katalyzátorov na báze Pt, čo zdôrazňuje potrebu zvýšiť ich katalytickú účinnosť. Je všeobecne známe, že zloženie, štruktúra, morfológia a charakteristiky povrchu/rozhrania významne ovplyvňujú ich katalytickú aktivitu. V tejto práci boli študované rôzne inovatívne katalyzátory na báze prechodných kovov pre elektrochemický rozklad

vody, pripravené jednoduchými a škálovateľnými metódami. Multikomponentné katalyzátory s pórovitou štruktúrou (Obr. 1) zlepšujú synergické interakcie, optimalizujú elektronickú štruktúru a zväčšujú počet aktívnych miest. Vďaka tomu je katalýza efektívnejšia a stabilnejšia.



Obr. 1 FeNi penový katalyzátor pre elektrochemický rozklad vody.

Príspevok vznikol s podporou Vedeckej grantovej agentúry MŠVVaM SR [VEGA 1/0057/25].

- [1] Nasiru S.M. a kol.: *J. Energy Stor.* 73, 109207 (2023).
- [2] Zeng H. a kol.: *Nat. Commun.* 16, 4314 (2025).
- [3] Putri L.K. a kol.: *Chem. Eng. J.* 461, 141845 (2023).

1P19

VÝVOJ A CHARAKTERIZÁCIA VIACPRVKOVÉHO KATALYZÁTORA PRE ALKALICKÚ ELEKTROLÝZU VODY

Mária Paračková¹, Renáta Oriňaková¹, Magdaléna Strečková², Michal Ivanisko¹

¹Katedra fyzikálnej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 11 Košice, maria.parackova@student.upjs.sk

²Ústav materiálového výskumu SAV, Slovenská akadémia vied, Watsonova 47, 040 01 Košice

Vodík je dôležitou priemyselnou surovinou a zároveň perspektívnym nástrojom dekarbonizácie priemyslu a energetiky [1]. Jeho globálny dopyt takmer nepretržite z roka na rok rastie už niekoľko desaťročí. Podľa Medzinárodnej energetickej agentúry sa v roku 2023 spotrebovalo vyše 97 Mt vodíka, pričom väčšina bola vyrobená z fosílnych palív [2]. Environmentálne prijateľnejšou alternatívou je výroba vodíka elektrolýzou vody s využitím obnoviteľných zdrojov energie [1]. V dôsledku relatívne nízkej účinnosti (61 – 82 %) a vysokých výrobných nákladov (4,05 – 4,95 €/kg H₂ pre alkalické elektrolýzery vody) je však

využitie tejto technológie zatiaľ obmedzené. Tieto obmedzenia by mohli byť prekonané pomocou vysoko-účinných a cenovo dostupných katalyzátorov [3]. Cieľom tejto práce bolo preskúmať elektrokatalytické vlastnosti materiálu obsahujúceho päť kovov (Cu, Fe, Ni, Mo, Zn) zastúpených v približne rovnakej koncentrácii pre reakciu vývoja kyslíka (OER) v zásaditom prostredí. Katalyzátor bol pripravený metódou sól-gél s následným tepelným spracovaním a analyzovaný pomocou rotačnej diskovej elektródy zo sklovitého uhlíka, na ktorú bol aplikovaný vo forme katalytického atramentu. Voči OER vykazoval relatívne dobrú aktivitu – s nadpätím potrebným na dosiahnutie 10 mA·cm⁻² rovným 491 mV a Tafelovou smernicou 50 mV·dec⁻¹. Zároveň preukázal dobrú stabilitu pri 10 mA·cm⁻² počas 10 hodín.

Táto práca bola podporená Vnútorným vedeckým grantovým systémom – program ESGD Univerzity Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach (vvg-2023-2957) financovaným EÚ NextGenerationEU prostredníctvom Plánu obnovy a odolnosti SR v rámci projektu č. 09I03-03-V05-00008.

- [1] Hossain Bhuiyan M.M., Siddique Z.: *Int. J. Hydrogen Energy* 102, 1026-1044 (2025).
- [2] International Energy Agency, Global Hydrogen Review 2024, (2024).
- [3] Chen Z., Yun S., Wu L., Zhang J., Shi X., Wei W., Liu Y., Zheng R., Han N., Ni B.-J.: *Nanomicro Lett.* 15, 4 (2023).

1P20

PRECHODNÉ KOVOVÉ FOSFIDY AKO PERSPEKTÍVNE ELEKTROKATALYZÁTORY PRE REAKCIU VYLUČOVANIA VODÍKA

Natália Podrojková¹, Alexandra Gubóová², Magdaléna Strečková², Renáta Oriňaková¹

¹Katedra fyzikálnej chémie, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Dr. Kostlivého 1, 040 01 Košice, natalia.podrojkova@upjs.sk

²Ústav materiálového výskumu SAV, Watsonova 47, 040 01 Košice

Reakcia vylučovania vodíka (HER) predstavuje kľúčový proces pri výrobe zeleného vodíka elektrolýzou vody, ktorá je jednou z najperspektívnejších technológií pre udržateľnú energetiku. Vývoj efektívnych, cenovo dostupných a stabilných katalyzátorov je nevyhnutný pre zníženie energetických nákladov a zvýšenie účinnosti procesu. Prechodné kovové fosfidy (TMPs) sa v tomto kontexte javia ako sľubné materiály, vďaka ich výhodnej elektrónovej

štruktúre, vysokej vodivosti a schopnosti adsorbovať vodíkové medziprodukty. Tieto vlastnosti vyplývajú zo synergického pôsobenia kovových a fosforových centier, ktoré podporujú prenos náboja, zvyšujú počet aktívnych miest a optimalizujú väzbu vodíka, čím zlepšujú kinetiku reakcie.

V tejto práci sme sa zamerali na fosfid molybdénu (MoP), ktorý sa ukazuje ako perspektívna alternatíva k platinovým katalyzátorom. Kombináciou elektrochemických meraní a výpočtov pomocou teórie funkcionálu hustoty (DFT) sme skúmali HER aktivitu MoP v kyslom, neutrálnom a zásaditom prostredí. Najvyššia aktivita bola pozorovaná v zásaditom médiu (1 M KOH), s najnižším odporom prenosu náboja (7,12 Ω) a Tafelovou krivkou (57 mV.dec⁻¹). DFT výpočty potvrdili adsorpciu H₂O preferovanú na MoP(101) a (110) a priaznivú hodnotu Gibbsovej energie adsorpcie vodíka ($\Delta G_{H^*} = 0,15$ eV) na MoP(100).

Výsledky poukazujú na význam orientácie povrchu, typu aktívnych miest, pH prostredia a molekulovej interakcie pri návrhu účinných TMPs katalyzátorov pre HER.

Táto práca bola podporená z prostriedkov EÚ – NextGenerationEU prostredníctvom Plánu obnovy a odolnosti Slovenskej republiky v rámci projektu č. 09I03-03-V04-00109.

1P21

REDOX ACTIVITY AND CYTOTOXICITY OF COPPER AND ZINC COMPLEXES WITH A TMS-SUBSTITUTED INDOLO [2,3-C]QUINOLINE-DERIVED SCHIFF BASE

Peter Rapta

Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, SK-81237 Bratislava, Slovakia, peter.rapta@stuba.sk

Recently, we reported on the antiproliferative activity and mechanisms of action of Schiff bases derived from indoloquinolines, indolobenzazepines, indolobenzazocines and indolobenzazonines [1,2]. The similarity of silicon to carbon makes it the ideal choice as a carbon bioisostere, while some differences between these elements lead to marked changes of the physicochemical and pharmacological properties of the resulting siladugs. The attachment of the trimethylsilyl (TMS) group to the proligand backbone increased the lipophilicity. Therefore, we recently studied the redox activity and cytotoxicity of copper (1)

and zinc (2) complexes with a TMS-substituted indolo [2,3-c]quinoline-derived Schiff base [3]. The protonation state of the corresponding proligand corresponds to the neutral form at physiological pH, and metal complexes 1 and 2 were also stable at this pH and dimethylsulfoxide (DMSO). Both proligand and 2 were found to generate reactive oxygen species (ROS) under cell free conditions and this was in accordance with their redox activity established by cyclic voltammetry. The ability of 1 to generate ROS was investigated in the presence of ascorbate (Asc) as a natural reducing agent. We found that much smaller amounts of radicals were formed in the absence of Asc indicating the important role of the natural reducing agents to produce ROS.

The study was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contracts nos. APVV-19-0024, APVV-23-0195 and by the grant agency VEGA (contract no. 1/0392/24).

- [1] Bacher F., Wittmann C., Nové M., Spengler G., Maré M.A., Enyedy E.A., Darvasiová D., Rapta P., Reiner T., Arion V.B.: *Dalton Trans.* 48, 10464 (2019).
- [2] Kuznetcova I., Bacher F., Alfadul S.M., Tham M.J.R., Ang W.H., Babak M.V., Rapta P., Arion V.B.: *Inorg. Chem.* 61, 10167 (2022).
- [3] Wittmann C., Besleaga I., Mahmoudi S., Palamarcu O., Balan-Porcarasu M., Dascalu M., Shova S., Cazacu M., Kiricsi M., Igaz N., Dömötör O., Enyedy E.A., Dvoranová D., Rapta P., Arion V.B.: *Dalton Trans.* 54, 7882 (2025).

1P22

GLUKÓZOVÉ SENZORY NA BÁZE TiO₂ MATERIÁLOV

Jana Shepa¹, Richard Filip¹, Ivan Shepa², Nikolas Király³, Ivana Šišoláková¹, Renáta Oriňáková¹

¹Katedra fyzikálnej chémie, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice, jana.shepa@upjs.sk

²Ústav materiálového výskumu, Slovenská akadémia vied, Watsonova 47, 040 01 Košice

³Katedra anorganickej chémie, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice

Enzymatické senzory pre stanovenie glukózy v krvi predstavujú štandardné zariadenia, ktoré sú bežne využívané širokým spektrom používateľov. Napriek tomu, tieto senzory majú nevýhody spojené hlavne s nestabilitou využívaných enzýmov (nestabilita nad 44°C alebo pri pH pod 2 a nad 8). Naproti tomu, TiO₂ predstavuje materiál, ktorý nie je zaťažovaný nedostatkami používaných

enzýmov a vykazuje zaujímavé vlastnosti v kontexte detekcie glukózy a teda tvorba väzby medzi molekulou glukózy a TiO_2 , pričom vzniká komplex prenosu náboja (ligand-to-metal charge transfer complex). Glukózový senzor na báze anodizovaného titánového pliešku vykazuje široký praktický lineárny rozsah (1–15 mM) pri neutrálnom pH, ktorý pokrýva typické koncentrácie glukózy u pacientov s diabetes mellitus. Selektivita senzora a jeho limit detekcie boli stanovené na $8,3 \text{ k}\Omega \cdot \text{mM}^{-1}$ a 1,2 mM. Na základe týchto výsledkov možno tento typ systému považovať za veľmi perspektívneho kandidáta pre monitorovanie hladiny glukózy v krvi, ktorý by mohol v budúcnosti nahradiť konvenčné enzymatické glukózové senzory [1]. Na účely ďalších experimentálnych meraní bola zvolená aj alternatívna prístupová stratégia – platforma s uhlíkovou elektródou pripravenou metódou sieťotlače modifikovaná nanočasticami rutilu s veľkosťou menšou ako 100 nm. Využitie SPCE prispieva k zefektívneniu meraní, a to jednak znížením požadovaného objemu vzorky (60 μL), ako aj miniaturizáciou zariadenia, čo zjednodušuje celkovú manipuláciu.

Financované EÚ NextGenerationEU prostredníctvom Plánu obnovy a odolnosti SR v rámci projektu č. 09-I05-03-V02-00047.

[1] Hovancová J.: *J. Electroanal. Chem.* 878, 114589 (2020).

1P23

ELECTROCHEMICAL CELLS WITH BORON DOPED DIAMOND ANODES FOR OF OXIDATION OF XENOBIOTICS

Karolina Schwarzová-Pecková¹, Lucie Pražáková¹, Martin Šeřík¹, Mikuláš Zich¹, Sanay Prakash¹, Paweł Lochyński², Andrew Taylor³, Jan Fischer¹

¹Charles University, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, Albertov 6, 128 00 Prague 2, Czech Republic, karolina.schwarzova@natur.cuni.cz

²Institute of Environmental Engineering, Wrocław University of Environmental and Life Sciences, pl. Grunwaldzki 24, 50-363 Wrocław, Poland

³FZU - Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, Na Slovance 2, 182 00 Prague 8, Czech Republic

In recent twenty years, boron doped diamond (BDD) anodes have gained a wide popularity in academic sphere as prospective material for water disinfection and waste water treatment. These non-active anodes benefit from production of hydroxyl radicals $\text{OH}^\bullet$ on the surface at highly positive potentials due to anodic water decomposition. $\text{OH}^\bullet$

radicals are physically sorbed on the BDD surface and consequently oxidize non-specifically organic substances. The efficiency of these electrochemical advanced oxidation processes (EAOPs) depends on many factors, including electrochemical cell design (anode/cathode material, their positioning, cell volume), operational parameters (applied potential/current density, convection of the solution), and composition of the solution (type of xenobiotics, pH, electrolyte) [1, 2].

Although EAOPs using BDD anodes usually allows for significant reduction in xenobiotic's concentration, it has been observed that some fraction of the parent compound as well as various degradation (by)products may persist, even showing significant toxicity [3]. These by-products may include halogenated compounds (trihalomethanes, haloacetic acids, haloacetonitriles), carboxylic acids, sulfoxides and many other specific compounds arising from the structure of the original xenobiotics.

Herein, we will compare the design of various electrochemical cells developed in our laboratory with commercially available cells. Batch and flow-by cells with planar BDD anodes as well as flow-through cells with porous BDD anodes will be presented. 3D-print technologies were using to fabricate cells with separated anodic and cathodic compartments. Degradation efficiency achieved using selected cells was evaluated using *e.g.*, doxycycline, amoxicillin, and paracetamol as model xenobiotics.

Financial support from the Czech Science Foundation (project GAČR 25-14463L), Grant Agency of Charles University (project GAUK 392825), and Specific Scientific Research at Charles University (SVV 260690) is gratefully acknowledged.

- [1] He Y.P., Lin H., Guo Z., Zhang W., Li H., Huang W.: *Sep. Purif. Technol.* 212, 802-821 (2019).
- [2] Cornejo O.M., Murrieta M.F., Aguilar Z.G., Rodríguez J.F., Márquez A.A., León M.I., Nava J.L.: *Chem. Eng. J.* 496, 153935 (2024).
- [3] Mazaleuskaya L.L.: *Pharmacogenet Genomics* 25, 416 (2015).

1P24

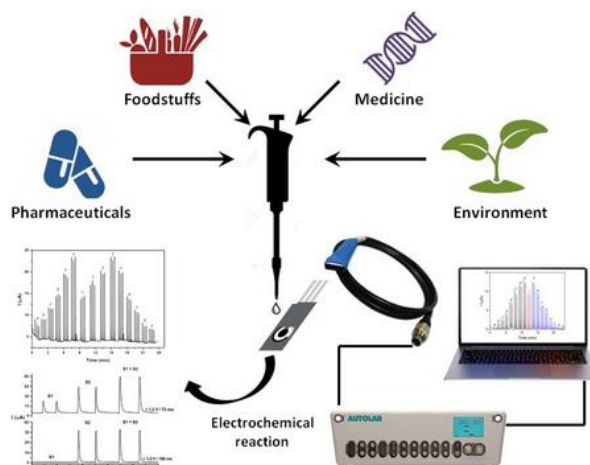
VSÁDZKOVÁ INJEKČNÁ ANALÝZA S ELEKTROCHEMICKOU DETEKCIOU AKO UŽITOČNÝ PROSTRIEDOK V POTRAVINÁRSKEJ A FARMACEUTICKEJ PRAXI

Ľubomír Švorc, Soňa Slašťanová, Monika Čerňanská,
Simona Nutterová, Marek Haššo

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

Vsádzková injekčná analýza (Batch Injection Analysis, BIA) v spojení s elektrochemickou detekciou predstavuje perspektívnu analytickú techniku s vysokou rýchlosťou analýzy, nízkou spotrebou vzorky a reagensií, ako aj jednoduchou implementáciou [1]. Umožňuje priame a reprodukovateľné meranie bez potreby náročnej prípravy vzoriek, čo ju predurčuje na aplikácie v oblasti potravinárstva a farmaceutického priemyslu.

Prednáška sa zameria na optimalizačné stratégie pri vývoji a validácii nových analytických metód s využitím BIA systému s elektrochemickou detekciou. Pozornosť bude venovaná konkrétnym aplikáciám, ako je stanovenie farmaceutických účinných látok a potravinárskych aditív (Obr. 1) [2,3]. BIA s elektrochemickou detekciou sa javí ako efektívny a robustný nástroj pre modernú analytickú prax.



Obr. 1 Možnosti uplatnenia BIA systému s elektrochemickou detekciou v analytickej praxi.

Tento príspevok vznikol s podporou VEGA MŠVVaM SR a SAV pre projekt č. 1/0036/24, 1/0017/23, APVV-23-0066 a SK-PL-23-0013.

- [1] Haššo M., Švorc Ľ.: *Monatsh. Chem.* 153, 985-1000 (2022).
- [2] Haššo M., Matúšková I., Švorc Ľ.: *J. Food Compos. Anal.* 115, 105035 (2023).
- [3] Haššo M., Sarakhman O., Ďurdič S., Stanković D., Švorc Ľ.: *J. Electroanal. Chem.* 942, 117578 (2023).

PREDNÁŠKY - SEKCIA 2: ANORGANICKÁ CHÉMIA A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA

2P01

MECHANOCHEMICKÁ SYNTÉZA HYDROXYAPATITU ZA VYUŽITIA VAJEČNEJ ŠKRUPINY: PREDPOKLADY A PRVÉ EXPERIMENTY

Matej Baláž¹, Fanni Rontová², Bronislava Pokorná²,
Kamil Szmuc³, Yaroslav Shpotyuk^{3,4}, Lenka
Luptáková², Eva Petrovová²

¹Ústav geotechniky SAV, Watsonova 45, 040 01
Košice, Slovensko, balazm@saske.sk

²Univerzita veterinárskeho lekárstva a farmácie
v Košiciach, Komenského 68, 041 81 Košice,
Slovensko

³Faculty of Exact and Technical Sciences, University
of Rzeszów, 1, Pigonia str, Rzeszów, 35-959, Poland

⁴Ivan Franko National University of Lviv, 107
Tarnavskoho str, Lviv, 79017, Ukraine

Biokeramické materiály na báze hydroxyapatitu sú veľmi zaujímavé z hľadiska ich potenciálnej aplikácie v implantátoch kĺbov a kostí. Konvenčné metódy prípravy týchto materiálov vo väčšine prípadov využívajú viacstupňové zdĺhavé prístupy. V našom prípade sme použili mechanochemický prístup. Mechanochemia je alternatívnou metódou voči tradičnej roztokovej chémii, kedy sa využívajú rozpúšťadlá a nie je potrebné umelo zvyšovať teplotu. Vo väčšine prípadov možno procesy realizovať „zelenšie“, čo sa demonštruje výpočtom metrik zelenej chémie [1]. Navyše, ako zdroj vápnika sme použili vaječnú škrupinku, veľmi významný odpadový materiál. Výhoda využitia mechanochemických postupov pre zhodnotenie vaječného odpadu bola zdôraznená napr. v prehľadnom článku [2]. V rámci príspevku budú prezentované predbežné výsledky mechanochemickej syntézy hydroxyapatitu. Okrem iného aj fakt, že napriek dodržaniu experimentálnych podmienok v štúdiu [3], ktorou sme sa inšpirovali, dochádzalo k veľmi významnému oteru korundu z mlecích guľôčok a stien mlecej komôrky. Úspešnosť syntézy bola hodnotená pomocou RTG analýzy a vybraná vzorka bola analyzovaná pomocou transmisnej elektrónovej mikroskopie. Vybrané experimenty boli monitorované z hľadiska zmien tlaku a teploty počas mletia. Napokon sa úpravou podmienok podarilo získať takmer čistý hydroxyapatit bez oteru iba s malým obsahom nezreagovaného kalcitu (vzhľadom na RTG analýzu). S vybranou vzorkou boli uskutočnené aj testy embryotoxicity na kuracích embryách. V budúcnosti sa plánuje za pomoci štatistického prístupu (plánovanie experimentov,

metóda ANOVA) definitívne optimalizovať podmienky mletia aby sa pripravil úplne čistý hydroxyapatit. Rovnako sa plánuje detailnejšia analýza biokompatibility pripravených materiálov.

Táto práca vznikla za podpory Agentúry pre výskum a vývoj (projekt APVV-23-0372) a grantovej agentúry VEGA (projekt 2/0112/22).

- [1] Fantozzi N., Volle J. N., Porcheddu A., Virieux D., Garcia F., Colacino, E.: *Chem. Soc. Rev.* 52, 6680-6714 (2023).
- [2] Baláž, M.: *Adv. Colloid Interface Sci.* 256, 256-275 (2018).
- [3] Ferro A., Seixas T., Guedes M.: *Ceram. Int.* 50, 282-292 (2024).

2P02

SYNTHESIS OF $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ MXENE BY ETCHING WITH VARIOUS FLUORIDES

Marek Baráth¹, Barbora Alföldyová¹, Pavol Farkaš¹,
Andrej Vikartovský¹, Ľubomír Orovčík², Monika
Jerigová^{3,4}, Peter Kasák⁵, Ján Tkáč¹, Lenka Lorencová¹

¹Institute of Chemistry SAS, Dúbravská cesta 9/5807,
845 38 Bratislava, Slovakia, marek.barath@savba.sk

²Institute of Materials and Machine Mechanics,
Dúbravská cesta 9/6319, 845 13 Bratislava, Slovakia

³Department of Physical Chemistry, Faculty of
Natural Sciences, Comenius University, Mlynská
dolina, 842 15 Bratislava, Slovakia

⁴International Laser Centre-Slovak Centre of Scientific
and Technical Information, Ilkovičova 3, 841 04
Bratislava, Slovakia

⁵Center for Advanced Materials, Qatar University,
P.O. Box 2713, Doha, Qatar

MXenes are a novel class of two-dimensional (2D) inorganic materials with the general formula $\text{M}_{n+1}\text{X}_n\text{T}_x$, obtained by selective etching the A-layer from so-called MAX phases. In these phases, "M" typically represents an early transition metal such as Ti, V, or Mo; "A" is an element from groups 13 or 14 of the periodic table (commonly Al, Si, or Ga); and "X" stands for carbon and/or nitrogen. Due to the weaker M–A bonds compared to M–X bonds, the A-layer can be selectively removed, yielding MXenes with exceptional electrical, chemical, and mechanical properties (Fig. 1) [1]. These unique characteristics have generated significant interest in MXenes for a wide range of applications, including energy storage, electronics, biosensing, and water purification.

The most widely used method for etching MAX phases involves direct exposure to hydrofluoric acid (HF). However, because of HF's high toxicity and associated environmental risks, there is growing interest in alternative, more sustainable

etching approaches. One promising strategy involves the *in situ* generation of HF via the reaction of hydrochloric acid (HCl) with various fluoride salts [2]. Despite this, no systematic investigation has yet addressed, how the specific choice of fluoride salt influences the properties of the resulting MXenes.

In this study, we synthesize $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ MXenes using seven different fluoride salts - AgF , LiF , CuF_2 , NiF_2 , MnF_2 , CoF_3 , and FeF_3 - and systematically optimize the reaction conditions. We also explore the subsequent surface functionalization with biologically active γ -aminobutyric acid (GABA) of the resulting material, aiming to tailor their properties for specific applications.

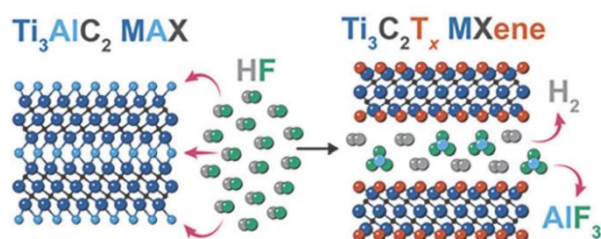


Fig. 1 The principle of MXene synthesis by etching the 'A' layer with HF.

The authors would like to acknowledge the financial support received from the projects of the Slovak Research and Development Agency (APVV-22-0345 and APVV-23-0083). This work was supported by funding received from the V4-Korea 2023 Joint Call. This work was jointly supported by Qatar University and the Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences-IRCC-2024-429.

- [1] Cai Y., Xiao F.X.: *Acta Phys. - Chim. Sin.* 40, 2306048 (2024).
- [2] Bi W. et al.: *Prog. Mater. Sci.* 142, 101227 (2024).

2P03

KEY ASPECTS IN CORROSION OF SUPERALLOYS IN MOLTEN FLUORIDE SALTS

Miroslav Boča, Viliam Pavlík, Ramu Ambati, Niketan Patel

Institute of Inorganic Chemistry SAS, Dúbravská cesta, 9, 845 36 Bratislava, Slovak Republic, miroslav.boca@savba.sk

The main identified aspect in the corrosion of Incoloy 800H/HT in molten FLiNaK (eutectic mixture of LiF, NaF and KF) is the fact that hydrogen, in the form of HF and/or H_2O , contributes to the corrosion acceleration dramatically (up to six-fold) in comparison with the only oxygen presence. This observation was

confirmed on the series of selected additives (CrF_3 , $\text{CrF}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, Cr_2O_3 , Na_2O , KF, and KHF_2). The role of additives was to serve as so-called corrosion accelerators in order to speed up the corrosion process of the material. The authors performed accelerated corrosion tests to confirm previous findings [1-3] and at the same time to resolve inconsistencies found in the literature. From the point of view of the corrosion efficiency of the FLiNaK eutectic mixture on the Incoloy 800H/HT model alloy, not only the effect of additions but also their concentration of the listed salts containing chromium, oxygen, hydrogen or water was evaluated. In addition, two different crucible materials were used, sintered alumina and glassy carbon. Corrosion strength of investigated additives increases in order $\text{Na}_2\text{O} < \text{KF} < \text{Cr}_2\text{O}_3 < \text{CrF}_3 < \text{KF} \cdot \text{HF} < \text{CrF}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (Fig. 1). Corrosion rate was found to be higher when glassy carbon crucibles were used.

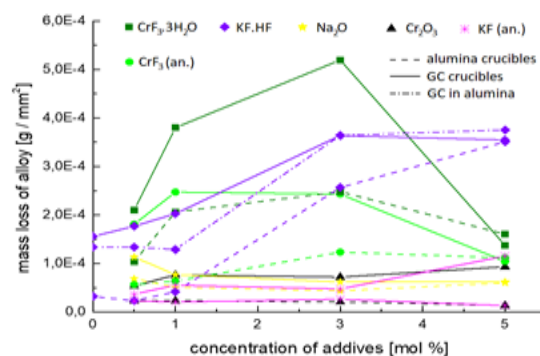


Fig. 1 Dark green squares = hydrated CrF_3 , light green circles = anhydrous CrF_3 , black triangles = Cr_2O_3 , yellow stars = Na_2O , violet spades = hydrated KF, magenta crosses = anhydrous KF, full lines = glassy carbon crucibles used, dash lines = alumina crucibles used, dash-dot line = GC inserted into the alumina crucible.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-19-0270 and by Slovak grant agency: VEGA 2/0083/24.

- [1] Pavlík V., Boča M., Kityk A.: *Corros. Sci.* 195, 110011 (2022).
- [2] Pavlík V., Kontrík M., Boča M.: *New J. Chem.* 39, 9841-9847 (2015).
- [3] Patel N.S., Pavlík V., Kubíková B., Nosko M., Danielik V., Boča M.: *Corros. Eng. Sci. Technol.* 54, 46-53 (2019).

2P04

MAGNETOAKTÍVNE ZLÚČENINY MEDICESTA KOVOVÝCH KOMPLEXOV K CIEĽU MOLEKULY DNA

Michaela Červeňáková, Ján Titiš

Fakulta prírodných vied, Ústav chémie
a environmentálnych vied, Univerzita sv. Cyrila
a Metoda v Trnave, Nám. J. Herdu 2, 917 01 Trnava,
Slovenská republika, cervenakova2@ucm.sk

Súčasná odborná literatúra poskytuje množstvo príkladov Cu(II) komplexov analyzovaných z rôznych hľadísk. Tieto komplexy sa bežne využívajú ako modelové systémy pri štúdiu štrukturálnych, spektroskopických, magnetických, redoxných a katalytických vlastností [1]. V poslednom období sa čoraz väčšia pozornosť venuje aj ich potenciálu v medicínskej chémii, najmä farmakologickým vlastnostiam voči mikroorganizmom a vybraným typom malignít. Niektoré mednaté komplexy, ako napríklad skupina liečiv Casiopeinas, už postúpili do klinických štúdií pri liečbe onkologických ochorení, ako sú kolorektálny karcinóm či akútna myeloidná leukémia [2]. Okrem nich sa v predklinickej fáze úspešne skúmajú aj ďalšie neplatínové komplexy kovov, ako sú železo, striebro či ruténium, ktoré vykazujú unikátne mechanizmy biologickej aktivity [3].

Motivovaní sľubnými biologickými a štrukturálnymi vlastnosťami komplexov, ako bolo uvedené vyššie, a našou neustálou vedeckou angažovanosťou v tejto oblasti, prezentujeme prehľad syntézy a charakterizácie niektorých nových Cu(II) komplexov typu $[MLCl_2]$ a $[ML(H_2O)_2(NO_3)_2]$. Okrem toho sa na našom pracovisku venujeme príprave biologicky aktívnych komplexov prechodných kovov ($M = Fe, Co, Ni$), ktoré obsahujú rôzne N- a N,O-donorové bioaktívne ligandy, ako napríklad 2,2'-bipyridín, 1,10-fenantrolín a 2,2':6',2''-terpyridín. Na určenie štruktúry komplexov boli použité rôzne experimentálne techniky (scXRD, IR, UV-Vis, EPR, fluorescenčná spektroskopia, elementárna analýza C/H/N/S) v kombinácii s výpočtovými metódami DFT a *ab initio*. Keďže DNA je považovaná za primárny cieľ väčšiny protinádorových a antimikrobiálnych liečiv, bol navrhnutý mechanizmus väzby syntetizovaných komplexov na ct-DNA. Potenciálne biologické vlastnosti komplexov boli hodnotené *in vitro* pomocou spektroskopických metód vo vodnom roztoku, čím sa stanovila väzbová konštanta K_b . Väzbová afinita komplexov k ct-DNA bola ďalej

skúmaná pomocou molekulového dokovania. Predikcia biologických a farmakokinetických vlastností bola realizovaná pomocou online nástroja SwissADME. Antibakteriálnu aktivitu komplexov sme analyzovali štandardnou bujónovou mikroriediacou metódou *in vitro*, pričom sa stanovili hodnoty minimálnej inhibičnej koncentrácie (MIC). Testovanie prebehlo na vybraných gram-pozitívnych a gram-negatívnych baktériách kmeňoch *Klebsiella*, *Pseudomonas*, *Acinetobacter*, *Enterococcus* a *Staphylococcus*.

Podakovanie patrí predovšetkým môjmu školiťovi prof. J. Titišovi a Dr. E. Samolovej za meranie kryštalografických dát a riešenie štruktúr. Táto práca vznikla vďaka finančnej podpore projektu VEGA 1/0086/21 a FPVV 47-2025.

- [1] Abdel-Rahman L.H., Abdelghani A.A., AlObaid A.A., El-ezz D.A., Warad I., Shehata M.R., Abdalla E.M.: *Sci. Rep.* 13, 3199 (2023).
- [2] Figueroa-DePaz Y., Pérez-Villanueva J., Soria-Arteche O., Martínez-Otero D., Gómez-Vidales V., Ortiz-Frade L., Ruiz-Azuara L.: *Molecules* 27, 3504 (2022).
- [3] Hussain A., AlAjmi M.F., Rehman M.T. Amir S., Husain F.M., Alsalmeh A., Siddiqui M.A., Alkhedhairy A.A., Khan, R.A.: *Sci. Rep.* 9, 5237 (2019).

2P05

LIGHT-INDUCED ISOMERIZATION OF AZOPHENYL MOIETY IN SCO ACTIVE Fe(II) COMPLEX

Oliver Čierny¹, Alexandra Šagátová¹, Jakub Orvoš², Ján Moncol¹, Ivan Šalitroš¹

¹Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 81107 Bratislava, Slovak Republic, oliver.cierny@stuba.sk

²Department of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 81107 Bratislava, Slovak Republic

The octahedral Fe(II) complexes of N-donor ligands exhibit magnetic bistability (Spin CrossOver process SCO) [1], which can be controlled by external stimuli (temperature, light). The spin state transition between Low-Spin and High-Spin states is based on a change in the ligand field strength. The main parameters characterizing the SCO are the magnetic profile and its transition temperature ($T_{1/2}$) [2]. The light-induced SCO controlled under isothermal conditions by ligand's moiety photoisomerization is known as the

Ligand-Driven Light-Induced Spin Change (LD LISC) effect [3].

The SCO active Fe(II) complex $[\text{Fe}(\text{L})_3](\text{ClO}_4)_2 \cdot (\text{CH}_3)_2\text{CO}$ ($\text{L} = \text{trans-2-[4-(phenyldiazenyl)pyridin-2-yl]-1H-benzo[d]imidazole}$) [3] with bidentate N-donor organic ligands containing photoactive azophenyl moiety was prepared to investigation of LD-LISC effect in the complex. In the solid state, SQUID magnetometry measurements demonstrate almost complete thermal SCO with $T_{1/2}$ centered at 175 K. However, upon desolvation, the $T_{1/2}$ shifts notably to a higher temperature, approximately 219 K, indicating that the removal of coordinating solvent molecule stabilizes the LS state, thus requiring a higher temperature to induce the spin transition. Notably, the complex exhibits a partial Light-Induced Excited Spin State Trapping (LIESST) effect, where 532 nm irradiation excited about 43 % of Fe(II) ions to the metastable HS state with $T(\text{LIESST})$ at 49 K.

The authors are grateful for the financial support of Slovak Grant Agencies (APVV-23-0006, APVV-22-0172, APVV-20-0111, VEGA 1/0029/22, DS-FR-22-0010) and the project "Large Projects for Excellent Researchers" under the Recovery and Resilience Plan of the Slovak Republic (09I03-03-V03-00029). The authors are also grateful to Slovak Chemical Society.

- [1] Gütlisch P., Hauser A., Spiering H.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 33, 2024-2054 (1994).
- [2] Roux C., Zarembowitch J., Gallois B., Granier T., Claude R.: *Inorg. Chem.* 33, 2273-2279 (1994).
- [3] Orvoš J., Fischer R., Brachňaková B., Pavlik J., Moncol J., Šagátová A., Fronc M., Kožíšek J., Routaboul L., Bousseksoud A., Šalitroš I.: *New J. Chem.* 47, 1488-1497 (2023).

2P06

NEW ACTIVE SITE FOR ACTIVATION OF MOLECULAR OXYGEN BY SPLITTING – NON-PARALLEL NON-AXIAL BINUCLEAR Fe SITES

Jiří Dědeček, Štěpán Sklenák

J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the CAS, Prague, Czech Republic, jiri.dedecek@jh-inst.cas.cz

Activation of dioxygen attracts enormous attention because of its potential for utilization of methane and applications in other selective oxidation reactions. One of possible ways, which has no analogy in nature is splitting of molecular oxygen over distant binuclear cationic site formed by two transition metal ions stabilized in the zeolite matrix in two opposite cationic sites distant ca. 0.7 nm

[1,2]. The split oxygen is enormously active and is able to oxidize methane at room temperature. However, this local arrangement represents strict limitation to matrices capability to accommodate distant binuclear cationic sites and thus limits, together with requirements on Al organization in the framework, number of possible catalysts and maximum possible yield of the (pseudo)catalyst. Our DFT calculations suggest new, non-axial non-parallel arrangement of binuclear Fe(II) site, which is also able to split at low temperature molecular oxygen.

- [1] Tabor E., Dedeczek J., Mlekodaj K., Sobalik Z., Andrikopoulos P.C., Sklenak S.: *Sci. Adv.* 6, eaaz9776 (2020).
- [2] Sklenak S., Dedeczek J.: *Chem. Soc. Rev.*, in press.

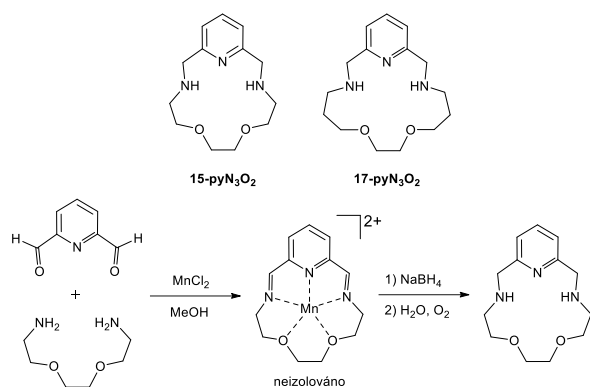
2P07

OPTIMALIZACE SYNTÉZY MAKROCYKlickÝCH LIGANDŮ S VYUŽITÍM LINEÁRNÍCH PUMP A PRŮTOČNÉHO REAKTORU

Bohuslav Drahoš, Eva Zahradníková

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 779 00, Olomouc, ČR, bohuslav.drahos@upol.cz

Templátová syntéza je jedním z nejpoužívanějších syntetických postupů pro přípravu makrocyclických ligandů [1]. V rámci optimalizace syntézy 15-17členných pyridinových makrocyclických ligandů (15-pyN₃O₂, 17-pyN₃O₂, Obr. 1) [2,3], která je založena na vzniku Mn(II) komplexu Schiffovy báze z pyridin-2,6-dikarbaldehydu a příslušného diaminoetheru v prvním makrocyclizačním kroku a následně na jeho redukci pomocí NaBH₄ a demetalaci, byl měněn způsob přidávání reaktantů v prvním kroku, a to od nejjednoduššího uspořádání pomocí dělicí nálevky, přes využití jedné nebo dokonce dvou lineárních pump, až po nejsofistikovanější provedení reakce v průtočném cívkovém reaktoru. Změnou uspořádání, které zlepšuje kontinuálnost přidavku reaktantů a jejich rovnoměrné smíchávání bez koncentračních výkyvů, se podařilo výrazně zvýšit výtěžky reakce z ~70 na ~90 % a snížit množství vedlejších produktů. Diskutovaná experimentální uspořádání představují budoucnost syntézy analogických systémů i dalších organických a komplexních sloučenin.



Obr. 1 Strukturní vzorce pripravovaných ligandů společně se schématem jejich syntézy.

Tato práce vznikla za institucionální podpory Katedry anorganické chemie PřF Univerzity Palackého v Olomouci.

- [1] Costisor O., Linert W.: *Metal mediated template synthesis of ligands*. World Scientific Publishing (2004).
- [2] Antal P., Drahoš B., Herchel R., Trávníček Z.: *Inorg. Chem.* 55, 5957-5972 (2016).
- [3] Zahradníková E., Pichon C., Duhayon C., Sutter J.-P., Halaš P., Drahoš B.: *RSC Adv.* 14, 28138-28147 (2024).

2P08

UDRŽATEĽNÁ MODIFIKÁCIA 3D TLAČENÝCH UHLÍKOVÝCH SENZOROV: PLAZMOVÁ DEGRADÁCIA PLA A ELEKTROPOLYMERIZÁCIA VODIVÉHO POLYMÉRU PEDOT

Katarína Gregová¹, Miroslav Kováč¹, Ľubomír Švorc², Sľaďana Ďurdič³, Pavol Gemeiner¹

¹Oddelenie polygrafie a aplikovanej fotochémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika, katarina_gregova@stuba.sk

²Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika

³University of Beograd, Faculty of Chemistry, Belgrade, Serbia

Aktuálny výskum aktivácie 3D tlačených elektród/senzorov z polymérnej matrice kyseliny polymliečnej (PLA) a vodivých uhlíkových častíc sa zameriava na ekologické alternatívy k štandardným metódam využívajúcim toxické chemikálie. Jednou z alternatív je povrchová úprava nízkoteplotným atmosférickým plazmovým výbojom, ktorý degraduje izolujúcu PLA, sprístupňuje vodivé uhlíkové nanočastice, čím zvyšuje elektrochemickú aktivitu [1]. Takto

upravenú elektródu je možné následne modifikovať, napr. 2D materiálmi, oxidmi kovov, prípadne enzýmami za účelom prípravy biosenzorov. Na modifikáciu je možné využiť aj vodivé polyméry, najmä poly(3,4-etyldioxytiofén) (PEDOT).

Modifikácia PEDOT-om preukázala zvýšenú selektivitu a aktivitu [2]. Navyše, dopovanie PEDOTu, napr. dodecylsírantom sodným (SDS), zvyšuje filmtvornosť a elektrickú vodivosť. Dopovaný PEDOT sa na povrch naniesie elektropolymerizáciou z východiskového roztoku monoméru 3,4-etyldioxytiofénu a SDS pôsobením prúdu veľkosti 1 mA [3].

V práci boli pripravené PLA/CNT elektródy povrchovo aktivované atmosférickou plazmou a následne modifikované elektropolymerizáciou PEDOT-om. Mikroskopická analýza (SEM) potvrdila degradáciu PLA už po 5 sekundách. Meraním cyklickej voltampérometrie elektródy bez plazmovej úpravy nevykazovali elektrochemickú aktivitu v redoxnom mediátore $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-/4-}$. Aktivácia plazmou spôsobila nárast aktivity, s ideálnymi parametrami pre 40 sekundovú aktiváciu. Následnou elektropolymerizáciou PEDOT:SDS došlo k dodatočnému vylepšeniu elektrochemických vlastností.

Na základe dosiahnutých výsledkov môžeme samotnú plazmovú úpravu, ako aj jej kombináciu s elektrodepozíciou PEDOT:SDS považovať za ekologickú alternatívu na výrobu lacných a citlivých senzorov.

Autori by touto cestou radi poďakovali grantovým agentúram VEGA a APVV za finančnú podporu výskumu prostredníctvom projektov VEGA 2/0136/24, VEGA 1/0036/24, bilaterálneho APVV SK-SRB-23-0025 a APVV-23-0066. Za finančnú podporu patrí poďakovanie STU – Programu na podporu mladých výskumníkov.

- [1] Kalinke C. et al.: *Analyst* 145, 1207-1218 (2020).
- [2] Liao M. et al.: *Electrochem. Commun.* 165, 107754 (2024).
- [3] Wu X. et al.: *J. Electroanal. Chem.* 758, 26-32 (2015).

2P09**VYUŽITIE KVANTOVEJ CHÉMIE PRE VÝSKUM MAGNETIZMU KOMPLEXOV ŽELEZA**Radovan Herchel

Katedra anorganické chémie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 779 00 Olomouc, ČR, radovan.herchel@upol.cz

Problematica magnetických vlastností železnatých či železitých koordinačných zlúčenín je pomerne široká, pretože v obidvoch, bežne dostupných oxidačných číslach II a III, bolo pripravených mnoho komplexov vykazujúcich kríženie spinových stavov (z angl. „spin crossover“) najčastejšie vyvolaných zmenou teploty alebo pôsobením žiarenia. Okrem toho, existujú komplexy ktoré vykazujú tzv. spinovo zmiešané stavy (z angl. „spin-admixed state“), v ktorých sú výsledné vlastnosti dôsledkom príspevkov stavov s rôznou multiplicitou, a dochádza k značným zmenám v magnetickej anizotropii týchto látok.

Príspevok bude zameraný na prehľad využitia teórie funkcionálu hustoty (DFT) a post-Hartree-Fockových metód (CASSCF/NEVPT2) vo výskume železo-obsahujúcich koordinačných zlúčenín, jednak k pochopeniu ich elektrónovej štruktúry ale aj pre interpretáciu ^{57}Fe Mössbauerovej spektroskopie [1-3].

Autor ďakuje za finančnú podporu z inštitucionálnych zdrojov Katedry anorganickej chémie, PrF UP v Olomouci a projektom uvedených v citovaných publikáciách.

- [1] Antal P., Nemec I., Pechoušek J., Herchel R.: *Inorganics* 10, 199 (2022).
- [2] Smékal Z., Novák P., Zeller M., Antal P., Čížmár E., Herchel R.: *Polyhedron* 212, 115586 (2022).
- [3] Nemec I., Kotásková L., Herchel R.: *Cryst. Growth Des.* 23, 1323-1329 (2023).

2P10**VYUŽITIE BIOCHARU V SIEŤOTLAČENÝCH ELEKTROCHEMICKÝCH SENZOROCH NA DETEKCIU SARKOZÍNU**

Miroslav Kováč¹, Karolína Čolláková¹, Michal Hatala¹, Andrej Vikartovský², Lenka Lorencová², Alenka Šišková-Opálková³, Martin Nosko³, Pavol Gemeiner¹

¹*Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Oddelenie polygrafie a aplikovanej fotochémie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, miroslav.kovac@stuba.sk*

²*Chemický ústav, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 5807/9, 845 38 Bratislava*

³*Ústav materiálov a mechaniky strojov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9/6319, 845 13 Bratislava*

Štúdiá sa zaoberá vývojom a charakterizáciou sieťotlačených biosenzorov na báze biocharu určených na elektrochemickú detekciu sarkozínu, ktorý je považovaný za potenciálny biomarker rakoviny prostaty [1]. Biochar bol pripravený pyrolýzou šupiek zemiakov a mrkvy pri teplote 1000 °C a následne použitý ako uhlíkový materiál pri výrobe funkčných elektród. Vďaka vysokej porozite, špecifickému povrchu, obsahu uhlíka, funkčným skupinám a primeranej elektrickej vodivosti predstavuje biochar ekologickú a udržateľnú alternatívu ku tradičným uhlíkovým materiálom [2]. Elektródy boli pripravované v kombinácii s časticami grafitu s cieľom optimalizovať ich vodivé vlastnosti [3]. Ich elektrické a štrukturálne vlastnosti boli hodnotené pomocou merania plošného odporu, optickej a SEM mikroskopie, ako aj testu adhézie. Kľúčovou analytickou metódou bola cyklická voltampérometria, využitá na dvoch úrovniach – na charakterizáciu elektród v elektrolyte s redoxným párom $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-/4-}$, kde sa preukázal pozitívny vplyv elektrochemickej aktivácie v 0,5 M NaOH, a následne na detekciu sarkozínu pri pH 7,4. Výsledky ukázali, že 100 % biocharové elektródy dosahovali vyšší faradaický prúd než grafitové, čo potvrdzuje ich vyššiu elektrochemickú aktivitu, citlivosť a aplikačný potenciál v oblasti biosenzoriky a klinickej diagnostiky.

Za podporu nášho výskumu ďakujeme Agentúre na podporu výskumu a vývoja (APVV-23-0066) a Vedeckej grantovej agentúre MŠVVaM SR (VEGA 2/0136/24).

- [1] Carnei N. et al.: *Int. J. Mol. Sci.* 14, 13893-13908 (2013).
- [2] Florian G.F. et al.: *J. Compos. Sci.* 8, 220 (2024).
- [3] Gibi C. et al.: *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.* 154,

105071 (2024).

2P11**SOLUBILITY INVESTIGATION OF SELECTED RE₂O₃ IN (LiF-NaF)EUT vs (LiF-NaF-REF₃) MOLTEN SYSTEMS**

Blanka Kubíková, Jarmila Mlynáriková, Zuzana Vasková, Oksana Matselko, Miroslav Boča

Institute of Inorganic Chemistry SAS, Dúbravská cesta, 9, 845 36 Bratislava, Slovak Republic, blanka.kubikova@savba.sk

Rare earth (RE) elements play important role in the material chemistry and this fact causes a constant increasing demand of these metals. European Union (EU) suffers from the lack of raw materials in general, RE elements including. These elements belong to the group of critical raw materials defined by the EU with very low recycling level [1]. The recycling seems to be the efficient way how to reduce the dependence on imports of raw materials, reduce the volume of waste and how to increase the sustainable development.

Molten salt electrolysis is an industrial method for the extraction of RE elements from corresponding mixtures, including oxides. It is known that the solubility of rare earth oxides (REO) is not high but the presence of RE fluorides increase the solubility.

Our recent work was focused on solubility study of selected RE₂O₃ in the molten mixture of LiF-NaF-REF₃. The solubility investigation was measured by thermal analysis of molten mixtures and XRD analysis of the solidified samples. Solubility limit was finally determined based on the presence of RE₂O₃ patterns in the XRD records of solidified mixtures.

This work was supported by Slovak grant agency: VEGA 2/0083/24.

[1] <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/SK/TXT/?uri=CELEX:52020DC0474>.

2P12**SALICYLÁTOMEĎNATÉ KOMPLEXY S FENANTROLÍNOM V SLUŽBÁCH BIOLÓGIE**

Matúš Lištiak¹, Rudolf Varga¹, Flóra Jozefíková¹, Miriam Malček Šimunková², Miroslava Puchoňová¹, Ján Moncol¹

¹*Oddelenie anorganickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, matus.listiak@stuba.sk*

²*Oddelenie fyzikálnej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava*

V rámci nášho výskumu boli pripravené štyri dvojjadrové meďnaté komplexy 1–4 obsahujúce N,N-donorový ligand 1,10-fenantrolín a rôzne halogénderiváty kyseliny salicylovej ako O-donorové ligandy. Štruktúrna charakterizácia (XRD, UV-Vis, IR, EPR, ESI-MS) potvrdila, že všetky komplexy majú v tuhej fáze geometriu dvoch distorzných štvorcovopyramidálnych jednotiek prepojených spoločnou hranou. Molekulové usporiadanie je stabilizované π - π interakciami medzi aromatickými systémami ligandov [1].

Komplexy 1–4 vykazujú interkalačný spôsob interakcie s molekulou DNA. Interakcia s hovädzím sérovým albumínom (BSA) bola kvantifikovaná pomocou väzbových konštánt ($K \approx 10^4$ – 10^5 M⁻¹), čo poukazuje na vysokú afinitu k transportným proteínom [2]. Biologická relevantnosť týchto komplexov bola podporená ich mimetickou aktivitou superoxidodismutázy (SOD), pričom komplex 3 dosiahol najvyššiu antioxidačnú účinnosť.

Okrem toho komplex 3 preukázal najvyššiu katalytickú efektivitu pri oxidácii 3,5-di-terc-butylcatecholu na zodpovedajúci chinón v prostredí DMSO/metanol. Výsledky poukazujú na potenciál týchto komplexov pre aplikácie v oblasti bioanorganickej chémie a biomimetických systémov.

Táto práca vznikla s podporou grantov APVV-23-0006, VEGA 1/0686/23 a VV-MVP-24-0039.

[1] Lištiak M., Jozefíková F., Valentová J., Zahradníková E., Varga R., Samol'ová E., Litecká M., Lušpai K., Puchoňová M., Malček Šimunková M., Moncol J.: *Eur. J. Inorg. Chem.* e202500143 (2025).

[2] Findik M., Türkan E., Pehlivanoglu S., Sayin U., Ceylan, U., Akgemci E.G.: *Inorg. Chem. Commun.* 156, 111300 (2023).

2P13

VRSTVA PORÉZNÍHO UHLÍKU NA
KERAMICKÉM NOSIČISajida Perveen, Václav SlovákOstravská univerzita, Dvořákova 7, 701 03 Ostrava,
ČR, vaclav.slovak@osu.cz

Tato studie se zabývá přípravou, charakterizací a hodnocením tenkých vrstev porézního uhlíku nanesených na keramickou pěnu s cílem zlepšit adsorpční účinnost a mechanickou stabilitu materiálů pro environmentální aplikace. Byly testovány tři typy prekurzorů – dřevný dehet, floroglucinol a sacharóza – a porovnávány z hlediska mechanických vlastností, obsahu uhlíku, morfologie povrchu a texturálních parametrů. SEM analýza odhalila rozdíly v povrchové morfologii jednotlivých vrstev, přičemž floroglucinol a sacharóza poskytly hladké, kompaktní povlaky s dobrou adhezí. Adsorpční zkoušky s methylenovou modří ukázaly výrazně vyšší kapacitu u sacharózového vzorku, zatímco vrstvy z dehtu a floroglucinolu vykazovaly nižší účinnost. Adsorpce jódu a BET analýza dále potvrdily, že výběr prekurzoru a jeho chemická úprava významně ovlivňují porozitu výsledného uhlíkového filmu. Výsledky ukazují potenciál těchto tenkých vrstev porézního uhlíku pro aplikace v oblasti filtrace, katalýzy či sanace vody. Budoucí výzkum se zaměří na optimalizaci syntézy a využití levnějších a ekologických prekurzorů pro rozšíření praktického využití těchto materiálů.

Tato práce byla podpořena projektem SGS08/PřF/2025 Ostravské univerzity.

2P14

THERMALLY AND LIGHT-INDUCED SPIN
CROSSOVER IN IRON(III) COMPLEXES
WITH BENZOPHENONE-BASED PENTA-
AND HEXADENTATE SCHIFF BASE
LIGANDSLukáš Pogány¹, Ján Moncol¹, Ivan Nemeč², Ivan Šalitroš¹

¹Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, 812 37 Bratislava, Slovakia, ivan.salitros@stuba.sk

²Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Palacký University, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Czech Republic

First-row transition metal complexes with $3d^n$ ($n=4-7$) electronic configuration of central ion and

octahedral symmetry can exhibit spin-crossover (SCO) magnetic bistability. These complexes function as molecular switches due to their ability to reversibly and reproducibly transition between high-spin (HS) and low-spin (LS) states in response to external stimuli such as temperature, pressure, light, or magnetic fields. SCO can be further tuned through various chemical modifications, including ligand substitution, variation of co-crystallized solvents, and the choice of counter-anions.

While Fe(II)-SCO complexes have been extensively studied, Fe(III)-SCO systems have also garnered significant attention due to their superior air stability, making them more viable for practical applications. Among these, iron(III) complexes with pentadentate (N_3O_2) and hexadentate (N_4O_2) Schiff base ligands are particularly well-documented, as these ligand frameworks effectively promote SCO behavior. Herein we report the comprehensive of thermal and light-induced SCO in a series of iron(III) complexes with penta- and hexadentate Schiff base ligands (Fig. 1). The presence or absence of SCO bistability was found to depend critically on three factors: (i) subtle structural variations in the Schiff base ligands, (ii) the nature of coordinated versus non-coordinated pseudohalide anions, and (iii) the inclusion or exclusion of lattice solvent molecules.

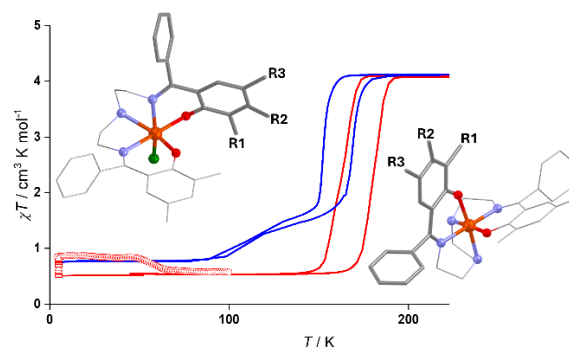


Fig. 1 Molecular structures of iron(III) Schiff base complexes and their SCO properties.

The authors are grateful for the financial support of Slovak Grant Agencies (APVV-23-0006, APVV-22-0172, VV-MVP-24-0039, VEGA 1/0029/22) and the project "Large Projects for Excellent Researchers" under the Recovery and Resilience Plan of the Slovak Republic (09I03-03-V03-00029).

- [1] Pogány L. et al.: *New J. Chem.* 41, 5904-5915 (2017).
- [2] Pogány L. et al.: *Chem. Eur. J.* 24, 5191 (2018).
- [3] Pogány L. et al.: *ChemPlusChem* 84, 358 (2019).

2P15**NOVEL HALF-SANDWICH Rh(III) COMPLEXES AS POTENTIAL ANTICANCER DRUGS**

Slavomíra Šterbinská, Pavel Štarha

Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Palacký University Olomouc, 17. listopadu 12, 77 146 Olomouc, Czech Republic, slavomira.sterbinska@upol.cz

The undesirable side effects of Pt drugs, which are now used in cancer treatment, have led to the development of new alternatives based on other *d*-metals such as Ru, Rh, Os, Ir or Ta [1]. Despite initial prejudices against possible toxicity, Rh(III) compounds have become very promising candidates in anticancer therapy [2].

For this purpose, three new half-sandwich Rh(III) compounds, namely $[\text{Rh}(\eta^5\text{-Cp}^{\text{bph}})\text{Cl}(\text{L1})]\text{PF}_6$, $[\text{Rh}(\eta\text{-Cp}^*)\text{Cl}(\text{L1})]\text{PF}_6$ and $[\text{Rh}(\eta^5\text{-Cp}^{\text{bph}})(\text{abpt})\text{Cl}]\text{PF}_6$, where $\text{HCp}^{\text{bph}} = 4\text{-(2,3,4,5-tetramethylcyclopenta-2,4-dien-1-yl)biphenyl}$, $\text{L1} = \text{N-[1-(anthracene-9-yl)-methylidene]-3,5-di(pyridin-2-yl)-4H-1,2,4-triazol-4-amine}$, $\text{HCp}^* = \text{pentamethylcyclopentadiene}$ and abpt is $3,5\text{-di(pyridin-2-yl)-4H-1,2,4-triazol-4-amine}$, have been prepared by microwave reactions of the corresponding dimer and the ligand L1 or abpt in methanol. All these compounds were fully characterized by elemental analysis, IR, $^1\text{H-NMR}$, UV-Vis spectroscopy and mass spectrometry.

For the aim of biological testing, the stability and possible photopotential of the complexes in the DMF/D₂O with PBS (phosphate-buffered saline) mixture, and consequently their interactions with NADH (nicotinamide adenine dinucleotide) and NAD⁺ molecules were studied using UV-VIS spectroscopy in the dark and after irradiation with blue light ($\lambda = 425\text{ nm}$), supported by $^1\text{H-NMR}$ and mass spectrometry experiments. The studied L1-containing complexes showed markedly higher ability to oxidize NADH to NAD⁺ when irradiated as compared with control experiments in the dark. This observation indicated that these compounds are photosensitive and have a potential for the field of photodynamic therapy.

This work was supported by institutional sources of the Department of Inorganic Chemistry, Palacký University Olomouc, Czech Republic.

[1] Mcquitty R.J.: *Sci. Prog.* 97, 1-19 (2014).

[2] Štarha P., Dvořák Z., Trávníček Z.: *J. Organomet. Chem.* 872, 114-122 (2018).

2P16**MEĎNATÉ KOMPLEXY SCHIFFOVÝCH ZÁSAD ODVODENÉ OD PYRIDÍN-2-KARBALDEHYDU-N-OXIDU: ŠTÚDIUM ICH INTERAKCIE S BIOMOLEKULAMI (DNA, BSA) A PROTINÁDOROVEJ AKTIVITY**Jindra Valentová¹, Barbora Svitková², Peter Baran³

¹Farmaceutická fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Slovensko, valentova@fpharm.uniba.sk

²Ústav experimentálnej onkológie, Biomedicínske výskumné centrum, SAV, Bratislava, Slovensko

³Department of Chemistry and Biochemistry, Juniata College, Huntingdon, USA

Komplexy Schiffových zásad odvodené od aminokyselín a aromatických aldehydov patria medzi koordinačné zlúčeniny so širokým spektrom biologických aktivít. V práci sme sa zamerali na prípravu, charakterizáciu nového typu komplexov medzi Schiffovými bázami odvodenými od pyridín-2-karbaldehyd-N-oxidu a rôznych aminokyselín – kys. 2-aminoizobutánovej, β -alanínu, kys. 3-aminobutánovej. Komplexy vykazovali štvorcovo-planárnu alebo štvorcovo-pyramidovú koordinačnú geometriu medzi. Interakcia pripravených komplexov s DNA a sérovým albumínom (BSA) bola hodnotená rôznymi technikami (UV-Vis, FLD spektroskopia, viskozimetria) a sledovala sa ich schopnosť hydrolyticky štiepiť molekulu DNA. Najvyššia nukleázová aktivita bola pozorovaná u komplexu s kys. 2-aminoizobutánovou, ktorá účinne štiepila plazmidovú DNA do jej lineárnej formy. Tento komplex vykázal aj najvýraznejšiu afinitu k sérovému albumínu. Cytotoxická komplexov bola hodnotená na rakovinových bunkových líniiach A549, HepG2 a na zdravých bunkách HEL (pľúcne fibroblasty). Komplexy vykazovali významný cytotoxický účinok na HepG2 rakovinových bunkách, porovnateľný s cis-platinou. Genotoxický účinok, morfológické zmeny cytoskeletu a mitochondriálna toxicita bola stanovená v rakovinových bunkách HepG2 a zdravých bunkách HEL po 72 hodinách aplikácie. Po aplikácii komplexu sa pozorovali zmeny cytoskeletu v normálnych aj rakovinových bunkách vrátane rozpadu aktínovej siete.

Práca bola podporená grantom VEGA 1/0661/24 a APVV-23-0349.

2P17

CATALYTIC PERFORMANCE OF MODIFIED MONTMORILLONITES IN THE PRINS REACTION OF INDENE WITH PARALDEHYDE

Eva Vrbková, Michaela Hlinková, Eliška Vyskočilová

Department of Organic Technology, University of Chemistry and Technology Prague, Technická 5, Prague, Czech Republic, eva.vrbkova@vscht.cz

The target product of the Prins reaction between indene and paraldehyde, 4,4a,5,9b-tetrahydro-2,4-dimethylindeno[1,2-d]-1,3-dioxin, is of interest due to its applications in the fragrance industry and its reported biological activity, including effects on the growth of certain bacteria.

In this study, a series of montmorillonite-based catalysts were prepared by acid treatment (using sulfuric, hydrochloric, and nitric acids) and ion-exchange modification with multivalent metal cations (Sn^{4+} , Zr^{4+} , and Fe^{3+}). The physicochemical properties of the prepared materials were comprehensively characterized using X-ray fluorescence (XRF), nitrogen physisorption, and

temperature-programmed desorption (TPD) techniques.

The catalytic activity of these materials was evaluated in the Prins cyclization of indene with paraldehyde under different reaction conditions. Acid-treated montmorillonites exhibited consistently high catalytic performance, achieving conversions in the range of 95–97% with 100% selectivity toward the desired product (24 h). Among the ion-exchanged materials, Sn^{4+} - and Zr^{4+} -modified montmorillonites demonstrated the highest activity, with conversions between 74–82% (100% selectivity, 24 h).

The influence of various reaction conditions (catalyst type and loading, solvent, reaction temperature, and reactant molar ratio) was systematically investigated. The findings confirm that modified montmorillonites serve as efficient heterogeneous catalysts for this transformation and represent their first reported application in the Prins reaction of indene with paraldehyde.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 3: ORGANICKÁ CHÉMIA A POLYMÉRY

3P01

SYNTÉZA AMFIFILNÝCH DERIVÁTOV BENZIMIDAZOLU AKO POTENCIÁLNYCH ANTINEOPLASTÍK

Dušan Bortňák, Alex Ondruška, Viktor Milata, Daniel Végh

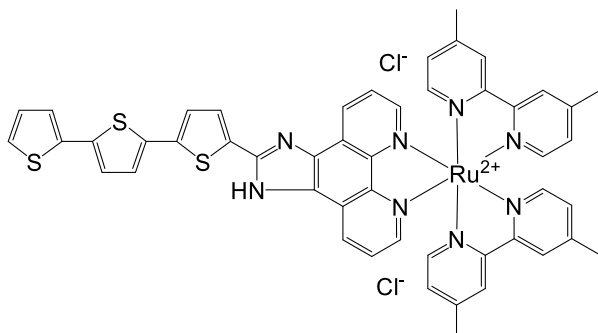
Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, dusan.bortnak@stuba.sk

Predkladaná práca sa zameriava na návrh, syntézu a charakterizáciu nových amfifilných zlúčenín odvodených od derivátov benzimidazolu, ktoré sú perspektívne v oblasti onkologickej liečby. Tieto heterocyklické zlúčeniny sú známe pre svoj významný antineoplastický potenciál, avšak ich nízka rozpustnosť vo vodnom prostredí často limituje ich biologickú dostupnosť a terapeutickú účinnosť [1].

Hlavným cieľom nášho výskumu bolo prekonať toto obmedzenie modifikáciou hydrofóbných

benzimidazolových skeletov za účelom zvýšenia ich biologickej dostupnosti a selektivity. Navrhnuté molekuly pozostávajú z hydrofóbnnej časti, tvorenej samotným benzimidazolovým jadrom, a pripojenej hydrofilnej časti. Táto amfifilná povaha umožňuje pripraveným látkam tvorbu supramolekulárnych agregátov vo vodnom prostredí, ako sú micely alebo dvojvrstvové štruktúry, čím dochádza k ich efektívnej solubilizácii [1].

Prvotné výsledky naznačujú, že takto solubilizované deriváty, ako napríklad perspektívne zlúčeniny typu TLD-1433 (Obr. 1), sa javia byť sľubnými kandidátmi pre ďalší vývoj. Výsledky tejto práce tak poukazujú na veľký potenciál týchto novo navrhnutých zlúčenín ako platformy pre vývoj novej generácie antineoplastík s vylepšenými farmakokinetickými vlastnosťami [2].



Obr. 1 Štruktúra antineoplastika TLD-1433 využívaného vo fotodynamickej terapii.

Táto práca bola vypracovaná s podporou projektu VEGA 1/0385/25.

- [1] Pham T.C., Nguyen V.-N., Choi Y., Lee S., Yoon J.: *Chem. Rev.* 121, 13454-13619 (2021).
- [2] Kulkarni G.S., Lilge L., Nesbitt M., Dumoulin-White R.J., Mandel A., Jewett M.A.S.: *Eur. Urol. Open Sci.* 41, 105-111 (2022).

3P02 PHOTOSWITCHING OF TRIARYLHYDRAZONES IN THE SOLID STATE

Marek Cigán¹, Bernard Mravec¹, Šimon Budzák², Miroslav Medved^{2,3}, Lukáš F. Pašteka⁴, Petr Lazar³, Eliška Procházková⁵, Aleš Růžicka⁶, Jozef Kožíšek⁷, Karol Vegso⁸, Michal Bodík⁸, Peter Šíffalovič⁸, Peter Švec⁹, Juraj Filo¹

¹Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Ilkovičova 6, SK-842 15 Bratislava, Slovakia, marek.cigan@uniba.sk

²Department of Chemistry, Matej Bel University, Faculty of Natural Sciences, Tajovského 40, SK-974 01 Banská Bystrica, Slovakia

³Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, The Czech Advanced Technology and Research Institute (CATRIN), Palacký University Olomouc, Šlechtitelů 27, 779 00 Olomouc, Czech Republic

⁴Department of Physical and Theoretical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Ilkovičova 6, SK-842 15 Bratislava, Slovakia

⁵Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Czech Academy of Sciences, Flemingovo nám. 2, CZ-160 00 Prague, Czech Republic

⁶Department of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, CZ-532 10 Pardubice, Czech Republic

⁷Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-81237 Bratislava, Slovakia

⁸Center for Advanced Materials and Applications (CEMEA), Slovak Academy of Sciences, Dubravska cesta 5807/9, SK-84511 Bratislava, Slovakia.

⁹Institute of Physics, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, SK-845 11 Bratislava, Slovakia

The development of novel photochromic systems that respond effectively to external light stimuli remains a key focus in contemporary materials science. While numerous organic photoswitches demonstrate efficient photochromic behavior in solution, achieving robust photoswitching in the solid state is still uncommon and presents ongoing challenges in modern photochemistry [1].

Over the past decade, bistable diaryl- and triarylhydrazone photoswitches have attracted considerable interest due to their straightforward synthesis, modular structural design, and, notably, their exceptional thermal stability coupled with efficient photoconversion.

In this lecture, we will present the unique photochromic behavior of triarylhydrazones featuring a perfluorinated hydrazine phenyl ring.

These compounds exhibit remarkable solid-state photochromism that deviates from the conventional *E/Z* isomerization observed in diarylhydrazones. Instead, their switching mechanism involves an excited-state intramolecular proton transfer (ESIPT) as a key step (Fig. 1) [2].

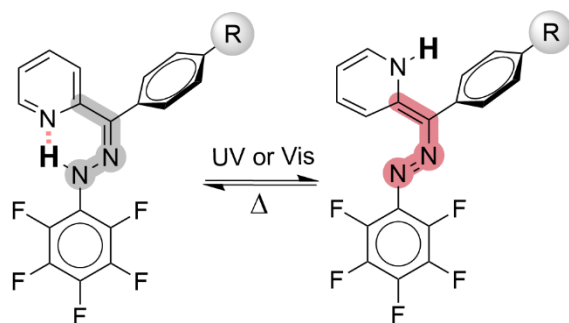


Fig. 1 Photochromic behaviour of triarylhydrazones bearing perfluorated hydrazine phenyl ring in the solid state.

Funded by the EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No. 09I03-03 V04-00062 (M.C.; revealing the reaction mechanism) as well as the Slovak Research and Development Agency (M.M.; APVV-20-0098; initial phase).

- [1] Gonzalez A., Kengmana E.S., Fonseca M.V., Han G.G.D.: *Mater. Today Adv.* 6, 100058 (2020).
- [2] Mravec B., Budzák Š., Medved' M., Pašteka L.F., Lazar P., Procházková E., Růžička A., Kožíšek J., Vegso K., Bodík M., Šiffalovič P., Švec P., Filo J., Cigán M.: *J. Am. Chem. Soc.* 147, 2421-2431 (2025).

3P03

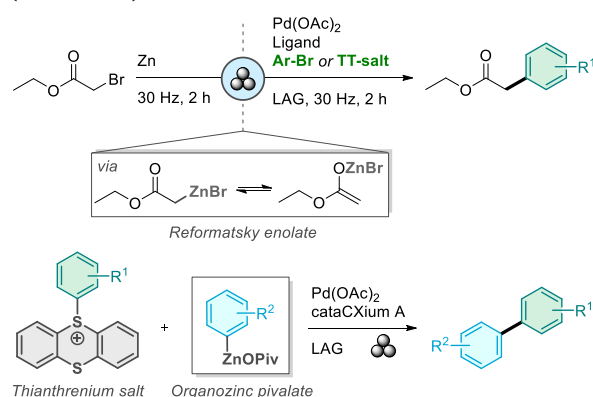
MECHANOCHEMICAL CROSS-COUPPLINGS OF ORGANOZINC COMPOUNDS

Tomáš Čarný, Dominika Mravcová, Barbora Steinhübllová, Radovan Šebesta

Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University Bratislava, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovakia, tomas.carny@uniba.sk

Although many cross-coupling reactions have become an almost routine part of the research, significant challenges remain, and more practical or mild reaction conditions are highly desirable. The primary disadvantages are sensitivity to moisture and oxygen, requirement to operate at low temperatures and high reactivity. Transition-metal-catalyzed α -arylations of carbonyl compounds have shown to be a useful strategy for the synthesis of α -arylesters, however the use of strong basic conditions and difficult handling of

organozinc compounds are major drawbacks. On the other hand, operationally simple mechanochemical cross-coupling of Reformatsky zinc-enolates carried at ambient conditions, where granulated zinc is activated *in-situ* by mechanochemical force, can overcome these challenges [1]. Less reactive and commercially more affordable aryl bromides provided the desired products in good to excellent yields in comparison to aryl iodides. The optimized conditions were applied in scale-up reaction and in the synthesis of esters, amides, and derivatives of natural products. Furthermore, we are investigating the reactivity of Reformatsky enolates with solid thianthrenium salts, that can be used as unconventional electrophiles suitable for mechanochemical cross-coupling reactions. Recently, thianthrenium salts were successfully used as electrophiles in the mechanochemical cross-coupling together with organozinc pivalates (Scheme 1) [2,3].



Scheme 1 Mechanochemical cross-couplings of organozinc compounds.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the Contract APVV-22-0167 and the EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No. 09I03-03-V04-00024.

- [1] Čarný T., Mravcová D., Steinhübllová B., Šebesta R.: *Adv. Synth. Catal.* 366, e202401403 (2024).
- [2] Čarný T., Peňaška T., Andrejčák S., Šebesta R.: *Chem. Eur. J.* 28, e202202040 (2022).
- [3] Čarný T., Mart M., Blauciak M., Steinhübllová B., Šebesta R.: *ChemCatChem* 17, e202500373 (2025).

3P04**MOLECULAR IMPRINTING:
OPTIMIZING REACTION PARAMETERS
FOR TARGETED EXTRACTION**

Lada Dolejšová Sekerová, Anna Šmídová, Anna Křížová, Eliška Vyskočilová

Department of Organic Technology, University of Chemistry and Technology Prague, Technická 5, 166 28 Praha 6, Czech Republic, lada.sekerova@vscht.cz

Molecularly imprinted polymers (MIPs) are synthetic materials engineered to recognize and selectively bind specific target molecules, offering promising applications in separation science, sensing, and drug delivery [1,2].

This study focuses on optimizing MIP synthesis for thymol recognition using a fractional factorial design to systematically evaluate the influence of key reaction parameters. Twelve MIPs were prepared under varied reaction conditions, along with a reference polymer, and tested via solid-phase extraction of thymol.

Among them, MIP synthesized at 40 °C, 500 rpm, with optimized monomer-to-template (12:1) and monomer-to-crosslinker (1:10) ratios, exhibited a 50% higher affinity for thymol compared to its non-imprinted counterpart. Such MIP also successfully separated thymol from a mixture containing thymol together with limonene, confirming the selectivity of the imprinted cavities. Statistical analysis revealed that increased solvent volume and stirring rate positively influenced MIP performance, while large excess of the functional monomer had a negative effect.

This work highlights the power of design of experiments (DoE) in tailoring MIP properties and contributes valuable insights for developing efficient and selective extraction materials.

- [1] Cheong W., Yang S.H., Ali F.: *J. Sep. Sci.* 36, 609-628 (2012).
[2] Piletska E.V., Guerreiro A.R., Whitcombe M.J., Piletsky S.A.: *Macromol.* 42, 4921-4932 (2009).

3P05**ENKAPSULÁCIA KYSELINY
ASKORBOVEJ PRE POUŽITIE
V KOZMETICKOM GÉLI**

Ondrej Hruška, Kristína Masnicová, František Kreps, Erika Hrašková

Slovenská technická univerzita, FCHPT, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ondrej.hruska@stuba.sk

Kyselina askorbová je bioaktívna látka, ktorá je v kozmetike vysoko žiadaná. Má protizápalové

vlastnosti, podporuje syntézu kolagénu a redukuje pigmentové škvrny na pokožke. Problémom je však jej nestabilita – náchylnosť k oxidačnej alebo hydrolytickej degradácii. Tiež podlieha reakciám s ďalšími zložkami kozmetických výrobkov, a tým dochádza k jej znehodnoteniu v priebehu skladovania.

Jednou z možností jej stabilizácie je enkapsulácia pomocou chitozanových nanočastíc. Nanočastice vznikajú v slabo kyslom prostredí (pH 6) a zachytávajú hydrofilné molekuly prítomné v roztoku. Alishahi *et al.* (2011) ukázali vysoký ochranný potenciál nanočastíc na kyselinu askorbovú. Pri skladovaní krmiva v priebehu 20 dní pri teplote 25 °C s enkapsulovanou kyselinou askorbovou došlo k výraznej retencii degradácie oproti neenkapsulovanej forme.

V práci Alishahi *et al.* (2011) použili ako matricu krmivo pre ryby [1], ktorého vlastnosti nie sú v práci bližšie špecifikované. Podľa podmienok skladovania išlo pravdepodobne o suchý materiál.

Naším cieľom bolo otestovať možnosti využitia chitozanových nanočastíc vo vodnom prostredí, ktoré je pre kozmetické výrobky typické. Nanočastice sme pripravili modifikovaným postupom podľa Algharib *et al.* (2022) [2] a pridali ich do kozmetického gélu (Carbopol Ultrez 21). Výsledky ukázali len malý ochranný efekt použitého prístupu, čo bolo pravdepodobne spôsobené difúziou kyseliny askorbovej z nanočastíc do vodného prostredia gélu.

Výskum bol podporený Vedeckou grantovou agentúrou MŠVVaŠ SR a SAV (VEGA) na základe zmluvy č. 1/0141/23.

- [1] Alishahi A., Mirvaghefi A., Tehrani M.R., Farahmand H., Shojaosadati S.A., Dorkoosh F.A., Elsabee M.Z.: *Food Chem.* 126, 935-940 (2011).
[2] Algharib S.A., Dawood A., Zhou K., Chen D., Li C., Meng K., Zhang A., Luo W., Ahmed S., Huang L., Xie S.: *J. Mol. Struct.* 1252, 132129 (2022).

3P06**MODIFIKACE VLASTNOSTÍ A
STRUKTURY CHITIN- GLUKANOVÉHO
KOMPLEXU S VYUŽITÍM IONTOVÝCH
KAPALIN**

Ivan Kelnar, Miroslav Janata

Ústav makromolekulární chemie AVČR, v.v.i., Heyrovského n. 2, 162 00 Praha 6, ČR, kelnar@imc.cas.cz

Chitin-glukanový komplex (CGC) je polysacharid s veľkým potenciálom pro řadu medicínálních aplikací díky složení z komponent majících

výrazné léčebné účinky, které se vhodně doplňují. GCG s různým složením se vyskytují převážně ve velké řadě hub, kde tvoří stěny buněk. Obě složky CGC jsou kromě vodíkových můstků vázány glykosidickými vazbami, což způsobuje jejich nerozpustnost ve většině rozpouštědel. To je hlavním důvodem dosud menšího rozsahu aplikací ve srovnání s ostatními polysacharidy. Podobně jako u celulózy a chitinu jsou jedinými efektivními rozpouštědly iontové kapaliny (IL), které jsou i vhodným prostředím pro řadu modifikací. V této práci byly pro rozpouštění CGC izolovaného z *Aspergillus niger* použity 1-ethyl-3-methylimidazoliumacetát a 1-butyl-3-methylimidazoliumchlorid, ve kterých bylo provedeno i roubování poly (ϵ -kaprolaktonu) a alkylace s využitím anhydridu kyseliny palmitové. Obdobně byl modifikován deacetylovaný CGC. Je diskutován vliv modifikací na supramolekulární strukturu a mechanické vlastnosti, jimiž lze získat polysacharidový materiál s velkým rozsahem parametrů a prakticky nezvýšenou cytotoxicitou. Deacetylace a modifikace ovlivňují rovněž samouspořádání v IL. Zatímco CGC s relativně velkým dipólovým momentem tvoří vezikuly vedoucí k nízké viskozitě, modifikace eliminují toto uspořádání, což způsobuje podstatně vyšší viskozitu roztoku. Tyto změny reologického chování jsou důležitým nástrojem pro řízení struktury vláken připravených mokřým zvlákněním.

Práce vznikla s podporou Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (Grant LUAUS23004).

3P07

VZNIK CYTOTOXICKÉHO GAMATOKOFERYLCHINÓNU POČAS VYPRÁŽANIA HRANOLIEK V REPKOVOM OLEJI

František Kreps, Kristína Masnicová, Ondrej Hruška, Zuzana Krepsová

Ústav potravinárskej technológie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko, frantisek.kresp@gmail.com

Práca sa zaoberá vplyvom vyprážania hranoliek pri 180 °C na rozklad mastných kyselín a tokoferolov v repkovom oleji. Osobitný dôraz sa kladie na vznik a následnú adsorpciu gamatokoferylchinónu na povrchu hranoliek. Táto látka vykazuje cytotoxické vlastnosti a jej dlhodobé pôsobenie môže viesť k poškodeniu DNA. Zistilo

sa, že pri vyprážaní hranoliek vzniká gamatokoferylchinón o 20 % rýchlejšie než alfa-tokoferylchinón, ktorý nemá nepriaznivé účinky na zdravie. Prítomnosť hranoliek v oleji zároveň podporila hydrolytické štiepenie mastných kyselín, čo spôsobilo až 1,3-násobné zrýchlenie rozkladu tokoferolov v porovnaní s ohrevom samotného oleja. Novým poznatkom je, že gamatokoferylchinón predstavuje oxidačný produkt tokoferolov, ktorý sa majoritne viaže na povrch hranoliek. Jeho koncentrácia bola o polovicu vyššia než v prípade alfa-tokoferylchinónu. Výsledky naznačujú, že používanie olejov s vysokým obsahom gama-tokoferolu na vyprážanie môže predstavovať zdravotné riziko. Tieto zistenia sú v súlade s nami publikovanou prácou [1].

Výskum bol podporený Vedeckou grantovou agentúrou MŠVVaŠ SR a SAV (VEGA) na základe zmluvy č. 1/0141/23.

[1] Kreps F., Krepsová Z., Dubaj T.: *Food Chem.* 478, 143701 (2025).

3P08

DESIGN OF POLYMER THERANOSTICS FOR HETERONUCLEAR MR IMAGING AND TARGETED CANCER THERAPY

Richard Laga¹, Ladislav Androvič¹, Lucie Kracíková¹, Eliška Hrdá¹, Michal Pechar¹, Michal Franc², Natalia Ziolkowska², Dominik Havlíček², David Červený², Daniel Jiráček²

¹*Institute of Macromolecular Chemistry, Czech Academy of Sciences, Heyrovského nám. 2, 162 00 Prague 6, Czech Republic, laga@imc.cas.cz*

²*Institute for Clinical and Experimental Medicine, Vídeňská 1958/9, 140 21 Prague 4, Czech Republic*

Heteronuclear magnetic resonance imaging (X-MRI) is an emerging non-invasive diagnostic technique that enables “hot spot” imaging through the use of exogenous MR-active probes containing heteroatoms such as ³¹P, ¹⁹F, or ¹¹B. Optimal probes should be based on biocompatible, long-circulating materials that offer favorable MR properties, including appropriate relaxation times, high signal-to-noise ratios, and spectral separation from the biological background. To address these requirements, we developed a series of structurally diverse macromolecular probes with excellent aqueous solubility, minimal toxicity, and a high content of X-nuclei. Using controlled polymerization techniques, we synthesized phosphopolymers of various architectures and compositions bearing phosphoester, thiophosphoester, phosphonate, or phosphazene

groups [1,2]. All materials exhibited favorable ^{31}P MR relaxation properties and were detectable at low concentrations using a 4.7 T scanner. Probes containing thiophosphoester groups showed redox-responsive behavior, enabling *in vivo* detection of the tumor microenvironment [3]. Furthermore, we incorporated ^{19}F - (5-fluorouracil derivatives) and ^{11}B -containing (cosane) moieties into the selected phosphopolymer structures to introduce complementary imaging modalities and therapeutic functions. These dual-functional systems combine diagnostic sensitivity with anticancer activity. Our results highlight the potential of these polymer conjugates as versatile platforms for next-generation cancer theranostics.

This research was financially supported by the Czech Science Foundation (Project No. 24-10980S).

- [1] Kracíková L., Ziolkowska N., Androvič L., Klimánková I., Červený D., Vít M., Pompach P., Konefař R., Janoušková O., Hrubý M., Jiráček D., Laga R.: *Macromol. Biosci.* 22, 2100523 (2022).
- [2] Kracíková L., Androvič L., Potočková I., Ziolkowska N., Vít M., Červený D., Jiráček D., Laga R.: *Molecules* 28, 2334 (2023).
- [3] Ziolkowska N., Sulková K., Kracíková L., Androvič L., Havlíček D., Laga R., Jiráček D.: *Commun. Mater.* 5, 178 (2024).

3P09

HYBRIDNÉ AKRIDÍN-TIAZOLIDINÓNY: SYNTÉZA, NMR A DFT CHARAKTERIZÁCIA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA

Tomáš Ján Liška¹, Radka Michalková², Ivan Potočňák¹, Erika Samolová³, Mária Vilková¹

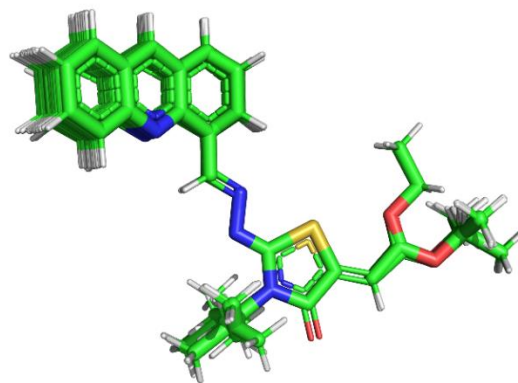
¹Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovenská republika, jan.liska@student.upjs.sk

²Ústav farmakológie, Lekárska fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Trieda SNP 1, 040 01 Košice, Slovenská republika

³Fyzikálny ústav Akadémie vied Českej republiky, Na Slovance 2, 182 00 Praha 8, Česká republika

Rastúci dopyt po cenovo dostupných a účinných liečivách s minimálnymi vedľajšími účinkami vedie k hľadaniu nových prístupov vo farmaceutickom výskume. Jednou z perspektívnych stratégií je molekulová hybridizácia, ktorá spája dve alebo viac bioaktívnych štruktúr do jednej molekuly s cieľom zvýšiť biologickú účinnosť, selektivitu a využiť synergický vplyv kombinovaných farmakofórov. Hybridné liečivá sa podľa typu spojenia farmakofórov najčastejšie

delia na spojené hybridy, zlúčené hybridy a hybridy s linkerom [1]. V liečivách sú často využívané heterocykly, kvôli schopnosti heteroatómu interagovať s biologickými cieľmi. Tiazolidinón je heterocyklus s významnými biologickými vlastnosťami, vrátane protirakovinovej aktivity [2]. Akridíny, ktorých chemoterapeutické vlastnosti boli intenzívne študované, sú známe svojou schopnosťou interakcie do DNA alebo naviazaním do žliabkov, čím zasahujú do procesov ako replikácia alebo oprava DNA. Ich deriváty sú jedny z najpoužívanejších a zároveň najstarších tried bioaktívnych molekúl [3]. Na tomto základe bola pripravená séria tiosemikarbazónov, ktoré následne slúžili na syntézu dvoch skupín hybridných molekúl s tiazolidinónovým a akridínovým jadrom spojených krátkym azínovým mostíkom (Obr. 1). Ich štruktúry boli overené pomocou NMR a molekulového modelovania, pričom sa pozorovali svetlom indukované zmeny v roztoku chloroformu alebo dimetylsulfoxidu. Biologické testy odhalili, že štyri zlúčeniny vykazujú výraznú účinnosť, pričom jedna z nich taktiež vykazovala vysokú selektivitu voči nádorovým bunkám.



Obr. 1 Súbor konformérov pripravenej hybridnej zlúčeniny.

Výskum bol realizovaný s využitím výpočtovej infraštruktúry obstaranej v projekte Národné kompetenčné centrum pre vysokovýkonné počítanie (kód projektu: 311070AKF2) financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja, Štrukturálnych fondov EÚ Informatizácia spoločnosti, operačného programu Integrovaná infraštruktúra 2014-202 v rámci projektu p1117-25-1 a táto práca bola podporená Kultúrnou a edukačnou grantovou agentúrou MŠVVaM SR (KEGA) v rámci projektu 008UPJŠ-4/2023.

- [1] Sampath Kumar H.M.: *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 30, 127514 (2020).
- [2] Suthar S.K.: *Eur. J. Med. Chem.* 63, 589-602 (2013).
- [3] Gamage S.A.: *J. Med. Chem.* 42, 2383-2393 (1999).

3P10**ALDOSE REDUCTASE INHIBITORS –
STRUCTURE, MODE OF ACTION, AND
SELECTIVITY**

Magdaléna Májeková, Lucia Kováčiková, Peter Šramel

*Centre of Experimental Medicine of the SAS,
Dúbravská cesta 9, 841 04 Bratislava, Slovakia,
magdalena.majekova@savba.sk*

Aldose reductase (ALR2) is a frequent therapeutic target in the search for new treatments for diabetic complications and other chronic diseases. It catalyzes the reduction of various aldehydes and carbonyls, including monosaccharides such as glucose. Aldose reductase inhibitors (ARIs) are a class of drugs that were primarily designed to prevent diabetic complications, but have shown potential in the treatment of asthma, chronic obstructive pulmonary disease, and cancer.

Structurally, ARIs can be divided into subgroups, which include cyclic amides, carboxylic acid derivatives, spirohydantoin, succinimides, rhodanines, polyphenolic substances, and others. Many of them were included in clinical trials but were later withdrawn due to their side effects and poor activity in human clinical practice. Side effects are mostly attributed to the low selectivity of ARIs towards the related enzyme, aldehyde reductase (ALR1); therefore, the design of such substances is conditional on achieving high selectivity between both enzymes. Poor activity in human treatment may, in turn, be due to inappropriate pharmacokinetic properties resulting from the chemical structure of the substances.

In the presentation, we will provide an overview of the most important types of ARIs and also mention those structures that have been designed, prepared, or tested at our workplace (Fig. 1) [1-3]. We will discuss the essential structural attributes for maintaining inhibitor selectivity towards ALR2 and ALR1.

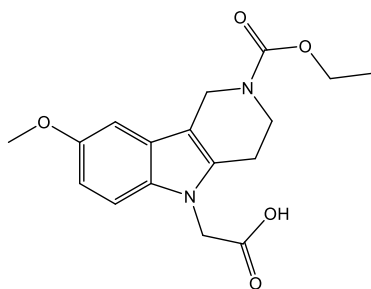


Fig. 1 Structure of the most potent ARI developed at our workplace.

** Dedicated to the memory of Milan Štefek, founder of the ARIs research at CEM SAS.*

This research was funded by VEGA 2/0103/22, VEGA 2/0008/22, and the Slovak Research and Development Agency under the Contract No. APVV-20-0543.

- [1] Štefek M., Šnirc V., Demopoulos V., Djoubissie P., Račková L., Májeková M., Karasu C.: *Carboxymethylated pyridoindoles as pharmaceutical agents*, 8.6.2009, Slovak Patent No. 28695.
- [2] Štefek M., Ballekova J., Šoltéssová-Prnová M., Májeková, M.: *Use of 5-Carboxymethyl-1,2,3,4-tetrahydro-1H-pyrido[4,3-b]indoles and their pharmaceutical composition*, 7.1.2020, Slovak Patent No. 288725.
- [3] Štefek M., Kováčiková L., Šoltéssová Prnová M., Addová G., Boháč A.: *Centirestat disulfide prodrug of aldose reductase inhibitor, preparation, pharmaceutical composition and therapeutic use*, 14.12.2020, Slovak Patent Application No. 50074-2020.

3P11**HALOGENATED PYRIDINIUM OXIMES
REACTIVATING ORGANOPHOSPHATES-
INHIBITED CHOLINESTERASES**

David Malinak^{1,2}, Karolina Knittelova¹, Eliska Prchalova¹, Zuzana Kohoutova¹, Sara Benesova¹, Rudolf Andrys¹, Kamil Musilek^{1,2}, Tamara Zorbaz³, Zrinka Kovarik³, Etienne Derat⁴

¹*University of Hradec Kralove, Faculty of Science, Department of Chemistry, Rokitanskeho 62, 500 03 Hradec Kralove, Czech Republic,
david.malinak@uhk.cz*

²*University Hospital in Hradec Kralove, Biomedical Research Centre, Sokolska 581, 500 05 Hradec Kralove, Czech Republic*

³*Institute for Medical Research and Occupational Health, Ksaverska cesta 2, HR-10000, Zagreb, Croatia*

⁴*Parisian Institute of Molecular Chemistry, Sorbonne University, 4 place Jussieu, 750 05 Paris, France*

Organophosphorus compounds (OPs) belong to the group of highly toxic irreversible inhibitors of acetylcholinesterase and butyrylcholinesterase. OPs are among the most toxic synthetic compounds found in commercial agricultural applications (e.g., chlorpyrifos is used as insecticide). This leads to many poisonings in developing countries where OPs are used as pesticides [1]. Additionally OPs such as tabun, sarin, VX or A-gents (“Novichoks”) are associated with terrorist attacks. The causal treatment of OP poisonings are oximes reactivators (e.g. pralidoxime, obidoxime, asoxim). Their mechanism of action is restoration of cholinesterase function through nucleophilic

attack of oxime in the catalytic active site of the inhibited cholinesterase to the phosphorus of OP. Studies done by our research group show that the nucleophilicity of oxime reactivators can be modified by the substitution of halogens in close proximity of the oxime moiety [1-3]. Such modifications lead to increased formation of the oximate ion followed by higher reactivation of inhibited cholinesterases. It is important to also consider the position of the substituents and the oxime group in reactivator as it has a direct impact on its efficiency. These findings provide an important basis for further detailed research on modified oxime reactivators useful for the treatment of intoxication by OPs.

This work was supported by the Czech Science Foundation (No. GA25-15339S).

- [1] Knittelova K. et al.: *ACS Med. Chem. Lett.* 15, 2181-2189 (2024).
- [2] Zorbaz T., Malinak D. et al.: *Eur. J. Med. Chem.* 238, 114377 (2022).
- [3] Prchalova E. et al.: *Arch. Toxicol.* 98, 2937-2952 (2024).

3P12

PRÍPRAVA A VYUŽITIE OLIGONUKLEOTIDOV S TERMINÁLNOU DIFOSFÁTOVOU SKUPINOU

Ján Matyasovský, Pavol Čekan

MultiplexDx, Ilkovičova 8, 84104 Bratislava 4, Slovenská republika, matyasovsky@multiplexdx.com

Polyfosfátové väzby predstavujú dôležité štruktúry v prirodzene sa vyskytujúcich nukleotidoch a oligonukleotidoch. Dajú sa napríklad nájsť ako terminálne skupiny na molekulách RNA prokaryotických a eukaryotických buniek vo forme 'RNA cap' (RNA čiapočky) [1,2].

Laboratórne pripravené oligonukleotidy nesúce polyfosfáty majú rôzne využitie v oblastiach molekulárnej biológie. fPAR-CLIP je laboratórna technika umožňujúca identifikáciu špecifických častí RNA, ktoré zodpovedajú na interakcie s RNA viažucimi sa proteínmi. Výhodou tejto metódy je použitie fluorescence miesto rádioaktivity v procese izolácie komplexov proteín-RNA viazaných kovalentnou väzbou [3]. Toto je zabezpečené priamou ligáciou medzi fluorescenčne značeným adaptérom a bunkovej RNA. Adaptér je pripravený metódami chemickej syntézy, kde dochádza k formovaniu difosfátovej skupiny na 5' konci oligonukleotidu v procese preadenylácie. Táto reakcia za podmienok

známych v literatúre prebieha s nedokonalou konverziou. Preto je snaha o optimalizáciu tohto reakčného kroku možnosťou, ako zefektívniť metódu fPAR-CLIP. Zvýšenie konverzie reakcie má zmysel z ekonomického, ale aj ekologického hľadiska.

- [1] Ramanathan A., Robb B., Chan S.: *Nucleic Acid Res.* 44, 7511-7526 (2016).
- [2] Hudeček O., Benoni R., Reyes-Gutierrez P.E., Culka M., Šanderová H., Hubálek M., Rulíšek L., Svačka J., Krásný L., Cahová H.: *Nature Comm.* 11, 1052 (2020).
- [3] Anastasakis D.G., Jacob A., Konstantinidou P., Meguro K., Claypool D., Cekan P., Haase A.D., Hafner M.: *Nucleic Acid Res.* 49, e45 (2021).

3P13

HETEROARYL ESIPT-BASED HYDRAZONE PHOTOSWITCHES

Bernard Mravec¹, Lea Hegedüsová¹, Marek Cigáň¹, Juraj Filo¹, Šimon Budzák², Miroslav Medved²

¹Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University Bratislava, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovakia, mravec7@uniba.sk

²Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Matej Bel University, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica, Slovakia

Hydrazone photoswitches have become a central focus of interest in recent years. Their high thermal stability, along with straightforward structural and photochromic tunability, makes them versatile, light-driven molecular tools for a wide range of applications [1].

In contrast to conventional isomerization-based switching, we present a group of dibenzoheteroaryl hydrazone photoswitches whose photochromism is closely linked to excited-state intramolecular proton transfer (ESIPT) in solution [2]. The thermal stability of the ESIPT intermediate can be finely tuned (ranging from milliseconds to seconds) by modifying the molecular structure, as well as by adjusting solvent polarity and proticity. Furthermore, several derivatives display notable fluorescence properties.

To better understand the structure-property relationships in these T-type photoswitching systems, we employed quantum-chemical calculations in combination with experimental data.

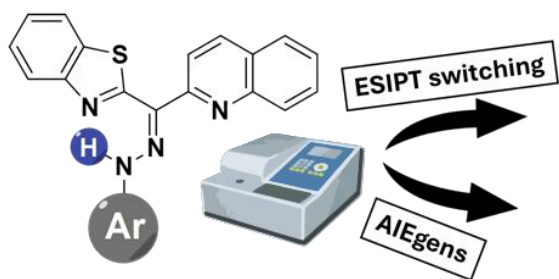


Fig. 1 Dibenzoheteroaryl hydrazone photoswitches.

We would like to thank Chavdar Slavov, Josef Wachtveitl and Nadine Blaise for co-operation on this work. Funded by the EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No. 09I03-03-V04-00068.

- [1] Shao B., Qian H., Li Q., Aprahamian I.: *J. Am. Chem. Soc.* 141, 8364-8371 (2019).
- [2] Mravec B., Budzák Š., Medveď M., Pašteka L.F., Lazar P., Procházková E., Růžička A., Kožíšek J., Vegso K., Bodík M., Šiffalovič P., Švec P., Filo J., Cigán M.: *J. Am. Chem. Soc.* 147, 2421-2431 (2025).

3P14

VYUŽITIE DERIVÁTOV KYNURÉNOVEJ KYSELINY V LIEČBE ALZHEIMEROVEJ CHOROBY

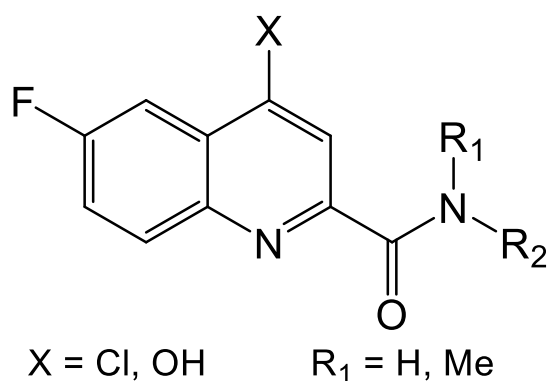
Branislav Pavilek, Dana Hajduová, Viktor Milata

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Brano.Pavilek@gmail.com

Alzheimerova choroba (AC) patrí medzi najčastejšie neurodegeneratívne ochorenia vedúce k demencii. Väčšina v súčasnosti schválených liečiv predstavuje len symptomatickú liečbu s cieľom zvýšiť koncentráciu neurotransmiteru acetylcholínu (Donepezil, Rivastigmín, Galantamín) alebo znížiť excitotoxicitu (Memantín). Jediný typ kauzálnej liečby – monoklonálne protilátky (Aducanumab, Lecanemab, Donanemab) preukázali len mierny vplyv na spomalenie neurodegenerácie, čo len poukazuje na komplexnú patogenézu AC, ktorá okrem akumulácie extracelulárnych amyloidných zhlukov zahŕňa aj vznik intracelulárnych neurofibrilárnych spletí tvorených abnormálne fosforylovaným Tau proteínom, neurologický zápal, oxidačný stres, nerovnováhu neurotransmiterov a iné [1]. Z tohto dôvodu sa očakáva, že multipotenciálne liečivá (MTDL) predstavujú efektívnejší prístup k liečbe AC.

Endogénna kyselina kynurénová (KK) je súčasť kynurenínového cyklu. Samotnej KK sú pripisované neuroprotektívne a protizápalové

vlastnosti, je to antagonist NMDA receptora podobne ako Memantín [2]. Derivatizáciou KK, konkrétne vytvorením amidickej väzby s bioaktívnym amínom je možné dosiahnuť MTDL charakter potenciálneho liečiva [3]. Zároveň touto derivatizáciou a zavedením fluóru do štruktúry je možné regulovať nevyhovujúce farmakokinetické vlastnosti samotnej KK ako je nízka rozpustnosť a nízky prestup cez BBB. Štruktúra trinástich derivátov KK, ktoré boli odoslané na anti-Alzheimerické biotesty sú uvedené na obr. 1. Tieto deriváty boli syntetizované zo spoločnej východiskovej fluórovanej KK, pričom bolo použitých a porovnaných päť metód tvorby amidickej väzby.



R₂ = Ph, Bz, propyl, cyklopentyl, adamantyl, -CH₂(CH₂)₁₋₂N(CH₃)₂, CH₃CH(CH₂)₃N(CH₂CH₃)₂

Obr. 1 Štruktúra potenciálnych MTDL liečiv proti Alzheimerovej chorobe na báze kyseliny kynurénovej.

Táto práca vznikla vďaka podpore projektu VEGA 1/0385/25.

- [1] 2024 Alzheimer's disease facts and figures. *Alzheimer's Dement.* 20, 3708-3821 (2024).
- [2] Stone T.W., Darlington L.G., Badawy A.A.-B., Williams R.O.: *Int. J. Mol. Sci.* 25, 9040 (2024).
- [3] Estrada Valencia M., Herrera-Arozamena C., de Andrés L., Pérez C., Morales-García J.A., Pérez-Castillo A., Ramos E., Romero A., Viña D., Yáñez M., Laurini E., Priol S., Rodríguez-Franco M.I.: *Eur. J. Med. Chem.* 156, 534-553 (2018).

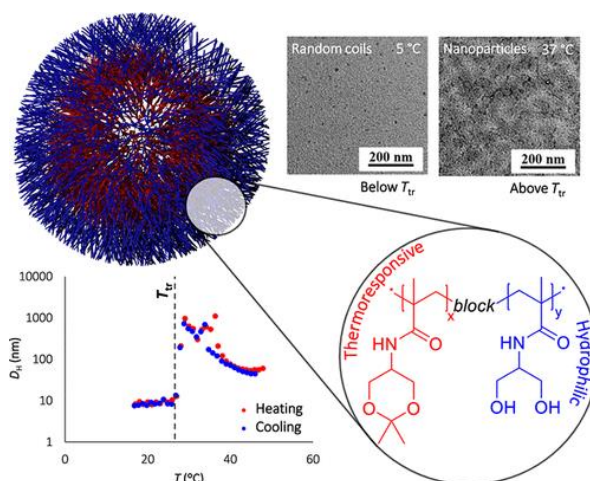
3P15

STIMULI-RESPONSIVE SUPRAMOLECULAR POLYMER SYSTEMS FOR DRUG AND GENE DELIVERY

Michal Pechar, Sára Pytlíková, Rafal Konefal, Robert Pola, Alena Braunová, Miroslav Šlouf, Tomáš Etrych, Richard Laga

Institute of Macromolecular Chemistry of the Czech Academy of Sciences, Heyrovského náměstí 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic, pechar@imc.cas.cz

This work presents the synthesis, comprehensive physicochemical characterization, and basic biological evaluation of thermoresponsive diblock copolymers based on methacrylamide and acrylamide derivatives. Utilizing a two-step RAFT polymerization, amphiphilic diblock copolymers were designed and synthesized to form nano- or microparticles in response to temperature changes, with potential applications as drug delivery carriers. The incorporation of acetal groups imparts pH sensitivity, enabling controlled particle disassembly and cargo release under acidic conditions, such as those found in tumor microenvironment. Detailed studies using DLS and NMR confirmed the reversible self-assembly and phase transition behavior of the polymers, influenced by block length and composition. The acrylamide-based copolymers demonstrated superior formation of well-defined, stable nanoparticles, particularly above physiological temperature, while methacrylamide-based analogues formed larger aggregates. Hydrolytic stability tests revealed that acetal-containing polymers undergo rapid degradation at acidic pH, resulting in particle disintegration and loss of thermoresponsive behavior. Cytotoxicity assays indicated excellent biocompatibility, with no observed toxicity toward murine tumor cell lines or activated T lymphocytes up to $100\ \mu\text{g ml}^{-1}$. These findings highlight the potential of these novel, dual-responsive polymeric systems for targeted and controlled drug and gene delivery in cancer therapy [1].



Obr. 1 Thermo-responsive polymer nanoassemblies.

This research was financially supported by the Czech Science Foundation (project No. 24-10980 S).

[1] Pytlíková S., et al.: *ACS Appl. Bio Mater.* 8, 271-284 (2024).

3P16

C–H ARYLATION OF BIARYL SUBSTRATES

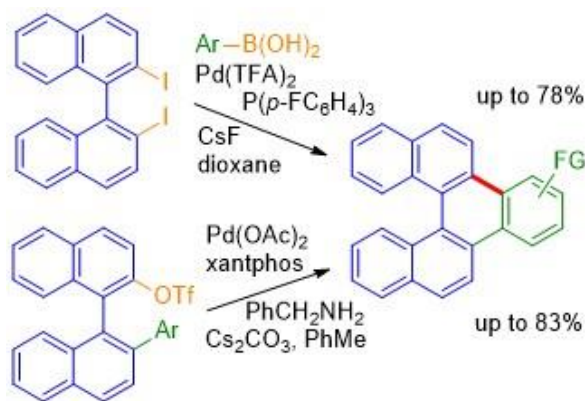
Martin Putala

Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, 842 15 Bratislava, Slovakia, martin.putala@uniba.sk

The toolbox for creation of aryl–aryl bond evolved from cross-coupling reactions to procedures involving C–H activation [1]. Catalytic methods for the direct conversion of C(Ar)–H bonds are attractive as a shorter and more environmentally friendly synthetic path.

On biaryl substrates, C–H alkenylations are mainly described. Regioselectivity is achieved using primary amino group, picolinamide or transient directing group formed *in situ* from aldehyde and chiral aminoacid. Stereoselectivity is induced by chiral ligand or by aminoacid in the case of transient directing group.

Recently, we reported an effective preparation of naphthochrysenes by tandem arylation of binaphthyl substrate via Suzuki-Miyaura reaction followed by intramolecular C–H arylation (Scheme 1) [2]. Similar cyclization protocol was published by Ruch et al. from already arylated binaphthyl substrate [3].



Scheme 1 Reported C–H arylations of binaphthyl substrates.

Funded by the EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No. 09I03-03-V04-00141.

- [1] Rogge T., Kaplaneris N., Chatani N., Kim J., Chang S., Punji B., Schafer L.L., Mussev D.G., Wencel-Delord C.A., Roberts R., Sarpong Z.E., Wilson M.A., Brimble M.J., Johansson L., Ackermann L.: *Nat. Rev. Methods Prim.* 1, 43 (2021).
- [2] Bulko F., Cigán M., Filo J., Putala M.: *Eur. J. Org. Chem.*, e202300826 (2024).
- [3] Ruch A.A., Handa S., Kong F., Nesterov V.N., Pahls D.R., Cundari T.R., Slaughter L.M.: *Org. Biomol. Chem.* 14, 8123-8140 (2016).

3P17

MECHANOCHEMICKÉ PALÁDIOM-KATALYZOVANÉ CROSS-COUPLINGOVÉ A KARBONYLAČNÉ REAKCIE

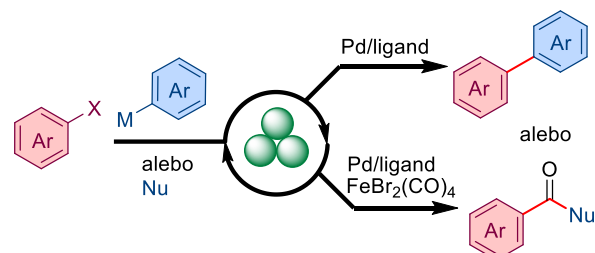
Radovan Šebesta

Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, radovan.sebesta@uniba.sk

Kovmi katalyzované *cross-couplingové* reakcie umožňujú syntézu rôznych komplexných molekúl. Ich širšie použitie často obmedzujú citlivé katalyzátory na báze prechodných kovov a reaktívne organokovové činidlá. Mechanochemia sa snaží tieto problémy riešiť a nedávne štúdie ukázali, že kovmi katalyzované

cross-couplingové reakcie sa dajú efektívne uskutočňovať za mechanochemických podmienok.

Náš tím preskúmal mechanochemické *cross-couplingové* reakcie organozinočnatých pivalátov a Reformatského enolátov s organickými halogenidmi za mechanochemických podmienok [1]. Nedávno sme tiež študovali použitie aryltiantreniových solí ako alternatívnych elektrofilov v Pd-katalyzovaných *cross-couplingových* reakciách s organoboritými a organozinočnatými zlúčeninami [2]. Okrem toho sme zistili, že Pd-katalyzovaná karbonylácia arylhalogenidov s amínmi a fenolmi sa dá taktiež dosiahnuť za mechanochemických podmienok. Kľúčovým aspektom použitia mechanochemie v týchto prípadoch bolo použitie pevného $\text{FeBr}_2(\text{CO})_4$ ako zdroja CO [3]. Naše zistenia naznačujú, že kovmi katalyzované *cross-couplingové* reakcie sa dajú vykonávať udržateľnejším spôsobom za použitia mechanochemie (Obr. 1).



Obr. 1 Kovmi katalyzované *cross-couplingové* reakcie.

Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. APVV-22-0167 a agentúrou VEGA, grant číslo VEGA-1/0445/24.

- [1] Čarný T., Mravcová D., Steinhüblova B., Šebesta R.: *Adv. Synth. Catal.* 367, e202401403 (2025).
- [2] Mravíková Z., Peňaška T., Horniaková D., Šebesta R.: *ChemSusChem* 18, e202402599 (2025).
- [3] Čarný T., Kisszékelyi P., Markovič M., Gracza T., Koós P., Šebesta R.: *Org. Lett.* 25, 8617-8621 (2023).

PREDNÁŠKY - SEKCIA 4: VYUČOVANIE, POPULARIZÁCIA A HISTÓRIA CHÉMIE

4P01

ODBORNÁ SKUPINA CHEMICKÉHO VZDĚLÁVÁNÍ JAKO VÝZNAMNÁ SOUČÁST ČSCH

Hana Čtrnáctová

*Přirodovědecká fakulta Univerzity Karlovy, Albertov
6, 120 43 Praha 2, ČR, ctr@natur.cuni.cz*

Se zavedením samostatného předmětu chemie na SŠ a následně i na ZŠ na konci 40. let 20. století byla stále naléhavější potřeba oboru, který se bude nejen praktickými, ale i teoretickými otázkami výuky chemie zabývat. Nejprve začaly v 50. a 60. letech 20. století vznikat pedagogické instituty a následně fakulty připravující učitele chemie a postupně přibývalo pracovníků na VŠ a současně aktivních vyučujících na ZŠ a SŠ, kteří se problematikou chemického vzdělávání intenzivně zabývali.

Významným výsledkem jejich aktivit bylo v r. 1965 založení odborné skupiny pro výuku chemie Česko-slovenské chemické společnosti, nyní odborná skupina chemického vzdělávání ČSCH. Odborná skupina si dala za cíl působit především v těchto oblastech činnosti:

- podílet se na modernizaci učiva a výuky chemie na ZŠ a SŠ a při přípravě učitelů;
- pečovat o talentované žáky a studenty při různých formách zájmové činnosti (zejména při chemické olympiádě);
- rozvíjet didaktiku chemie jako vědní obor a jako předmět vysokoškolské přípravy učitelů chemie.

Činnost odborné skupiny je po celou dobu realizována zejména prostřednictvím samostatných celostátních konferencí a seminářů, které jsou od začátku 80. let doplněny sekcemi v rámci sjezdů ČSCH, působením v institutech MŠMT při tvorbě kurikulárních dokumentů a spoluprací s učiteli chemie a organizace chemické olympiády.

Tato práce byla podpořena projektem Univerzity Karlovy COOPERATIO ve vědní oblasti: Subject Specific Education Research.

- [1] Banýr J.: 40 let odborné skupiny chemického vzdělávání ČSCH (přednáška). ČSCH, Praha (2005).
- [2] Cídllová H. a kol.: Chemie – historie. Masarykova

univerzita, Brno (2011).

- [3] Čtrnáctová H.: Chem. Listy 98, 950-951 (2004).

4P02

ROZVOJ DIGITÁLNÝCH KOMPETENCIÍ BUDÍCICH UČITEĽOV PRÍRODNÝCH VIED

Mária Ganajová, Ivana Sotáková, Petra Letošníková

*Oddelenie didaktiky chémie, Ústav chemických vied,
Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika
v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice,
maria.ganajova@upjs.sk*

Európska komisia vypracovala Európsky rámec digitálnych kompetencií pre občanov (DigComp) a na jeho základe aj Európsky rámec digitálnych kompetencií pedagógov (DigCompEdu) [1,2]. Cieľom príspevku je predstaviť výsledky projektu *VVGs UPJS IPEL 2023-2521 Rozvoj digitálnych kompetencií budúcich učiteľov chémie v rámci predmetu Aktivizujúce metódy výučby chémie*, ktorého hlavným cieľom bolo vytvoriť e-learningový kurz v LMS Moodle s cieľom rozvíjať digitálne kompetencie študentov magisterského štúdia učiteľstva chémie v kombinácii, v súlade s požiadavkami zakotvenými v rámci DigCompEdu. Obsah e-learningového kurzu bol navrhnutý tak, aby podporoval rozvoj digitálnych kompetencií budúcich učiteľov v súlade so šiestimi oblasťami rámca DigCompEdu – od profesijného zapojenia, cez výber a tvorbu digitálnych zdrojov, využívanie digitálnych technológií vo výučbe a učení, digitálne formy hodnotenia, až po personalizáciu učenia, ako aj rozvoj digitálnych kompetencií samotných žiakov. Postoje a názory študentov na prínos výučby pre ich budúcu pedagogickú prax sme zisťovali prostredníctvom dotazníka vlastnej konštrukcie. Z výsledkov vyplýva, že rozvoj digitálnych kompetencií budúcich učiteľov je nevyhnutné integrovať do obsahu všetkých didaktických predmetov tak, aby bol súčasťou širšieho pedagogického a kurikulárneho kontextu. Ďalšie oblasti výskumu budú riešené v rámci projektu *VEGA č. 1/0051/25 Model rozvoja digitálnych kompetencií budúcich učiteľov prírodných vied*.

Príspevok vznikol s podporou národného projektu „Digitálna transformácia vzdelávania a školy“ (DiTEdu), ktorý je financovaný z Európskeho sociálneho fondu plus cez Program Slovensko 2021 - 2027. Taktiež bol podporený grantami: VEGA 1/0051/25 „Model rozvoja digitálnych kompetencií budúcich učiteľov prírodných vied“, KEGA 001UPJS-4/2023 „Implementácia formatívneho hodnotenia do výučby na základnej škole so zameraním na digitálnu

formu“, IPEL VVGS 2024-3405 „Inovácia výučby predmetu Didaktika chémie II implementáciou digitálnych úloh sumatívneho a nástrojov formatívneho hodnotenia“ a IPEL VVGS 2025-3464 „Tvorba nástrojov sumatívneho a formatívneho hodnotenia pre výučbu predmetu Špeciálne praktikum školských pokusov I“.

- [1] Redecke, C.: *European framework for the digital competence of educators: DigCompEdu* (JRC107466). Seville, Spain: Joint Research Centre (2017).
- [2] Caena F., Redecker C.: *Eur. J. Educ.* 54, 356-369 (2019).

4P03

RODOVÉ ROZDIELY V ROZVOJI SPÔSOBILOSTÍ VEDECKEJ PRÁCE

Katarína Kotuláková

Katedra chémie, Pedagogická fakulta Trnavskej univerzity v Trnave, Priemyselná 4, 918 43 Trnava, katarina.kotulakova@truni.sk

Výskumne orientované prírodovedné vzdelávanie (IBSE) je často prezentované ako efektívny nástroj na rozvoj prírodovednej gramotnosti žiakov. Predkladaná štúdia analyzuje jeho diferenciálny vplyv na rozvoj spôsobilostí vedeckej práce (SVP) u žiakov druhého stupňa základných škôl so zreteľom na rodové rozdiely. Počas štyroch školských rokov (2019–2024) bol realizovaný kvázi-experiment na šiestich školách. Experimentálna skupina (vyučovaná pomocou IBSE) a kontrolná skupina (tradičný deduktívny prístup) absolvovali identické pre- a post-testy zamerané na kľúčové SVP, ako sú formulovanie hypotéz, klasifikácia či plánovanie experimentu.

Hoci sa v oboch skupinách potvrdilo štatisticky významné zlepšenie, analýza podľa pohlavia ukázala, že chlapci v IBSE skupine profitovali výraznejšie než ich rovesníci v kontrolnej skupine, zatiaľ čo u dievčat takýto rozdiel zistený nebol. Výsledky naznačujú, že bez cielenej inkluzívnej stratégie môže IBSE neúmyselne reprodukovat' rodové nerovnosti [1-3]. Pre zabezpečenie rovnakého prínosu pre všetkých žiakov sa odporúča didaktický dizajn zahŕňajúci explicitné narušanie stereotypov, primerané kognitívne vedenie a predstavovanie rozmanitých vzorov vedeckej identity.

- [1] Riegler-Crumb C., Morton K., Nguyen U., Dasgupta N.: *AERA Open* 5, 3 (2019).
- [2] Makarova E., Aeschlimann B., Herzog W.: *Front. Educ.* 4, 60 (2019).
- [3] Jerrim J., Oliver M., Sims S.: *Learn. Instr.* 80, 101310 (2022).

4P04

VYUŽITÍ CHATGPT PRO TVORBU ÚLOH Z OBLASTI CHEMICKÝCH VÝPOČTŮ

Roman Maršálek, Radim Petroš

Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, Česká republika, roman.marsalek@osu.cz

Cílem této studie bylo ověřit možnosti využití umělé inteligence, konkrétně nástroje ChatGPT, při tvorbě úloh z oblasti chemických výpočtů pro studenty gymnázií. Byly připraveny dvě sady úloh – jedna se standardním zadáním podle běžných sbírek a druhá generovaná prostřednictvím ChatGPT s důrazem na motivační prvky a propojení s reálným životem. Součástí praktické části výzkumu bylo otestování těchto úloh na vzorku studentů, přičemž byla analyzována jejich úspěšnost, míra jistoty při řešení a čas potřebný k vypracování. Pro hodnocení rozdílů ve výsledcích obou skupin byl použit Studentův t-test. Výsledky ukázaly, že rozdíly v úspěšnosti ani v čase řešení mezi skupinami nebyly statisticky významné. Studenti zvládali úlohy generované ChatGPT stejně dobře jako úlohy tradičního typu a ocenili jejich praktické zaměření. Studie naznačuje, že využití umělé inteligence při přípravě didaktických úloh může být pro pedagogy přínosné a nemusí představovat zátěž pro studenty.

4P05

SPOLOČNÉ ZJAZDY SLOVENSKÝCH A ČESKÝCH CHEMIKOV V BANSKEJ ŠTIAVNICI

Viktor Milata^{1,2}, Michal Uher^{1,2}, Jozef Čársky¹

¹*Slovenská chemická spoločnosť, Radlinského 9/1111, 812 15 Bratislava*

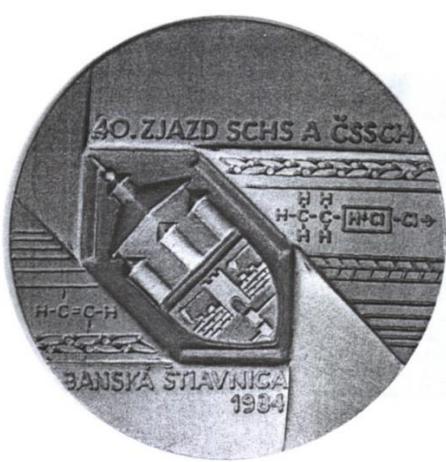
²*Oddelenie organickej chémie, ÚOChKP FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, viktor.milata@stuba.sk*

Chemické listy priniesli sériu článkov, ktoré popisujú históriu a registračné údaje spolkov chemikov od pamätného roku 1865, keď študent techniky F. E. Fischer z Prahy navrhol zriadiť spolok „Isis“ - Spolek pro vzdělání v oboru chemie a pomocných věd (Verein zur Ausbildung in der Chemie und der Hilfswissenschaften), ktorý bol skutočne založený 24. 4. 1866 v Prahe. Jeho členmi bolo aj niekoľko študenti zo Slovenska.

Chémia, metalurgia, mineralógia a banské vedy boli v tom čase na Slovensku už veľmi vysoko rozvinuté aj vďaka Banskej akadémii v Banskej

Štiavnica – prvej vysokej technickej škole svojho zamerania, ktorá bola založená z popudu Márie Terézie v roku 1763 a už na prelome 18./19.storočia na nej prednášali také osobnosti ako A. L. Ruprecht (1748-1814), L. N. Vauquelin (1763-1829) a mnohí iní. Z ich iniciatívy sa konalo 27. augusta 1786 aj prvé medzinárodné vedecké stretnutie – konferencia v Sklených Tepliciach. Mimoriadnym úspechom zjazdu v Sklených Tepliciach bolo založenie prvej medzinárodnej odbornej vedecko-technickej spoločnosti, zameranej na rozvoj banských vied pod názvom Societät der Bergbaukunde (La Societé de l'art de l'exploitation des mines) [1-3].

V roku 1929 započali prípravné práce na založení slovenskej stavovskej organizácie chemikov a 30.11.1929 sa konala ustanovujúca schôdza odbočky ČSCh v Bratislave. V roku 1940 bola pretransformovaná na Spolok chemikov Slovákov a už 5.-7. júla 1946 bol usporiadaný prvý zjazd v Banskej Štiavnici. Nasledovali zjazdy v roku 1947, 1949, 1950 a v rokoch 1952-5 boli v Banskej Štiavnici usporiadané spoločné zjazdy českých a slovenských chemikov. Posledné zmienky o zjazdoch v Banskej Štiavnici sú z rokov 1959 a 1984 (40. zjazd SCHS a ČSSCh):



Táto práca vznikla vďaka podpore projektu VEGA 2/0076/24.

- [1] Čársky J.: Anton Leopold Ruprecht (14.11.1748-16.10.1814), profesor Baníckej Akadémie v Banskej Štiavnici, ChemZi 10(1), 6-14 (2014).
- [2] Uher M., Milata V.: Anton Leopold Ruprecht – Osobnosť 18. storočia, zv. 10, SCHS 2024, Bratislava, 95s, ISBN 978-80-8208-132-2.
- [3] Sališová M.: 250 rokov od založenia Banskej akadémie a výučby chémie v Banskej Štiavnici, ChemZi 8(1), 36-38 (2012).

4P06

OD ZÁŽITKU K POROZUMĚNÍ: AFEKTIVNÍ PŘÍNOS EXKURZÍ VE VÝUCE PRŮMYSLOVÉ CHEMIE

Kamila Petrželová, Jana Prášilová

*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta,
Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu
1192/12, 771 46 Olomouc, ČR,
kamila.petrzelova@upol.cz*

Současné vzdělávání čelí výzvám spojeným s informačním přetížením a klesající motivací ke studiu přírodních věd. Tyto problémy pramení mimo jiné z nedostatku propojení výuky s reálným životem [1,2]. V reakci na to vznikla v rámci projektu CHEMIE ŽIJTE! interaktivní mapa chemického průmyslu v ČR, která slouží jako výuková a plánovací pomůcka pro organizaci exkurzí [3].

Príspevek prezentuje výsledky výzkumu mezi studenty učitelství chemie a bioanorganické chemie, kteří absolvovali exkurzi do společnosti Farmak a.s. Cílem bylo zjistit, jak se proměňuje jejich vnímání chemického průmyslu, role chemie ve společnosti a osobní vztah k oboru.

Na základě výsledů dotazníků vyplňovaných před a po exkurzi bylo zjištěno, že přímý kontakt s průmyslovým prostředím výrazně přispěl ke schopnosti studentů propojit teoretické poznatky s praxí a vytvořit si realističtější představu o práci v oboru. Exkurze byla hodnocena jako vysoce přínosná. Výsledky šetření potvrzují, že tento typ zážitkového učení by měl být systematicky podporován i v přípravě budoucích učitelů chemie.

- [1] Zhou M., Li J.: *Front. Educ.* 8, 1161777 (2023).
- [2] Gaspard H. et al.: *J. Res. Sci. Teach.* 57, 222 (2020).
- [3] Petrželová K., Sadílková K., Klečková M.: *Chem. Listy* 117, 177-184 (2023).

4P07

JE TŘÍHODINOVÁ PŘEDNÁŠKA PŘEŽITKEM?

Jana Prášilová, Kamila Petrželová, Helena Mašláňová

*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta,
Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12,
779 00 Olomouc, ČR, jana.prasilova@upol.cz*

Pojetí výuky na základních a středních školách se v posledních letech výrazně proměňuje. Do popředí se dostávají aktivizační metody, které podporují všestranný rozvoj klíčových kompetencí žáků [1]. Jak je to ale s výukou na vysokých školách? Převládá zde stále frontální forma

výuky? A nejsou dnes tříhodinové přednášky již přežitkem?

Měli bychom se zamyslet nad tím, kdo je současný student vysoké školy – s jakými kompetencemi přichází, jakým způsobem se učí a jak využívá digitální technologie ve svém studiu. Nejde o snižování nároků, ale o změnu přístupu k výuce a její modernizaci s ohledem na vývoj společnosti a potřeby studentů.

Na Katedře anorganické chemie PřF UPOL byly první změny ve výuce budoucích učitelů chemie zahájeny v roce 2021 u předmětu „Školní pokusy“ [2]. Výuku vede zkušený pedagog s dlouholetou středoškolskou praxí. Na základě sebereflexe, výsledků ústních zkoušek a studentských evaluací došlo v roce 2024 ke změnám také v tříhodinových přednáškách předmětu „Didaktika chemie“.

Prostor k inovacím se otevřel i u odborných předmětů typu B, jako jsou „Průmyslová anorganická chemie“ a „Průmyslová organická chemie“. Hlavní změny spočívají v aktivním zapojení studentů, rozvoji měkkých dovedností a zavádění prvků formativního hodnocení.

Děkujeme všem kolegům ochotným se zapojit do inovace výuky na naší katedře.

- [1] European Commission/EACEA/Eurydice: Structural indicators for monitoring education and training systems in Europe – 2023: Overview of major reforms since 2015 in key policy areas. Publications Office of the European Union. (2023). <https://data.europa.eu/doi/10.2797/843239>
- [2] Klečková M., Mašláňová H., Smékal Z.: Školní pokusy z chemie. 2. vyd. Olomouc: Univerzita Palackého v Olomouci (2024).

4P08

UČIT SE UČIT – WEBOVÝ PORTÁL NA PODPORU STUDENTŮ UČITELSTVÍ

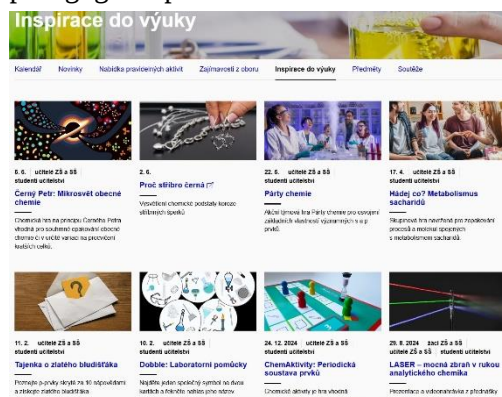
Veronika Švandová, Kateřina Jarolímková

Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kamenice 5, 625 00 Brno, ČR,
106381@mail.muni.cz

Príspevok predstavuje webový portál **Učit se učit** provozovaný na Přírodovědecké fakultě Masarykovy univerzity v Brně. Základním posláním portálu je podpora studentů učitelství v jejich vysokoškolském studiu a přechodu do

pedagogické praxe. Vedlejším cílem je podpora výuky chemie na základních a středních školách v České republice, jelikož ze studentů se časem stávají absolventi a portál mohou dále sledovat i po ukončení studia.

Webový portál Učit se učit [1] vznikl v roce 2010 s cílem pomoci připravovat budoucí středoškolské učitele (přírodovědných předmětů a informatiky Masarykovy univerzity) na jejich budoucí povolání a požadavky praxe. V roce 2019 byl portál obnoven, od roku 2020 inovován a plněn obsahem. Byl převeden do nového redakčního systému v souladu s jednotným vizuálním stylem Masarykovy univerzity. Postupně byl rozšiřován jeho redakční tým tvořený především ze samotných studentů učitelství spolupracujících s oborovými didaktiky. Obsahuje rubriky Novinky, Nabídka pravidelných aktivit, Kalendář, Zajímavosti z oboru, Inspirace do výuky, Předměty a Soutěže [2]. Obsah je též členěn dle jednotlivých oborů (chemie, dále je zastoupena též biologie, geografie, matematika, fyzika, geologie či učitelství obecně) [2]. Poslední roky se rozvíjí především sekce *Inspirace do výuky* (Obr. 1), která studentům nabízí především řadu metod, které mohou využít ve výuce chemie ve své pedagogické praxi.



Obr. 1 Sekce Chemie – Inspirace do výuky portálu Učit se učit.

- [1] Masarykova univerzita: *Učit se učit*. <http://www.ucitseucit.cz/> (1. 7. 2025)
- [2] Švandová V., Pospíšil P., Hrubá J.: *Czech Chemical Society Symposium Series: 74. Sjezd českých a slovenských chemických společností. 74, 261-262 (2022).*

PREDNÁŠKY - SEKCIA 5

CHEMPROGRESS – CHEMICKÉ TECHNOLÓGIE

5P01

VLIV SEPARÁTORU NA TRANSPORT HMOTY A NÁBOJE V ALKALICKÉM ELEKTROLYZÉRU VODY: MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ A EXPERIMENTÁLNÍ ANALÝZA

Karel Denk, Roman Kodým, Adam Fiedler, Jaromír Hnát, Karel Bouzek

Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice, ČR, denk@vscht.cz

Vodíková ekonomika představuje strategii přechodu od fosilních paliv k obnovitelným zdrojům energie. Klíčovou roli v tomto procesu hraje elektrolýza vody jako hlavní způsob produkce „čistého“ vodíku. Konvenční alkalická elektrolýza vody (AEV) pracuje za zvýšených teplot (70–100 °C) s koncentrovaným roztokem KOH (25–30 hm.%), což omezuje flexibilitu a ekonomickou efektivitu. Novější přístup využívá aniontově selektivní membránu (ASM) namísto klasické porézní diafragmy, čímž zlepšuje iontový transport i při nižších koncentracích KOH a teplotách. AEV s membránou (MAEV) tak pracuje flexibilněji a efektivněji než klasická AEV. Tato práce se věnuje hlubšímu studiu vlivu typu separátoru a provozních podmínek na výkon (M)AEV s pomocí matematického modelování a experimentů.

Byly testovány dva druhy separátorů: homogenní ASM a komerční diafragma. Výsledky získané v laboratorním svazku a s pomocí matematických modelů, ukázaly, že MAEV dosahuje lepšího výkonu díky efektivnějšímu transportu iontů separátorem [1]. Byli vyvinuty matematické modely různé úrovně složitosti lišící se v počtu modelových dimenzí (1D, 2D, 3D) a uvažování/zanedbání vývoje plynné fáze. V těchto modelech jsou přenos hmoty a náboje, stejně jako vícefázový tok (plyn-kapalina), popsány pomocí teorie kontinua s využitím makrohomogenního přístupu. Práce identifikuje podmínky vhodné pro provoz v kombinaci s obnovitelnými zdroji a přináší důležité poznatky pro další vývoj této technologie.

Tento výzkum byl financován z projektu Technologické agentury ČR jako součást projektu číslo TK02030103 Výzkum a vývoj reverzibilního alkalického palivového článku.

[1] Denk K. et al.: Chem. Eng. J. 479, 147354 (2024).

5P02

NANOSTRUCTURED BORON-DOPED DIAMOND ELECTRODES FOR HIGH- PERFORMANCE ELECTROCHEMICAL SUPERCAPACITORS

Alexander Kromka¹, Ondrej Szabó¹, Dhananjay K. Sharma¹, Rene Pfeifer¹, Štěpán Stehlík¹, Štěpán Potocký¹, Marian Marton², Marian Vojs², Shradha Suman³, Kamatchi J. Sankaran³

¹*Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, Prague, Czech Republic, kromka@fzu.cz*

²*Institute of Electronics and Photonics, Slovak University of Technology, Bratislava, Slovakia*

³*CSIR-Institute of Minerals and Materials Technology, Bhubaneswar, India*

Electrochemical energy storage is a pivotal challenge in the pursuit of sustainable and efficient power technologies. We present a novel approach to engineering high-performance supercapacitor electrodes using nanostructured boron-doped diamond (BDD) films. By employing reactive ion etching with Au nanoparticle masks, we fabricated vertically aligned diamond nanopillars from two BDD morphologies: microcrystalline (BMCD) and ultra-nanocrystalline (BUNCD) films [1,2]. These nanostructures exhibit significantly enhanced surface area and electrochemical properties, owing to the synergistic interplay between sp³ diamond stability and sp² carbon activity. Electrochemical characterization in both inert and redox-active electrolytes revealed specific capacitances up to 1.0 mF/cm², excellent charge retention over 5000 cycles, and outstanding energy and power densities [2]. Notably, BMCD-derived nanostructures demonstrated higher long-term stability, while BUNCD-based pillars offered superior instantaneous performance. The influence of diamond grain morphology on nanostructure formation, electron transfer kinetics, and electrochemical behavior is systematically evaluated using Raman spectroscopy, XPS, and SEM. These findings underline the promise of tailored BDD nanostructures for robust and scalable energy storage devices, bridging materials science with real-world electrochemical applications [1-3].

We acknowledge the OP JAC project financed by ESIF and the MEYS SENDISO - CZ.02.01.01/00/22_008/0004596.

- [1] Suman S. et al.: *Small* 21, 2407514 (2025).
- [2] Suman S. et al.: *J. Mater. Chem. A* 12, 21134-21147 (2024).
- [3] Pfeifer R. et al.: *ACS Appl. Eng. Mater.* 1, 1446-1454 (2023).

5P03

PŘÍPRAVA NIFE LDH KATALYZÁTORU PRO REAKCI VÝVOJE KYSLÍKU POMOCÍ ELEKTRODEPOZICE NA NIKLOVOU PĚNU

Michaela Plevová, Jaromír Hnát, Karel Bouzek

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav anorganické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR, plevovam@vscht.cz

Se snahou o snížení produkovaného množství CO_2 a závislosti na fosilních palivech, roste zájem o využití vodíku v energetice, průmyslu a dopravě. Vodík může být vyroben bez vedlejší produkce CO_2 pomocí elektrochemického rozkladu vody s využitím obnovitelných zdrojů elektrické energie. Pro větší rozšíření výroby vodíku elektrolýzou vody je však nutný vývoj účinných a cenově dostupných katalyzátorů, které by snížili energetické nároky. Nejvyšší aktivitu vykazují drahé materiály jako Pt a IrO_2 , které jsou nezbytné v technologii pracující s demineralizovanou vodou. V alkalickém prostředí však vysokou aktivitu a stabilitu vykazují také sloučeniny na bázi běžně dostupných kovů, jako je nikl a železo.

V této práci byl pomocí jedнокrokové elektrodepozice připraven katalyzátor pro vývoj kyslíku na bázi sloučeniny niklu a železa ve formě vrstevnatého hydroxidu (NiFe LDH) přímo na povrch trojrozměrné elektrody – niklové pěny (NF). NiFe LDH/NF dosáhl nízkého přepětí pro vylučování kyslíku (180 mV při 10 mA cm^{-2}) a při použití v membránovém laboratorním elektrolyzáru vody dosáhl výrazně vyšší proudové hustoty než elektroda s komerčním IrO_2 katalyzátorem (1 mol dm^{-3} KOH, 50 °C, navážky $\sim 2 \text{ mg cm}^{-2}$). Díky těmto parametrům má NiFe LDH/NF reálný potenciál uplatnění v alkalické elektrolýze vody.

Tato práce byla realizována s podporou Technologické agentury ČR v rámci projektu TK050200013.

5P04

PRÍTOMNOST PCB NA SLOVENSKU – SPÔSOB SANÁCIE

Renáta Števuľová, Ján Híveš, Ladislav Štibrányi

Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Oddelenie anorganickej technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, renata.stevulova@stuba.sk

Polychlórované bifenyly (PCB) sú skupinou perzistentných organických znečisťujúcich látok, ktoré sa v minulosti vo veľkej miere používali v priemysle, najmä ako chladivá, izolanty alebo prísady do farieb a plastov. Vzhľadom na ich toxicitu, hydrofóbnosť a bioakumulačný potenciál však v súčasnosti patria medzi prioritné znečisťujúce látky s negatívnym vplyvom na životné prostredie a zdravie organizmov.

Adsorpcia sa považuje za jednu z najperspektívnejších metód odstraňovania PCB, pretože je cenovo dostupná a zároveň ekologicky udržateľná. V tejto štúdii boli na odstránenie PCB z modelového roztoku obsahujúceho zmes Delor 103 a Delor 106 použité sorbenty typu WG – a to v granulovanej forme (WG1, WG2) aj v práškovej forme (PWG). Práškový sorbent PWG dosiahol účinnosť odstránenia 99,9 %, zatiaľ čo WG1 a WG2 vykázali účinnosti 95,1 % a 96,5 %.

Vyššia účinnosť PWG súvisí s menšou veľkosťou častíc, čo vedie k väčšiemu špecifickému povrchu a zvýšenej dostupnosti adsorpčných miest. WG1 a WG2 obsahovali 100 mg, resp. 200 mg sorbentu. Lepšia účinnosť WG2 v porovnaní s WG1 je spôsobená vyšším množstvom adsorpčného materiálu. Napriek tomu však granulované formy vykazovali nižšiu účinnosť v dôsledku menšej efektívnej povrchovej plochy a obmedzenej dostupnosti pórov pre adsorpciu v porovnaní s práškovou formou.

Tento výskum bol realizovaný s podporou Ministerstva školstva a vedy Slovenskej republiky v rámci projektu VEGA 1/0436/23.

5P05

SORPTION EFFICIENCY OF NEW ZEOLITE-MINERAL COMPOSITES, HUMIC PREPARATES, AND BIO-BASED CARBON TYPE PROTOTYPES ON PCBS CONTAINED IN HIGHLY CHLORINATED PREPARATION OF DELOR 106

Štefan Tóth¹, Ladislav Štibrányi²

¹NPPC, National Agricultural and Food Centre – Research Institute of Agroecology, Špitálska 1273, 071 01, Michalovce, Slovakia

²Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, ladislav.stibranyi@stuba.sk

The main goal of the laboratory trial was to quantify the sorption effect of 7 soil-appliable preparations on polychlorinated biphenyls (PCBs). Three types of sorbents were involved: (i) two new zeolite-mineral composites of ZEO Revital (ZR) and ZEO Sil (ZS); (ii) two humic composites of HUMAC Agro (HA) and HUMAC Enviro (HE); and (iii) three novel carbon-type superabsorbents of SABA – SABE – SABM. A low dose (1:1000, ratio of Delor 106 to sorbent) was applied uniformly all across the sorbents within the set of stock solution 1 (SS-1); then the optimized high, medium, and low doses of the sorbents were applied differentially (1:5000, 1:2000, and 1:1000) within SS-2. PCBs were represented by Delor 106, a commercial product with predominance of highly chlorinated congeners (manufactured in the past at the Slovakian Chemko Strážske facility). Firstly, the Delor 106 aqueous solution's extraction workflow was standardized as a reference solution for the samples treated with sorbents [1].

Total peak area by treatments (at unified low dose, and set of SS-1) showed that sorption efficiency increased in the order of: ZR < ZS < HA < HE < SABE < SABA < SABM (23.9 < 56.3 < 61.6 < 70.4 < 91.5 < 93.9 < 94.5%).

Príspevok bol podporený firmou WPTECH Future.

[1] Tóth Š., Štibrányi L.: *Agriculture / Poľnohospodárstvo*. Pripravené do tlače, 2025.

5P06

TECHNICKO-EKONOMICKÉ POSOUZENÍ VÝROBY E-METHANOLU

Jana Vostrá, Ivan Souček, Jiří Trejbal

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice, ČR, Jana.Vostrav@vscht.cz

S rostoucím tlakem na dekarbonizaci průmyslu a přechod k udržitelným technologiím se e-methanol jeví jako perspektivní alternativa k fosilnímu methanolu. Tato práce se zaměřuje na technicko-ekonomické zhodnocení výroby e-methanolu, tedy methanolu vyráběného hydrogenací CO₂ za použití zeleného vodíku. Cílem bylo zjistit návratnost investic pro modifikaci stávající methanolvé jednotky na produkci e-methanolu.

Pomocí simulačního softwaru Aspen Plus byla modelována výroba methanolu z různých vstupních surovin (syngas z parního reformingu vs. směs H₂/CO₂) a analyzovány dopady na kapacitu, energetickou náročnost a potřebu technických úprav. Výsledky ukazují, že přechod na směs H₂/CO₂ vede ke snížení kapacity o 13 %, poklesu produkce páry o 48 % a zvýšení spotřeby kompresní práce. Zároveň však dochází ke snížení tvorby vedlejších vyšších alkoholů a zlepšení čistoty produktu.

Ekonomická analýza zohlednila investiční a provozní náklady na výrobu zeleného vodíku, zachytávání CO₂ a úpravy technologie.

Tato studie přináší komplexní pohled na možnosti transformace současných výrobních kapacit methanolu směrem k udržitelnější produkci s využitím obnovitelných zdrojů a přispívá k diskuzi o praktické realizovatelnosti e-methanolu v průmyslovém měřítku.

CENA SHIMADZU

CS01

**SÓL-GÉLOVÉ SPOJIVÁ PRE TLAČENÉ
KOMPOZITNÉ BIOCHAR/TiO₂
PROTIELEKTRODY V INTERIÉROVÝCH
FARBIVOM SENZIBILIZOVANÝCH
SOLÁRNYCH ČLÁNKOCH**

Tatiana Buchlová¹, Pavol Gemeiner¹, Roberto Speranza², Andrea Lamberti²

¹*Oddelenie polygrafie a aplikovanej fotochémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika, tatiana.buchlova@stuba.sk*

²*Ústav aplikovaných vied a technológií, Technická univerzita v Turíne, Corso Duca degli Abruzzi 24, 101 29 Turín, Taliansko*

Súčasný výskum farbivom senzibilizovaných solárnych článkov (DSSC) je orientovaný na ich využitie v interiéroch svetelných podmienkach. Pre aplikáciu v protielektrodách sú skúmané uhlíkové materiály, napríklad biochar – ekonomicky výhodný a široko dostupný materiál produkovaný pyrolýzou biomasy [1,2]. Tlačené uhlíkové protielektrody sa pripravujú z disperzií obsahujúcich organické polymérne spojivá, ktoré negatívne ovplyvňujú elektrochemické vlastnosti CE [3].

Práca sa zameriava na vývoj sieťotlačených CE na báze biocharu a TiO₂, aplikovaných v DSSC určených pre interiérové osvetlenie. Kompozitné CE boli pripravené z biocharových disperzií obsahujúcich sól-gély na báze TiO₂, ktoré boli využité ako alternatíva organických polymérnych spojív. Sintrovanie CE pri teplote 450 °C viedlo ku vzniku zosietenej štruktúry nanočastíc TiO₂ v anatasovej kryštalickej forme zabezpečujúcich kontakt medzi časticami biocharu a zlepšenú adhéziu funkčnej vrstvy k substrátu. Porézna štruktúra vrstvy viedla k nárastu katalytickej aktivity CE v prostredí elektrolytu na báze komplexných kationov medi Cu(tmby)⁺²⁺ a taktiež k zvýšeniu účinnosti konverzie energie DSSC. Najvyššia účinnosť v podmienkach interiérového osvetlenia LED s intenzitou 1000 lux (15,63 %) bola dosiahnutá pre DSSC s biochar/TiO₂ CE s využitím sól-gélu obsahujúceho 2 hm.% polyvinylpyrolidónu ako stabilizátora TiO₂ častíc. Výsledky poukazujú na perspektívu využitia kompozitu biocharu a TiO₂ pre vývoj ekologicky šetrných a cenovo dostupných CE v DSSC pre interiérové osvetlenie.

Táto práca bola podporená prostriedkami Early Stage grantu (Grant 23-04-04-A), za čo vyjadrujeme úprimné poďakovanie.

- [1] Khazraei S., Mikladal B.F., Etula J., Varjos I., Hannu J.: *Electrochim. Acta* 488, 144221 (2024).
- [2] Tiihonen A., Siipola V., Lahtinen K., Pajari H.: *Electrochim. Acta* 368, 137583 (2021).
- [3] Narudin N., Ekanyake P., Soon, Y.W., Nakajima H., Lim C.M.: *Sol. Energy* 225, 237-244 (2021).

CS02

**USE OF IR
SPECTROELECTROCHEMISTRY AND
MASS SPECTROMETRY TO STUDY THE
OXIDATION MECHANISMS OF
SYNTHETIC SELAGINPULVILINS**

Lucie Dostálková^{1,2}, Peter Čambal², Tereza Havlíková³, Karolina Schwarzková-Pecková², Lukáš Rýček³, Romana Sokolová¹

¹*J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the Czech Academy of Sciences, Dolejškova 3, 182 00 Prague 8, Czech Republic, lucie.dostalkova@jh-inst.cas.cz*

²*Charles University in Prague, Faculty of Science, Department of Analytical Chemistry, Albertov 6, 128 00 Prague 2, Czech Republic*

³*Charles University in Prague, Faculty of Science, Department of Organic Chemistry, Albertov 6, 128 00 Prague 2, Czech Republic*

Selaginpulvilins are biologically active compounds with remarkable biological and pharmaceutical properties. They are found as secondary metabolites in plants of the genus *Selaginella* (Fig. 1A), along with other compounds such as selaginellins, neolignans, and biflavonoids [1,2]. In study [3], derivatives of these compounds were prepared, and notably, some exhibited the formation of radicals stable in air in the solid state.

The aim of the study was to propose an oxidation mechanism of four synthetic selaginpulvilins differing in the presence of hydroxyl, methyl, and two methoxy groups (Fig. 1B) using IR-spectroelectrochemistry, and HPLC/MS analysis of oxidation products mixture. These products were obtained through exhaustive electrolysis at constant potentials of +1.4 V and +1.7 V (vs. Ag|AgCl|1 M LiCl), corresponding to the first and second oxidation waves. Using fragmentation spectra, the main oxidation products were identified as compounds containing one keto group and two hydroxyl groups.

The experimental results were supplemented with theoretical calculations of the spatial distribution of the HOMO orbitals of all studied compounds.

The results indicate that the first electron transfer takes place on the fluorene skeleton and subsequently leads to the formation of hydroxylated products.

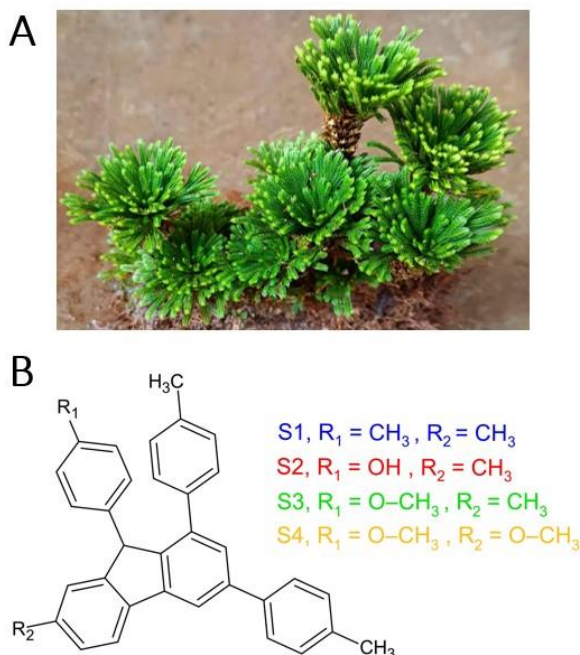


Fig. 1 (A) The plant *Selaginella pulvinata* and (B) the chemical structures of all studied selaginpulvinilins.

The work has been supported by the Czech Academy of Sciences (RVO: 61388955) and Grant Agency of Charles University (project GAUK 24324).

- [1] Banks J.A.: *Annu. Rev. Plant Biol.* 60, 223-238 (2009).
- [2] Zhang J.S., Liu X., Weng Y.Q., Guo Y.Q., Li Q.J., Ahmed A., Tang G.H., Yin S.: *Org. Chem. Front.* 4, 170-177 (2017).
- [3] Nallappan S., Lapinskaite R., Hájíček J., Kunák D., Čambal P., Císařová I., Nečas D., Atalay H.N., Tümer T. B., Tarábek J., Schwarzková-Pecková K., Rýček L.: *ChemPlusChem* 89, e202300410 (2024).

CS03 SEPARÁCIA RÁDIOIZOTOPOV Ni A STANOVENIE ICH AKTIVITY VO VZORKE RÁDIOAKTÍVNEHO ODPADU S VYUŽITÍM 3D TLAČE

Marek Hupians, Oľga Rosskopfová, Dominik Juračka, Michal Galamboš

Katedra jadrovej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, marek.hupian@uniba.sk

Rádioizotopy niklu ^{59}Ni a ^{63}Ni patria medzi aktívne produkty vznikajúce v jadrových reaktoroch ožiarením stabilného nuklidu Ni

neutrónmi. Vzhľadom na ich dlhú dobu polpremeny (76 000 r, 100 r) a schopnosť viazať sa v kovových štruktúrach, predstavujú významnú zložku rádioaktívneho odpadu [1,2]. Táto práca sa zameriava na separáciu týchto izotopov od rôznych interferentov a stanovenie ich hmotnostných aktivít vo vzorke výluhu z rádioaktívneho odpadu. Použila sa kombinácia viacerých separačných metód – iónovymenná chromatografia, extrakčná chromatografia a zrážanie. Rádiochemický výťažok sa stanovil gravimetricky a spektrofotometricky. Separácia sa opakovala 5-krát, pre zaistenie reprodukovateľnosti výsledkov. Rádioizotop ^{59}Ni sa meral pomocou LeSi detektora, pričom sa využili 3D tlačou vytvorené nadstavce na optimalizáciu geometrie merania, čo umožnilo zvýšiť účinnosť detekcie približne o 1 rád. Rádioizotop ^{63}Ni sa meral pomocou LSC. Z hodnôt hmotnostných aktivít rádioizotopov niklu sa určil presný pomer aktivít $^{63}\text{Ni}/^{59}\text{Ni}$ a porovnal sa s dostupnou literatúrou.

Tento príspevok je financovaný grantom UK/1109/2025. Poďakovanie patrí aj projektu SK-SRB-23-0057.

- [1] Lehto J., Hou X.: Wiley-VCH (2011).
- [2] Rosskopfová O., Galamboš M., Rajec P.: *J. Radioanal. Nucl. Chem.* 289, 251-256 (2011).

CS04 ANALÝZA MIERY ROZLOŽITEĽNOSTI VLHČENÝCH UTIEROK

Martina Illášová¹, Lenka Lorencová², Monika Jerigová^{3,4}, Andrej Vikartovský²

¹Gymnázium Ľudovíta Jaroslava Šuleka Pohraničná 10, 945 01 Komárno, martinka.illasova@gmail.com

²Chemický ústav SAV, v.v.i., Dúbravská cesta 9/5807, 845 38 Bratislava

³Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava

⁴Medzinárodné laserové centrum-Centrum vedecko-technických informácií SR, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava

V dnešnom modernom svete, kde pohodlie a hygiena hrajú kľúčovú rolu v každodennom živote, sa vlhčený toaletný papier stal populárnym doplnkom v osobnej starostlivosti. Tento produkt kombinuje jemnosť a čistiacu schopnosť vlhkých obrúskov s pohodlím tradičného toaletného papiera. Napriek jeho užívateľským výhodám sa však vynára otázka jeho vplyvu na životné prostredie, najmä v kontexte rozložiteľnosti.

Rozložiteľnosť materiálov je kritickým aspektom environmentálnej udržateľnosti. Aj keď je vlhčený toaletný papier často označovaný ako „rozložiteľný“ alebo „splachovateľný“, jeho správanie v reálnych podmienkach často nespĺňa deklarované vlastnosti. Kľúčovým faktorom, ktorý ovplyvňuje rozklad vlhčeného toaletného papiera, je jeho materiálové zloženie.

Cieľom tejto práce je analyzovať mieru degradácie vybraných verejne dostupných vzoriek vlhčeného toaletného papiera v kontrolovaných podmienkach a porovnať ju s vlastnosťami tradičného toaletného papiera, rovnako ako s inými vzorkami nerozložiteľných druhov utierok. Výsledky našej analýzy prispievajú k lepšiemu pochopeniu environmentálneho dopadu týchto produktov a poskytnú odporúčania pre ich dizajn a reguláciu.

Výsledky predstavujú porovnanie materiálového zloženia jednotlivých vzoriek pomocou metódy hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov a využitie získaných dát na potenciálne riešenie danej problematiky. Obsahom práce je takisto pozorovanie dezintegrácie v prítomnosti rôznych faktorov a stanovenie optimálnych podmienok na efektívny rozklad. Predkladaná práca poukazuje navyše na detailný rozbor odpadovej vody, nakoľko chemický rozklad utierok a jeho vplyv na zloženie vody je rovnako dôležitým aspektom ako samotný fyzický rozpad.

Pevne veríme, že prínosom tejto práce budú nie len samotné zistenia, ale aj zvýšenie povedomia a vzbudenie záujmu o témy s negatívnym environmentálnym dopadom. Naším cieľom je poukázať na environmentálne riziká spojené s používaním vlhčeného toaletného papiera a zároveň priniesť konkrétne riešenia pre zlepšenie jeho udržateľnosti. Výsledky výskumu môžu slúžiť ako základ pre legislatívne úpravy, ktoré zabezpečia presnejšie označovanie rozložiteľnosti produktov.

CS05

A NEW METHOD FOR DETECTING TRAZODONE IN BIOLOGICAL FLUIDS

Oleksandra Labzova^{1,2}, Vojtěch Hrdlička², Tomáš Navrátil², Oleksandr Matvieiev¹, Renáta Šelešovská¹

¹University of Pardubice, Institute of Environmental and Chemical Engineering, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic, oleksandra.labzova@jh-inst.cas.cz

²J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the Czech Academy of Sciences, Dolejškova 3, 182 00 Prague 8, Czech Republic

A new method was developed and validated for the determination of antidepressant trazodone in human biological fluids. The method combines two techniques: hollow fiber-based liquid-phase microextraction (HF-LPME) and square wave voltammetry (SWV) using screen-printed boron-doped diamond electrode (SP-BDDE) [1]. The study established the optimal conditions with isoamyl benzoate as supported liquid membrane (SLM) immobilized in a polypropylene porous hollow fibre, 0.1 mol L⁻¹ H₂SO₄ acceptor solution, Britton-Robinson buffer (pH = 10) as donor solution and extraction time of 35 minutes. After extraction, 10 µL of the acceptor solution was analyzed using SWV with the following optimized parameters: amplitude 55 mV, frequency 20 Hz, and potential step 4 mV.

The combined HF-LPME-SWV method demonstrated excellent performance, with a linear range of 20-2000 nmol L⁻¹. The limit of quantification (LOQ) was 42 nmol L⁻¹ and the limit of detection (LOD) was 12 nmol L⁻¹. Given that the therapeutic effect of Trazodone directly depends on maintaining its physiological levels, an objective method for controlling its dosage and absorption is critical [2,3].

The developed method was successfully applied to analyze human urine and blood plasma samples. Additionally, the study explored the electrooxidation mechanism of trazodone using mass-spectrometric analysis of electrogenerated products and reaction intermediates, proposing a two-step electro-oxidation mechanism.

The authors acknowledge the assistance provided by the AMULET project, supported by the MEYS CR (No. EH22_008/0004558, Co-funded by the EU) (T.N.), and the University of Pardubice (projects No. SGS_2025_002) (O.L. and R.Š.).

[1] Hrdlička V., Navrátil T., Barek J.: *J. Electroanal. Chem.* 835, 130-136 (2019).

[2] Khouzam H.R.: *Postgrad. Med.* 129, 140-148 (2017).

- [3] Baranda A.B., Mueller C.A., Alonso R.M., Jiménez R.M., Weinmann W.: *Ther. Drug Monit.* 27, 44-52 (2005).

CS06

MONITOROVÁNÍ DEGRADACE LÉČIV: SROVNÁNÍ ON-LINE A OFF-LINE PŘÍSTUPU

Lucie Pražáková, Martin Šefčík, Jan Fischer, Anna Kubíčková

Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Albertov 6, 128 00 Praha 2, ČR, prazakolu@natur.cuni.cz

Oxidační degradace je perspektivní metodou rozkladu farmaceutických látek, která vede k jejich rychlé přeměně na degradační produkty či jejich úplné mineralizaci [1]. Elektrochemické metody nabízejí ekologickou alternativu k chemické oxidaci, jelikož generují reaktivní formy kyslíku, zejména hydroxylové radikály, přímo na povrchu elektrody bez nutnosti přidání chemických činidel [2]. Díky své stabilitě a širokému potenciálovému oknu jsou k tomuto použití zvláště vhodné borem dopované diamantové elektrody (BDDE). V této studii bylo testováno on-line propojení elektrochemické degradační cely s hmotnostní spektrometrií (EC-MS), které umožňuje okamžité sledování vznikajících degradačních produktů. Studie probíhala s využitím vlastní průtokové elektrochemické cely vyrobené pomocí 3D tisku, která umožňuje efektivní řízení doby kontaktu látky s BDDE a zároveň miniaturizaci celého systému. Byly porovnány produkty zachycené při on-line MS analýze s výsledky off-line HPLC-MS analýzy z degradací ve vsádkové i průtokové elektrochemické cele. Studie přináší detailní analýzu degradačních produktů vznikajících v různých fázích rozkladu léčivých látek a měla by přispět k hledání rychlých, šetrných a účinných přístupů k jejich degradaci v životním prostředí.

Tento výzkum byl podpořen Grantovou agenturou České republiky (projekt č. 25-14463L), Grantovou agenturou Univerzity Karlovy (projekt č. 392825) a Specifickým vysokoškolským výzkumem na Univerzitě Karlově, Česká republika (SVV260690).

- [1] Peixoto R.L.D., Coelho M.S.D., Peralta-Zamora P.F.C.V.: *Environ. Adv.* 3, 100032 (2021).
[2] Qiao J., Xiong Y.: *J. Water Process Eng.* 44, 102308 (2021).

CS07

STUDIUM KOMPLEXAČNÍCH VLASTNOSTÍ MOČOVINOVÝCH RECEPTORŮ PREORGANIZOVANÝCH AZACALIXARENOVÝMI NOSIČI

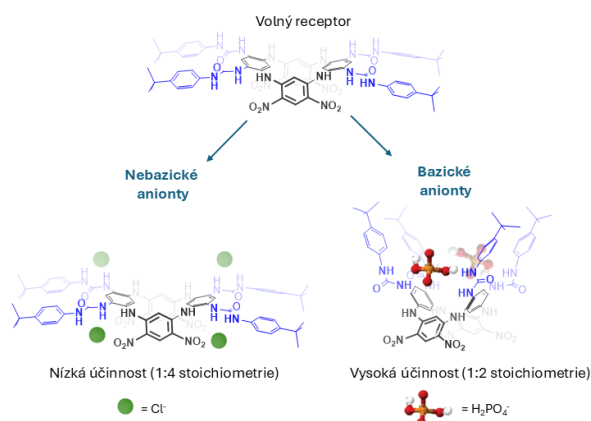
Karolína Salvadori^{1,2}, Olivier Siri²

¹*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav analytické chemie, Technická 5, 160 00 Praha 6, Česká republika, salvadok@vscht.cz*

²*Aix-Marseille Université, CNRS UMR 7325 Centre Interdisciplinaire de Nanoscience de Marseille (CINaM), Campus de Luminy, Marseille cedex 09 13288, Francie*

Anionty se přirozeně vyskytují v přírodě. Řada z nich však patří k závažným environmentálním polutantům a látkám negativně ovlivňujícím organismy. V kontrastu k anorganickým kationtům vykazují i jednoduché anionty značnou geometrickou rozmanitost a obecně vyšší solvatační energie. Navíc některé z nich jsou odvozeny od slabých kyselin, a jsou tak značně bazické (např. karboxyláty a fosfáty) [1]. Takovéto anionty pak mohou při nevhodném návrhu receptoru způsobit nežádoucí deprotonaci vazebných motivů. Z těchto a řady dalších důvodů je příprava struktur vhodných k jejich komplexaci značnou výzvou.

Cílem našeho výzkumu se stala syntéza jednoduchých receptorů a jejich modelových systémů, které disponují močovinovými vazebnými místy (Obr. 1). Ke zvýšení vazebné účinnosti byly močovinové motivy preorganizovány pomocí azacalix[4]arenového skeletu. Vazebné schopnosti receptorů byly studovány v kompetitivním prostředí (DMSO) za použití ¹H NMR a UV-Vis titrací [2]. Experimentální výsledky potvrdily značnou selektivitu receptoru vůči fosforečnanům ve srovnání s biologicky důležitými anionty, jako jsou Cl⁻, NO₃⁻ a HSO₄⁻. Navíc se ukázalo, že komplexy se nejen liší silou interakce, ale i stechiometrií. V případě bazických aniontů dochází k pozitivní kooperativitě systému, umocňující účinnost receptoru. Spojení vazebných míst s azacalixarenovým nosičem s sebou přináší i další praktické důsledky. Ukázalo se, že díky velikosti molekul je možné receptory efektivně recyklovat pomocí nanofiltrace.



Obr. 1 Interakce aniontů s močovinovými vazebnými místy preorganizovanými pomocí azacalix[4]arenového skeletu.

Práce byla podpořena grantem GAČR 25-17173O.

- [1] Steed, J.W., Atwood J. L.: *Supramolecular Chemistry*, Wiley, Chichester, UK (2009).
- [2] Schalley C.A.: *Analytical Methods in Supramolecular Chemistry*, John Wiley & Sons (2012).

CS08

POROVNANIE ZEOLITOV A KYSLÝCH IÓNOMENIČOV AKO KATALYZÁTOROV PRE PRÍPRAVU ADITÍVA DO DIESELOVÝCH PALÍV

Zuzana Silná, Tomáš Soták, Anastasiia Kuzina

OOTKaR FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, zuzana.silna@stuba.sk

Etyltetrahydrofurfuryléter (ETFE) je sľubným kandidátom pre potenciálnu aplikáciu ako zelené aditívum do dieselových palív pre . Má vysoké cetánové číslo (80-90) a pri motorových skúškach v zmesiach s konvenčným dieselovým palivom dosiahol pozitívne výsledky. Vo výfukových plynach takýchto palivových zmesí boli zistené nižšie koncentrácie oxidov dusíka, síry a tuhých častíc [1].

Jednou z metód prípravy ETFE je éterifikácia tetrahydrofurfurylalkoholu (THFA) a etanolu (EtOH) v prítomnosti kyslého katalyzátora. Surovinu potrebnú na túto prípravu ETFE je možné vyrobiť z biomasy.

V tejto štúdii sme využili metódu prípravy nesymetrických éterov zo zmesi alkoholov v prítomnosti heterogénnych katalyzátorov, ktorú sme úspešne aplikovali pre iné typy zlúčenín [2,3]. Reakciu sme skúmali vo vsádzkovom aj prietokovom systéme. Pri modelovej reakcii vo vsádzkovom systéme sme nechali reagovať zmes EtOH a THFA v hmotnostnom pomere 5 : 1 po

dobu 5 hodín pri teplote 140 °C. Pri bežnom experimente v prietokovom systéme bola rovnaká zmes alkoholov dávkaná na pevné lôžko katalyzátora pri zaťažení 0,25 g_{THFA}·g_{kat}⁻¹·h⁻¹ a reakčnej teplote 140 °C.

Heterogénnymi kyslými katalyzátormi testovanými v tejto reakcii boli viaceré komerčne dostupné zeolity a iónovymenné živice typu Amberlyst.

V oboch typoch reaktorov sme dosiahli najlepšie výsledky v prítomnosti zeolitu H-ZSM-5. Najvyššia dosiahnutá selektivita tvorby ETFE bola 27,8 % pri konverzii THFA 50,3 %, a to v prietokovom systéme. V porovnaní so zeolitmi boli iónovymenné živice menej selektívne voči ETFE, menej stabilné a náročnejšie regenerovateľné.

Táto publikácia vznikla za podpory Ministerstva školstva, vedy a výskumu (projekt VEGA 1/0374/23) a Agentúry na podporu výskumu a vývoja (projekt VV-MVP-24-0331).

- [1] de Jong E., Vijlbrief T., Hijkoop R., Gruter G.-J.M., van den Waal J.C.: *Biomass Bioenerg.* 36, 151-159 (2012).
- [2] Soták T., Magyarová Z., Shamzhy M., Kubů M., Gołabek K., Čejka J., Hronec M.: *Appl. Catal. A: Gen.* 618, 118122 (2021).
- [3] Silná Z., Lopatka P., Soták T.: *Reac. Kinet. Mech. Cat.* (2025), v tlači.

CS09

ADSORPTIVE REMOVAL OF RADIOACTIVE ¹³³BA USING MXENE-BASED MATERIAL: INFLUENCE OF PH AND CONTACT TIME

Vesaj Singh¹, Vipul Vilas Kusumkar¹, Shalu Atri², Eva Viglašová¹, Michal Galamboš¹

¹Comenius University Bratislava, Faculty of Natural Sciences, Department of Nuclear Chemistry, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovak Republic, singh19@uniba.sk

²Comenius University Bratislava, Faculty of Natural Sciences, Department of Inorganic Chemistry, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovak Republic

MXenes are a new generation 2-D material, which have been well known for their physicochemical properties like reactive adsorption sites with negative charge, large specific surface area, high chemical stability, controllable layer space, superior sorption-reduction capacity, and good hydrophilicity [1]. To this end, modified Ti₃C₂T_x was prepared via intercalation using tetramethylammonium hydroxide under

conventional stirring at room temperature. This study investigates the potential of the synthesized MXene-based material for the adsorptive removal of radioactive ^{133}Ba from aqueous solutions.

Batch adsorption experiments were conducted to evaluate the effects of pH and contact time. At a fixed contact time of 2 hours, the adsorbent showed maximum uptake of ^{133}Ba at pH 8.1, with an adsorption capacity of $19.18 \text{ mg}\cdot\text{g}^{-1}$ and K_d of $510.34 \text{ mL}\cdot\text{g}^{-1}$, indicating strong interaction between Ba^{2+} ions and surface functional groups.

The effect of contact time was assessed at pH 7.5 for time intervals ranging from 15 to 360 minutes. Adsorption increased with time, reaching equilibrium around 60 minutes with a maximum adsorption capacity of $4.33 \text{ mg}\cdot\text{g}^{-1}$ and 16% removal efficiency. Prolonged contact beyond 60 minutes showed minimal improvement, suggesting surface site saturation. The structural

and morphological characteristics of the material were examined using X-ray diffraction and scanning electron microscopy. Overall, MXene-based adsorbents show strong promise for application in radioactive wastewater treatment [2].

This work was supported by the Research and Development Support Agency based on Contract no. SK-SRB-23-0057.

- [1] Liu Y.-L., Li D., Cao P., Yin X., Zeng Q., Zhou H.: *Mater. Today Phys.* 44, 101444 (2024).
- [2] Atri S., Kusumkar V.V., İnan S., Gregor M., Roch T., Caplovicova M., Galambos M., Viglasova E., Plesch G., Monfort O.: *Inorg. Chem. Front.* 11, 7860-7871 (2024).

POSTERY - SEKCIA 1 ANALYTICKÁ CHÉMIA A FYZIKÁLNA CHÉMIA

1Po01

MODELLING THE TERNARY COMPLEX AND ACTIVE SITE DYNAMICS OF GALACTOFURANOSYL TRANSFERASE 2 FOR RATIONAL DRUG DESIGN

Yasir Ali, Monika Ďuračková, Barbora Stratilová,
Stanislav Kozmon

*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences,
Dúbravská cesta 5807/9, 845 38 Bratislava, Slovakia,
yasir.ali@savba.sk*

Galactofuranosyltransferase (Glft2) is an essential enzyme that transfers galactofuranose (Galf) subunits from donor UDP onto the acceptor galactan chain during *Mycobacterium tuberculosis* cell wall assembly. As tuberculosis continues to be a major global health threat, with 1.25 million fatalities reported in 2023, targeting Glft2 presents a promising strategy for the development of new therapeutic agents. This study reconstructs Glft2 with UDP-Galf and acceptor galactan chain to show how loop 1 (aa 397 to 407) anchors UDP-Galf in the active site and put them in place for reaction. Next, we employed multi-tiered docking and hit selection approach for screening of lead compounds against Glft2's active site. Our

hierarchical approach started from benchmarking docking to get an Enrichment factor (EF) of 5.56% to pharmacophore modelling improving the EF to 43.65%. These benchmarked approaches were used to identify several lead compounds with better binding affinities compared to the native donor substrate. With the subsequent binding pose metadynamics, we were able to show twenty compounds with comparable stability to UDP-Galf across matrices various metrics like PoseScore < 2.0 and PersScore > 0.4, a threshold often attributed to X-ray crystalized poses [1]. Principal component analysis indicated that the proposed compounds are well within the chemical space of FDA approved drugs. Taken together, our results provide a strong rationale for the experimental testing of these compounds to validate their potential as Glft2 inhibitors [2].

This work was financially supported by APVV-20-0230, APVV-21-0346 grants. Yasir Ali is also supported by Action Austria-Slovakia program.

- [1] Janoš P., Kozmon S., Tvaroška I., Koča J.: *Chem. Eur. J.* 24, 7051-7059 (2018).
- [2] Fusani L., Palmer D.S., Somers D.O., Wall, I.D.: *J. Chem. Inf. Model* 60, 1528-1539 (2020).

1Po02**SEASONAL OXIDATIVE DYNAMICS AND ISOTOPIC FRACTIONATION OF NO_x AND SO₂ IN OSTRAVA, CZECH REPUBLIC: INSIGHTS FROM STABLE ISOTOPE ANALYSIS**

František Buzek¹, Bohuslava Cejkova¹, Ivana Jackova¹, Radim Seibert², Jan Curik¹, František Veselovsky¹, Daniel A. Petrash¹

¹Czech Geological Survey, Geologická 6, 152 00 Prague 5, Czech Republic, frantisek.buzek@geology.cz

²Czech Hydrometeorological Institute, K Myslivne 2182/3, 708 00 Ostrava-Poruba, Czech Republic

The city of Ostrava, NE Czech Republic, is known for its industrial pollution. In 2021, we conducted a series of sampling campaigns to assess the isotopic fractionation ¹⁵N and ³⁴S conducive to NO₃⁻ and SO₄²⁻ aerosols in PM₁₀. Sampling campaigns were timed to capture varying atmospheric conditions, including climatic inversion periods, providing also insights into urban emission dynamics over the course of the year. Gaseous NO_x and SO₂ were collected on passive filters, while their oxidized forms, NO₃⁻ and SO₄²⁻, were captured on PM₁₀ particle filters, enabling us to analyze the transformation dynamics of these pollutants. Isotopic analyses distinguished the sources of NO_x emissions—coal combustion (δ¹⁵N = - 3‰) and vehicular emissions (δ¹⁵N = - 7 ‰)—and allowed quantifying isotope fractionation during their conversion to NO₃⁻ (ε_{NO_x-NO₃⁻} = 11.5 ± 1.15 ‰). This fractionation, however, was influenced by seasonal variations, and appears to be notably affected by NH₄NO₃ decomposition during warmer months. Similarly, for SO₂, primarily emitted from coal combustion (δ³⁴S = - 2‰), we identified distinct fractionation patterns during oxidation to SO₄²⁻ encompassing both kinetic (ε_{SO₂-H₂O} = - 1.3 ± 0.5‰) and equilibrium (ε_{SO₂-SO₄²⁻} = 2.24 ± 0.67‰) effects.

1Po03**STABILIZATION EFFECT OF SEVERAL ANTIOXIDANTS IN NATURAL RUBBER STUDIED BY NONISOTHERMAL DSC**

Zuzana Cibulková, Tibor Dubaj

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, zuzana.cibulkova@stuba.sk

Natural rubber (NR) finds extensive use in various products, particularly in the automotive and industrial sectors, due to its exceptional elasticity,

durability, and ability to absorb shock. Its unique properties, like heat resistance and resilience, make it irreplaceable in certain applications, including tires and military coatings. While natural rubber exhibits good elasticity and other desirable qualities, it is highly susceptible to degradation over time when exposed to certain environmental factors, due to the presence of double bonds in the main chain. Degradation of NR is accelerated mainly by heat, oxygen, light, ozone and radiation. Thermooxidative ageing of rubber is a very serious problem, because it causes considerable changes in its structure leading to the change of physico-mechanical properties. In order to minimize the oxidative degradation of NR during service at high temperatures, it is effective to mix it with antioxidants.

Thermooxidative degradation of elastomers exhibits an induction period (IP). At the end of IP the oxidation connected with a sudden change of material properties begins. Therefore is the length of IP frequently taken as a measure of the material stability [1]. In our previous works [1,2] an integral isoconversional method is proposed for obtaining the kinetic parameters of IPs from the onset temperatures of nonisothermal DSC runs with linear increase of temperature.

In this study the thermooxidative stability of natural rubber has been examined in the presence of several antioxidants (including IPPD, lignin, calcium lignosulfonate). The stabilization effect of these antioxidants and their mixtures have been studied by DSC under non-isothermal conditions. In order to evaluate the stabilization effect of the additives, protection factors were calculated [3].

Financial support from the Slovak Scientific Grant Agency VEGA under the contract No. 1/0498/22 is gratefully acknowledged.

- [1] Šimon P., Kolman L.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 64, 813-820 (2001).
- [2] Šimon P.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 84, 263-270 (2006).
- [3] Cibulková Z., Šimon P., Lehocký P., Balko J.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 80, 357-361 (2005).

1Po04**ANTHRAQUINONE DERIVATIVES IN HYPERICUM SPECIES FROM THE LC-MS POINT OF VIEW**

Richard Čmelík¹, Dana Moravcová¹, Lenka Svojanovská¹, Miroslava Bálintová², Katarína Bruňáková²

¹*Institute of Analytical Chemistry of the Czech Academy of Sciences, Veveří 97, 602 00 Brno, Czech Republic, cmelik@iach.cz*

²*Department of Genetics, Institute of Biology and Ecology, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Mánesova 23, 041 54 Košice, Slovakia*

Anthraquinones (AQs) represents a class of secondary metabolites, which are essential in various biological processes in plants. For instance, AQs act as intermediates in the naphthodianthrone biosynthesis pathway in *Hypericum* species. *Hypericum perforatum* L., a model species within the genus *Hypericum*, is mainly studied for its production of hypericins, potent photosensitive naphthodianthrone pigments with significant pharmaceutical value. On the other hand, the diversity of AQ derivatives across *Hypericum* species remains relatively underexplored.

In this study, we used an enhanced liquid-liquid extraction procedure combined with reversed-phase high-performance liquid chromatography, along with UV and electrospray ionization mass spectrometry to profile metabolites in selected *Hypericum* species. Structural analysis of the predominant metabolites - detected by diode-array detection at 440 nm - led to the identification of six groups of AQs, including emodin, its *O*-glucoside, and various *O*-pentosides and *O*-hexosides derived from skyrin and oxyskyrin.

The structures of these AQ derivatives were proposed based on their UV/Vis spectra, hydrolysis experiments, and MS data, compared with existing literature reporting data for *Hypericum* and other plants containing AQs.

This work was supported by APVV-18-0125, VEGA 1/0546/22, KEGA 015UPJŠ-4/2024, and the institutional research plan [RVO: 68081715].

1Po05**VOLTAMETRICKÉ CHARAKTERIZACE ORGANOKOVÝCH GLYKOMIMETIK**

Marek Zelinka¹, Lucie Žaloudková¹, Vojtěch Hamala², Jindřich Karban², Veronika Ostatná¹, Aleš Daňhel¹

¹*Oddělení biofyzikální chemie a molekulární onkologie, Biofyzikální ústav AV ČR, Královopolská 135, 612 00 Brno, Česká republika, danhel@ibp.cz*

²*Výzkumná skupina Bioorganické chemie a biomateriálů, Ústav chemických procesů AV ČR, Rozvojová 135, 165 00, Praha 6, Česká republika*

Ligandy galektinů se jeví jako velmi slibné látky pro léčbu kardiovaskulárních onemocnění, fibrózy a rakoviny. V důsledku toho v poslední době vzrostla poptávka po jejich syntéze a po studiích interakcí mezi galektiny a jejich ligandy [1]. Moderní elektrochemické techniky, jako je voltametrie se střídavým proudem (AC voltametrie) nebo chronopotenciometrická rozpouštěcí analýza s konstantním proudem (CPS) na visícím rtuťové kapkové elektrodě, stejně jako cyklická voltametrie (CV) a voltametrie s čtvercovou vlnou (SWV) na elektrodě z pyrolytického grafitu, mohou být výhodně využity pro elektrochemickou charakterizaci, elektroanalytickou detekci a studium interakcí [2,3]. V této studii bylo zkoumáno elektrochemické chování nových organokovových glykomimetik, jejich adsorpční/desorpční chování na nabitých površích a interakce s modelovým proteinem – hovězím sérovým albuminem (BSA) nebo lidskými galektiny-1 a -3.

Tato práce vznikla za finanční podpory Grantové agentury České republiky (projekt 23-06115S).

- [1] Hamala V., Kurfirt M., Cervenková Stastná L. et al.: *Inorg. Chem. Front.* 11, 7588-7609 (2024).
- [2] Žaloudková L.: *Bachelor Thesis*, Masaryk University, 2023.
- [3] Zelinka M.: *Master Thesis*, Masaryk University, 2024.

1Po06**APTAMER SEQUENCES AS POTENTIAL FORMERS OF G-QUADRUPLEX**

Michaela Dobrovolná^{1,2,†}, Anne Cucchiari^{3,†}, Václav Brázda^{1,2}, Jean-Louis Mergny^{1,3}

¹*Institute of Biophysics, Czech Academy of Sciences, Královopolská 135, 612 00 Brno, Czech Republic, vaclav@ibp.cz.*

²*Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic*

³*Laboratoire d'Optique et Biosciences, Ecole Polytechnique, CNRS, INSERM, Institut Polytechnique de Paris 911 20 Palaiseau, France*

†Equal contribution

Aptamers are short DNA or RNA sequences that fold into unique three-dimensional structures, allowing them to bind target molecules with high specificity and affinity, similar to antibodies. A notable structural motif in many aptamers is the G-quadruplex (G4), a four-stranded fold formed by guanine-rich sequences. While G4 formation has been proposed for select aptamers, we investigated how frequently G4-prone motifs emerge through the SELEX process. We analyzed over 1,400 sequences from the UTexas Aptamer Database, sourced from 400 publications, to assess their potential to form G4 and i-motif structures. No strong i-motif candidates were identified, but nearly one-quarter of DNA aptamers and one-sixth of RNA aptamers showed potential for G4 formation. Interestingly, many of these G4-capable motifs were previously unrecognized; only 17% of sequences with predicted stable G4s mentioned "quadruplex" in the corresponding publications. We experimentally tested 30 aptamers and confirmed G4 formation in all sequences with a G4Hunter score of 1.31 or higher. These results indicate that G4 motifs may be an underappreciated structural feature in aptamer design. Greater awareness and analysis of G4-forming potential could enhance aptamer discovery and functional interpretation.

[1] Cucchiari A., Dobrovolná M., Brázda V., Mergny J.-L.: *Nucleic Acids Res.* 53, gkaf424 (2025).

1Po07**DEGREE OF CONVERSION IN THERMOANALYTICAL KINETICS**

Tibor Dubaj, Zuzana Cibulková, Peter Šimon

Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, tibor.dubaj@stuba.sk

Thermoanalytical methods such as differential scanning calorimetry (DSC) and thermogravimetry (TG) are routinely employed for kinetic analysis of processes in condensed phase. The measured thermoanalytical signal (heat flow in DSC, mass in TG) represents an envelope of all processes occurring in a sample at a given instant. Normalized thermoanalytical signal is usually treated as degree of conversion, conventionally defined as the reacted amount of a reactant normalized to its initial amount. Here we show that "classical" and thermoanalytical degree of conversion are equal only in case of elementary processes. For complex processes, such as two parallel first-order reactions ($A \rightarrow B$, $A \rightarrow C$) or two consecutive first-order reactions ($A \rightarrow B \rightarrow C$), they may differ considerably and are equivalent only in special limiting cases [1]. The corollary of this discrepancy resides in interpretation of kinetic parameters obtained from thermoanalytical data using general rate equation. Since conversion is calculated solely on the basis of observed thermoanalytical effects, the resulting kinetic parameters therefore describe the kinetics of heat exchange (for DSC) or mass loss (for TG) rather than the kinetics of chemical or physical transformation. Hence, no mechanistic conclusions should be drawn from such kinetic parameters; however, they still enable us to model the kinetics of complex processes from the point of view of the measured thermoanalytical quantity.

Financial support from the Slovak Scientific Grant Agency (VEGA 1/0498/22) is gratefully acknowledged.

[1] Šimon P., Skrdla P.J., Dubaj T., Cibulková Z.: *Thermochim. Acta* 745, 179933 (2025).

1Po08**THE EXPERIMENTAL AND THEROETICAL DFT ANALYSIS OF SPIN-SPIN INTERACTION CONSTANTS OF KERATAN SULPHATE AND IOTA- AND KAPPA-CARRAGEENANS**

Michal Hricovíni, Miloš Hricovíni

*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences,
845 38 Bratislava, Slovakia,
Milos.Hricovini@savba.sk*

A detailed understanding of the molecular structure of carbohydrates is essential for elucidating the diverse processes involved in glycobiology. Sulphated polysaccharides, such as the glycosaminoglycan (GAG) keratan sulphate, which is commonly found in corneal, skeletal, and neural tissues, and carrageenans, which are sulphated galactans derived from red algae, play vital roles in extracellular interactions, cell signalling, and matrix organisation [1,2].

The combination of density functional theory (DFT) with high-resolution NMR spectroscopy provides valuable insights into the conformational behaviour, solvation properties, and protein-binding mechanisms of glycosaminoglycans [3]. In this contribution, DFT calculations of molecular geometries and proton–proton and proton–carbon coupling constants were examined and compared with experimental spectroscopic data. The results reveal that the position and number of sulphate groups – whether on the galactose rings of carrageenans or along the keratan sulphate backbone – strongly influence the local geometry, electronic distribution, and the magnitude of indirect spin-spin coupling constants. Furthermore, the DFT calculations emphasise the importance of extensive hydrogen bonding networks and strong ionic interactions in shaping the first hydration shell, both of which substantially contribute to the 3D geometry of the saccharide molecules.

This work was financially supported by Slovak grant agency VEGA 2/0071/22.

- [1] Funderburgh J.L.: *Glycobiol.* 10, 951-958 (2000).
- [2] Campo V.L. et al.: *Carbohydr. Polym.* 77, 167-180 (2009).
- [3] Perez S. et al.: *JACS Au.* 3, 628-656 (2023).

1Po09**SIMS CHARAKTERIZÁCIA PEROVSKITOVÝCH VRSTIEV PRE ICH APLIKÁCIU V SOLÁRNYCH ČLÁNKOCH**Monika Jerigová^{1,2}, Dominik Sarvaš¹*¹Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského,
Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Ilkovičova 6,
842 15 Bratislava, monika.jerigova@uniba.sk**²Medzinárodné laserové centrum, CVTI SR, Ilkovičova
3, 841 04 Bratislava*

Perovskity (sumárny vzorec ABX_3) vykazujú množstvo zaujímavých optoelektronických vlastností [1], ktoré ich predurčujú ako jednu z vhodných náhrad za doteraz bežne používané kremikové solárne články. Pri ich príprave je však kľúčový správny výber podmienok, ktorý sa odrazí výslednej kvalite pripravených perovskitových vrstiev a ich optoelektronických vlastnostiach.

V práci boli pripravené perovskitové vrstvy ($CH_3NH_3PbI_xCl_{3-x}$) analyzované hmotnostnou spektrometriou sekundárnych iónov (SIMS) ako v pozitívnej, tak aj v negatívnej polarite a s využitím 2D imagingu (skenovaná plocha $500 \times 500 \mu m$). Sledoval sa vplyv rotačnej rýchlosti spin-coatingu na homogenitu vrstiev, s cieľom nájsť jej optimálnu hodnotu. Príprava perovskitových vrstiev prebiehala v gloveboxe pod dusíkovou atmosférou. Na vopred vyčistený FTO substrát bol nanosený 50 μl perovskitového prekursoru a následne sa spin-coatoval v rozsahu rotačných rýchlostí od 1000-5000 rpm. Po 30 s od začiatku spin-coatingu bolo pridaných 100 μl chlórbenzénu ako antisolventu a spin-coatovalo sa ďalších 30s. Po ukončení boli vzorky anelované pri 100 °C po dobu 10 min.

V hmotnostných spektrách sme vo všetkých prípadoch identifikovali jednoduché ióny CH_3^+ , NH_4^+ , CH_3N^+ , CH_6N^+ , Pb^+ , PbI^+ , CN^- , Cl^- , I^- , I_2^- , I_3^- , PbI^- ako aj ióny klastrové PbI_2^- , Pb_2I^- , $Pb_2I_3^-$, ktoré jasne dokazujú prítomnosť vzniknutej perovskitovej štruktúry [2]. 2D imaging pripravených vrstiev ukázal, že najoptimálnejšie vlastnosti z hľadiska homogenity povrchu sa dosahujú pri rotačnej rýchlosti 3000 rpm.

Táto práca je financovaná prostredníctvom grantu APVV-23-0083.

- [1] Nandigana P. et al.: *Energy Adv.* 3, 442 (2024).
- [2] Diaz J.J. et al.: *Synth. Met.* 307, 117705 (2024).

1Po10**IDENTIFIKÁCIA ANTIOXIDANTOV V ČAJOCH CAMELLIE SINENSIS**Terézia Kelemenová¹, Monika Jerigová^{2,3}¹Gymnázium, Bilíkova 24, 844 19 Bratislava, terezakelem@gmail.com²Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava³Medzinárodné laserové centrum, CVTI SR, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava

Čaj patrí medzi najkonzumovanejšie nápoje na svete, spája sa s viacerými kultúrami a každodennými rituálmi mnohých ľudí. Známy je aj vďaka svojmu vysokému obsahu antioxidantov – látok, ktoré zohrávajú kľúčovú úlohu v obranných mechanizmoch tela.

Táto práca sa venuje analýze antioxidantu epigalokatechín-3-gallátu (EGCG) v čajoch rastliny *Camellia sinensis* – konkrétne v zelenom a čiernom čaji. Na výskum bola použitá hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov. Prítomnosť EGCG sa potvrdila vo všetkých vzorkách, pričom sa ukázalo, že jeho fragmenty sa uvoľňujú už po troch minútach lúhovania. Výsledky zároveň potvrdili vysokú stabilitu EGCG pri rôznych teplotách vody (70 °C a 100 °C), ako aj pri dlhšom čase lúhovania.

Okrem EGCG sa sledovali aj vybrané stopové prvky a minerály v čajoch, ako napríklad horčík, draslík, fluór či železo. Zistenia poukazujú na rozdiely medzi zeleným a čiernym čajom, ktoré súvisia s ich technologickým spracovaním – fermentáciou čierneho čaju a jej vplyvom na obsah účinných látok. Výraznejší rozdiel bol pozorovaný pri koncentrácii fluóru, ktorý sa vo väčšej miere uvoľnil pri vyššej teplote vody v zelenom čaji. Merania ukázali, že antioxidant EGCG sa uvoľňuje rýchlo a stabilne, takže aj krátke lúhovanie čaju je účinné. Zároveň sa potvrdilo, že zelený čaj obsahuje väčší obsah sledovaného antioxidantu aj niektorých minerálov ako čierny čaj.

1Po11**THERMOOXIDATIVE STABILITY OF NATURAL RUBBER AFTER ACCELERATED AGEING STUDIED BY NONISOTHERMAL DSC**

Zuzana Cibulková, Tatiana Klempová, Tibor Dubaj

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, zuzana.cibulkova@stuba.sk

Natural rubber (NR) plays a crucial role in various industries due to its unique combination of elasticity, resilience, and waterproof properties. It is used in many applications spanning across automotive, medical, and consumer goods sectors. However, during its lifetime NR undergoes degradation process with a detrimental effect on its properties. The main factors responsible for degradation are heat, oxygen and light. Thermooxidation leads to the changes in the chemical structure and thus to the loss of the physico-mechanical properties. It usually occurs in two steps. The first one is co-called induction period (IP) and the second step is the oxidation itself. During IP seemingly no chemical reactions take place and at the end of the IP sudden changes occur in the material properties. For this reason, IP is often considered as a measure of material stability [1].

In this study the thermooxidative stability of pure NR and NR with antioxidants (lignin, calcium lignosulfonate and IPPD) has been examined before and after accelerated ageing at elevated temperature in air atmosphere. Non-isothermal DSC measurements were employed to study the thermooxidative stability of all samples. Non-Arrhenian Berthelot–Hood temperature function was used to obtain the kinetic parameters describing the IPs [1,2]. IPs and residual stabilities were calculated from the obtained values of kinetic parameters.

Financial support from the Slovak Scientific Grant Agency VEGA under the contract No. 1/0498/22 is gratefully acknowledged.

[1] Šimon P., Kolman E.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 64, 813-820 (2001).

[2] Šimon P.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 97, 391-396 (2009).

1Po12**ANALÝZA PROFILU TĚKAVÝCH LÁTEK V PLODECH BRUSNICE BORŮVKY (*VACCINIUM MYRTILLUS*) BĚHEM ZRÁNÍ METODOU HS-SPME-GC-MS**

Pavĺina Knapovská, Eva Vítová

Ústav chemie potravin a biotechnologií, Fakulta chemická VUT v Brně, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Pavlina.Knapovska@vut.cz

Brusnice borůvka (*Vaccinium myrtillus* L.) je oblíbenou plodinou střední Evropy, ceněnou pro své sladkokyselé plody s výrazným červenofialovým zbarvením a charakteristickou vůní [1]. Těkavé látky hrají klíčovou roli v senzorické kvalitě těchto plodů, avšak jejich složení a vývoj během zrání jsou dosud nedostatečně prozkoumány. Dostupné studie se soustředí převážně na zralé plody, nikoliv na jednotlivé fáze jejich vývoje [2].

Cílem této studie bylo sledovat změny v profilu těkavých látek během zrání plodů v pěti definovaných fázích. Analýza byla provedena metodou mikroextrakce pevnou fází (HS-SPME) v kombinaci s plynovou chromatografií a hmotnostní spektrometrií (GC-MS), přičemž byl zároveň hodnocen jejich vliv na výsledný aromatický profil. Výsledky ukázaly, že během zrání dochází k výrazným změnám ve složení těkavých látek – zejména k poklesu alkoholů a nárůstu esterů a terpenoidů. Zralé plody byly charakterizovány především přítomností (Z)-3-hexenyl-acetátu, ethyl-isovalerátu a β -linaloolu, které přispívají k ovocnému, čerstvému a květinovému aroma.

Studie tak přináší nové poznatky o vývoji aromatických látek borůvek a jejich vlivu na senzorickou kvalitu během zrání.

Tato práce byla podpořena projektem Specifického výzkumu: Vybrané aspekty a trendy současných potravinářských věd (FCH-S-25-8818).

- [1] Rohloff J., Netsby R., Nes A., Martinussen I.: *Latv. J. Agron.* 12, 98 (2009).
- [2] Sater H.M., Bizzio L.N., Tieman D.M., Muñoz P.D.: *J. Agric. Food Chem.* 68, 5777-5786 (2020).

1Po13**IN SILICO SCREENING OF POTENTIAL INHIBITORS OF THE GAS2P ENZYME**

Stanislav Kozmon, Barbora Stratilová

Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 5807/9, 845 38 Bratislava, Slovakia, stanislav.kozmon@savba.sk

Each year, more than 300 million people contract yeast infections, with approximately 3.8 million succumbing to them [1]. The yeast cell wall plays a key role in yeast survival, with the polysaccharides β -1,3- and β -1,6-glucan and chitin being the main structural components. In the course of physiological processes, these are subject to constant changes catalysed by different enzymes, e.g. the elongation and branching of β -1,3-glucan is catalysed by members of the GH72 family. Since mammals lack specific structural components and enzymes essential for yeast cell wall biogenesis and remodeling, targeting this structure represents a promising direction for the development of novel antifungal drugs [2]. Given their important physiological role, inhibition of GH72 family enzymes could represent a promising strategy in achieving this goal.

Our work was concerned with the identification of potential inhibitors of the GAS2P enzyme (5FIH.pdb), which is currently the only enzyme of this family with a known crystal structure [3].

The structures of 2384 glycomimetics from the Asinex database were docked into the acceptor binding site of GAS2P using the Glide program and subsequently resequenced using the MMGBSA method. The top 15 complexes were then selected and subjected to further analysis by molecular dynamics simulations using the Amber22 program, followed by free binding energy calculations. In the future, the effects of the selected inhibitors will be experimentally verified by determining their influence on GAS2P activity using fluorescently labelled acceptors.

This work was supported by grants VEGA 2/0162/24 and APVV-21-0346.

- [1] Denning D.W.: *Lancet Infect. Dis.* 24, e428-e438 (2024).
- [2] Cortés J.C.G., Curto M.A., Carvalho V.S.D. et al.: *Biotechnol. Adv.* 37, 107352 (2019).
- [3] Raich L., Borodkin V., Fang W. et al.: *J. Am. Chem. Soc.* 138, 3325-3332 (2016).

1Po14**STANOVENIE REZÍDUI PESTICÍDOV V POTRAVINÁCH NA POČÍATOČNÚ A NÁSLEDNÚ VÝŽIVU DOJČIAT METÓDAMI LC-MS/MS A GC-MS/MS**

Miroslava Kuzniarová^{1,2}, Martina Micháliková¹, Milena Dömötörövá¹

¹Úrad verejného zdravotníctva Slovenskej republiky, Národné referenčné centrum pre rezíduá pesticídov, Trnavská cesta 52, 826 45 Bratislava, Slovenská republika, miroslava.kuzniarova@uvzs.sk

²Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovenská republika

Národné referenčné centrum pre rezíduá pesticídov ÚVZ SR zaviedlo metódy na stanovenie vyše 200 pesticídov v detskej strave. V porovnaní s dospelými jedincami je u novorodencov spotreba potravín na telesnú hmotnosť výrazne vyššia, čo vedie k potrebe kontrolovať prítomnosť pesticídov a ich rezíduí na veľmi nízkej koncentračnej hladine. To vyžaduje veľmi nízke medze stanoviteľnosti a detekcie. Spájajú sa s tým vysoké nároky na úpravu vzorky, citlivosť využívanej metódy a prístrojovú techniku. Na analýzu finálnych extraktov vzoriek sa využila vysoko rozlišovacia kvapalinová a plynová chromatografia s tandemovou hmotnostnou spektrometrickou detekciou (LC-MS/MS, GC-MS/MS). Pred použitím metód na stanovenie pesticídov sa u každého rezídua pesticídu kontrolovali nasledovné validačné parametre podľa dokumentu Sante z roku 2021 [1]. Selektivita a špecifita, kde odozva blanku a pomer kvantifikačného a porovnávacieho iónu vo vzorke nesmela presiahnuť 30%. Linearita, kde odchýlky od kalibračnej čiary mali povolenú odchýlku 20% a zmeny odozvy na kalibračných hladinách meraných pred a po sekvencii vzoriek museli byť do 30%. Správnosť, kde akceptovaná výťažnosť je v rozsahu 60-140 %, reprodukovateľnosť rezídua do 20% a neistota merania do 50%. Stanovenie vybraných pesticídov je akreditované Slovenskou národnou akreditačnou službou. Správnosť metód je overovaná účasťou v medzinárodných porovnávacích testoch. Vzorky detskej stravy boli predupravené metódou QuEChERS [2].

- [1] Document No. SANTE/11312/2021v2, Analytical quality control and method validation procedures for pesticide residues analysis in food and feed.
[2] Anastassiades M., Lehotay S.J., Štajnbaher D., Schenck F.J.: J. AOAC Int. 86, 412-431 (2003).

1Po15**ZÁVISLOST KATALYTICKÉ AKTIVITY NANOČÁSTIC ZLATA NA JEJICH VELIKOSTI**

Libor Kvítek, Radka Pocklanová, Jan Stehlík, Lucie Suchánková, Jan Navrátil, Aleš Panáček, Robert Pucek

Katedra fyzikální chemie, Univerzita Palackého, 17. listopadu 12, 779 00 Olomouc, ČR, libor.kvitek@upol.cz

Heterogenní katalýza je základem řady významných průmyslových aplikací. To se odráží i v oblasti základního výzkumu při studiu zákonitostí, kterými se tento proces řídí. Klasický koncept heterogenní katalýzy je spojen s představou reakce mezi reaktanty v adsorbovaném stavu. Protože množství naadsorbovaných reaktantů, a tudíž i rychlost reakce významně závisí na specifickém povrchu katalyzátoru, je fyzikální struktura katalyzátoru jedním z nejsledovanějších parametrů. Proto se se zmenšující velikosti částic roste reakční rychlost vztažená na jednotku hmotnosti katalyzátoru [1]. Tato závislost nemusí platit s poklesem velikosti nanočástic pod určitou hodnotu. Pod určitou velikostí nanočástic dochází ke změně fyzikální (krystalický versus amorfní stav) i elektronové struktury (přechod od pásové struktury k systému diskretních energetických hladin). Limitní velikost nanočástic pro takovou situaci se pohybuje mezi 3-5 nm [2]. Pokud je velikost nanočástic pod touto mezí, dochází ke změně jejich katalytické aktivity. Prezentovaná studie se zabývá tímto stavem v případě nanočástic zlata, jejichž katalytická aktivita je studována za pomoci modelové reakce redukce p-nitrofenolu tetrahydridoboritanem sodným. Získané výsledky jednoznačně prokazují, že pod výše uvedeným limitem velikostí dochází k poklesu katalytické aktivity nanočástic zlata. Otázkou zůstává důvod tohoto poklesu, zda je způsoben ztrátou krystalové struktury nebo ztíženým přenosem elektronů z diskretních elektronových hladin v tak malé nanočástici.

Autoři děkují za finanční podporu internímu grantu Univerzity Palackého IGA_PrF_2025_024.

- [1] Suchomel P., Kvítek L., Pucek R., Panacek A., Halder A., Vajda S., Zboril R.: Sci. Rep. 8, 4589 (2018).
[2] Peng Y.Y., Guo D., Ma W., Long Y.T.: ChemElectroChem 5, 2982-2985 (2018).

1Po16**ELUCIDATING THE INTERACTION OF BOVINE SERUM ALBUMIN WITH NON-STEROIDAL ANTI-INFLAMMATORY AND ANTIBACTERIAL DRUGS USING A MULTI-TECHNIQUE APPROACH**

Hira Lal, Martin Pisárčik

Department of Chemical Theory of Drugs, Faculty of Pharmacy, Comenius University, SK-83232 Bratislava, Slovakia, hira.lal@uniba.sk

Comprehending how serum albumin interacts with non-steroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs) and sulfonamide derivatives with potential antibiotics effect is critical for evaluating their transport, distribution and bioavailability within the body. In the present study, we explored the interaction of bovine serum albumin (BSA) with regularly consumed NSAIDs (naproxen (NPX) and ibuprofen (IBF)), and sulfadiazine (SD) utilizing several methods including isothermal titration calorimetry (ITC), circular dichroism (CD) and dynamic light scattering (DLS) measurements. ITC analyses showed distinct thermodynamic profiles for the binding of each drug to BSA, indicating that the interactions occur spontaneously and are predominantly governed by hydrophobic forces. The binding constants and enthalpy variations provides quantitative insights on the affinity and nature of these interactions. CD spectroscopy was utilized to assess drug-induced conformational alteration in BSA induced by drug binding, showing modifications in the secondary structure, suggestive of partial structural rearrangement. Complementary DLS measurements confirmed the alterations in the hydrophobic diameter and particle size distribution, revealing complexation and potential changes in BSA aggregation behavior. Overall, these results provide a comprehensive insight into drug-protein interactions at molecular and colloidal levels, aiding in the understanding of pharmacokinetics and supporting the design of effective drug delivery systems.

The presented research was supported by the Comenius University GUKPOST grant No. GUKPOST/20/2024 and the Slovak Research and Development Agency Grant No. APVV-23-0349.

- [1] Rahman M.M., Rahman M.H., Rahman N.N.: *Pak. J. Pharm Sci.* 18, 43-47 (2005).
- [2] Ràfols C., Zarza S., Bosch E.: *Talanta* 130, 241-250 (2014).
- [3] Mavani A., Ray D., Aswal V.K., Bhattacharyya J.: *J. Mol. Struct.* 1287, 135697 (2023).

1Po17**FARADAYOV OPTICKÝ JAV V MXÉNOCH DEKOROVANÝCH MAGNETICKÝMI NANOČASTICAMI**

Dušan Lorenc^{1,2}, Eva Noskovičová^{1,3}, Peter Kasák⁴, Monika Jerigová^{1,3}, Monika Stupavská⁵, Ľubomír Orovčík⁶, Lenka Lorencová⁷

¹MLC CVTI SR, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava, Slovensko, Dusan.Lorenc@cvtisr.sk

²Fyzikálny ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 841 04 Bratislava, Slovensko

³Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, PriF UK, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovensko

⁴Centrum pre pokročilé materiály, Katarská univerzita, P.O. Box 2713, Dauha, Katar

⁵Plazmové nanotechnológie a bioaplikácie – Prírodovedecká fakulta, Masarykova univerzita, Kotlářská 267/2, 611 37 Brno, ČR

⁶Ústav materiálov a mechaniky strojov, Dúbravská cesta 9/6319, 845 13 Bratislava, Slovensko

⁷Chemický ústav SAV, v. v. i., Dúbravská cesta 5807/9, 845 38 Bratislava, Slovensko

MXény zostávajú v centre záujmu v oblasti 2D materiálov aj v širšom kontexte chémie a materiálovej vedy [1]. Z pohľadu vlastností a zvýšenia funkcionality má zmysel dekokorovať a tým pádom funkcionalizovať vybrané MXény nanočasticami. V predkladanej práci boli tri druhy MXénov (Ti_3C_2 , Nb_4C_3 a Nb_2C) *in situ* vo vodných roztokoch dekorované superparamagnetickými časticami na báze Fe_xO_y prostredníctvom laserovej ablácie v kvapaline. Následne bola študovaná optická Faradayova odozva vzniknutých roztokov v striedavom vonkajšom magnetickom poli [2], pričom boli zistené kvalitatívne rozdiely v magnetickej odozve jednotlivých MXénov.

Autori by sa chceli poďakovať za finančnú podporu z projektov Agentúry na podporu výskumu a vývoja (APVV-22-0345 a APVV-23-0083). Táto práca bola podporená finančnými prostriedkami získanými zo spoločnej výzvy V4-Kórea 2023. Túto prácu spoločne podporila Katarská univerzita a Chemický ústav Slovenskej akadémie vied - IRCC-2024-429.

- [1] Gokul E.S., Rashad M., Santhana K.K.A., EL-Mahdy A.F.M.: *Chem. Asian J.* 20, e202401181 (2025).
- [2] Patterson C., Syed M., Takemura Y.: *J. Magn. Magn. Mater.* 451, 248-253 (2018).

1Po18**ELEKTROCHEMICKÁ DETEKCIA
GENTAMICÍNU NA MODIFIKOVANÝCH
UHLÍKOVÝCH ELEKTRODÁCH
PRIPRAVENÝCH METÓDOU
SIEŤOTLAČE**

Ivana Mojžišová, Jana Demeterová, Jana Shepa, Ivana Šišoláková, Renáta Oriňáková

Katedra fyzikálnej chémie, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice, ivana.mojzisova@student.upjs.sk

Ortopedické implantáty zásadne transformovali oblasť ortopedickej chirurgie, avšak bakteriálne infekcie spojené s implantáciou naďalej predstavujú závažnú klinickú komplikáciu. Preto sa v súčasnosti intenzívne skúmajú rôzne preventívne stratégie, vrátane systémov na riadené uvoľňovanie liečiv a externých podporných technológií. Medzi najčastejšie používané liečivá v tomto kontexte patria amoxicilín, gentamicín, ciprofloxacín a vankomycín, ktoré sa zabudovávajú do povrchových vrstiev implantátov a následne sa postupne uvoľňujú do okolitého prostredia [1,2]. Monitorovanie kinetiky ich uvoľňovania je však náročné z dôvodu extrémne nízkych koncentrácií, ktoré si vyžadujú vysoko citlivé analytické metódy. Cieľom tejto štúdie je vývoj elektrochemického senzora pre detekciu gentamicínsulfátu prostredníctvom modifikácie povrchu pracovnej elektródy uhlíkovými nanotrubičkami modifikovanými striebornými nanočasticami, čo umožní zlepšiť analytické vlastnosti senzora, najmä citlivosť, selektivitu a spoľahlivosť merania v reálnych podmienkach. Študovaný senzor bol schopný stanoviť gentamicín v koncentračnom rozsahu od 0.1 – 1 mM a vzhľadom na svoju jednoduchú prípravu je vhodným adeptom na testovanie reálnych vzoriek.

Táto práca bola financovaná NATO SPS Call for Proposals 2023-1, G6106.

- [1] Hickok N.J. et al.: Adv. Drug Deliv. Rev. 64, 12 (2012).
- [2] Wang M. et al.: Frontiers Media SA. (2023).

1Po19**ABSORPČNÁ SPEKTROSKOPIA
TENKÝCH VRSTIEV PEROVSKITU
CH₃NH₃PbI_{3x}Cl_x**

Eva Noskovičová^{1,2}, Dominik Sarvaš¹, Jaroslav Bruncko², Monika Jerigová^{1,2}

¹Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovensko, noskovicov14@uniba.sk

²Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04, Bratislava, Slovensko

Organicko-anorganické perovskity patria medzi unikátne fotosenzitívne polovodiče s potenciálom uplatniť sa v solárnych článkoch, LED diódach, detektoroch a podobne [1], hoci vhodné podmienky prípravy pre budúce optoelektronické aplikácie stále predstavujú výzvu. V práci bol pozorovaný vplyv substrátu a antisolventu na absorpčné vlastnosti perovskitu CH₃NH₃PbI_{3x}Cl_x vo VIS oblasti. Tenké perovskitové filmy boli pripravené z roztoku CH₃NH₃I a PbCl₂ v DMF v molárnom pomere 3:1 technikou rotačného liatia pri otáčkach 3000 rpm a následným vypekaním pri 100°C. Ako substrát bol použitý zafír, sklo s tenkou vrstvou SnO dopovaného indiom (ITO sklo) a ITO sklo s 80 nm vrstvou ZnO. Tenká vrstva ZnO bola pripravená pulznou laserovou depozíciou. Pri zafírovom substráte bol sledovaný aj vplyv antisolventu na kryštalizáciu perovskitovej štruktúry. Absorpčnou spektroskopiou bola pozorovaná výrazná zmena šírky zakázaného pásu z 1,5 eV na 2,3 eV pri použití ITO skla s vrstvou ZnO. Takéto výrazné zmeny poukazujú na rozklad CH₃NH₃PbI_{3x}Cl_x a Eg = 2,3 eV poukazuje na vznik PbI₂ [2] o čom svedčí aj vizuálna zmena perovskitovej vrstvy z tmavej na žltú. Pri použití zafírového substrátu a ITO skla bola nameraná šírka zakázaného pásu približne 1,5 eV, ktorá prislúcha pripravovanému perovskitu CH₃NH₃PbI_{3x}Cl_x [3]. Pridanie chlorobenzénu ako antisolventa malo za následok zlepšenie absorpčných vlastností perovskitu.

Tato práca vznikla za podpory grantu APVV-23-0083.

- [1] He C., Xiaogang Liu X.: Light Sci. Appl. 12, 15 (2023).
- [2] Chen H., Yan H., Cai Y.: Chem. Mater. 34, 3 (2022).
- [3] Lama N.N., Leb T.M., Trana K.A., Van Nguyena D., Kim Le P.T.: Chem. Eng. Trans. 113 (2024).

1Po20**ŠTÚDIUM VPLYVU ANTISOLVENTU NA MORFOLÓGIU PEROVSKITOVÝCH VRSTIEV**Dominik Sarvas¹, Daniel Haško², Monika Jerigová^{1,2}¹*Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, sarvas6@uniba.sk*²*Medzinárodné laserové centrum, CVTI SR, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava*

Výsledné optoelektronické vlastnosti perovskitových solárnych článkov (PSC) determinuje aj kvalita a morfológia pripravených perovskitových vrstiev. Tú možno významne ovplyvniť už pri samotnom procese ich prípravy, pri ktorej dochádza k riadenej kryštalizácii a tvorbe perovskitových zŕn z molekúl prekursorov.

V práci sa študoval vplyv antisolventu chlórbenzénu na morfológiu pripravených perovskitových vrstiev hybridného perovskitu $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$. Vrstvy perovskitu boli nanosené na vopred vyčistený FTO substrát jedнокrokovou metódou spin-coatingu (4000 rpm, 30 s), s prídavkom rôzneho objemu chlórbenzénu ako antisolventu. Po nanosení boli vrstvy anelované pri teplote 100 °C po dobu 10 min. Vzhľadom na zvýšenú schopnosť degradácie perovskitu vplyvom vzdušnej vlhkosti sa celá príprava uskutočňovala v gloveboxe v inertnej dusíkovej atmosfére.

Morfológia takto pripravených vrstiev bola študovaná prostredníctvom metódy AFM. Vrstvy (5x5 μm) boli skenované v semikontaktnom móde, skenovacou rýchlosťou 6,8 μm/s. Z nameraných dát bola vypočítaná priemerná drsnosť vrstvy a priemerná veľkosť zŕn.

Zistili sme, že optimálny objem chlórbenzénu je 75 μl, čo sa prejavilo aj na žiadanom „guľôčkovom“ habite vzniknutých zŕn. V ostatných prípadoch dominovali zrná pozdĺžneho tvaru s minimálnym zastúpením sférických zŕn. Potvrdili sme, že použitie chlórbenzénu ako antisolventu pri príprave perovskitových vrstiev vplýva na ich morfológiu. V dôsledku jeho nepolárneho charakteru, po pridaní optimálneho množstva na vrstvu perovskitového prekursora, dochádza k lokálnemu presýteniu, ktoré napomáha nukleácii a formácii perovskitových zŕn [1].

Táto práca vznikla s podporou grantu APVV-23-0083.

[1] Ghosh S., Mishra S., Trilok S.: *Adv. Mater.*

Interfaces. 7, 2000950 (2020).

1Po21**ELEKTROCHEMICKÉ SENZORY NA BÁZE MEDI PRE STANOVENIE INZULÍNU**

Laura Slabejová, Jana Shepa, Ivana Šišoláková, Renáta Oriňáková

Katedra fyzikálnej chémie, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice, laura.slabejova@student.upjs.sk

Inzulín je anabolický hormón kľúčový pre metabolizmus glukózy a činnosť pankreatických ostrovčekov. Jeho hladina slúži ako indikátor diabetu, inzulínomov či metabolických porúch. Presné meranie inzulínu je preto dôležité v klinickej diagnostike. Bežne využívané analytické metódy zahŕňajú imunotesty, HPLC, kapilárnu elektroforézu a elektrochemické techniky. V porovnaní s nimi, elektrochemická detekcia inzulínu vyniká jednoduchosťou, nízkymi nákladmi a možnosťou miniaturizácie. Elektroaktívne aminokyseliny prítomné v molekule inzulínu (tyrozín, tryptofán, cystín) umožňujú jeho elektrochemickú detekciu, no pri použití nemodifikovaných elektród môže dôjsť k pomalému prenosu elektrónov, či adsorpcii interferentov. Tieto obmedzenia možno prekonať modifikáciou elektród pomocou kovových alebo oxidických nanočastíc (napr. Cu, NiO). Navyše, kovy ako napríklad Cu(II) alebo Mn(II) sú schopné interagovať s molekulou inzulínu, čo vedie k zmene ich elektrochemických vlastností a predstavuje elektrochemicky detekovateľnú zmenu [1].

V tejto štúdii boli použité uhlíkové elektródy pripravené metódou sieťotlače, ktoré boli modifikované Cu, pričom detekcia je založená na tvorbe komplexov Cu(II)–inzulín.

Financované EÚ NextGenerationEU prostredníctvom Plánu obnovy a odolnosti SR v rámci projektu č. 09-I05-03-V02-00047.

[1] Rong Z. et al.: *J. Mol. Struct.* 1335, 141992 (2025).

1Po22**VLIV REDOXNÍHO STAVU GALEKTINU NA JEHO LEKTINOVOU AKTIVITU**

Peter Šebest¹, Veronika Ostatná¹, Roman Hrstka², Vojtěch Hamala³, Jindřich Karban³, Aleš Daňhel¹

¹Biofyzikální ústav, Akademie věd České republiky, v.v.i., Královopolská 135, 612 00 Brno, Česká republika besta@ibp.cz

²Masarykův onkologický ústav, Výzkumné centrum aplikované molekulární onkologie, Žlutý kopec 7, 656 53 Brno, Česká republika

³Výzkumná skupina Bioorganické chemie a biomateriálů, Ústav chemických procesů AV ČR, Rozvojová 135, 165 00, Praha 6, Česká republika

Lidský galektin-1 (Gal-1) je malý protein patřící do evolučně konzervované rodiny lektinů vážících glykany. Domény galektinů, které vážou sacharidy, se skládají do trojrozměrné struktury rozpoznávající β -galaktosidové skupiny [1,2].

Gal-1 vykazuje výjimečnou citlivost vůči oxidační inaktivaci, která hraje klíčovou roli v regulaci jeho prostorové a časové biologické aktivity. Funkční vlastnosti Gal-1 jsou určovány dvěma fyzikálně-chemickými stavy – rovnováhou mezi monomerní a dimerickou formou a jeho redoxním stavem. Studovali jsme chování a interakce nativního Gal-1 s N-acetyl-laktosaminem ve srovnání s Gal-1 v jeho redukovaném a oxidovaném stavu na nabitém povrchu pomocí chronopotenciometrické stripovací analýzy při konstantním proudu (CPS) a vnitřní fluorescenční spektroskopie.

Glykomimetika jsou modifikované přírodní sacharidové ligandy. Jejich design souvisí se strukturou vazebného žlábků galektinu, jehož nejkonzervativnější část (tzv. podtypy C a D) je uzpůsobena pro interakci se dvěma monosacharidovými jednotkami současně [3]. Byla studována interakce s glykomimetickými ligandy (galektinové inhibitory), mono-fluorovanými analogy N-acetyl-laktosaminu, a sledována síla interakce v závislosti na redoxním stavu galektinu.

Fluorování sacharidových ligandů představuje efektivní přístup ke studiu interakcí mezi proteiny a sacharidy, jak bylo jednoznačně prokázáno v uplynulých dvou desetiletích. Fluor účinně napodobuje hydroxylovou skupinu a má také výhodné vlastnosti např. jako NMR sonda.

Tato práce vznikla za finanční podpory Grantové agentury České republiky (projekt 23-06115S).

[1] Di Lella S., Sundblad V., Cerliani, J.P., Guardia C.M., Estrin D.A., Vasta G.R., Rabinovich G.A.: *Biochem.* 50, 7842-7857 (2011).

[2] Sacchettini J.C., Baum L.G., Brewer C.F.: *Biochem.* 40, 3009-3015 (2001).

[3] Guardia C.M.A., Gauto D.F., Di Lella S., Rabinovich G.A., Martí M.A., Estrin D.A.: *J. Chem. Inf. Model* 51, 1918-1930 (2011).

1Po23**DIFFERENCE BETWEEN THE KINETIC AND THERMOANALYTICAL DEGREES OF CONVERSION**

Peter Šimon, Tibor Dubaj, Zuzana Cibulková

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

Condensed-state processes are routinely studied by thermoanalytical techniques. Their kinetics is frequently described by the methods based on the general rate equation. For the kinetic analysis, two degrees of conversion should be discriminated: (i) the degree of conversion used in classical kinetics, α_{kin} , conventionally defined as the reacted amount of a reactant normalized to its initial amount; (ii) the thermoanalytical degree of conversion, α , defined as the thermoanalytical effect observed at temperature T (or at time t for isothermal measurements) divided by the total thermoanalytical effect [1].

For elementary reactions, $\alpha_{\text{kin}} = \alpha$ so that the general rate equation is a true rate equation describing the mechanism of the reaction. For complex processes, α_{kin} and α differ considerably in general; they are equivalent for some special cases only. In this case, the general rate equation represents the single-step approximation [2]. The values of α thus describe the kinetics of heat exchange (for DSC) or mass loss (for TG) and so do the kinetic parameters obtained from the treatment of experimental data.

The above said findings underline the necessity to differentiate between elementary and complex processes. A frequent flaw of the application of methods based on the general rate equation is that complex processes are treated as elementary ones.

Financial support from the Slovak Scientific Grant Agency (VEGA 1/0498/22) is gratefully acknowledged.

[1] Šimon P., Skrdla P.J., Dubaj T., Cibulková Z.: *Thermochim. Acta* 745, 179933 (2025).

[2] Šimon P., Dubaj T., Cibulková Z.: *J. Therm. Anal. Calorim.* 14, 11507 (2024).

1Po24**VÝVOJ ELEKTROCHEMICKÉHO MULTISENZORA PRE RÝCHLU DETEKCIU BIOANALYTŮV V KLINICKEJ DIAGNOSTIKE**

Ivana Šišoláková, Jana Shepa, Pavol Jarčuška, Ondrej Zahornacký, Soňa Király, Renáta Oriňáková

Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach,
Šrobárová 2, 041 54 Košice, ivana.sisolakova@upjs.sk

Rýchla, selektívna a dostupná detekcia bioanalytov zohráva kľúčovú úlohu v modernej diagnostike, najmä pri ochoreniach, ako je diabetes mellitus. Tradičné metódy, hoci sú presné, sú často finančne a technicky náročné a nevhodné na použitie mimo laboratória. Elektrochemické senzory ponúkajú atraktívnu alternatívu vďaka svojej jednoduchosti, citlivosti a možnosti miniaturizácie pričom predstavujú perspektívnu technológiu pre rýchlu a nízko nákladovú detekciu bioanalytov. Tento výskum sa zameriava na vývoj neenzymatických elektrochemických senzorov určených na detekciu klinicky významných látok ako sú glukóza, inzulín, cholesterol, kyselina askorbová, antibiotiká atď. Cieľom je optimalizácia jednotlivých senzorov ako predpoklad pre ich budúcu integráciu do multisenzora.

Vyvíjané senzory sú založené na uhlíkových elektródach pripravených metódou sieťotlače (SPCE) modifikovaných polymérnymi membránami (napr. chitozán, polypyrol) a kovovými nanočasticami (Ni, Cu, Au), ktoré nahrádzajú enzymatickú zložku [1]. Na základe vykonaných elektrochemických meraní je možné konštatovať, že vhodná kombinácia polyméru a kovu vedie k zlepšeniu citlivosti, stability a selektivity jednotlivých senzorov. Detekčné limity dosahujú hodnoty pod 10 nM, pričom je zachovaná nízka doba detekcie (<10 s) a vysoká reprodukovateľnosť.

Tieto výsledky vytvárajú solídny základ pre vývoj integrovaného multisenzorového zariadenia určeného pre simultánnu detekciu viacerých bioanalytov v reálnych vzorkách mimo laboratória.

Financované EÚ NextGenerationEU prostredníctvom Plánu obnovy a odolnosti SR v rámci projektu č. 09-I05-03-V02-00047.

- [1] Šišoláková I.: *Bioelectrochemistry* 130, 107326 (2019).

1Po25**OPTIMIZATION OF CONDITIONS FOR DETERMINING PROLYL OLIGOPEPTIDASE ACTIVITY**

Šárka Štěpánková, Daniela Zachrdlová

Department of Biological and Biochemical Sciences,
Faculty of Chemical Technology, University of
Pardubice, Czech Republic,
sarka.stepankova@upce.cz

Prolyl oligopeptidase (POP) is a serine protease found in almost all tissues of the human body, with the highest activity in skeletal muscle and brain. Its main function is to cleave small peptides at the carboxyl side of the proline residue. Some studies suggest that POP may be associated with neurodegeneration, memory and cognitive impairment. Patients with Alzheimer's disease have been found to have significantly higher levels of POP activity than healthy individuals. Inhibition of POP may improve memory by blocking the metabolism of endogenous neuropeptides [1,2].

The aim of the work was to determine suitable conditions for measuring POP activity, specifically the effect of temperature, substrate concentration and enzyme amount on the reaction rate was investigated. The determination of POP activity is based on the hydrolysis of the substrate Z-Gly-Pro-4-nitroanilide. The formation of *p*-nitroanilide, directly proportional to POP activity, was measured spectrophotometrically at 405 nm [3] and the rate of the enzymatic reaction under given conditions was subsequently determined.

From the dependence of the reaction rate on the substrate concentration and the amount of enzyme at selected temperatures, suitable conditions for measuring the activity and possibly inhibition of POP were determined. Kinetic parameters, K_M and V_m were also determined.

The authors wish to acknowledge financial support from the University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology.

- [1] Svarcbaš R., Julku U., Kilpeläinen T., Kyrrö M., Jäntti M., Myöhänen T.T.: *Biochem. Pharmacol.* 161, 113-120 (2019).
[2] Eteläinen T.S., Silva M.C., Uhari-Väänänen J.K., De Lorenzo F., Jäntti M.H., Cui H., Chavero-Pieres M., Kilpeläinen T., Mechtler C., Svarcbaš R., Seppälä E., Savinainen J.R., Puris E., Fricker G., Gynther M., Julku U.H., Huttunen H.J., Haggarty S.J., Myöhänen T.T.: *Sci. Transl. Med.* 15, eabq2915 (2023).
[3] Siatka T., Adamcová M., Opletal L., Cahliková L., Jun D., Hrabínová M., Kuneš J., Chlebek J.: *Molecules* 22, 1181 (2017).

1Po26**VYUŽITÍ GC/MS PRO IDENTIFIKACI A DŮKAZ OXIDAČNÍCH PRODUKTŮ FENTANYLU**

Dana Štolbová, Radek Jerga, Jana Skopalová, Petr Barták

Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 779 00 Olomouc, ČR, dana.stolbova01@upol.cz

Fentanyl a jeho deriváty jsou vysoce účinné syntetické opioidy využívané jako anestetika v lékařství, avšak v posledních letech se fentanyl stal všeobecně známý neobdobnou veřejností jako obzvláště nebezpečná nelegální droga, která je smrtelná už v malých dávkách a objevuje se jako příměs jiných nelegálních drog.

Je už známo, že fentanyl a jeho deriváty lze stanovit elektrochemicky metodou adsorpční square-wave voltametrie, a to s mezí detekce v řádu desetin $\mu\text{mol/l}$ [1]. Mechanismus elektrochemické oxidace fentanylu, ke které při stanovení dochází, není úplně objasněn. Tato práce popisuje využití GC/MS pro identifikaci oxidačních produktů fentanylu a jeho analog furanylfentanylu a sufentanilu.

Pro jednoznačnou identifikaci a spolehlivé prokázání přítomnosti studovaných oxidačních produktů byly aplikovány dvě strategie: A/ přímá analýza, která umožňuje porovnání retenčních časů a MS spekter se standardy, B/ analýza po derivatizaci, která umožňuje identifikaci na základě reaktivity funkčních skupin a detekce produktů derivatizace. Tyto postupy umožnily identifikovat dva oxidační produkty fentanylu, a to fenylacetaldehyd a *N*-fenylpropanamid. Furanylfentanyl poskytuje analogické produkty fenylacetaldehyd a 2-furanilid, stejně tak sufentanil poskytuje thiofen-2-ylacetaldehyd a *N*-fenylpropanamid. Standardy *N*-fenylpropanamidu a 2-furanilidu nejsou snadno komerčně dostupné a proto byly pro potřeby analýzy syntetizovány z anilinu a chloridu odpovídající kyseliny.

Tato práce vznikla za podpory Univerzity Palackého v Olomouci (projekt IGA_PrF_2025_027).

[1] Jerga R., Štolbová D., Zajacová Cechová M., Barták P., Skopalová J.: 73. *Zjazd chemikov*. Horný Smokovec, Slovenská republika, 6.-10. 9. 2021. Sborník příspěvků. *ChemZi* 17/1, 174 (2021).

1Po27**CHLORELLA V HRE O BUDÚCNOSŤ – POTENCIÁLNY PRÍNOS PRE ENVIRONMENTÁLNE APLIKÁCIE**

Monika Takáčsová¹, Monika Jerigová^{2,3}

¹Gymnázium, Bilíkova 24, 844 19 Bratislava, takacsovam12@gmail.com

²Přírodovědecká fakulta Univerzity Komenského, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava

³Medzinárodné laserové centrum, CVTI SR, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava

Globálne znečistenie mikroplastmi a nanočasticami kovov patrí medzi najväčšie ekologické problémy súčasnosti. Tieto látky prenikajú do vodných ekosystémov z rôznych zdrojov, ako sú odpadové vody, kozmetické produkty či plastový odpad a predstavujú záťaž pre rastliny, živočíchy aj ľudí. Cieľom tejto práce bolo overenie hypotézy o schopnosti riasy *Chlorella* naviazať vybrané látky – mikročastice polystyrénu (PS), kyseliny polymliečnej (PLA) a strieborných nanočastíc (AgN) – a následné vyhodnotenie ich naviazania pomocou metódy hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov (ToF-SIMS). Táto metóda umožňuje analýzu chemického zloženia povrchu vzoriek na úrovni atómov a molekúl. Výsledky preukázali prítomnosť píkov zodpovedajúcich skúmaným látkam. V prípade PS a PLA boli namerané fragmenty s hmotnosťou 127 a 128,9 m.u. – PS a 127 a 128,96 m.u. – PLA, ktoré boli zaznamenané aj v spektre vzoriek s *Chlorellou*. Pri AgN boli zaznamenané izotopy $^{107}\text{Ag}^+$ a $^{108}\text{Ag}^+$, zodpovedajúce izotopom striebra. Tieto zistenia poukazujú na schopnosť *Chlorelly* viazať kontaminanty, čo má potenciál využitia pri vývoji environmentálnych technológií na odstraňovanie mikroplastov a kovov z vôd. Výsledky predstavujú základ pre ďalší výskum, napríklad s inými druhmi mikroplastov a kovov. Dôležitý by mohol byť aj výskum zameraný na konkrétne druhy riasy *Chlorella*, ako napríklad *Chlorella vulgaris*, *Chlorella pyrenoidosa* či *Chlorella kessleri*, keďže ich schopnosť naviazania skúmaných látok sa môže líšiť.

1Po28**SENZOR NA BÁZE $\text{Nb}_4\text{C}_3\text{T}_x$ MXÉN@NI
KOMPOZITU PRE ELEKTROCHEMICKÚ
DETEKCIU DOPAMÍNU**

Andrej Vikartovský^{1,2}, Lenka Lorencová¹, Marek Baráth¹, Ľubomír Orovčík³, Monika Jerigová^{4,5}, Peter Kasák⁶, Ján Tkáč¹

¹Chemický ústav SAV, v.v.i., Dúbravská cesta 9/5807, 845 38 Bratislava, Slovensko, Andrej.Vikartovsky@savba.sk

²Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava ³Ústav materiálov a mechaniky strojov, Dúbravská cesta 9/6319, 845 13 Bratislava, Slovensko

⁴Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovensko

⁵Medzinárodné laserové centrum, Centrum vedecko-technických informácií SR, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava, Slovensko

⁶Centrum pre pokročilé materiály, Katarská univerzita, P.O. Box 2713, Dauha, Katar

MXény sú skupina 2D nanomateriálov zložených z tenkých vrstiev karbidov a nitridov prechodných kovov. Sú známe svojimi výnimočnými vlastnosťami, ako sú vysoká elektrická vodivosť, veľká špecifická plocha povrchu a hydrofilnosť. Typicky sa syntetizujú selektívnym vyleptaním prvku A z prekursorovej MAX fázy. Štruktúra a vlastnosti MXénov závisia nielen od zloženia pôvodnej MAX fázy, ale aj od samotného leptacieho procesu, respektíve terminácie povrchu [1]. Pôvodný povrch MXénov je však nestabilný pri ich vystavení anodickému potenciálovému oknu, čo vedie k oxidácii povrchu a zníženiu ich elektrochemickej aktivity a tým následne obmedzenej použiteľnosti pre detekciu redoxne aktívnych látok [2].

V našej práci sme $\text{Nb}_4\text{C}_3\text{T}_x$ MXén modifikovali nanočasticami niklu pomocou elektrochemickej depozície ($\text{Nb}_4\text{C}_3\text{T}_x$ MXén@Ni). Pôvodný $\text{Nb}_4\text{C}_3\text{T}_x$ MXén rovnako ako $\text{Nb}_4\text{C}_3\text{T}_x$ MXén@Ni kompozit boli charakterizované prostredníctvom rastrovacej elektrónovej mikroskopie (SEM) a hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov (SIMS). Po nanosení $\text{Nb}_4\text{C}_3\text{T}_x$ MXén@Ni kompozitu na predpripravený povrch elektródy zo sklovitého uhlíka (GCE) sme dosiahli takmer dvojnásobné zväčšenie elektrochemicky aktívnej plochy pre GCE/ $\text{Nb}_4\text{C}_3\text{T}_x$ MXén@Ni senzor v porovnaní s pôvodným $\text{Nb}_4\text{C}_3\text{T}_x$ MXénom (GCE/ $\text{Nb}_4\text{C}_3\text{T}_x$ MXén). Senzor na báze GCE/ $\text{Nb}_4\text{C}_3\text{T}_x$ MXén@Ni vykazoval zlepšenú stabilitu v anodickom potenciálovom okne

a naviac umožnil elektrochemickú detekciu dopamínu s limitom detekcie $1,4 \mu\text{mol}/\text{dm}^3$ metódou diferenčnej pulzovej voltampérometrie (DPV).

Autori by sa chceli poďakovať za finančnú podporu z projektov Agentúry na podporu výskumu a vývoja (APVV-22-0345 a APVV-23-0083). Táto práca bola podporená finančnými prostriedkami získanými zo spoločnej výzvy V4-Kórea 2023. Túto prácu spoločne podporila Katarská univerzita a Chemický ústav Slovenskej akadémie vied - IRCC-2024-429.

[1] Gajdosova V., Lorencova L., Prochazka M., Omastova M., Micusik M., Prochazkova S., Kveton F., Jerigova M., Velic D., Kasak P., Tkac J.: *Microchim. Acta* 187, 52 (2020).

[2] Lorencova L., Bertok T., Dosekova E., Holazova A., Paprckova D., Vikartovska A., Sasinkova V., Filip J., Kasak P., Jerigova M., Velic D., Mahmoud K.A., Tkac J.: *Electrochim. Acta* 235, 471-479 (2017).

1Po29**KOMPOSTOVÁNÍ ODPADNÍ BIOMASY ZA
VZNIKU SUBSTRÁTŮ S VYŠŠÍM
OBSAHEM HUMINOVÝCH KYSELIN A
OPTIMALIZOVANOU SCHOPNOSTÍ
ZADRŽOVAT VODU**

Lucie Řepečká^{1,2}, Daniel Vrábl³, Anna Gavlová¹, Kateřina Smutná¹, Jitka Pavlíková⁴, Martina Vráblová¹

¹VŠB-Technická univerzita Ostrava, CEET, Institut environmentálních technologií, 17. listopadu 2172/15, Ostrava 708 00, Česká republika, lucie.repecka@vsb.cz

²VŠB-Technická univerzita Ostrava, Fakulta materiálově-technologická, 17. listopadu 2172/15, Ostrava 708 00, Česká republika

³Ostravská univerzita, Přírodovědecká fakulta, Katedra fyziky, 30. dubna 22, Ostrava 701 03, Česká republika

⁴FCC Česká republika, s.r.o., Ďáblická 791/89, Praha 182 00, Česká republika

Odpadní biomasa představuje obnovitelný zdroj živin využitelný v zemědělství. Čistírenské kaly (ČK) mohou být pro tento účel využívány jen omezeně kvůli přítomnosti znečišťujících látek. Na druhou stranu jsou ČK cenným zdrojem organické hmoty a živin, zejména uhlíku, dusíku a fosforu. Cílem této práce bylo zjistit, jak spolukompostování ČK s jinou odpadní biomasou ovlivňuje přítomnost znečišťujících látek a akumulaci huminových kyselin (HA) ve výsledných substrátech, a jak přítomnost HA ovlivňuje růst rostlin a retenci vody v půdě. Experimenty zahrnovaly kompostování v reálném měřítku s organickými směsmi obsahujícími ČK a

pět různých materiálů (dřevní štěpka, dřevní vlákno, biologicky rozložitelný odpad, tráva a hlinitopísčité půda). Směsi byly spolukompostovány po dobu 120 dnů. Během celého procesu byla sledována teplota a změny koncentrací biologicky významných prvků včetně těžkých kovů. Byly monitorovány hladiny polycyklických aromatických uhlovodíků (PAU) a HA. Výsledné substráty byly dále testovány na růst jarního ječmene. Substráty s dřevní štěpkou vykazovaly nejlepší výsledky z hlediska obsahu HA a růstových parametrů rostlin. Substráty obohacené o HA vykazovaly nižší akumulaci PAU a těžkých kovů, zvýšenou schopnost zadržovat vodu a vyšší fotosyntetickou účinnost rostlin za kontrolovaných podmínek sucha. Tato studie zdůrazňuje potenciál cíleného spolukompostování odpadní biomasy k výrobě substrátů, které zmírňují degradaci půdy a podporují udržitelnost zemědělství.

Práce byla podpořena Ministerstvem zemědělství České republiky [č. QK21010300]. Experimentální výsledky byly získány s využitím velké výzkumné infrastruktury ENREGAT podporované MŠMT, č. projektu LM2023056.

1Po30

CHEMICAL AND STRUCTURAL STABILITY OF ZnO ELECTRON TRANSPORT LAYERS DEPOSITED BY LASER ABLATION FOR PEROVSKITE PHOTOVOLTAICS

Monika Stupavská^{1,2}, Dominik Sarvaš¹, Jaroslav Bruncko³, Monika Jerigová^{1,3}

¹Department of Physical and Theoretical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University Bratislava, Ilkovičova 6, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, monika.stupavska@fns.uniba.sk

²Department of Plasma Physics and Technology, Faculty of Science, Masaryk University, Kotlářská 267/2, Veveří, Brno, Czech Republic

³International Laser Centre-Slovak Centre of Scientific and Technical Information, Ilkovicova 3, Bratislava, 841 04, Slovak Republic

Zinc oxide (ZnO) thin films are widely investigated as electron transport layers (ETLs) in perovskite solar cells due to their favourable electronic properties, high transparency, and ease of fabrication. Among various deposition techniques, pulsed laser deposition offers precise control over film thickness and stoichiometry, making it suitable for high-quality ZnO layer preparation. However, the chemical and structural stability of ZnO remains a key issue, particularly

under conditions relevant to perovskite layer deposition and long-term device operation. In this study, we employed X-ray photoelectron spectroscopy to investigate the surface composition and chemical states of ZnO films deposited by laser ablation. The primary focus was to evaluate their stability under different environmental and thermal treatments, simulating real processing and operational conditions. We systematically monitored changes in stoichiometry, the formation of hydroxyl groups, oxygen vacancies, and other surface defects that may compromise the interface with the perovskite absorber layer. The results reveal pathways of interfacial degradation and highlight the sensitivity of ZnO surfaces to ambient exposure and elevated temperatures. Insights from this work support the development of stabilization strategies such as surface passivation or modified deposition protocols. These findings are critical for improving the reliability and efficiency of ZnO-based ETLs in perovskite solar cell applications.

This research was supported by the project APVV-23-0083, funded by the Slovak Research and Development Agency. Partial support was also provided by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic under project No. LM2023039.

1Po31

PROBLEMATIKA PŘÍTOMNOSTI ANTIBIOTIK A GENŮ ANTIBIOTICKÉ REZISTENCE V KOMUNÁLNÍCH ODPADNÍCH VODÁCH

Martina Vráblová¹, Lucie Řepečká^{1,2}, Tereza Stachurová³, Jan Bednárek¹, Anna Gavlová¹, Kateřina Smutná¹

¹ VSB-Technical University of Ostrava, CEET, Institute of Environmental Technology, 17. listopadu 15, Ostrava 70800, Czech Republic

² VSB-Technical University of Ostrava, Faculty of Materials Science & Technology, 17. listopadu 15, Ostrava 708 00, Czech Republic

³ University of Ostrava, Faculty of Science, Department of Biology and Ecology, Chittussiho 10, 710 00, Ostrava, Czech Republic

Antibiotika jsou látky používané k léčbě bakteriálních infekcí, jejichž široké a často nevhodné používání vedlo k rozvoji antibiotické rezistence. Geny antibiotické rezistence (ARG) umožňují mikroorganismům přežít působení antibiotik a šířit tuto schopnost na další bakterie. Antibiotika i ARG tak představují narůstající riziko pro životní prostředí i veřejné zdraví. ARG mohou být přenášeny mezi mikroorganismy, což

podporuje šíření rezistentních kmenů, a jejich výskyt ve vodním prostředí je často spojen s jejich neúplným odstraněním při konvenčním čištění odpadních vod. Biologické procesy v čistírnách navíc mohou tento přenos ještě usnadnit. Tato studie se zaměřuje na nové možnosti snížení těchto rizik prostřednictvím sorpčního materiálu na bázi granulovaného aktivního uhlí (GAC) modifikovaného iontovými kapalinami (IL). Testovaný materiál (iGAC) byl hodnocen z hlediska schopnosti eliminovat bakterie nesoucí ARG i adsorbovat zbytková antibiotika a další léčiva ve vzorcích odpadních a šedých vod. Výsledky ukázaly výrazný antimikrobiální účinek iGAC, zejména vůči rezistentním bakteriím, a zároveň zachování jeho sorpčních vlastností. Ekotoxikologické testy potvrdily, že IL zůstávají stabilně vázány na uhlí, což minimalizuje sekundární kontaminaci vod. Studie tak upozorňuje na významné riziko přetrvávání ARG v životním prostředí a zároveň ukazuje směr k vývoji účinnějších metod jejich eliminace z odpadních vod.

Tato práce vznikla za podpory projektu REFRESH – Research excellence for REgion Sustianability and High-tech Industries, reg.č. CZ.10.03.01/00/22_003/0000048 spolufinancován Evropskou unií z operačního programu Spravedlivá transformace. Experimentální výsledky byly získány s využitím velké výzkumné infrastruktury ENREGAT, podporované MŠMT, č. projektu LM 2023056.

1P032 NIR-LIGHT ABSORBING AZA-BRIDGED DIKETOPYRROLOPYRROLES WITH TERMINAL ARYLAMINE- FUNCTIONALIZED BENZOTHIAZOLES DISPLAYING LARGE TWO-PHOTON ABSORPTION CROSS-SECTIONS

Rajmohan Rajamani¹, Kenji Kamada², Erik Rakovský¹, Peter Hrobárik¹

¹Comenius University Bratislava, Faculty of Natural Sciences, Department of Inorganic Chemistry, Ilkovičova 6, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovakia, rajmohan.rajamani@uniba.sk

²Nanomaterials Research Institute (NMRI), National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST) Ikeda, Osaka 563-8577, Japan

A series of boron-containing heteroaromatic dyes was prepared by reacting diketopyrrolopyrrole (DPP) with variously functionalized benzothiazole-2-amines and BF₃. The obtained DPP-cored photosensitizers, featuring a quasi-quadrupolar architecture with diverse lateral

substituents and varying π -conjugation lengths, were fully characterized by multinuclear NMR spectroscopy (¹H, ¹³C, ¹⁹F, ¹¹B) and high-resolution mass spectrometry (HRMS), while the molecular structures of selected derivatives were also confirmed by single-crystal X-ray diffraction (XRD). The photophysical properties of the synthesized dyes were determined by UV-vis-NIR absorption and emission spectroscopy, showing a very intense lowest-energy absorption band ($\epsilon_{\text{max}} \sim 0.6 \times 10^5 - 1.1 \times 10^5 \text{ M}^{-1} \text{cm}^{-1}$) in the deep-red to NIR spectral region (650 – 800 nm), while the absorption and emission properties of these dyes were significantly affected by variations of the peripheral substituents. The two-photon absorption (TPA) properties of the synthesized arylamine-functionalized aza-BODIPY dyes were experimentally investigated using the Z-scan technique over the wavelength range of 800–1500 nm, revealing TPA cross-section maxima of up to 2500 GM at 810 nm and up to 600 GM at 1050 nm.

This work has been supported by the Slovak Research and Development Agency (grant no. APVV-21-0503), the Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic (VEGA project no. 1/0669/22), and by the EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No. 09I03-03-V03-00040 (PUSHMAT). Dr. Rajamani also acknowledges the support from the Postdoctoral Grant of the Comenius University (GUKPOST, grant no. 09I03-03-V05-00012).

- [1] Zhou, Y., Ma, C., Gao, N., Wang, Q., Lo, P.-C., Wong, K.S., Xu, Q.-H., Kinoshita, T., Ng, D. K. P.: *J. Mater. Chem. B* 6, 5570-5581 (2018).
- [2] Shimizu, S., Iino, T., Araki, Y., Kobayashi, N.: *Chem. Commun.* 49, 1621-1623 (2013).
- [3] Fischer, G.M., Isomäki-Kron Dahl, M., Göttker-Schnetmann, I., Daltrozzo, E., Zumbusch, A.: *Chem. Eur. J.* 15, 4857-4864 (2009).

1Po33**BENZOTHAZOLE HEPTAMETHINE CYANINE DYES WITH TERMINAL AMINE SUBSTITUENTS: TARGETED PROBES FOR FLUORESCENCE IMAGING AND PHOTODYNAMIC THERAPY USING ONE- AND TWO-PHOTON ABSORPTION IN NEAR-INFRARED REGION**Babiola Annes Sesuraj, Rajmohan Rajamani, Jozef Noga, Peter Hrobárik*Comenius University Bratislava, Faculty of Natural Sciences, Department of Inorganic Chemistry, Ilkovičova 6, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovakia, babiolaannes@gmail.com*

Heptamethine dyes are attractive probes in fluorescence imaging and the sensing of various analytes. They are also actively studied for their use in photodynamic cancer therapy, combining deep tissue imaging, tumor targeting, and reactive oxygen species (ROS) cytotoxicity, although their clinical application is limited by poor photostability, low solubility, aggregation-induced photobleaching, and very low two-photon absorption (TPA) cross-sections. To address these challenges and red-shift absorption and emission maxima, we synthesized novel quasi-quadrupolar heptamethine cyanine dyes with two benzothiazole units at the periphery, functionalized with various terminal amino groups at the C-6 position of the *S,N*-heteroarene ring. Based on our quantum chemical calculations, such modification is anticipated to shift absorption/emission peaks to longer NIR wavelengths and at the same time to boost the two-photon absorption of given cyanine dyes, which – if proven experimentally – would enhance the application potential of heptamethine dyes in modern laser technologies as well as two-photon excited bioimaging and PDT.

A series of benzothiazole-derived heptamethine dyes with extended π -conjugation was synthesized

from corresponding 6-*N,N*-dialkylamino- or 6-*N,N*-diaryl-amino-functionalized 2,3-dimethylbenzothiazolium salts by condensation with the iminium salt derived from (*E*)-2-chloro-3-(hydroxymethylene)cyclohex-1-ene-1-carbaldehyde and two equivalents of aniline. The target cyanine dyes were characterized by ^1H and ^{13}C NMR, UV-vis absorption and emission spectroscopies, as well as by HRMS spectrometry. Our preliminary data suggest that terminal electron-donating groups at the C-6 position of benzothiazole effectively tune photophysical properties of this important class of chromophores and enhance their intersystem crossing and singlet oxygen generation. These findings provide a foundation for developing highly efficient NIR-activated agents for fluorescence bioimaging and PDT applications. Our future work will focus on characterizing the nonlinear optical (NLO) properties of these dyes using femtosecond laser Z-scan measurements.

This work has been supported by the Slovak Research and Development Agency (grant no. APVV-21-0503), the Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic (VEGA project no. 1/0669/22), and by the EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No. 09I03-03-V03-00040 (PUSHMAT). Dr. Sesuraj also acknowledges the support from the Postdoctoral Grant of the Comenius University (GUKPOST, grant no. 09I03-03-V05-00012).

- [1] Medeiros, N.G., Braga, C.A., Câmara, V.S., Duarte, R.C., Rodembusch, F.S.: *Asian J. Org. Chem.* 11, e202200095 (2022).
- [2] Feng, L., Chen, W., Ma, X., Liu, S.H., Yin, J.: *Org. Biomol. Chem.* 18, 9385-9397 (2020).
- [3] Pawlicki, M., Collins, H.A., Denning, R.G., Anderson, H.L.: *Angew. Chem. Int. Ed.* 48, 3244-3266 (2009).

POSTERY - SEKCIA 2
ANORGANICKÁ CHÉMIA
A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA

2Po01
CHARAKTERIZACE TENKÝCH VRSTEV
OXIDU WOLFRAMOVÉHO
PŘIPRAVENÝCH METODOU BRICK-AND-
MORTAR

Tomáš Blecha, Petr Dzik, Marcela Králová, Michal Veselý

Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně,
Purkyňova 464, 612 00 Brno, ČR,
Tomas.Blecha1@vut.cz

Vyvinutí způsobu generace energie bez využití fosilních paliv a čištění životního prostředí jsou zásadní pro rozvoj udržitelného průmyslu. Významným zdrojem obnovitelné energie je sluneční záření, avšak jeho konverze a skladování je poměrně obtížné [1]. Heterogenní fotokatalýza založená na fotokatalytických polovodičích je ekologická metoda přeměny sluneční energie na chemickou. Excitací elektronů ozářením dochází ke generaci párů elektronu a díry (excitonů), které zprostředkovávají redoxní reakce na povrchu fotokatalyzátoru za vzniku reaktivních forem kyslíku. Při zavedení elektrického pole mezi fotokatalyzátor a protielektrodu dochází k oddělení párů a generaci fotoproudu [2].

Oxid wolframový je netoxický polovodič s výbornou fotokatalytickou aktivitou excitací zářením v oblasti UV i viditelného světla. K tomu dochází díky nižší šířce zakázaného pásu pod 2,8 eV, na rozdíl od hojně využívaného polovodiče oxidu titaničitého, který je excitován pouze UV zářením [1]. Oxid wolframový je tak zajímavým kandidátem pro environmentální využití, avšak nanášení tenkých vrstev často využívá komplikované metody nešetrné k životnímu prostředí.

Kombinovaná metoda brick-and-mortar („cihla a malta“) je zajímavá technika využívající dva odlišné postupy přípravy nanočástic polovodičů – top-down a bottom-up [3]. Cílem bylo připravit tenké vrstvy depozicí vodní suspenze WO₃, složené z mletých nanočástic a amorfního prekursoru, která po výpalu vytvoří tenkou vrstvu složenou pouze ze samotného oxidu wolframového.

[1] Peleyeju M.G., Viljoen E.L.: *J. Water Process Eng.*

40, 101930 (2021).

[2] Dutta V. et al.: *J. Environ. Chem. Eng.* 9, 105018 (2021).

[3] Nakajima T. et al.: *J. Mater. Chem. A* 4, 17809 (2016).

2Po02
PHASE FORMATION IN ALKALI AND
AMMONIUM FLUOROSCANDATE
SYSTEMS UNDER MILD
HYDROTHERMAL CONDITIONS

Veronika Demovics Silliková, Oksana Matselko, Blanka Kudíková, Zuzana Netriová, Miroslav Boča

Institute of Inorganic Chemistry SAS, Dúbravská cesta
9, 845 36 Bratislava 45, Slovakia,
veronika.sillikova@savba.sk

Fluoroscandates are known for their industrial applications, e.g., in fuel cells, as phosphors, or in lasers. Compared to solid-state methods, hydrothermal chemistry—reactions in water above 100 °C and 1 bar, typically conducted in autoclaves—is less explored. This approach allows better control over phase purity and crystal growth conditions, offering advantages in precision and reproducibility [1,2].

Mild hydrothermal synthesis was applied to perform a systematic study of the formation of alkali metal and ammonium fluoroscandates in solution. The following compounds were obtained: (NH₄)₂ScF₁₁, (NH₄)₃ScF₆, NaScF₄, Na₃ScF₆, KSc₂F₇, K₅Sc₃F₁₄, CsSc₃F₁₀, and CsScF₄. The synthesis included mixing the initial chemicals in water with HF, heating in Teflon-lined autoclaves, and was followed by filtration and drying. The obtained compounds were characterised using XRPD, DSC, and SEM with EDXS.

The formation of the compounds in the systems NaF–ScF₃, KF–ScF₃, CsF–ScF₃ and NH₄F–ScF₃ was studied in more detail. With basic synthesis, only NaScF₄ and Na₃ScF₆ could be obtained. Adjusting the component ratios and the amount of HF allowed us to obtain the remaining compounds. Further, these compounds were used as initial components for synthesising other compounds. Nevertheless, the formation of (NH₄)ScF₄, (NH₄)Sc₃F₆, (NH₄)₅Sc₃F₁₄ and K₃ScF₆ was observed only in a mixture with other phases.

This work was supported by the Slovak Academy of Sciences Grant Programme for Postdoctoral Fellows “PostdokGrant” grant No. APD0029.

[1] Buschow K.H.J.: *Encyclopedia of Materials: Science and Technology* (Second Edition)

Amsterdam: Elsevier Science (2001).

- [2] Xu R.R.: *Modern Inorganic Synthetic Chemistry* (Second Edition), Amsterdam: Elsevier (2017).

2Po3

MESOPORIZATION OF *BEA ZEOLITE BY HOT LIQUID WATER AND ITS MECHANISM

Jiří Dědeček¹, Věnceslava Tokarová^{2,3}, Stanislava Stiborová³, Martina Urbanová¹

¹J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the CAS, Prague, Czech Republic, jiri.dedecek@jh-inst.cas.cz

²Faculty of Natural Sciences of Jan Evangelista Purkyně University, Ústí nad Labem, Czech Republic

³ORLEN a.s., Ústí nad Labem, Czech Republic

Zeolites were recently shown to be promising catalysts for biomass transformations. However, there are limited by the transport of large(r) molecules in the microporous channels of the zeolite. Although mesoporous zeolites were highly recently reported, only *BEA zeolite and USY zeolite represent commercially available silica rich aluminosilicate zeolite catalysts with largest pores. Nevertheless, this drawback can be overcome by the introduction of mesopores to the microporous zeolite crystal. However, the methods employed for the mesopores formations are usually not ecologically friendly.

The effect of hot liquid water treatment on beta zeolites was investigated. Commercial beta zeolites with Si/Al 12.5 – 18 were treated under various temperatures in hot liquid water. Surface area and micro- and mesoporosity were evaluated using nitrogen adsorption, crystallinity of treated zeolites by powder x-ray diffraction, state of Al and Si atom by ²⁹Si and ²⁷Al MAS NMR spectroscopy.

The employment of HWT at 95 °C led to increasing of mesopores in all studied beta zeolites. Mesopore formation starts by dealumination followed by desilication and finally by leaching of Al and Si from the channel system. Hot liquid water treatment represents new, simple and ecologically friendly method for the introduction of mesopores to the beta zeolite catalysts.

2Po4

CATALYTIC AND ADSORPTIVE PROPERTIES OF RARE-EARTH OXIDES WITH EMPHASIS ON CERIUM OXIDE

Jakub Ederer¹, Jiří Henych², Viktorie Neubertová³

¹Faculty of Environment, Jan Evangelista Purkyně University, Pasteurova 3632/15, 400 96 Ústí nad Labem, Czech Republic, jakub.ederer@ujep.cz

²Institute of Inorganic Chemistry of the Czech Academy of Sciences, 250 68 Husinec-Řež, Czech Republic

³Faculty of Science, Jan Evangelista Purkyně University, Pasteurova 3632/15, 400 96 Ústí nad Labem, Czech Republic

Rare-earth oxides (REOs) have emerged as highly effective materials in catalytic applications due to their unique electronic structures, oxygen storage capacity, and thermal stability. These properties enable REOs to enhance catalytic activity by promoting active site dispersion, improving redox behavior, and increasing resistance to deactivation. Among the most prevalent REOs is cerium oxide (ceria), primarily due to its remarkable chemical and physical properties, such as the easy and reversible change between oxidation states Ce³⁺/Ce⁴⁺, the capability to control Ce³⁺/Ce⁴⁺ ratio depending on the synthesis method used, high surface area, and outstanding catalytic properties [1]. Ceria is a relatively inexpensive material considered waste from rare earth processing, but it is commonly used in industrial catalysis or in glass polishing, while applications in wastewater treatment are less common [2]. Ceria is known for the ability to cleave various bonds in biologically active molecules, pesticides, or chemical warfare agents, especially phosphoester bonds [3]. The capability of ceria-based materials to cleave phosphoester bonds is closely connected to the surface hydroxyl groups and other surface characteristics. However, in addition to the surface characteristics and physical and chemical properties of ceria, the chemical structure of the compounds also significantly influences the catalytic and adsorption activity of ceria [1].

The research was supported by the Czech Science Foundation Grant No. 25-15972S.

[1] Ederer J.: *J. Environ. Chem. Eng.* 13, 3 (2025).

[2] Hua M.: *J. Hazard. Mater.* 211, 317-331 (2012).

[3] Klabunde K.J.: *J. Phys. Chem.* 100, 12142 (1996).

2Po5**SNÍMÁNÍ FLUORESCENČNÍCH ZNAČEK
POMOCÍ PRŮMYSLOVÉ KAMERY**Denisa Filipi, Michal Veselý*Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická,
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, ČR,
Denisa.Filipi@vut.cz*

Polymerní materiály jsou levné, lehké a odolné materiály, které lze snadno tvarovat do různých výrobků. Díky tomu jsou stále více používány pro výrobu různorodých produktů. To má za následek růst jejich produkce, která v roce 2021 dosáhla celosvětově téměř 400 milionů tun. Protože se polymerní materiály používají zejména na jednorázové obaly, je potřeba zajistit způsob, jakým bude s těmito polymerními odpady nakládáno [1,2].

Recyklace plastových odpadů je klíčová pro snížení hromadění plastových odpadů a pro zachování zdrojů, ze kterých se polymerní materiály vyrábí. Pro účinnou recyklaci je třeba třídít odpad na jednotlivé materiály. Nejúčinnější metodou, která se momentálně pro třídění používá, je třídění pomocí NIR spektroskopie. Tato metoda však není vhodná pro polymerní materiály, které jsou tmavě zabarvené, kontaminované anebo pro materiály, které mají podobná NIR spektra, jako jsou například PE a PP [2].

Pro efektivnější třídění lze použít fluorescenční markery. Tyto markery mají charakteristickou emisi v NIR oblasti, podle které lze odlišit jednotlivé druhy polymerních materiálů. Pro identifikaci fluorescenčních značek byla použita průmyslová kamera, která snímá záření ve VIS a NIR oblasti. Pro rozlišení jednotlivých markerů byly využity interferenční filtry. Tento způsob identifikace markerů by mohl být využit v třídičkách polymerních odpadů pro zajištění efektivního třídění materiálů.

Tato práce byla finančně podpořena Technologickou agenturou České republiky v rámci programu Národní centrum kompetence – Polymery pro 21. století.

- [1] Jandric A., Olscher C., Zafiu C., Lielacher R., Lechner C., Lassenberger A., Part F.: *Polymers* 16, 2591 (2024).
[2] Larder R.R., Hatton F.L.: *ACS Polym. Au* 3, 182-201 (2023).

2Po6**CYTOTOXICKÁ AKTIVITA
REDUKOVANÝCH SCHIFFOVÝCH BÁZ A
ICH KOMPLEXOV SO ZINKOM A MEĐOU**Ladislav Habala¹, Jana Hricoviniová², Jindra Valentová¹, Bianka Oboňová¹, Miroslava Litecká³, Ludmila Pašková²¹*Katedra chemickej teórie liečiv, Farmaceutická fakulta UK, Odbojárov 10, 832 32 Bratislava, Slovensko, habala@fpharm.uniba.sk*²*Katedra bunkovej a molekulárnej biológie liečiv, Farmaceutická fakulta UK, Odbojárov 10, 832 32 Bratislava, Slovensko*³*Ústav anorganické chémie AV ČR, 250 68 Husinec-Řež č.p. 1001, Česká republika*

Schiffové zásady predstavujú dôležitú kategóriu ligandov, poskytujúcu komplexy kovov s veľkou štruktúrnou variabilitou. V mnohých prípadoch už samotné ligandy vykazujú rôzne druhy biologickej aktivity, pričom ich komplexáciou kovmi je často možné dosiahnuť potenciáciu tejto aktivity. V rámci našej práce sme pripravili rôzne redukované Schiffové bázy odvodené od cyklohexán-1,2-diamínu, ako aj ich mednaté a zinočnaté komplexy. Ligandy aj ich koordinačné zlúčeniny boli štruktúrne charakterizované pomocou RTG monokryštálovej štruktúrnej analýzy. V prípade všetkých koordinačných zlúčenín sa jednalo o jednojadrové komplexy. Následne bola stanovená cytotoxická aktivita produktov *in vitro* v rôznych bunkových líniiach metódou MTT (bunky hepatocelulárneho karcinómu HepG2 a kolorektálneho karcinómu HT-29, Caco-2). Ligandy a ich Cu a Zn komplexy efektívne znižovali viabilitu buniek v študovaných bunkových líniiach. Komplexy kovov všeobecne vykazovali vyššiu cytotoxickú aktivitu v porovnaní s voľnými ligandmi. Cytotoxicita študovaných komplexov bola v mnohých prípadoch vyššia než hodnota pre cisplatinu použitú ako štandard. V rámci stanovenia biologickej aktivity bola stanovená tiež antioxidačná aktivita metódou DPPH, ako aj interakcia so sérovým albumínom (BSA) a s DNA (ct-DNA). Skúmané molekuly predstavujú perspektívne štruktúry pre vývoj nových účinných látok s protirakovinovým účinkom [1,2].

Práca bola realizovaná s podporou Agentúry na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-23-0349. Táto práca bola podporená Vedeckou grantovou agentúrou MŠVVaŠ SR a SAV – projekt VEGA 1/0661/24.

- [1] Oboňová B., Valentová J., Litecká M., Pašková L., Hricoviniová J., Bilková A., Bilka F., Horváth B.,

Habala L.: *Int. J. Mol. Sci.* 25, 9166 (2024).

- [2] Oboňová B., Habala L., Litecká M., Herich P., Bilková A., Bilka F., Horváth B.: *Life* 13, 1516 (2023).

2Po07

COMPOSITE FILAMENT BASED ON PHARMACEUTICAL GLASS WASTE FOR ADDITIVE MANUFACTURING OF NEW LIVE-CYCLE PRODUCTS

Zora Hajdúchová¹, Martina Ferancová¹, Michaela Benkőová¹, Jozef Feranc², Marián Janek^{1,3}

¹Slovak University of Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Department of Inorganic Materials, Radlinského 9, Bratislava SK-81237, Slovakia, zora.hajduchova@stuba.sk

²Slovak University of Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Department of Plastics, Rubber and Fibers, Radlinského 9, Bratislava SK-81237, Slovakia

³Comenius University, Faculty of Natural Sciences, Department of Physical and Theoretical Chemistry, Mlynská dolina, Ilkovičova 6, CH1, Bratislava SK-84215, Slovakia

Recycled glass powder was selected due to its low cost and advantageous properties of glass, such as good mechanical strength, chemical and thermal resistance, making it an ideal candidate for new material life-cycle applications. Combination with 3D printing, specifically Fused Deposition Modelling (FDM), is well-suited for fabricating complex geometries with good precision and material efficiency. During FDM shaping, the filament is extruded through a heated nozzle, where it melts and is deposited layer by layer to form the desired 3D object. Several crucial parameters of the filament, such as consistent diameter, good thermal stability, and strong interlayer adhesion, must be considered. The objective of this study was to develop a filament derived from waste glass powder for 3D printing applications. To this end, 65 wt.% glass powder was mixed with 35 wt.% of a two-component thermoplastic polymer binder into filament, which was subsequently characterized using SEM and DTA, and its printability was evaluated using a commercial 3D printer.

This work was supported by the Slovak Grant Agency for Science VEGA grant No. 1/0070/22 and Slovak Research and Development Agency under Contracts No. APVV-23-0352, and the Operational Program Integrated infrastructure within the project: "ACCORD" ITMS2014+: 313021×329, co-financed by the ERDF.

2Po08

APLIKÁCIA KOMPLEXOV STRIEBRA S POTENCIÁLNOU BIOLOGICKOU AKTIVITOU V LOKÁLNEJ TERAPII PROSTREDNÍCTVOM KRÉMOV A GÉLOV

Kristína Harbuláková¹, Zuzana Vargová¹, Simona Sovová²

¹Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice, kristina.harbulakova@student.upjs.sk

²Dekanát prírodovedeckej fakulty, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Šrobárova 2, 041 54 Košice

Zlúčeniny striebra sú vzhľadom na rastúcu bakteriálnu rezistenciu vhodnou alternatívou pri liečbe infekcií spôsobených patogénnymi mikroorganizmami. Toxicita striebra pre bakteriálne bunky je už dlho známa, zatiaľ čo pre ľudí sa zdá, že jeho toxicita je pomerne nízka, čo je jednou z najväčších výhod striebra oproti iným medicínsky relevantným kovom [1]. Okrem toho sa komplexy striebra v posledných desaťročiach stali atraktívnymi ako protirakovinové liečivá, nakoľko komplexy striebra obsahujúce rôzne typy ligandov vykazujú selektívne účinky proti rôznym rakovinovým bunkám [2]. Najčastejšou liekovou formou určenou na lokálnu aplikáciu na pokožku alebo sliznicu je polotuhá – gély a krémy. Ich výhodou je samopodávanie, neinvazívnosť a znížený výskyt nežiaducich reakcií v porovnaní s inými liekovými formami. Zároveň poskytujú vhodné prostredie pre prenikanie aktívnych látok do pokožky [3].

V rámci našej experimentálnej práce pripravujeme stabilné komplexy vybraných ligandov so striebornými iónmi, pri ktorých predpokladáme štruktúrne a ďalšie fyzikálno-chemické vlastnosti vhodné na hodnotenie biologickej aktivity, predovšetkým antibakteriálnych a protirakovinových účinkov. Tieto komplexy následne zakomponovávame do polotuhých liekových foriem, ako sú krémy a gély, určených na lokálnu aplikáciu na pokožku, s cieľom využiť ich biologickú aktivitu priamo v mieste účinku.

Výskum bol podporený nasledujúcimi projektovými schémami: VEGA 1/0268/24, KEGA 007UPJŠ-4/2024 a VVGS vvg-2023-2543.

- [1] Medici S. et al.: *Coord. Chem. Rev.* 327- 328, 349-359 (2016).
- [2] Rendošová M. et al.: *J. Inorg. Biochem.* 168, 1-12 (2017).
- [3] Adeleye O.A. et al.: *J. Nanotechnol.* 2023, 15 (2023).

2Po09

ELECTROSPUN POLYURETHANE/PALLADIUM NANOFIBROUS MEMBRANE FOR HYDROGEN SORPTION

Jakub Hoskovec¹, Pavla Čapková¹, Petr Ryšánek¹,
Dániel Gardenö³, Karel Friess³, Jaroslava
Jarolímková¹, Viktor Greguš², Pavel Kaule², Tereza
Dušková², Magda Škvorová², Václav Šícha², Oldřich
Benadada⁴

¹Centre of Nanomaterials and Biotechnology, Faculty
of Science, J.E. Purkyne University, Usti nad Labem,
Czech Republic, Jakub.Hoskovec@ujep.cz

²Chemistry Department, Faculty of Science, J. E.
Purkyne University, Usti nad Labem, Czech Republic

³Institute of Chemical Technology, Prague, Czech
Republic

⁴Institute of Microbiology of the Czech Academy of
Sciences, Prague, Czech Republic

Safe and efficient hydrogen storage represents a key aspect in the development of sustainable energy systems. This contribution presents a nanofibrous membrane based on polyurethane (PUR), modified with palladium (Pd) nanoparticles and prepared using electrospinning technology (Fig. 1). The membrane was fabricated via two methods: direct electrospinning of a solution containing Pd nanoparticles and subsequent deposition of Pd onto a UV-activated PUR membrane. Hydrogen sorption capacity was evaluated using the Pressure Decay (PD) method and dynamic gas chromatography (dGC) at 30 °C. At 1 bar, the membrane achieved a sorption of 207.7 ml/g (1.9 wt.%), while at 4 bar it reached 1173.3 ml/g (10.6 wt.%), maintaining air permeability and mechanical stability. These results confirm its potential for practical use in reversible hydrogen storage applications. The presented research also forms a starting point for the further development of nanofibrous sorbents with precisely tailored structure and chemical functionality, with additional materials potentially being briefly mentioned as part of the contribution [1].

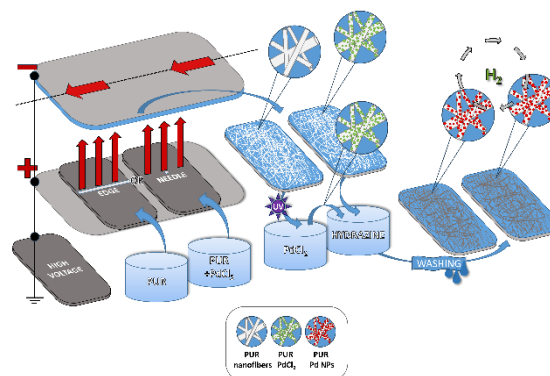


Fig. 1 Graphic representation of applied electrospinning technology and methods of one-step and multi-step modification of nanofibrous membranes for targeted hydrogen sorption.

The authors acknowledge the assistance provided by the Research Infrastructure NanoEnviCz, supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic under project NanoEnviCz (No. LM2023066). This work was also supported by the Technology Agency of the Czech Republic [TACR, No. TK05020080], by the SGS project (No. UJEP-SGS-2022-53 006-3), and project ERDF/ESF “UniQSurf – Centre of bio interfaces and hybrid functional materials” (No. CZ.02.1.01/0.0/0.0/17_048/0007411). The authors gratefully acknowledge the access to the electron microscopy facility of IMIC, supported by the Czech Academy of Sciences (RVO CZ61388971). The financial support from the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic for the specific university research (MSMT No. 21-SVV/2022 and 2023) is gratefully acknowledged.

[1] Hoskovec J., Čapková P., Ryšánek P., Gardenö D., Friess K., Jarolímková J., Benada, O.: *J. Mater. Chem. A* 12, 25202-25210 (2024).

2Po10

POLYANILINE NANOPARTICLES: INFLUENCE OF SYNTHESIS AND PROTONATION ON STRUCTURE, SURFACE AREA AND SORPTION PROPERTIES

Jaroslava Jarolímková¹, Viktorie Neubertová¹, Filip
Mamoň², Zdeňka Kolská¹

¹Centre for Nanomaterials and Biotechnology, Faculty
of Science, J. E. Purkyně University, Pasteurova 15,
40096, Ústí nad Labem, Czech Republic,
jaroslavajarolimkova@gmail.com

²Institute of Technology and Materials, Faculty of
Mechanical Engineering, J. E. Purkyně University,
Pasteurova 3334/7, 40096, Usti nad Labem, Czech
Republic

Polyaniline nanoparticles (PANI NPs) were prepared in the form of emeraldine salt (ES) and emeraldine base (EB) by oxidative polymerization with or without HCl stabilization. The aim was to clarify whether minor changes in the synthesis affect the structure, morphology and gas sorption

capacity. FTIR spectra confirmed the expected chemical structures and showed that HCl acts as both a protonation dopant and a morphological modifier. SEM and DLS analyses revealed that the presence of HCl leads to smaller and more uniform particles with better dispersity, especially for the protonated form (PANI ES). Adsorption measurements showed that PANI EB exhibits a naturally higher specific surface area due to a more open structure, while HCl significantly increases the sorption capacity of PANI ES by disrupting intermolecular interactions. For CO₂ adsorption, the value increased from $24.6 \pm 1.2 \text{ cm}^3/\text{g}$ to $30.6 \pm 2.1 \text{ cm}^3/\text{g}$, while for N₂, the sorption for native PANI EB was $144.4 \pm 1.3 \text{ cm}^3/\text{g}$. By optimizing the synthesis, it was possible to obtain particles with a specific surface area of up to $70.8 \pm 2.1 \text{ m}^2/\text{g}$, which ranks them among the PANI NPs with the highest specific surface area and as promising materials for environmental applications.

The authors acknowledge the assistance provided by the Advanced Multiscale Materials for Key Enabling Technologies project, supported by the Ministry of Education, Youth, and Sports of the Czech Republic. Project No. CZ.02.01.01/00/22_008/0004558, Co-funded by the European Union and by the Grant Agency J. E. Purkyně University in Ústí nad Labem project no. UJEP-SGS-2023-53-002-3.

2Po11 FROM CRYSTAL STRUCTURES TO CYTOTOXICITY: PALLADIUM(II) COMPLEXES WITH BIDENTATE 8- HYDROXYQUINOLINE LIGANDS

Martina Kepeňová¹, Michaela Benediková¹, Martin Kello², Viktória Medvecová², Erika Samolová³, Miroslava Litecká⁴, Mária Vilková⁵, Ivan Potočník¹

¹Department of Inorganic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovakia, martina.kepenova@student.upjs.sk

²Department of Pharmacology Faculty of Medicine, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Trieda SNP 1, 040 11 Košice, Slovakia

³Institute of Physics of the Czech Academy of Science, Na Slovance 2, 182 21 Prague, Czech Republic

⁴Department of Materials Chemistry, Institute of Inorganic Chemistry of the Czech Academy of Science, Husinec-Řež 1001, 250 68 Řež, Czech Republic

⁵NMR laboratory, Institute of Chemistry, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovakia

Palladium complexes, as alternatives to platinum-based drugs, exhibit notable antitumor activity

while causing fewer side effects than cisplatin [1,2]. Moreover, numerous Pd^{II} compounds have been developed with proven antifungal, antiviral and antibacterial properties [3].

A series of palladium(II) complexes with derivatives of 8-hydroxyquinoline of general formula $\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2[\text{PdCl}_2(\text{XQ})]$ (1a-4a), where HXQ is 5-nitro-7-iodo-8-hydroxyquinoline (1a,b,c), 5-nitro-7-bromo-8-hydroxyquinoline (2a,b,c), 5-iodo-7-bromo-8-hydroxyquinoline (3a,b,c) and 5-chloro-7-bromo-8-hydroxyquinoline (4a,b,c) were synthesized. Ligand exchange during NMR spectroscopy experiments resulted in the formation of $[\text{PdCl}(\text{DMSO})(\text{XQ})]$ (1b-4b) and $[\text{Pd}(\text{XQ})_2]$ (1c-4c) complexes. The composition of all complexes was determined by infrared spectroscopy and elemental analysis, supported by the NMR experiments of 1a-4a and 1b-4b, which were also used to check the stability of these complexes in DMSO. X-ray structure analysis of the complexes from the a and b series (except 3b) proved a square-planar coordination stabilised by intermolecular interactions.

The negative influence of complexes 1b-4b on the growth and metabolism of the cells was studied on seven cancer cell lines. Complexes 3b and 4b demonstrated the highest activity as well as the highest selectivity on the Jurkat (1.73 for 3b) and MDA-MB-231 (1.84 for 4b) cell lines. No significant activity was observed for complexes 1b and 2b containing nitro derivatives.

This work was supported by VEGA 1/0126/23, VEGA 1/0498/23 and KEGA 008UPJŠ-4/2023.

- [1] Giorgi E. et al.: *Inorg. Chim. Acta* 581, 122645 (2025).
- [2] Abu-Surrah A.S. et al.: *Eur. J. Med. Chem.* 45, 471-475 (2010).
- [3] Coskun M.D. et al.: *Bioorg. Med. Chem.* 21, 4698-4705 (2013).

2Po12**NANOKOMPOZITY PRO POTENCIÁLNÍ VYUŽITÍ V MNOHA APLIKACÍCH**

Zdeňka Kolská¹, Václav Švorčík², Jaroslava Jarolímková¹, Viktorie Neubertová¹

¹Centrum nanomateriálů a biotechnologií, Přírodovědecká fakulta, Univerzita J. E. Purkyně v Ústí nad Labem, Pasteurova 15, 40096 Ústí nad Labem, ČR, zdenka.kolska@ujep.cz

²Ústav inženýrství pevných látek, Fakulta chemické technologie, VŠCHT v Praze, Technická 3, 16628 Praha 6, ČR

Kompozitní materiály zahrnují a kombinují funkční vlastnosti složek, ze kterých jsou připraveny. Kompozitní či nanokompozitní materiály, které zahrnují nanočástice, mívají velké hodnoty specifických povrchů a díky tomu mohou nalézt využití v mnoha oblastech, např. v procesech zachytu či separace plynů katalýzy, pro ochranu životního prostředí. při skladování energie nebo optoelektronice.

V našem výzkumu kombinujeme několik metod syntézy a přípravy různých nanomateriálů (MOF, chalkogenidy, další částice, např. PANI). Z nich připravujeme vhodné nanokompozitní materiály. V rámci práce jsou vyvíjeny, připravovány a studovány různé částice a nanočástice, dichalkogenidy přechodných kovů (TMD), jejich heterostrukтуры, struktury na 3D různých nosičích, bimetalické TMD. Dále jsou testovány jejich modifikace různými metodami, elektrochemicky, laserem, plazmatem, chemicky,... Všechny připravené struktury, nanočástice i nanokompozity jsou následně bohatě charakterizovány a testovány širokou škálou dostupných metod a technik, jako AFM, SEM, FTIR, XPS, elektrokinetická analýzy, sorpce plynů (N₂, CO₂, ...), elektrochemické metody, atd.).

Autoři děkují za pomoc poskytnutou v rámci projektu GAČR č. 23-05197S a projektu Pokročilé víceškálové materiály pro nosné klíčové technologie podporovanou Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy ČR, reg. č.:

CZ.02.01.01/00/22_008/0004558, spolufinancováno Evropskou unií.

[1] Jarolímková J. et al.: *Surf. Interf.* 61, 106086 (2025).

[2] Neubertová V. et al: *Micropor. Mesopor. Mat.* 336, 112956 (2024).

2Po13**NA VELIKOSTI PÓRŮ ZÁLEŽÍ: SYSTEMATICKÁ DSC ANALÝZA TÁNÍ VODY V MEZOPÓRECH (10-50 nm) UHLÍKATÝCH XEROGELŮ**

Lucie Kořená¹, Václav Slovák¹, Samantha L. Flores-López², Ana Arenillas²

¹Ostravská univerzita, Katedra chemie, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, ČR, lucie.korena@osu.cz

²Instituto de Ciencia y Tecnología del Carbono, INCAR-CSIC, Francisco Pintado Fe 26, 33011 Oviedo, Španělsko

Pomocí diferenční skenovací kalorimetrie (DSC) byl zkoumán vliv velikosti pórů na tání testovací kapaliny (vody) v pórech a na parametry používané pro transformaci DSC záznamů na distribuci velikosti pórů. Měření byla provedena na sérii uhlíkatých xerogelů s různými velikostmi pórů (10-50 nm), ale se stejným tvarem pórů a stejnou povrchovou chemií.

Klesající trend mezi poklesem teploty tání vody v pórech a poloměrem pórů uhlíkatých xerogelů umožnil potvrdit vhodnost modifikované Gibbs-Thomsonovy rovnice pro určení distribuce velikosti pórů. Plocha DSC píku představující teplo tání ledu v pórech a objem pórů vykazovaly dobrou lineární korelaci, která však byla ovlivněná velikostí pórů. Získaná Gibbs-Thomsonova konstanta se podstatně lišila od obecně přijímané hodnoty a vrstva nemrznoucí vody se zvětšovala se zvyšující se velikostí pórů.

Ze získaných výsledků vyplývá, že pro korektní konverzi DSC záznamů na distribuci velikosti pórů je nutné testovat hodnoty zmiňovaných parametrů pro každý studovaný systém kapalina-pevná látka zvlášť.

Tato práce byla podpořena Evropskou unií v rámci projektu LERCO č. CZ.10.03.01/00/22_003/0000003 a projektem Ostravské univerzity č. SGS12/PřF/2023.

2Po14**STRUCTURE AND THE BIOLOGICAL ACTIVITY OF THE NEW COPPER(II)-COUMARIN BASED COMPLEXES**

Jakub Kurjan¹, Zuzana Jendželovská², Viktória Dečmanová², Nikolina Kastratovic³, Vladislav Volarevic³, Lukáš Smolko⁴, Romana Smolková⁵, Miroslava Litecká⁶, Rastislav Jendželovský², Ivan Potočník¹

¹Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovakia,

jakub.kurjan@student.upjs.sk

²Department of Cell Biology, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Šrobárova 2, 041 54 Košice, Slovakia

³Departments for Genetics, Microbiology and Immunology, Center for Research on Harmful Effects of Biological and Chemical Hazards, Faculty of Medical Sciences, University of Kragujevac, 69 Svetozar Markovic Street, 340 00 Kragujevac, Serbia

⁴Department of Medical and Clinical Biochemistry, Faculty of Medicine, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Tr. SNP 1, 040 11 Košice, Slovakia

⁵Center for Applied Biomedicine, Technology and Innovation Park, P. J. Šafárik University in Košice, Tr. SNP 1, 040 11 Košice, Slovakia

⁶Department of Materials Chemistry, Institute of Inorganic Chemistry of the Czech Academy of Sciences, Husinec-Řež 1001, 250 68 Řež, Czech Republic

Copper, essential for many enzymes, plays a role in tumor angiogenesis and is found at elevated levels in cancer cells [1]. Coumarin derivatives, known for various biological activities, including anticancer properties [2], have shown enhanced cytotoxicity when complexed with copper—sometimes surpassing cisplatin in both potency and selectivity [3].

Within this study, nine copper(II) complexes with (3E)-3-(1-[(pyridin-2-yl)methyl]amino)ethylidene)-3,4-dihydro-2H-benzopyran-2,4-dione (HL) and its halogenated derivatives (6-XHL; X = F, Cl, Br) were synthesized. Complexes 1–4 have the general formula [Cu(ligand)Cl], complex 5 is [Cu(ligand)(H₂O)(NO₃)], and complexes 6–9 are of the type [Cu(ligand)(NO₃)_x]. Structural characterization and Hirshfeld surface analysis were performed for complexes 5–9.

Anticancer activity was evaluated in vitro against HCT-116 and MDA-MB-231 cancer cell lines, with comparisons to free ligands and healthy PDL-MSC cells. Several complexes showed promising anticancer effects, achieving IC₅₀ values below 5

μM. The three promising complexes 3, 4, and 7 were then more analyzed by DNA binding studies, cell proliferation assay, quantification of cell number and viability, and flow cytometry analyses - phosphatidylserine externalisation analysis and cell cycle analysis.

The financial support of KEGA 013UPJŠ-4/2024 and VEGA 1/0126/23 is gratefully acknowledged. This work was further supported by the project Open Scientific Community for Modern Interdisciplinary Research in Medicine (OPENMED) under Grant ITMS2014+: 313011V455.

[1] Lowndes S.A. et al.: *Neoplasia* 10, 299-310 (2005).

[2] Matos M.J. et al.: *Phytochemicals - Isolation, Characterisation and Role in Human Health*. 113-140 (2015).

[3] Lu. W. et al.: *J. Inorg. Biochem.* 238, 112030 (2023).

2Po15**THERMODYNAMICS OF ¹³⁷Cs ADSORPTION ON PLA, PET, AND PVC MICROPLASTICS**

Vipul Kusumkar¹, Süleyman İnan², Michal Galambos¹, Eva Viglasova¹

¹Comenius University in Bratislava, Faculty of Natural Sciences, Department of Nuclear Chemistry, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovak Republic, kusumkar1@uniba.sk

²Ege University, Institute of Nuclear Sciences, 351 00 Bornova-İzmir, Türkiye

Microplastics have emerged as persistent environmental pollutants with the capacity to adsorb hazardous substances, including radioactive ions such as cesium (Cs⁺) [1]. This study examines the thermodynamic behavior of Cs⁺ adsorption onto three commonly encountered microplastics: polylactic acid (PLA), polyethylene terephthalate (PET), and polyvinyl chloride (PVC). Batch adsorption experiments were conducted at 25 °C, 35 °C, and 45 °C. Distribution coefficient (K_d) values were determined and used to derive thermodynamic parameters based on Arrhenius and Van't Hoff models. Results indicated that Cs⁺ adsorption was enhanced with increasing temperature, confirming an endothermic process (Fig. 1). Among the tested materials, PET exhibited the highest activation energy (59.90 kJ/mol) and entropy change (226.51 J/mol·K), suggesting stronger and more disordered interactions. Conversely, PVC demonstrated the lowest energy values, indicating less stable binding. All adsorption data showed strong correlations with the applied models

($R^2 > 0.89$). These findings underscore the potential role of microplastics in the environmental mobility of radioactive contaminants. Understanding such interactions is essential for accurate environmental risk assessment and for the development of more effective materials and strategies for radioactive waste remediation in aquatic systems.

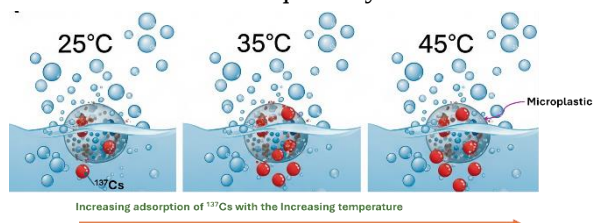


Fig. 1 Graphical presentation of effect of the temperature on the adsorption of the ^{137}Cs .

Funded by the EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No.09I03-03-V05-00012.

[1] Chan K., Zinchenko A.: *Chemosphere* 354, 141725 (2024).

2Po16

DETERMINATION OF SPECIFIC SURFACE AREAS AND TEXTURAL PROPERTIES OF CLAY MINERALS

Miloslav Lhotka, Barbora Doušova

University of Chemistry and Technology, Technická 5,
166 28 Prague, Czech Republic,
miloslav.lhotka@vscht.cz

Porous substances occur in many areas of chemical technology, most often as catalysts, membranes and adsorbents. Clay minerals can be also considered porous materials. Therefore, the knowledge of the basic textural characteristics of these substances. The methods for examining porous materials vary according to the size of the pores. The adsorption methods are preferably used for micro and mesoporous materials, while the Hg-porosimetry for macroporous materials. As the example of clays characterization, the determination of structural characteristics of kaolinite, bentonite and montmorillonite using the adsorption methods. The adsorption isotherms were measured on surface analysers “Micromeritics” using the gas sorption technique. These adsorption isotherms were fitted according the BET method and t-plot method for specific surface area and the pore-size distribution by BJH method and DFT method [1]. In addition, the scanning adsorption isotherms of all the mentioned samples were measured. Scanning isotherms

provide important information about the pore network geometry, including its connectivity and pore size distribution, which cannot be revealed from the main adsorption and desorption isotherms [2]. In conclusion, although there is a wide variety of methods applicable to the clay texture characterization, each method has the limitations, which must be taken into account when evaluating the results.

[1] Brunauer S., Emmet P.H., Teller E.: *J. Am. Chem. Soc.* 60, 309-319 (1938).

[2] Cimino R., Cychosz K.A., Thommes M., Neimark A.V.: *Colloids Surf. A: Physicochem. Eng. Asp.* 437, 76-89 (2013).

2Po17

SYNTÉZA, ŠTRUKTÚRA A BIOLOGICKÉ AKTIVITY MEĎNATÝCH KOMPLEXOV REDUKOVANÝCH SCHIFFOVÝCH BÁZ ODVODENÝCH OD METOXYBENZYLAMÍNŮV

Lucia Lintnerová¹, Peter Herich^{1,2}, Barbora Svitková³, Jindra Valentová¹

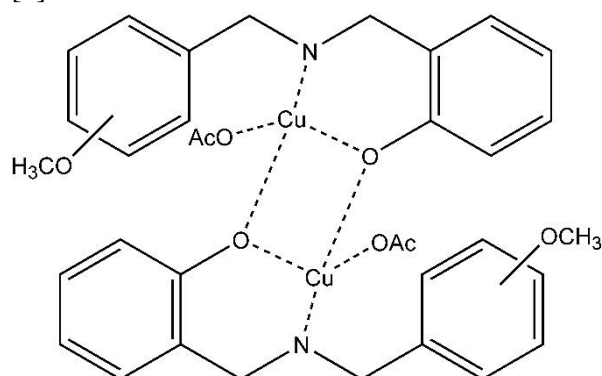
¹Katedra chemickej teórie liečiv, Farmaceutická fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Odbojárov 10, 832 32 Bratislava, Slovensko, lintnerova4@uniba.sk

²Ústav fyzikálnej chémie a chemickej fyziky, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovensko

³Ústav experimentálnej onkológie, Biomedicínske centrum, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 05 Bratislava, Slovensko

Za účelom prípravy meďnatých komplexov boli pripravené tri redukované Schiffove bázy odvodené od salicylaldehydu a 2-, 3- a 4-metoxibenzylamínu (Obr. 1). Redukované Schiffové bázy sú zaujímavou triedou látok skúmanou ako SOD mimetiká, látky schopné viazať a štiepiť DNA a hlavne ako potenciálne neoplastiká [1][2]. Prvým krokom syntézy bola príprava Schiffových báz a následnou redukciou boli získané chemicky stabilné sekundárne amíny. Meďnaté komplexy boli pripravené pomocou octanu meďnatého a z trojice pripravených komplexov, bol komplex odvodený od 3-metoxibenzylamínu vhodný aj na RTG kryštalografiu. Všetky komplexy sa chovali veľmi podobne, čo boli stanovované pomocou UV-Vis, IČ a MS spektroskopie, z čoho vyplýva, že ostatné dva komplexy mali veľmi podobnú štruktúru. V rámci štúdia biologických vlastností bola stanovená ich schopnosť viazať sa na DNA

pomocou absorpčnej titrácie a fluorescenčnej metódy vytesnenia EB. Tiež bola stanovená ich schopnosť viazať sa na BSA a cytotoxicita voči rakovinovým bunkám (A549, HepG2) v porovnaní s HEL fibroblastami. Napriek priemerným väzobným hodnotám voči DNA, mali komplexy IC₅₀ voči HepG2 v rozsahu 33 – 45 μM, voči A549 85 – 124 μM a voči HEL 81 – 136 μM. Významnou aktivitou voči HepG2 oproti zdravým HEL bunkám je pozitívnym výsledkom a predpokladá sa účinok hlavne prostredníctvom tvorby reaktívnych foriem kyslíka (ROS) v bunke [3].



Obr. 1 Štruktúra pripravených komplexov.

Tento výskum bol podporený grantami APVV-23-02349 a VEGA 1/066/24.

- [1] Jia L., Shi J., Sun Z., Li F., Wang Y., Wu W., Wang Q.: *Inorg. Chim. Acta* 391, 121-129 (2012).
- [2] Lintnerová L., Valentová J., Herich P., Kožíšek J., Devínsky F.: *Monatsh. Chem.* 149, 901-911 (2018).
- [3] Rudbari H.A., Saadati A., Aryaeifar M., Blacque O., Cuevas-Vicario J.V., Cabral R., Raposo L.R., Fernandes A.R.: *Bioorg. Chem.* 119, 105556 (2022).

2Po18

HIGHLY EFFICIENT SINGLET OXYGEN GENERATING RE(I) COMPLEXES WITH ONE- AND TWO-PHOTON EXCITATION

Anitha Mathradan¹, Patrik Osuský¹, Rajmohan Rajamani¹, Kenji Kamada², Peter Hrobárik¹

¹Comenius University Bratislava, Faculty of Natural Sciences, Department of Inorganic Chemistry, Ilkovičova 6, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovakia, anithahari491@gmail.com

²Nanomaterials Research Institute (NMRI), National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST) Ikeda, Osaka 563-8577, Japan

Photodynamic therapy (PDT) involves the use of light-activated photosensitizers that selectively accumulate in cancer cells. When exposed to specific wavelengths of light, these photoactive

compounds generate singlet oxygen (¹O₂) from molecular oxygen in its triplet ground state present in the air via intersystem crossing, and the short-lived ¹O₂ species damages tumor cells. Compared to conventional one-photon excitation, two-photon excitation using NIR laser light offers greater spatial selectivity and enables deeper tissue penetration.

In this regard, we present the synthesis of diverse quasi-quadrupolar ligands derived from arylamine-functionalized 2,2'-bibenzothiazoles and bis(benzothiazol-2-yl)ketones, their complexations with ReCl(CO)₅, and photophysical properties of the obtained ReCl(CO)₃(N^N) complexes. The abovementioned ligands exhibit intense intramolecular charge transfer and act as N^N bidentate donors, showing a notably red-shifted absorption upon Re(I) complexation.

A series of arylamine-functionalized 2-*H*-benzothiazoles were synthesized from 6-iodobenzothiazole using a Pd-catalyzed Sonogashira and Suzuki cross-coupling reactions with alkynes and corresponding boronic acids, followed by homocoupling or carbonyl insertion and subsequent metal complexation. The obtained Re(I) complexes were characterized by NMR (¹H, ¹³C) and UV-vis absorption spectroscopies as well as by HRMS. Most of the synthesized compounds show strong singlet oxygen generation potential.

This work has been supported by the Slovak Research and Development Agency (grant no. APVV-21-0503), the Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic (VEGA project no. 1/0669/22), and by the EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No. 09I03-03-V03-00040 (PUSHMAT).

- [1] Marker S.C., MacMillan S.N., Zipfel W.R., Li Z., Ford P.C., Wilson J.J.: *Inorg. Chem.* 57, 1311-1331 (2018).
- [2] Nociarová J., Osuský P., Rakovský E., Georgiou D., Polyzos I., Fakis M., Hrobárik P.: *Org. Lett.* 23, 3460-3465 (2021).
- [3] Osuský P., Nociarová J., Smolíček M., Gyepes R., Georgiou D., Polyzos I., Fakis M., Hrobárik P.: *Org. Lett.* 23, 5512-5517 (2021).

2Po19**APLIKÁCIA POVRCHOVO
MODIFIKOVANÉHO MATERIÁLU UiO-66-
NH₂ KYSELINOU LISTOVOU PRE
CIELENÝ TRANSPORT
PROTINÁDOROVÝCH LIEČIV**

Alexandra Migasová¹, Veronika Huntošová², Xu Li³,
Marco Andreana³, Angelika Unterhuber³, Miroslav
Almáši¹

¹Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických
vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa
Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice,
Slovensko, migasova.alexandra@upjs.sk

²Centrum interdisciplinárnych biovied, Technologický
a inovačný park, Prírodovedecká fakulta, Univerzita
Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Jesenná 5, 041 54
Košice, Slovensko

³Centrum pre medicínsku fyziku a biomedicínske
inžinierstvo, Lekárska Univerzita vo Viedni,
Währinger Gürtel 18-20, 1090 Viedeň, Rakúsko

Povrchová modifikácia nanočastíc kyselinou listovou predstavuje perspektívny prístup v oblasti cieľeného transportu liečiv do nádorových buniek, pretože využíva prirodzenú afinitu kyseliny listovej (FA) k folátovým receptorom nadmerne exprimovaných v mnohých typoch nádorových buniek [1]. Metallo-organická sieť UiO-66-NH₂ poskytuje vhodnú platformu pre takúto funkcionizáciu vďaka vysokej pórovitosti, stabilite a prítomnosti reaktívnych amínových skupín [2].

Materiál UiO-66-NH₂ bol povrchovo modifikovaný molekulami FA (UiO-66-FA). Do pórovitých štruktúr bolo uzavreté protinádorové liečivo 5-fluorouracil (5-FU). Pripravené materiály boli charakterizované dostupnými fyzikálnochemickými metódami a študovala sa schopnosť uvoľňovania liečiva. Zatiaľ čo sa z UiO-66-NH₂ po 24h uvoľnilo 95,29% 5-FU, v simulovanom prostredí nádorových buniek (*pH* = 5,5) sa z UiO-66-FA uvoľnilo len 39,18% 5-FU, čím sa potvrdil potenciál UiO-66-FA pre kontrolované a predĺžené uvoľňovanie liečiva.

Účinnosť 5-FU@UiO-66-NH₂ a 5-FU@UiO-66-FA v bunkách kolorektálneho karcinómu (KRK) bola sledovaná multimodálnym zobrazovaním. Dvojfotónová mikroskopia v týchto bunkách odhalila zmeny v hladinách metabolických koenzýmov NADH a FAD. Navyše boli Ramanovou mikroskopiou pozorované zmeny biomarkerov a molekulárneho metabolizmu. Formulácia 5-FU@UiO-66-FA účinne uvoľňovala 5-FU, ktorý vykazoval vynikajúci inhibičný účinok na proliferáciu študovaných buniek.

Získané výsledky naznačujú veľký potenciál multimodálneho zobrazovania pre analýzu buniek KRK vystavených liečivám dopravených do nádorov v UiO-66-FA.

Výskum bol podporený nasledujúcimi projektovými schémami: APVV BLT SK-AT-23-0001, APVV-23-0097 a čiastočne financovaný EÚ NextGenerationEU prostredníctvom Plánu obnovy a odolnosti SR v rámci projektu BCOrgFluorIDA č. 09I03-03-V04-00007.

[1] Narmani A. et. al.: Drug Dev. Res. 80, 4 (2019).

[2] Timofeev K.L. et. al.: Molecules 28, 9 (2023).

2Po20**DO SCHIFF BASES DERIVED FROM
TRIAZOLE DERIVATIVES EXHIBIT
BIOLOGICAL RELEVANCE AS LIGANDS
IN COORDINATION COMPOUNDS?**

Katarína Michelová¹, Lucia Hudáková², Svitlana
Vitushkina^{3,4}, Rastislav Jendželovský², Juraj Kuchár¹

¹Department of Inorganic Chemistry, Faculty of
Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice,
Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovakia,
katarina.michelova@student.upjs.sk

²Department of Cell Biology, Faculty of Science,
Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Šrobárova 2,
041 54 Košice, Slovakia

³Department of Materials Physics, Institute of
Experimental Physics of the Slovak Academy of
Sciences, Watsonova 47, 040 01 Košice, Slovakia

⁴Department of Applied Chemistry, Faculty of
Chemistry, V.N.Karazin Kharkiv National University,
Svobody Sq. 4, 61022, Kharkiv, Ukraine

Schiff bases, formed by condensing primary amines with aromatic or aliphatic carbonyls, are versatile ligands with strong chelating ability toward 3d metal ions [1]. The 1,2,4-triazole scaffold is recognized for its broad-spectrum biological activities and serves as a core structure in established anticancer drugs [2]. An intriguing research direction involves the study of such complexes in the context of the magnetic behavior of 3d or 4f single-molecule magnets (SMMs), where single-ion anisotropy and coordination geometry play key roles, with Schiff bases providing effective ligand control [3].

For the synthesis of the Schiff bases, 4-amino-3,5-di-2-pyridyl-4H-1,2,4-triazole (abpt) was employed as a multitopic amine ligand, condensed with methoxy-substituted derivatives of salicylaldehyde. Following optimization of synthetic conditions, three novel ligands were successfully obtained. Their characterization was carried out using a combination of spectroscopic techniques (IR, UV-Vis, ¹H and ¹³C NMR),

thermal analysis, elemental analysis, and structural analysis based on X-ray diffraction. Ligands were evaluated for their *in vitro* cytotoxicity using the MTT assay on the human colorectal carcinoma cell line HCT 116 and healthy human colonic fibroblast cell line CCD-18Co. The results demonstrated that the Schiff base incorporating 2-hydroxy-4-methoxybenzaldehyde exhibited the highest cytotoxic activity, while the ligand containing 2-hydroxy-5-methoxybenzaldehyde exhibited the greatest anticancer selectivity.

This research is funded by the European Union NextGenerationEU through the Recovery and Resilience plan for Slovakia under the project No. 09103-03-V01-00051. This work was supported by Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA No. 1/0189/22) and the project Open Scientific Community for Modern Interdisciplinary Research in Medicine (OPENMED) under Grant ITMS2014+: 313011V455.

- [1] Dalia S.A. et al.: *Int. J. Chem. Stud.* 6, 2859-2866 (2018).
- [2] Gichumbi L.M. et al.: *Z. Naturforsch.* 73, 167-178 (2018).
- [3] Panahandehjo S. et al.: *J. Mol. Struct.* 1308, 138086 (2024).

2Po21

EFFECT OF NdF_3 AND Nd_2O_3 ADDITIVES ON THE PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF CRYOLITE-BASED MELTS

Jarmila Mlynáriková, František Šimko

Institute of Inorganic Chemistry SAS, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovak Republic, jarmila.mlynarikova@savba.sk

This study presents a detailed investigation of the density and molar volume of cryolite-based molten systems doped with neodymium compounds NdF_3 and Nd_2O_3 , relevant to metallurgical and electrochemical processes. Four systems were studied: $\text{Na}_3\text{AlF}_6\text{--NdF}_3$, $(\text{NaF--Na}_3\text{AlF}_6)_{\text{eut.}}\text{--NdF}_3$, $\text{Na}_3\text{AlF}_6\text{--Nd}_2\text{O}_3$, and $(\text{Na}_3\text{AlF}_6\text{--NdF}_3)_{\text{eut.}}\text{--Nd}_2\text{O}_3$ over a temperature range of 910–1380 K. Density measurements were carried out using the Archimedes method, revealing a linear decrease in density with increasing temperature, consistent with typical thermal expansion.

The addition of NdF_3 and Nd_2O_3 resulted in increased melt density and decreased molar volume, indicating denser ionic packing and structural modifications. Partial molar volumes of Nd_2O_3 were significantly higher than those of NdF_3 , reflecting distinct structural roles of oxide

and fluoride ions in the melts. Repeated measurements and dual calculation methods ensured data reliability.

These thermophysical properties are crucial for optimizing electrolytic extraction of neodymium and aluminum metals, where controlling melt characteristics impacts process efficiency and product quality. The results provide valuable insights for the design and operation of industrial electrochemical cells containing rare-earth additives.

This work was supported by the Slovak Grant Agency VEGA 2/0046/22.

2Po22

ZIF-8 FUNCTIONALIZED WITH THYMOL AND EUCALYPTOL FOR ANTIBACTERIAL APPLICATIONS

Viktorie Neubertová, Zuzana Kodešová, Zdeňka Kolská

Centre for Nanomaterials and Biotechnology, Faculty of Science, University of Jan Evangelista Purkyně, Pasteurova 3632/15, 400 96 Ústí nad Labem, Czech Republic, viktorie.neubertova@ujep.cz

Metal-organic frameworks such as ZIF-8 are increasingly investigated for antimicrobial applications due to their porous structure and surface tunability. In this study, ZIF-8 was prepared via a simple one-pot method at room temperature and modified *in situ* with thymol and eucalyptol at various concentrations. Fourier transform infrared spectroscopy confirmed successful incorporation of both antibacterial agents into the framework. Zeta potential determinations showed a shift toward less positive values and increased aggregation was observed by dynamic light scattering, both indicating surface modification and changes in colloidal behavior. Nitrogen sorption analysis revealed a concentration-dependent decrease in surface area and pore volume, supporting interaction of the modifiers with the porous matrix. Antibacterial properties were evaluated using the colony forming unit drop plate method against *Escherichia coli* and *Staphylococcus epidermidis*. The activity of the samples prepared with thymol varied depending on the concentration, whereas all samples prepared with eucalyptol showed improved and consistent antibacterial performance compared to unmodified ZIF-8. The results demonstrate that *in situ* functionalization of ZIF-8 with thymol and eucalyptol improves its antibacterial performance, which may be

advantageous for applications in active materials or functional coatings.

The authors acknowledge the assistance provided by the Advanced Multiscale Materials for Key Enabling Technologies project (AMULET), supported by the Ministry of Education, Youth, and Sports of the Czech Republic.

Project No. CZ.02.01.01/00/22_008/0004558, Co-funded by the European Union.

2Po23

SYNTÉZA NANOČÁSTIC STŘÍBRA A ZLATA S LADITELNÝMI PLAZMONICKÝMI VLASTNOSTMI PRO SVĚTLEM INDUKOVANOU PROTINÁDOROVOU TERAPII

Aleš Panáček¹, Lucie Válková², Lucie Hochvaldová¹, Anastasiya Pedan¹, Hana Kolářová², Libor Kvítek¹

¹Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 1192/12, 779 00 Olomouc, ČR, ales.panacek@upol.cz

²Ústav lékařské biofyziky, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3, 779 00 Olomouc, ČR

Světlem indukovaná fototerapie představuje slibnou techniku v protinádorové léčbě a v kombinaci s nanočásticemi (NPs) ušlechtilých kovů představuje účinný způsob léčby nádorových onemocnění. V této výzkumné práci byly syntetizovány nanočástice ušlechtilých kovů s laditelnými plazmonickými vlastnostmi pomocí dvoustupňového redukčního procesu a následně byla ověřována jejich protinádorová fototermální účinnost metodami *in vitro*. Plasmonické anizotropní stříbrné NPs byly syntetizovány dvoustupňovým redukčním procesem, který zahrnoval částečnou redukci komplexního kationtu $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ tetrahydridoboritanem sodným v prvním kroku redukce za vzniku stříbrných zárodků, na kterých následně docházelo k redukci konečných anizotropních částic ve druhém redukčním kroku pomocí hydrazinu. V případě zlatých plazmonických nanočástic zahrnoval první krok syntézu stříbrných zárodků redukcí AgNO_3 pomocí tetrahydridoboritanu sodného. Po přidání roztoku HAuCl_4 byl zahájen druhý redukční krok pomocí kyseliny askorbové.

Pro stanovení protinádorových účinků byly stříbrné a zlaté NPs naneseny na 96jamkovou destičku pomocí elektrostatické samoorganizace částic stříbra a zlata na opačně nabitou polymerní vrstvu. Následně byla vyhodnocována *in vitro* fototermální protinádorová účinnost vůči buňkám lidského karcinomu děložního čípku (HeLa). K

vyvolání fototermálního efektu byly použity laserové zdroje různých výkonů a vlnových délek odpovídajících plazmonickému pásmu kovových NPs. Významný pokles viability byl pozorován u buněk HeLa kultivovaných na destičkách deponovaných jak stříbrnými, tak i zlatými nanočásticemi, které byly vystaveny ozáření různými dávkami energie. Nejvyšší fototermální protinádorový účinek s poklesem viability buněk pod 20 % byl vyvolán pomocí Au NPs ozářených laserem 660 nm (100 mW) při energii ozáření 20 J. Viabilita buněk kultivovaných na neupravených destičkách a vystavených stejným dávkám energie zůstala nezměněna. Na základě získaných výsledků lze konstatovat, že tato neinvazivní technika založená na fyzikálně-chemických vlastnostech plazmonických materiálů by mohla být účinnou a slibnou metodou v boji proti rakovinným onemocněním.

Tento výzkum byl finančně podpořen grantem Univerzity Palackého v Olomouci č. IGA_PrF_2025_022.

2Po24

CÍLENÁ PROTINÁDOROVÁ FOTOTERMÁLNÍ TERAPIE POMOCÍ NANOČÁSTIC ZLATA

Anastasiya Pedan¹, Lucie Válková², Aleš Panáček¹

¹Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 1192/12, 779 00 Olomouc, ČR, nastya.pedan@mail.ru

²Ústav lékařské biofyziky, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotínská 3, 779 00 Olomouc, ČR

Rakovina je skupina onemocnění charakterizovaná mimo jiné zvýšenou proliferační schopností buněk. Od buňky normální se nádorová buňka liší řadou charakteristik, jejichž pochopení je zásadní pro návrh účinné léčby. Fototermální terapie je druh neinvazivní léčby, která může být kombinovaná s řadou dalších konvenčních léčebných postupů a v současné době je velmi intenzivně studovaná v oblasti protinádorové terapie. Cílem této výzkumné práce je syntéza plazmonických zlatých nanočástic s různou velikostí a morfologií na základě řízené jedностupňové či dvoustupňové redukce zlatité soli maltózou, tetrahydridoboritanem sodným a kyselinou askorbovou, následně jejich funkcionalizace sunitinibem, charakterizace a stanovení biologické aktivity vůči nádorovým buňkám HeLa za využití fototermálního efektu.

Byly úspěšně syntetizovány stabilní AuNPs s různou velikostí a morfologií, které byly povrchově modifikovány sunitinibem. Dvoustupňovou redukcí byly připraveny hvězdicovité nanočástice o velikosti 70-90 nm a pomocí jedнокrokové syntézy byly připraveny kulovité částice s velikostí 10 nm a 12 nm pomocí redukce tetrahydridoboritanem sodným, resp. maltosou. Připravené AuNPs včetně jejich stability byly charakterizovány pomocí elektronové mikroskopie, dynamického rozptylu světla, absorpční a infračervené spektroskopie. V případě nanočástic povrchově modifikovaných sunitinibem byl prokázán zvýšený cytotoxický účinek částic zlata oproti částicím nemodifikovaným a rovněž byl prokázán zesílený cytotoxický efekt částic zlata v kombinaci s fototermální účinkem při ozařování laserem o vlnové délce 637 nm.

Tento výzkum byl finančně podpořen grantem Univerzity Palackého v Olomouci č. IGA_PrF_2025_022.

2Po25

PREPARATION AND CHARACTERISATION OF ANTIMICROBIAL NANOMATERIAL BASED ON LAYERED SILICATE AND PHLOXINE B

Marek Pribus¹, Katarína Bilská², Helena Bujdaková², Juraj Bujdák^{1,3}

¹*Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, marek.pribus@savba.sk*

²*Department of Microbiology and Virology, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Ilkovičova 6, 845 36 Bratislava*

³*Department of Physical and Theoretical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Ilkovičova 6, 845 36 Bratislava*

Bacterial biofilms are responsible for 80% of all microbial infections, which treatment, and eradication is difficult [1]. The use of antibiotics is no longer a feasible option for the treatment of biofilm-associated infections due to the development of microbial resistance to antibiotics. Several alternative strategies have been identified to eradicate or inhibit pathogenic microorganisms. One of them is photodynamic inactivation. It requires three components – a photosensitizer, a light source, and molecular oxygen. The photosensitizer is usually immobilized on a carrier, which mediates the interaction between the microbial cells and the photosensitizer [2,3].

This work is aimed at the interaction of phloxine B (PhB) with layered silicate – saponite (Sap). The surface of saponite particles was modified with poly(diallyldimethylammonium) (PDDA) polycations because of the repulsive forces acting between the saponite surface and molecules of photosensitizer. The prepared three-component complex consisting of Sap, PDDAC and PhB was stirred at room temperature, filtered through a Teflon filter, and washed with distilled water to remove unadsorbed dye. In the next step, the liquid polyurethane resin was applied on the surface of PhB/PDDA/Sap film. Then, polyurethane matrix was hardened and the prepared material was characterized by UV-Vis and fluorescence spectroscopy, and used for antimicrobial tests.

This work was supported by the Slovak Academy of Sciences Grant Programme for Postdoctoral Fellows "PostdokGrant" grant No. APD0134.

- [1] Sharma D., Misba L., Khan A.U.: *Antimicrob. Resist. Infect. Control.* 8, 76 (2019).
- [2] Okamoto I., Miyaji H., Miyata S., Shitomi K., Sugaya T., Ushijima N., Akasaka T., Enya S., Saita A., Kawasaki H.: *ACS Omega* 6, 9279-9290 (2021).
- [3] Braz M., Salvador D., Gomes A.T.P.C., Mesquita M.Q., Faustino M.A.F., Neves M.G.P.M.S., Almeida A.: *Photodiagnosis Photodyn. Ther.* 30, 101754 (2020).

2Po26

PRÍPRAVA A CHARAKTERIZÁCIA HETEROŠTRUKTÚR DICHALKOGENIDOV PRECHODOVÝCH KOVŮ

Lenka Pribusová Slušná¹, Peter Nádaždy^{1,2}, Michaela Sojková¹, Jana Hrdá¹, Martin Human¹

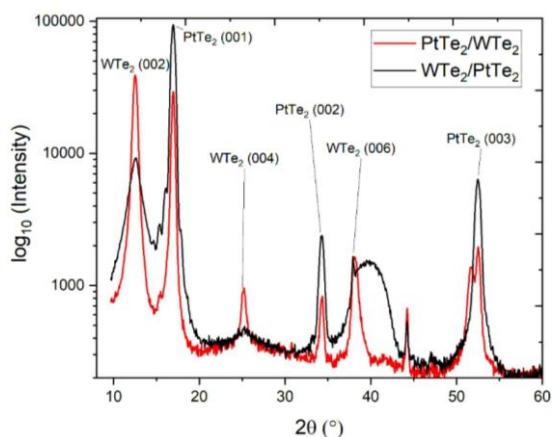
¹*Elektrotechnický ústav SAV, v.v.i., Dúbravská cesta 9, 841 04 Bratislava, slusnal@gmail.com*

²*Fyzikálny ústav SAV, v.v.i., Dúbravská cesta 9, 845 11 Bratislava*

Heteroštruktúry dichalkogenidov prechodových kovov sú systémy van der Waalsových 2D materiálov vytvorené skladaním vrstiev rôznych dichalkogenidov prechodových kovov. Kombinácie materiálov generujú zaujímavé vlastnosti napr. v oblasti spintroniky heteroštruktúry PtTe₂/WTe₂ (efektívne generuje spinovo-orbitálne momenty a umožňuje bezpolové prepínanie kolmo orientovanej magnetizácie - Nature Materials 2024¹). Tieto jedinečné vlastnosti heteroštruktúr PtTe₂ a WTe₂ ich robia mimoriadne vhodnými pre pamäťové zariadenia (MRAM), zariadenia využívajúce

spinovo-orbitálny moment a iné spintronicke aplikácie.

Vzorky boli pripravené priamou reakciou kovov Pt/W pri 600 °C v CVD komore pomocou telurizácie v ochrannnej atmosfére (prúd plynu H_2/Ar s prietokom 100 sccm). Na výrobu vrstvených Pt a W filmov s hrúbkou 3 nm boli platina a volfrám nanosené magnetronovým naprašovaním na c-orientovaný, obojstranne leštený zařirový substrát. Vrstvy boli skúmané pomocou röntgenovej difrakcie (XRD) a Ramanovej spektroskopie. Pre porovnanie kvality a vlastností filmov boli pripravené vzorky WTe_2 / $PtTe_2$ a tiež $PtTe_2$ / WTe_2 . Na Obr. 1 je zobrazený symetrický $2\theta/\theta$ sken hexagonálnej vrstvy $PtTe_2$ a ortorombickej vrstvy WTe_2 . Obe štruktúry boli potvrdené typickými difrakčnými píky charakteristickými pre tieto materiály.



Obr. 1. XRD $PtTe_2$ / WTe_2 a WTe_2 / $PtTe_2$ heteroštruktúr.

Autori ďakujú projektu PostdokGrant APD0021.

[1] Wang F. et al.: *Nat. Mater.* 23, 768-774 (2024).

2Po27

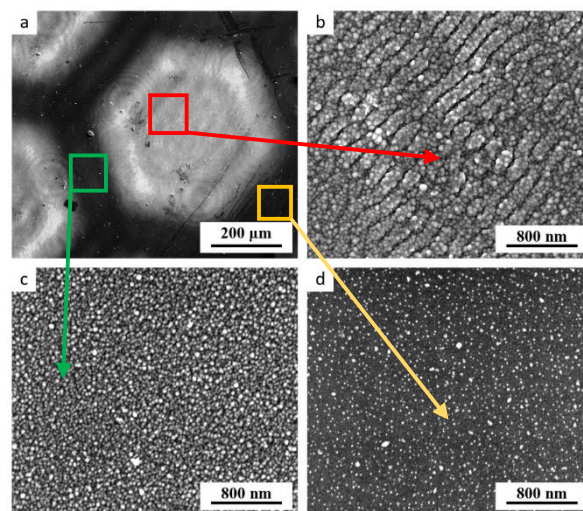
ANTIBAKTERIÁLNI ÚPRAVA POLYMERŇCH FÓLIÍ PEEK POMOCÍ LASEREM VÁZANÝCH STŘÍBRNÝCH NANOČÁSTIC

Jakub Siegel¹, Monika Valovičová¹, Jana
Pryjmaková¹, Miroslav Šlouf²

¹Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola
chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28
Praha, ČR, jakub.siegel@vscht.cz
Ústav makromolekulární chemie, Akademie věd České
republiky, Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha, ČR

Polyetheretherketon (PEEK) patří mezi pokročilé
polymery využívané v medicíně pro svou
biokompatibilitu, mechanickou pevnost a

chemickou odolnost. V této studii jsme navrhli a
realizovali povrchovou úpravu PEEK pomocí
selektivní imobilizace stříbrných nanočástic
(AgNPs) za použití excimerového laseru (248 nm)
[1]. Tímto postupem vznikly šestiúhelníkové
mikrodomény obohacené o AgNPs, které slouží
jako lokální zdroj stříbrných iontů s vysoce
efektivním antibakteriálním účinkem. Povrchy
byly charakterizovány pomocí CLSM, AFM, SEM
a XPS. Antibakteriální testy prokázaly vysokou
účinnost upravených povrchů proti *Escherichia
coli* a *Staphylococcus aureus*, a to i při
koncentracích stříbrných iontů nižších než
minimální inhibiční koncentrace pro tyto patogeny
[2]. Cytotoxikologické hodnocení na plicních
fibroblastech (MRC-5) ukázalo mírnou
cytotoxicitu, což podtrhuje nutnost další
optimalizace struktury, koncentrace AgNPs,
případně jejich velikosti. Laserem indukované Ag-
mikrodomény na PEEK představují slibnou
antibakteriální platformu pro aplikace v dočasných
lékařských pomůckách a implantátech [3].



Obr. 1 Snímky povrchu vzorku s mikrodoménami
stříbra pořízené pomocí rastrovací elektronové
mikroskopie (FEG-SEM). (a) Přehled šestiúhelní-
kových domén se stříbrnými nanočásticemi, (b) detailní
pohled na střed domény s patrnými laserem
indukovanými periodickými strukturami (LIPSS), (c)
okraj domény s rovnoměrně rozptýlenými AgNPs a (d)
oblast mezi doménami, kde je koncentrace nanočástic
výrazně nižší.

Tato práce vznikla za podpory Grantové agentury
České republiky v projektu č. 22-17346S.

- [1] Siegel J., Lyutakov O., Polívková M., Staszek M.,
Hubáček T., Švorčík V.: *Appl. Surf. Sci.* 420, 661-
668 (2017).
- [2] Ning C., Wang X., Li L., Zhu Y., Li M., Yu P.,
Zhou L., Zhou Z., Chen J., Tan G., Zhang Y., Wang
Y., Mao C.: *Chem. Res. Toxicol.* 28, 1815-1822
(2015).

- [3] Pryjmaková J., Vokatá B., Šlouf M., Hubáček T., Martínez-García P., Rebollar E., Slepíčka P., Siegel J.: *Coll. Surf. B.* 242, 114067 (2024).

2Po28

IMPLICATIONS OF SILVER NANOPARTICLES FOR *HELICOBACTER PYLORI* INFECTION: VIRULENCE FACTOR AND SIGNALING

Lucie Suchánková¹, Gernot Posselt², Silja Wessler², Libor Kvítek¹, Aleš Panáček¹

¹Department of Physical Chemistry, Palacky University Olomouc, Czech Republic, lucie.suchankova@upol.cz

²Department of Biosciences and Medical Biology, Paris Lodron University of Salzburg, Austria

Helicobacter pylori infection affects over half of the global population and is linked to chronic gastritis, peptic ulcers, and gastric cancer [1]. The virulence factor Cytotoxin-associated gene A (CagA) plays a pivotal role in pathogenesis by altering host cell morphology and signalling pathways [2]. Conventional antibiotic therapies face increasing challenges due to rising antibiotic resistance. Silver nanoparticles (AgNPs) have emerged as promising antimicrobial agents due to their broad-spectrum activity against resistant bacterial pathogens and their ability to enhance antibiotic efficacy. However, their effects on bacterial pathogenicity factors remain poorly understood. In this study impact of AgNPs on *H. pylori* viability, CagA-mediated host cell responses, and the cytotoxicity of AgNPs on gastric epithelial AGS cells has been investigated [3]. AgNPs inhibited *H. pylori* growth in a dose-dependent manner, while maintaining acceptable viability of AGS cells. Notably, preincubation of *H. pylori* with AgNPs attenuated the CagA-induced morphological changes in infected AGS cells, indicating interference with CagA function. Western blot analysis supported these findings by showing modulation of CagA-related signalling. Our results highlight the potential of AgNPs as a novel therapeutic strategy to combat *H. pylori* infection, especially antibiotic-resistant strains, by targeting both bacterial viability and virulence mechanisms.

The authors gratefully acknowledge the support provided by the Department of Physical Chemistry and inert grant of Palacky University Olomouc.

- [1] Pormohamad A.: *J. Cell Physiol.* 234, 1208-1218 (2019).
[2] Takahashi C.: *Mater. Sci. Eng. C.* 72, 143-149 (2017).

- [3] Hochvaldova L.: *Front. Cell. Infect. Microbiol.* 14, 1-10 (2024).

2Po29

ČASOVĚ ROZLIŠENÁ *IN-SITU* TRANSFORMACE AMORFNIHO UHLIČITANU VÁPENÁTÉHO

Radek Ševčík¹, Petra Mácová¹, Lucie Zárybnická¹, Eva Soukupová², Martin Olbert², Vilém Neděla²

¹Ústav teoretické a aplikované mechaniky Akademie věd České republiky, Prosecká 809, 190 00 Praha, Česká republika, sevcik@itam.cas.cz

²Ústav přístrojové techniky Akademie věd České republiky, Královopolská 147, 612 00 Brno, Česká republika

Uhlíčitan vápenatý (CaCO_3) představuje anorganickou sloučeninu s širokým uplatněním jak v přírodních procesech, tak v mnoha průmyslových aplikacích [1]. Nejběžnější krystalickou nehydratovanou formu CaCO_3 reprezentuje kalcit, dalšími metastabilními krystalickými hydratovanými polymorfy jsou vaterit a aragonit. Ikaite a monohydrát patří mezi typické zástupce krystalických hydratovaných forem [1,2]. CaCO_3 může vzniknout mnoha cestami, mezi které se řadí biomineralizace, karbonatace a syntézy z roztoků [1,2]. Tyto procesy jsou velmi ovlivnitelné okolními podmínkami, přítomností různých aditiv, které významně mění kinetické a termodynamické faktory a mají tedy zásadní vliv na vznik konkrétních forem CaCO_3 a jejich morfologické, mechanické a chemicko-fyzikální vlastnosti [1-3].

Tento příspěvek se věnuje *in-situ* časově rozlišené transformaci amorfního CaCO_3 (ACC) vzniklého během mísení koncentrovaných roztoků solí bez přídavku aditiv na jeho krystalické polymorfy. Pro studium krystalizačních procesů a morfologických změn bylo využito micro-Ramanova spektrometru s imagingovým detektorem a konfokální optická mikroskopie. Získané poznatky budou využity pro bližší pochopení vlivu experimentálních podmínek na strukturu a transformaci ACC, a selekci polymorfů CaCO_3 s ohledem na možné získání kontroly nad chemickou reakcí a návrhem materiálů pro následné aplikace.

Příspěvek vznikl v programu Strategie AV21 „Moc předmětů: Materialita mezi minulostí a budoucností“, podpořeném dotací Akademie věd ČR, jejímž příjemcem je Ústav teoretické a aplikované mechaniky AV ČR a Ústav přístrojové techniky AV ČR.

- [2] Jiang J., Yan P., Liu C., Sun T., Xu S., Li Q.: *Adv. Powder Technol.* 36, 104850 (2025).

- [3] Ševčík R., Pérez-Estébanez M., Viani A., Šašek P., Máčová P.: *Powder Technol.* 284, 265-271 (2015).
 [4] Ševčík R., Šašek P., Viani A.: *J. Mater. Sci.* 53, 4022-4033 (2018).

2Po30

QUASI-QUADRUPOLEAR FURAN- AND THIOPHENE-CORED DERIVATIVES FUNCTIONALIZED WITH BENZOTHAZOLO-OXADIAZABORININE UNITS AS POTENTIAL TWO-PHOTON ABSORBING DYES

Mayuri Karanth Thalekela, Rajmohan Rajamani, Peter Hrobárik

Comenius University, Faculty of Natural Sciences, Department of Inorganic Chemistry, Ilkovičova 6, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovakia, thalekela1@uniba.sk

We synthesized a series of V-shaped dyes derived from furan-2,5-dicarboxylic acid (FDCA) – serving as a renewable building block in various bio-based materials and bioplastics – and *push-pull* benzothiazole-2-amines connected to the diarylamine donor via a π -spacer of varying conjugation length. The corresponding amide-linked benzothiazoles underwent complexation reaction with BF_3 , leading to rigidification of the π -conjugated framework and improved charge-transfer characteristics. In parallel, an analogous series based on commercially available thiophene-2,5-dicarboxylic acid was also synthesized. Both series of quasi-quadrupolar dyes were characterized by multinuclear (^1H , ^{13}C , ^{11}B , and ^{19}F) NMR, UV-vis absorption and emission spectroscopies as well as by HRMS spectrometry. Additionally, the molecular structure of one of the furan-cored products was also confirmed by X-ray crystallography. The obtained boronated heteroarenes bearing terminal arylamine substituents emit light in the red to the deep-red spectral range, exhibit significant Stokes shifts ($\sim 4000\text{--}7000\text{ cm}^{-1}$), while derivatives with extended π -conjugation are anticipated to exhibit large TPA cross-sections ($> 1000\text{ GM}$) in the near-infrared region, as predicted by our quadratic response time-dependent DFT calculations. Therefore, our future work will focus on characterizing the nonlinear optical (NLO) properties of these dyes using femtosecond laser Z-scan measurements.

This work has been supported by the Slovak Research and Development Agency (grant no. APVV-21-0503), the Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic (VEGA project no. 1/0669/22), and by

the EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No. 09I03-03-V03-00040 (PUSHMAT). Dr. Rajamani also acknowledges the support from the Postdoctoral Grant of the Comenius University (GUKPOST, grant no. 09I03-03-V05-00012).

- [1] Morales-Huerta J.C., de Ilarduya A.M., Muñoz-Guerra S.: *Polymer* 87, 148-158 (2016).
 [2] Potopnyk M.A., Volyniuk D., Luboradzki R. et al.: *J. Org. Chem.* 84, 5614-5626 (2019).
 [3] Hrobárik P., Hrobáriková V., Sigmundová I. et al.: *J. Org. Chem.* 76, 8726-8736 (2011).

2Po31

VPLYV HIERARCHICKEJ PÓROVITOSTI MATERIÁLU HKUST-1 A JEJ DOPAD NA KATALYTICKÉ VLASTNOSTI V KNOEVENAGELOVEJ KONDENZÁCII

Nikola Vargová¹, Nikolas Király¹, Rastislav Serbin², Gabriela Zelenková³, Tomáš Zelenka³, Vladimír Zelenák¹, Miroslav Almáši¹

¹*Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovensko, nikola.vargova2@student.upjs.sk*

²*Katedra analytickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovensko*

³*Katedra chémie, Prírodovedecká fakulta, Ostravská Univerzita, 30. Dubna 22, CZ-702 00 Ostrava, ČR*

Kovovo-organické siete (MOF, metal–organic frameworks) predstavujú hybridné materiály, ktoré pozostávajú z anorganickej zložky premostenej organickými ligandami. Vďaka ich vysokej špecifickej povrchovej ploche a ľaditeľnej veľkosti pórov nachádzajú široké uplatnenie v oblastiach, ako je heterogénna katalýza [1].

Táto práca popisuje syntézu a charakterizáciu mikropórovito/mezopórovitých materiálov HKUST-1(A) a HKUST-1(B), pripravených solvotermálnou metódou, za použitia rôznych koncentrácií surfaktantu CTAB. Po homogenizácii zmesi nasledovala tepelná úprava materiálov pri 75 °C počas 24 hodín. Vzniknuté modré kryštály boli prefiltrované, premyté DMF a následne viacstupňovo purifikované.

Úspešná syntéza, aktivácia a odstránenie surfaktantu z oboch materiálov boli potvrdené infračervenou spektroskopiou. Adsorpčné merania preukázali, že HKUST-1(A) obsahuje mikro- aj mezopóry, zatiaľ čo HKUST-1(B) prevažne mezopóry. Hodnoty BET špecifického povrchu sú 1534 m² g⁻¹ pre HKUST-1(A) a 1709 m² g⁻¹ pre

HKUST-1(B). Výsledky preukazujú, že hierarchickú pórovitosť je možné dosiahnuť templátovou stratégiou, kde mezopóry vznikajú v rámci mikropórovitej štruktúry.

Katalytická aktivita materiálov bola skúmaná na Knoevenagelovej kondenzácii benzaldehydu s malononitrilom, pričom sa optimalizovali podmienky ako rozpúšťadlo, teplota a množstvo katalyzátora. Následne sa skúmal vplyv elektrónakceptorých a alkylových substituentov v rôznych polohách vzhľadom na karbonylovú skupinu. V celkovom porovnaní materiál HKUST-1(B) preukázal vyššiu katalytickú účinnosť ako HKUST-1(A).

Výskum bol podporený príslušnými grantovými schémami VEGA 1/0058/25, VEGA 1/0442/25.

[1] Yang D., Gates B.C.: *ACS Catal.* 9, 1779-1798 (2019).

2Po32

CATALYTIC PERFORMANCE OF Fe-LOADED ZEOLITE BETA IN FINE CHEMICAL SYNTHESIS: ACETALIZATION, CYCLIZATION AND ESTERIFICATION STUDIES

Martin Zapletal, Eliška Vyskočilová, Eva Vrbková

Department of Organic Technology, University of Chemistry and Technology Prague, Technická 5, 166 28 Prague 6 – Dejvice, Czech Republic, martin.zapletal@vscht.cz

Zeolite BETA catalysts modified with varying iron loadings (1, 5, and 10 wt%) were synthesized by wet impregnation method using iron(III) nitrate and tested for their catalytic performance in three reactions: the acetalization of heptanal with ethylene glycol to produce 2-hexyl-1,3-dioxolane, the esterification of lauric acid with methanol to form methyl laurate, and the Prins cyclization of citronellal to yield isopulegol. A significant enhancement in catalytic activity was observed for iron-modified zeolite BETA across all reactions. The catalyst with 1 wt% iron loading achieved over 90% conversion in both the esterification and acetalization reactions within 5 hours. In these two reactions, iron loading had minimal influence on catalytic performance. However, in the Prins cyclization of citronellal, a clear trend of increased catalytic activity with decreasing iron content was noted, with the 1 wt% Fe-loaded material achieving 70% citronellal conversion after 24 hours.

The physicochemical properties of the prepared materials were comprehensively characterized using techniques such as XRD, XRF, UV-Vis spectroscopy, temperature programmed desorption and reduction, laser light scattering, and nitrogen physisorption.

2Po33

VLIV TYPU PLNIVA NA MECHANICKÉ VLASTNOSTI GEOPOLYMERŮ VYSTAVENÝCH TEPELNÉMU ZATĚŽOVÁNÍ

Lucie Zárybnická¹, Ivana Perná², Petra Mácová¹, Radek Ševčík¹, Monika Šupová²

¹Ústav teoretické a aplikované mechaniky Akademie věd České republiky, Prosecká 809, 190 00 Praha, Česká republika, zarybnicka@itam.cas.cz

²Ústav struktury a mechaniky hornin Akademie věd České republiky, V Holešovičkách 41, 182 09 Praha, Česká republika

Stavební průmysl čelí nedostatku zdrojů, emisím uhlíku a problémům s produkcí odpadu. Tradiční stavební materiály, jako je beton na bázi portlandského cementu, přispívají k významné uhlíkové stopě [1]. Tyto materiály jsou pro svou všestrannost, i přesto široce používány. Ačkoli obecně vykazují dobrou tepelnou odolnost, vede dlouhodobá expozice při vysokých teplotách (nad 350 °C) k jejich degradaci a ztrátě strukturální integrity způsobené fyzikálně-chemickými změnami cementových fází [2].

Ve srovnání s portlandskými cementy, poskytují geopolymery výborné fyzikálně-mechanické vlastnosti i po expozici vysokým teplotám. Geopolymery se navíc vyznačují širokým aplikačním potenciálem a zároveň umožňují využití odpadních materiálů při jejich výrobě [3].

Cílem studie bylo vyhodnotit dopad použití různých typů plniv (křemičité písky, kordierity) a teplotního zatížení (v rozsahu 100–1000°C) na mechanické vlastnosti výsledných geopolymerních materiálů. Bylo zjištěno, že vzorky geopolimerů vykazovaly kompaktnější mikrostrukturu než vzorky na bázi Portlandského cementu, což se projevilo ve vyšší mechanické odolnosti při teplotní expozici. Nejlepší mechanické charakteristiky byly naměřeny pro vzorky geopolimerů obsahující kombinaci plniv. Získané výsledky mohou být cenným materiálem pro průmyslové aplikace.

Príspevok vznikl v rámci řešení programu Strategie AV21 „Moc předmětů: Materialita mezi minulostí a budoucností“, podpořeném dotací Akademie věd ČR,

jejímž příjemcem je Ústav teoretické a aplikované mechaniky AV ČR a dále za podpory obou zapojených institucí (RVO 67985891, RVO 68378297).

- [1] Ma Q., Guo R., Zhao Z., Lin Z., He K.: *Constr. Build. Mater.* 93, 371-383 (2015).
- [2] Mishra J., Nanda B., Patro S.K., Krishna R.S.: *Constr. Build. Mater.* 417, 135242 (2024).
- [3] Barbosa V.F.F., MacKenzie K.J.D.: *Mater. Res. Bull.* 38, 319-331 (2003).

2Po34

COMPOSITE MATERIALS BASED ON MMM-UiO-66-Zr AND MMM-UiO-66-NH₂-ZR FOR AMOXICILLIN DELIVERY

Lucie Zelená^{1,2}, Luboš Zauška¹, Eva Kinnertová², Tomáš Zelenka², Miroslav Almáši¹

¹Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, P. J. Šafárik University, Moyzesova 11, SK-041 01 Košice, Slovak Republic, lucie.zelena@student.upjs.sk

²Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Ostrava, 30. dubna 22, CZ-702 00 Ostrava, Czech Republic

Amoxicillin is a broad-spectrum β -lactam antibiotic widely used to treat bacterial infections. However, its chemical instability in acidic environments significantly reduces its therapeutic efficacy when administered orally. Drug delivery systems that protect acid-sensitive drugs during passage through the stomach and enable targeted release in the intestine are very interesting solutions to this problem.

This study investigates composite carriers based on hierarchically porous carbon monoliths (HPCM) combined with metal-organic frameworks (MOFs), specifically UiO-66 and UiO-66-NH₂. The composites were synthesized by in-situ method, allowing MOF crystals to grow directly within the porous carbon structure. Scanning electron microscopy confirmed homogeneous MOF distribution, with morphology varying by MOF type.

Amoxicillin release was studied at 37 °C and 42 °C in simulated gastric (pH 2) and intestinal (pH 7–8) environments over 24 hours using UV-VIS spectrophotometry. In acidic conditions, only ~20% of the drug was released from the composites, while nearly 100% was released from pure MOFs, indicating premature drug loss. In contrast, composites retained most of the drug until reaching neutral pH, where controlled release occurred.

These results highlight the ability of composites to protect acid-sensitive drugs and ensure targeted release, thereby improving therapeutic outcomes compared to pure MOF materials.

Funded by the EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No. 09I03-03-V02-00021.

- [1] Nauta K., Ho T., Ellermeier C.: *mBio* 12, e00179-21 (2021).
- [2] Lopes-de-Campos D., Pinto R., Lima S., Santos T.: *Int. J. Nanomedicine*. 14, 2781-2795 (2019).
- [3] Tiwari G., Tiwari R., Bannerjee S., Bhati L., Pandey S., Pandey P.: *Int. J. Pharm. Investig.* 2, 2-11 (2021).

2Po35

USE OF ALUMINOSILICATE-FLY ASH COMPOSITES IN WATER TREATMENT

Barbora Doušová, Eva Bedrnová, Miloslav Lhotka, Kateřina Maxová, Lukáš Pilař, David Koloušek

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

Preparation of composite adsorbents from waste products represents new discipline for possible obtaining broad-selective adsorbents thanks to the combination of properties of all participating components [1].

The composite adsorbents were prepared as dry mixtures of aluminosilicates (AL), specifically kaolin, bentonite and brick dust, with fly ash (FA) from biomass combustion in the weight ratio of 1:1. The suspension of each mixture with distilled water was agitated in the batch manner at 20 and 60 °C for 24 hours. The identical suspension was aged in autoclave at 110 °C for 5 days. Each suspension was filtered off, dried at 60 °C and homogenized. The source materials and composites were tested for the separate adsorption of cations (Pb²⁺, Cd²⁺) and anions (AsO₄³⁻, CrO₄²⁻), and for the cation and anion co-adsorption from model solution.

The adsorption potential of composites was in co-adsorption of differently charged ions, where up to 50% higher adsorption yield was generally achieved compared to the adsorption of a separate ion. In the case of anions, the presence of oppositely charged ion enhanced the adsorption yield up to five fold [2,3]. The other benefit of AL-FA composites was observed in increased homogeneity compared to the individual material.

This work was supported by the projects: No. TH79020001 "ABTOMAT2022 (Technology Agency of

the Czech Republic); No. TN02000025 “NCE II – 1. Energy conversion” (Technology Agency of the Czech Republic).

- [1] Han, H. et al.: *J. Hazard. Mater.* 369, 780-796 (2019).
- [2] Doušová, B. et al.: *App. Clay Sci.* 255, 107395. 7 p (2024).
- [3] Doušová, B. et al.: *Appl. Sci.* 14, 5358, 14 p (2024).

2Po36

COVALENT SURFACE FUNCTIONALIZATION OF BLACK PHOSPHORUS WITH COBALT(II) MACROCYCLIC SMMs

Eva Zahradníková, Ivan Nemec

*Department of Inorganic Chemistry, Faculty of
Science, Palacky University, 17. listopadu 12, CZ-771
46 Olomouc, Czech Republic,
eva.zahradnikova01@upol.cz*

Black phosphorus (BP) is a two-dimensional material with a layer-dependent band gap and high carrier mobility, making it a promising candidate for future electronic and spintronic applications. [1] However, its extreme sensitivity to ambient conditions severely limits its practical use. This project aims to passivate BP using Single-Molecule Magnets (SMMs) to both protect its surface and tailor its electronic and magnetic properties. [2, 3] We focus on two anchoring

strategies: non-covalent interactions and covalent bonding between SMMs and the phosphorus atoms of BP. Among the SMMs designed for this purpose, particular attention is given to Co(II)-based complexes with macrocyclic ligands. These ligands offer superior stability and well-defined geometries, enabling strong, durable interactions with BP. The macrocyclic effect not only enhances the chemical robustness of the complexes but also promotes large magnetic anisotropy - key for SMM performance. The use of such macrocycle-based SMMs is expected to yield stable hybrid materials suitable for further physical studies. Ultimately, this project will provide new insights into the functionalization of BP and demonstrate the potential of molecular magnetism for next-generation device architectures involving low-dimensional materials.

This work was supported by the project GAČR 25-16980S.

- [1] Akhtar, M., Anderson, G., Zhu, C., et al.: *2D Mat. App.*, **1**, 2397 (2017).
- [2] Ryder, C.R., Wood, J.D., Wells, S. A., et al.: *Nat. Chem.*, **8**, 597 (2016).
- [3] Guo, F.S., Day, B.M., Childs, S.L., et al.: *Science*, **362**, 1400 (2018).

POSTERY - SEKCIA 3

ORGANICKÁ CHÉMIA A POLYMÉRY

3Po01

TRIMEDOXIME ANALOGS AS PROMISING CANDIDATES FOR REACTIVATING CHOLINESTERASES INHIBITED BY ORGANOPHOSPHATES

Sara Benesova¹, Adela Fuchsova¹, Zuzana Kohoutova¹, Barbora Krizova¹, Rudolf Andrys¹, Kamil Musilek^{1,2}, David Malinak^{1,2}

¹University of Hradec Kralove, Faculty of Science, Department of Chemistry, Rokitanskeho 62, 500 03 Hradec Kralove, Czech Republic, sara.benesova@uhk.cz

²University Hospital in Hradec Kralove, Biomedical Research Centre, Sokolska 581, 500 05 Hradec Kralove, Czech Republic

Organophosphorus compounds, synthetic esters of phosphoric acid, are extensively used as agrochemical insecticides and have been weaponized in chemical warfare and terrorist incidents [1]. Their toxicodynamic mechanism includes the irreversible phosphorylation of serine residue in the active site of cholinesterases. Leading to disruption of cholinergic neurotransmission and the development of acute cholinergic syndrome [2]. The therapeutic treatment involves the administration of nucleophilic oxime reactivators, which facilitate the dephosphorylation of inhibited cholinesterase, thus restoring its enzymatic function [3]. The reactivation efficacy of oximes used in clinical practice is significantly limited by their hydrophilic nature, resulting in decreased permeability through the blood-brain barrier. Furthermore, no available reactivator exhibits a broad-spectrum reactivation efficiency against various structural variants of nerve paralytic agents (e.g. sarin, soman, tabun, etc.) [3]. We present the design and development of structurally modified oxime reactivators, derived from the clinically used trimedoxime. The modifications aim to increase nucleophilicity of oximes moiety and improve the blood-brain barrier permeability. These new compounds are expected to exhibit potential ability to reactivate a broad spectrum of organophosphate-inhibited cholinesterases.

This work was supported by the University of Hradec Kralove (No. SV2113-2025) and Czech Science Foundation (No. GA25-15339S).

[1] Musilek K. et al.: Handbook of Toxicology of

Chemical Warfare Agents (Third Edition). 1161-1177 (2020).

[2] Malinak D. et al.: Curr. Org. Chem. 22, 1619-1648 (2018).

[3] Kohoutova Z. et al.: Bioorg. Chem. 153, 107904 (2024).

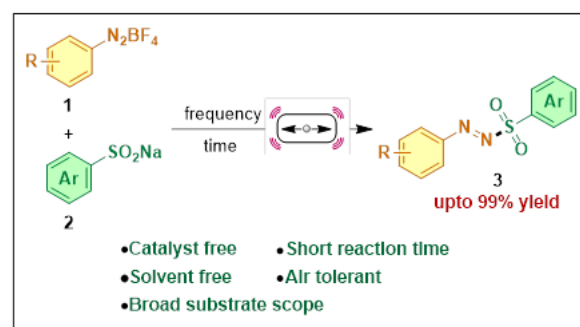
3Po02

MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS OF AZASULFONES

Rahul Das, Samuel Andrejčák, Michal Májek

Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University Bratislava, Ilkovičova 6, 842 15, Bratislava IV, Slovak Republic, das3@uniba.sk

Azasulfones serve as a stable surrogate for diazonium salts. In organic chemistry, they are widely used for transition metal or visible light catalyzed C–H functionalization [1]. The traditional approach for azasulfone synthesis requires trapping of diazonium ion, generated by the diazotization of aryl amines under aqueous solution, by aryl sulfinate salt. However, modern methods involve either oxidation of arylsulfonylhydrazones with various oxidants [2] or transition metal (Rh) catalyzed nitrene transfer from hypervalent iodine to aryl amines [3].



Scheme. 1 Mechanochemical synthesis of azasulfones.

In this study, we described a single-step mechanochemical synthesis of azasulfones **3** starting from aryl diazonium salt **1** and readily available aryl sulfinate salt **2** (Scheme 1). This reaction is tolerant to a wide range of functional groups, with isolated yields up to 99%. The successful elimination of metal catalyst and solvent makes this methodology much more sustainable than any other existing protocol. Further, the practicality of this protocol was demonstrated through a gram-scale synthesis (5.6 mmol scale), resulting in an excellent 90% yield of azasulfone product. The mechanistic investigations revealed that the reaction partially proceeds via a radical intermediate formed by

single electron transfer from sulfinic salt to the diazonium salt. We employed spectroscopic and computational analyses to provide insight about the process and its selectivity.

This work was supported by the European Union (ERC, CAPELE, 101078608) and Comenius University Grant (UK/1324/2025).

- [1] Chawla R., Singh, A.K., Dutta P.K.: *Org. Biomol. Chem.* 22, 869-893 (2024).
- [2] Phadnis N., Molen J.A., Stephens S.M., Weierbach S.M., Lambert K.M., Milligan J.A.: *J. Org. Chem.* 89, 5841-5845 (2024).
- [3] Ito M., Tanaka A., Higuchi K., Sugiyama S.: *Eur. J. Org. Chem.* 2017, 1272-1276 (2017).

3Po03

DESIGN AND APPLICATION POTENTIAL OF UNSYMMETRICAL DIARYLETHENES IN ADVANCED MATERIALS

Juraj Filo, Lenka Dzurňáková, Martin Kovalčín, Sofia Huliár, Peter Magdolen, Ivica Sigmundová, Marek Cigán

Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Ilkovičova 6, 841 01 Bratislava, Slovakia, juraj.filo@uniba.sk

Diarylethenes (DAEs) are among the most promising photochromic molecular switches due to their excellent thermal stability, high fatigue resistance, and efficient reversible photoisomerization. In solution, the open-ring isomer of DAEs typically exists as an equilibrium mixture of parallel (P) and antiparallel (A) conformers, with only the A form being photochemically active [1]. This conformational distribution inherently limits the maximum photocyclization efficiency to approximately 50%.

In our recent study, we report that the incorporation of a benzothiazole moiety into the DAE induces a strong conformational preference for the antiparallel form [2]. This structural modification effectively eliminates the inactive P conformer, resulting in a significant enhancement of the photocyclization quantum yield up to 86%. These findings allow quantitative photoswitching between isomers and underscore the potential of heteroaromatic substitution as a powerful strategy to enhance the photochemical performance of DAE-based molecular switches.

Preliminary results further suggest high applicability of these derivatives as regulatory elements in advanced materials such as metasurfaces, holographic photopolymers, and as building blocks for molecules used in high-resolution bioimaging applications.

This project was financially supported by Scientific Grant Agency of the Slovak Republic, VEGA 1/0664/25.

- [1] Irie M.: *Diarylethene Molecular Photoswitches: Concepts and Functionalities*; Wiley-VCH: Weinheim, p. 2, (2021).
- [2] Bovoloni M., Filo J., Sigmundová I., Magdolen P., Budzák Š., Procházková E., Tommasini M., Cigán M., Bianco A.: *Phys. Chem. Chem. Phys.* 24, 23758-23768 (2022).

3Po04

PRÍPRAVA (KO)POLYMÉROV NA BÁZE FURÁNU POMOCOUI RIADENEJ RADIKÁLOVEJ FOTOPOLYMERIZÁCIE

Mária Gurská¹, Anita Eckstein-Andicsová¹, Ivana Šurinčíková¹, Anna Vykydalová¹, Katarína Mosnáčková¹, Jaroslav Mosnáček^{1,2}

¹Ústav polymérov SAV, v. v. i., Dúbravská cesta 5779/9, 845 41 Bratislava, maria.gurska@savba.sk

²Centrum pre využitie pokročilých materiálov SAV, v. v. i., Dúbravská cesta 5807/9, 845 41 Bratislava

Príprava (ko)polymérov na báze furánu prostredníctvom riadenej radikálovej fotopolymerizácie predstavuje perspektívny prístup k vývoju udržateľných polymérnych materiálov. Furánové monoméry, syntetizované z obnoviteľného 5-(hydroxy-metyl)furfuralu ponúkajú ekologicky priaznivú alternatívu k monomérom získaných z fosílnych surovín [1]. Polyméry pripravené z furánových monomérov ponúkajú environmentálne výhody, ako sú zníženie uhlíkovej stopy a biologická odbúrateľnosť, pričom ich mechanické a funkčné vlastnosti sú často porovnateľné, alebo dokonca prevyšujú vlastnosti polymérov na báze fosílnych surovín. Vďaka týmto vlastnostiam sú vhodné na rôzne technické a priemyselné aplikácie [2]. Táto práca sa zameriava na syntézu (ko)polymérov s presne definovanou štruktúrou prostredníctvom fotoindukovanej radikálovej polymerizácie s prenosom atómu (Photo-ATRP) [3]. Tento prístup umožňuje kontrolu nad molárnou hmotnosťou, nízkou disperzitou a presným nastavením architektúry polymérov. Optimalizované reakčné podmienky zabezpečujú účinnú polymerizáciu furánových monomérov a ich kopolymerizáciu s ďalšími monomérmi, čím sa dosahuje široké spektrum nových polymérnych materiálov. Hlavným cieľom tejto štúdie je systematická optimalizácia polymerizačných podmienok a dosiahnutie vysokej úrovne kontroly nad molárnou hmotnosťou a štruktúrou výsledných (ko)polymérov. Okrem základnej syntézy a fyzikálno-chemickej charakterizácie sa táto práca zameriava aj na funkčnú modifikáciu

pripravených furánových (ko)polymérov čo umožňuje využiť ako nosičov fluorescenčných značiek alebo liečiv prostredníctvom postmodifikačných reakcií. Táto štúdia tak prispieva k rozšíreniu možností vo vývoji funkčných, udržateľných polymérnych materiálov vhodných pre aplikácie v oblasti materiálového inžinierstva, biomedicíny a ďalších high-tech oblastí.

Výskum práce bol financovaný z grantov: VEGA 2/0137/23, APVV-23-0401 a APVV-23-0534.

- [1] Lalanne L., Nyanhongo G.S., Guebitz G.M., Pellis A.: *Biotechnol. Adv.* 48, 107707 (2021).
- [2] Bielski R., Gryniewicz G.: *Green Chem.* 23, 7458-7487 (2021).
- [3] Zain G., Bondarev D., Doháňošová J., Mosnáček J.: *ChemPhotoChem* 3, 1138-1145 (2019).

3Po05

POLYMERIC MEMBRANES AND COMPOSITES FOR CO₂ CAPTURE AND SEPARATION

Kateřina Hamalová, Viktorie Neubertová, Zdeňka Kolská

Faculty of Science, Centre for Nanomaterials and Biotechnology, Jan Evangelista Purkyně University in Ústí nad Labem, Pasteurova 15, 400 96 Ústí nad Labem, Czech Republic, katerina.hamalova@ujep.cz

The development of advanced polymeric materials for carbon dioxide capture remains a key research focus in the context of reducing the impact of climate change. Mixed matrix membranes (MMMs), which combine the advantages of polymers and functional fillers, offer a promising way to improve separation performance. In our recent work, we demonstrated that poly(ether-block-amide) (PEBA) membranes doped with various amine compounds can significantly improve CO₂ sorption and selectivity. Optimal performance was achieved using tetraethylenepentamine (TEPA) and hexadecylamine (HDA) at low concentrations, where the interactions between the functional groups played a more significant role than the surface area [1].

Based on these findings, our current research focuses on incorporating deep eutectic solvents (DESs) and inorganic nanoparticles into styrene-butadiene-styrene (SBS) block copolymer membranes. The aim is to develop a versatile membrane platform for CO₂ separation and volatile organic compounds (VOCs) removal. Our focus is on using DESs to modify both the

membrane matrix and filler surfaces to achieve tunable properties.

This research aims to expand the design options for polymer-based membranes and support the development of efficient and sustainable separation systems based on environmentally friendly principles and multifunctional composite materials.

The authors acknowledge the assistance provided by the project UJEP-SGS-2023-53-002-3 and by the Advanced Multiscale Materials for Key Enabling Technologies project, supported by the Ministry of Education, Youth, and Sports of the Czech Republic. Project No. CZ.02.01.01/00/22_008/0004558, Co-funded by the European Union.

- [1] Hamalová K., Neubertová V., Vostiňáková M., Fíla V., Kolská Z.: *Mater. Lett.* 333, 133695 (2023).

3Po06

SIGNIFICANT INCREASE IN CYTOTOXICITY AND ANTIFUNGAL ACTIVITY OF QUINAZOLINONE LIGANDS UPON Cu(II) COORDINATION

Jana Hricovíniiová¹, Peter Hergott^{2,3}, Renáta Vadkertiová⁴, Eva Horváthová³, Zuzana Hricovíniiová⁴

¹*Department of Cell and Molecular Biology of Drugs, Faculty of Pharmacy, Comenius University, 832 32 Bratislava, Slovakia*

²*Department of Genetics, Faculty of Natural Sciences Comenius University, 842 15 Bratislava, Slovakia*

³*Cancer Research Institute, Biomedical Research Center, Slovak Academy of Sciences, 845 05 Bratislava, Slovakia*

⁴*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, 845 38 Bratislava, Slovakia, chemhric@savba.sk*

Quinazolinones are privileged scaffold in medicinal chemistry [1]. Being inspired by the current interest in quinazolinones as anticancer and antimicrobial agents, the cytotoxic and antifungal activity of quinazolinone Schiff bases and their Cu(II) complexes were investigated. The aim of the study was to find agents with dual activity because such compounds are particularly useful in the treatment of cancer patients with overall therapy-induced immuno-suppression.

Quinazolinone ligands and Cu(II) complexes were synthesized and characterized by various spectroscopic techniques [2,3]. Compounds were screened for cytotoxicity against a panel of cancer cell lines (Caki-1, HT-29, HepG2, THP-1, MCF-7) and non-tumorigenic (MCF-10a) cells by MTT assay. Cytotoxicity screening indicate that ligands had only moderate antiproliferative effect, however, the Cu(II) complexes exhibited

significant anticancer activity. The antifungal properties were evaluated against a panel of yeast strains to compare the effect of ligand and respective Cu(II) complex. The species studied included pathogenic yeast of human origin and the most common food spoilage yeasts (e.g. *Candida albicans*, *C. glabrata*, *C. parapsilosis*, *Zygosaccharomyces bailii*, *Zyg. rouxii*, *Pichia membranifaciens*). The ligands and complexes tested were able to inhibit yeast growth to different extents. The results suggest that Cu(II) complexes represent new potential drug candidates with anticancer and antimicrobial properties.

This work was financially supported by Slovak grant agency VEGA projects 2/0071/22 and 2/0151/22.

- [1] Uddin M.N., Ahmed S.S. et al.: *J. Coord. Chem.* 73, 3109-3149 (2020).
 [2] Hricovíniová Z., Hricovíni M.: *Chem. Pap.* 72, 1041-1053 (2018).
 [3] Gurgul I., Hricovíniová J., Mazuryk O. et al.: *Inorganics* 11, 391 (2023).

3Po07 BINAPHTHYL AZOSWITCHES WITH A THREE-ATOM BRIDGE

Lukáš Huska, Iveta Kmentová, Martin Putala

Comenius University, Faculty of Natural Sciences,
 Department of Organic Chemistry, Ilkovičova 6, 842
 15 Bratislava, Slovenská republika,
 huska.work@mailfence.com

Binaphthyl azoswitches are a type of chiroptical photoswitches based on a chiral binaphthyl unit and a photoswitchable azobenzene (diazene) moiety. These switches have potential applications in medicine (as fluorescent probes) and materials chemistry (as self-assembling molecules, molecular films, and polymers) [1,2].

A particularly intriguing modification of these systems is the macrocyclic arrangement, in which both aryl groups of the azobenzene moiety are connected to both naphthyl rings of the binaphthyl unit via two so-called bridges, forming a macrocycle. This structure facilitates *E*-to-*Z* isomerization and enhances photoswitching efficiency.

Several photoswitches of this type have been described in the literature, and the effects of side chains, bridge length, and the mode of connection of individual parts on the chiroptical properties have been studied [3].

In this work will be presented the synthesis of new macrocyclic binaphthyl azoswitches, as well as the influence of various three-atom bridges on their photoswitchable properties (Fig. 1).

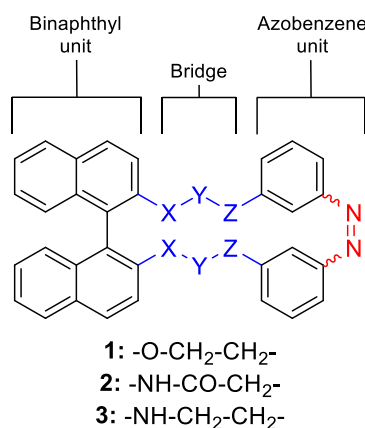


Fig. 1 General structure of the synthesized binaphthyl azoswitches.

This study was financially supported by the Research and Development Agency of the Slovak Republic under contract No. APVV-23-0529.

- [1] Cheng H.-B., Zhang S., Qi J., Liang X.-J., Yoon J.: *Adv. Mater.* 33, 2007290 (2021).
 [2] Barrett C.J., Mamiya J., Yager K.G., Ikeda T.: *Soft Matter.* 3, 1249-1261 (2007).
 [3] Takaishi K., Kawamoto M.: *Molecules* 16, 1603 (2011).

3Po08 MECHANOCHEMICAL SITE-SELECTIVE BROMINATION OF ACTIVATED NAPHTHALENES

Subhro Chatterjee, Pramod Kumar, Martin Putala

Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural
 Sciences, Comenius University, Ilkovicova 6, 842 15
 Bratislava, Slovakia, pathak2@uniba.sk

Mechanochemistry, a solvent-free technique aligning with green chemistry principles, is gaining prominence for its environmental benefits and efficiency [1]. Its ability to reduce energy consumption, minimize waste, and eliminate hazardous solvents makes it an attractive alternative in synthetic organic chemistry [2]. Naphthalenes, due to their rigid, planar structure and extended π -conjugation, serve as crucial intermediates in dyes, pharmaceuticals, and materials science. Bromination at the α -site yields 1-bromonaphthalenes, key precursors for complex molecular architectures [3]. Further β -functionalization enhances their utility, yet conventional methods often rely on hazardous solvents and harsh conditions, with limited site-selectivity and functional group tolerance. Addressing these challenges, a mechanochemical approach using ball milling and N-bromosuccinimide (NBS) was developed for the selective bromination of 2-acetamidonaphthalene at the β -position (Scheme 1). This reaction

proceeds efficiently within 30 minutes and is scalable to gram quantities. The resulting β -functionalized 1-bromonaphthalenes were successfully diversified through C–C and C–N bond formation, hydrolysis, reduction, and N-alkylation. A wide array of substituents, including electron-donating and withdrawing groups as well as heterocycles, were explored to establish substrate scope and limitations. Our work demonstrates a practical, sustainable strategy for accessing valuable naphthalene derivatives through solvent-free mechanochemical synthesis. The optimization of reaction condition and reactions would be presented on poster.



R = Activating group

Scheme 1 Mechanochemical bromination of β -substituted naphthalenes.

This study was financially supported by the Research and Development Agency of the Slovak Republic under contract No. APVV-23-0556.

- [1] Margetic D., Štrukil V.: *Mechanochemical Organic Synthesis*, Elsevier (2016).
- [2] Cuccu F., De Luca L., Delogu F., Colacino E., Solin N., Mocci R., Porcheddu A.: *ChemSusChem* 15, e202200362 (2022).
- [3] Wasilewska A., Wozniak A., Doridot G., Piotrowska K., Witkowska N., Retailleau N., Six Y.: *Chem. Eur. J.* 19, 11759 (2013).

3Po09

SYNTHESIS OF [5]HELICENE DERIVATIVES WITH EXTENDED SCAFFOLD EXHIBITING CONFIGURATIONAL STABILITY

Lukáš Kerner, Maksym Serdiuk, Martin Putala

Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, lukas.kerner@uniba.sk

The rather low intrinsic configurational stability of [5]helicene can be enhanced by proper substitution in the fjord region [1]. Attaching even small fragments at positions 1 and/or 14 results in a substantial increase of the racemization barrier. According to our theoretical calculations, a similar effect can be achieved by underinvestigated simultaneous substitution at positions 2 and 13, although much bulkier residues are required. Based on literature precedents employing tandem

arylation and/or C–H activation pathways, we set out to prepare several naphtho[1,2-*g*]chrysene derivatives **3** containing the [5]helicene scaffold [2,3]. Bulky aryl substituents at positions 9 and 12 should ensure the configurational stability and allow for the determination of the isomerization barriers. Their synthesis includes preparation of arylated naphthol **1** which undergoes oxidative coupling followed by enantiomeric resolution and further functionalization, leading to binaphthyl triflate **2** suitable for the stereoretentive annelation utilizing C–H activation (Fig. 1). Both theoretical and experimental results will be presented.

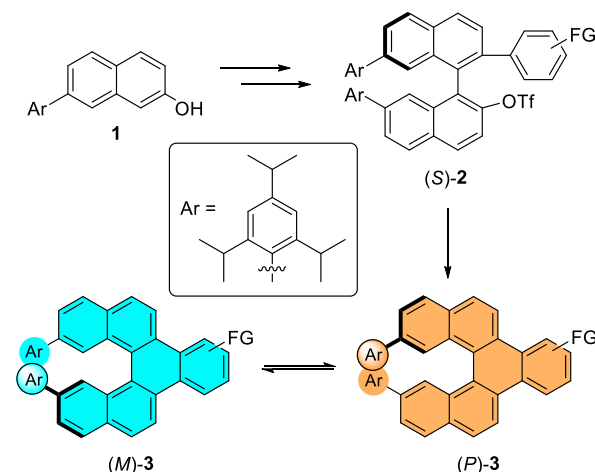


Fig. 1 Schematic representation of the present work.

This study was financially supported by the Research and Development Agency of the Slovak Republic under contract No. APVV-23-0556.

- [1] Ravat P., Hinkelmann R., Steinebrunner D., Prescimone A., Bodoky I., Juríček M.: *Org. Lett.* 19, 3707-3710 (2017).
- [2] Ruch A.A., Handa S., Kong F., Nesterov V.N., Pahls D.R., Cundari T.R., Slaughter L.M.: *Org. Biomol. Chem.* 14, 8123-8140 (2016).
- [3] Bulko F., Filo J., Cigán M., Putala M.: *Eur. J. Org. Chem.* 27, e202300826 (2024).

3Po10**NEJČASTĚJŠÍ PATOGENNÍ VARIANTY
VE FIBRINOGENU V ČESKÉ REPUBLICE
A JEJICH VLIV NA VLASTNOSTI
MOLEKULY A FIBRINOVÝ POLYMER**

Roman Kotlín¹, Eliška Ceznerová¹, Žofie Sovová¹, Jiří Suttar¹, Michael Pasák¹, Marek Havlíček¹, Tereza Sklenářová², Ingrid Hrachovinová³, Dana Provazníková³, Alžběta Hlaváčková¹

¹*Oddělení biochemie, Ústav hematologie a krevní transfuze, U Nemocnice 2094/1, 128 00 Praha 2, ČR, roman.kotlin@uhkt.cz*

²*Ústav biochemie a mikrobiologie, Fakulta potravinářské a biochemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR*

³*Laboratoř pro poruchy hemostázy, Ústav hematologie a krevní transfuze, U Nemocnice 2094/1, 128 00 Praha 2, ČR*

Fibrinogen, klíčový protein krevní koagulace, je tvořen třemi páry polypeptidových řetězců označovaných $\alpha\alpha$, $\beta\beta$ a γ ; které jsou kódovány geny *FGA*, *FGB* a *FGG*. Působením proteasy trombinu, dochází v průběhu hemokoagulace ke katalytickému štěpení peptidových vazeb v N-terminální části molekuly, uvolnění fibrinopeptidů a odhalení polymeračního místa, vzniku fibrinových monomerů, které následně polymerují za vzniku fibrinového polymeru. V případě, že je v některém z genů *FGA*, *FGB* nebo *FGG* patogenní varianta, dochází ke změně struktury molekuly fibrinogenu, která může být charakterizovaná kvantitativní (afibrinogenemie, hypobrinogenemie) a/nebo kvalitativní (dysfibrinogenemie) poruchou. Poruchy mohou být spojeny s různě závažnými formami krvácení a/nebo trombózami až na úrovni život ohrožujících stavů.

Na našem pracovišti jsme dosud provedli analýzu více než 300 rodin s podezřením na vrozenou poruchu ve fibrinogenu a identifikovali jsme patogenní varianty způsobující afibrinogenemii u 5 rodin. U 47 rodin byla charakterizována molekulární příčina hypofibrinogenemie a u 53 rodin příčina dysfibrinogenemie. Pomocí biochemických (turbidimetrie, HPLC), proteomických (LC-MS/MS) a mikroskopických metod (SEM, konfokální mikroskopie) jsme nalezené varianty dále charakterizovali.

Nejčastější příčinou dysfibrinogenemie v ČR je varianta NM_021871.4(*FGA*):c.104G>A; p.Arg35His způsobující poruchu odštěpování fibrinopeptidů A, která bývá nejčastěji spojená s různě závažnými krvácivými projevy. Podařilo

se nám odhalit také několik nových patogenních variant, které nebyly dříve popsány [1-3].

Tato práce byla podpořena institucionální podporou na dlouhodobý koncepční rozvoj výzkumné organizace Ministerstva zdravotnictví ČR č. 00023736.

- [1] Kotlín R., Pastva O., Štikarová J., Hlaváčková A., Suttar J., Chrastinová L., Riedel T., Salaj P., Dyr J.E.: *Thromb. Res.* 134, 901-908 (2014).
- [2] Ceznerová E., Kaufmanová J., Štikarová J., Pastva O., Loužil J., Chrastinová L., Suttar J., Kotlín R., Dyr J.E.: *Blood Coagul. Fibrinolysis* 33, 228-237 (2022).
- [3] Ceznerová E., Kaufmanová J., Sovová Ž., Štikarová J., Loužil J., Kotlín R., Suttar J.: *Int. J. Mol. Sci.* 23, 721 (2022).

3Po11**FILAMENTY S „NEVŠEDNÝMI“
PLNIVAMI PRE 3D TLAČ**

Mária Kováčová¹, Michaela Sedníčková¹, Adriana Hvizdošová Annušová^{1,2,3}, Daniel Truchan^{2,4}, Zdenko Špitálský¹

¹*Ústav polymérov SAV, v. v. i., Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava 45, Slovensko, m.kovacova@savba.sk*

²*Fyzikálny ústav SAV, v. v. i., Dúbravská cesta 9, 845 11 Bratislava 45, Slovensko*

³*Centrum pre využitie pokročilých materiálov SAV, v. v. i., Dúbravská cesta 9, 845 11 Bratislava 45, Slovensko*

⁴*Université Sorbonne Paris Nord, Université Paris Cité, Laboratory for Vascular Translational Science – LVTS, INSERM, UMR 1148, F-93017 Bobigny, France*

V súčasnosti zažíva 3D tlač svoj rozmach, keďže sa stala dostupnou i pre širšiu verejnosť. Umožňuje tvorbu zložitých objektov, je flexibilná, personalizovaná, s nízkou produkciou odpadu a taktiež ponúka využitie takmer v každej oblasti života. Aj z týchto dôvodov sa kladie čoraz väčší dôraz na produkciu širokej škály materiálov/filamentov. Veľmi žiaduce je ekologické a ekonomické využívanie odpadových produktov z viacerých zdrojov, napr. z poľnohospodárstva vo forme plnív pre 3D filamenty. Tieto filamenty by mali mať rovnaké alebo vylepšené vlastnosti v porovnaní so súčasnými materiálmi dostupnými na trhu a taktiež širšie uplatnenie. Takéto plnivá umožnia oveľa lacnejšiu výrobu konečného produktu, zníženie spotreby materiálov, energií, recykláciu a i. Výroba tohto typu kompozitov je odpoveď na dopyt európskeho priemyslu, ochranu životného prostredia a prírodných zdrojov [1,2].

Niektoré filamenty však musia vykazovať i špeciálne vlastnosti ako je vodivosť, zvýšená

mechanická odolnosť, antibakteriálne vlastnosti a iné. Príkladmi môže byť príprava filamentov s uhlíkovými kvantovými bodkami alebo MoOx nanočasticami, ktoré vieme využiť v biomedicíne alebo personalizovanej medicíne [3].

Kombinácia 3D tlače a polymérnych filamentov s neštandardnými plnivami prináša enormný potenciál, ktorý stále nie je naplno využitý a môže napomáhať v každej oblasti ľudského života a napĺňania nielen priemyselných potrieb.

Autori sú vďační za finančnú podporu Ministerstva školstva Slovenskej republiky, Slovenskej akadémie vied, grantu VEGA 2/0056/24.

- [1] Kováčová M. et al.: Processes 11, 395 (2023).
- [2] Kováčová M. et al.: Appl. Sci. 10, 3062 (2020).
- [3] Shaalan M.I. et al.: Polym. Bull. 81, 13009-13025 (2024).

3Po12

BAREVNOST JAKO INDIKÁTOR TEPELNÉ DEGRADACE DŘEVA: REFERENČNÍ MODEL PRO HODNOCENÍ KARBONIZACE

Petra Máčová¹, Lucie Zárybnická¹, Radek Ševčík¹,
Barbora Mayer², Jozef Ráhel²

¹Ústav teoretické a aplikované mechaniky Akademie věd České republiky, Prosecká 809/76, 190 00 Praha, Česká republika, macova@itam.cas.cz

²Lesnická a dřevařská fakulta, Mendelova univerzita v Brně, Zemědělská 3, 613 00 Brno, Česká republika

Trvanlivost dřeva je ve značné míře ovlivněna kvalitou povrchové úpravy, která slouží k ochraně materiálu před vnějšími degradačními vlivy. Mezi šetrné a ekologicky přijatelné metody ochrany dřeva patří tepelná modifikace [1,2]. Pro zachování mechanických vlastností je však klíčové omezit působení vysokých teplot pouze na povrchovou vrstvu. Za tímto účelem byla využita plazmou indukovaná karbonizace, která umožňuje cílené ošetření povrchu bez narušení vnitřní struktury dřeva [3].

Jednou z hlavních výzev této technologie je charakterizace změn v oblasti s velmi malou hloubkou tepelného zatížení (řádově desítky až stovky mikrometrů), kde je přímé vzorkování obtížné a nepřesné. V této studii byl proto zvolen nepřímý přístup: bukový dřevěný prach (*Fagus sylvatica* L.) byl za kontrolovaných podmínek vystaven teplotám v rozmezí 100–500 °C a následně analyzován pomocí UV-VIS a FTIR spektroskopie, kolorimetrie a skenovací elektronové mikroskopie.

Výsledky prokázaly korelaci mezi teplotou ošetření a změnami ve struktuře, chemickém

složení a barevnosti. Změna barvy se ukázala jako dostatečně spolehlivý indikátor stupně tepelné degradace. Tyto referenční údaje umožňují nepřímé určení rozsahu a hloubky fyzikálně-chemických změn u reálných vzorků s karbonizovaným povrchem a mohou tak přispět k optimalizaci metod ochrany dřeva s ohledem na jeho dlouhodobou trvanlivost a strukturální integritu.

Tato práce vznikla za podpory projektu GAČR 24-10430S Mikrovlnné tepelné modifikace se zvýšenou povrchovou selektivitou pro materiály na bázi dřeva.

- [1] Gérardin P.: Ann. For. Sci. 73, 559-570 (2016).
- [2] Petrič M.: Rev. Adhes. Adhes. 1, 216-247 (2013).
- [3] Volokitin G.G. et al.: Thermophys. Aeromech. 23, 119-124 (2016).

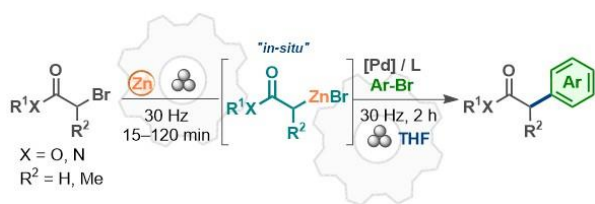
3Po13

NEGISHIHO KAPLING IN SITU GENEROVANÝCH ZN-ENOLÁTOV V PODMIENKACH MECHANICKEJ AKTIVÁCIE

Tomáš Čarný, Dominika Mravcová, Barbora
Steinhübllová, Radovan Šebesta

Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta
Univerzity Komenského, Ilkovičova 6, 842 15
Bratislava, dominika.mravcova@uniba.sk

Príprava, izolácia a použitie Reformatskeho Zn-enolátov v skrížených kaplingových reakciách je častokrát limitované na prácu v inertnej atmosfére, kvôli ich citlivosti na vzdušnú vlhkosť [1]. Pd-katalyzovaný skřížený kapling medzi Zn-enolátmi a aryl halogenidmi prebiehal v podmienkach mechanickej aktivácie v guľovom mlyne. Produkty, α -arylované estery a amidy, vznikali vo výťažku do 95 %. Hlavnou výhodou tejto metódy je, že Zn-enoláty vznikali *in situ* v podmienkach mechanickej aktivácie za prístupu vzduchu už za 15 min, bez nutnosti predchádzajúcej aktivácie zinku. V porovnaní s aryl jodidmi poskytovali menej reaktívne, komerčne dostupné aryl bromidy produkty v lepších výťažkoch. Optimalizované reakčné podmienky boli použité pri syntéze derivátov prírodných produktov (Obr. 1) [2].



Obr. 1 Negishiho kapling v podmienkach mechanickej aktivácie.

Financované EÚ NextGenerationEU prostredníctvom Plánu obnovy a odolnosti SR v rámci projektu č. 09I03-03-V04-00024 a Agentúrou na podporu výskumu a vývoja v rámci projektu č. APVV-22-0167.

- [1] Hama T., Liu X., Culkin D., Hartwig J.F.: *J. Am. Chem. Soc.* 125, 11176-11177 (2023).
- [2] Čarný T., Mravcová D., Steinhüblová B., Šebesta R.: *Adv. Synth. Catal.* 366, e202401403 (2024).

3Po14

SYNTHESIS OF NOVEL AMINOBENZOCOUMARIN FLUORESCENT MATERIALS

Jakub Orság, Henrieta Stankovičová, Martin Putala

Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovakia, orsag13@uniba.sk

Coumarin is a suitable scaffold which can serve as a fluorophore, but a number of criteria has to be met. In unsubstituted coumarin the fluorescence is quenched, and the relaxation pathway favors a thermal process. Assisting the already established, though weak, ICT in coumarin promotes relaxation through light emission [1]. There are several methods of achieving this, we chose the introduction of strong EDGs (amines) and prolonging the conjugation by one benzene ring. Further, we plan to postfunctionalize these derivatives by (hetero)arylation via C–H activation.

The key step in our synthetic approach was the use of C–H alkenylation [2]. The advantage of this route is the circumvention of *ortho*-formylation of naphthols where we observed multiple isomeric products, which complicated the purification. In total, we prepared four new benzo[*f*]coumarin derivatives from which three had promising photophysical properties (bathochromic shifts of λ_{abs} λ_{em}) (Fig. 1). Further, all prepared benzo[*f*]coumarins possessed fluorescence in solid state with even bigger red-shift of emission

maxima, similar to reported results from Ahn *et al.* [3].

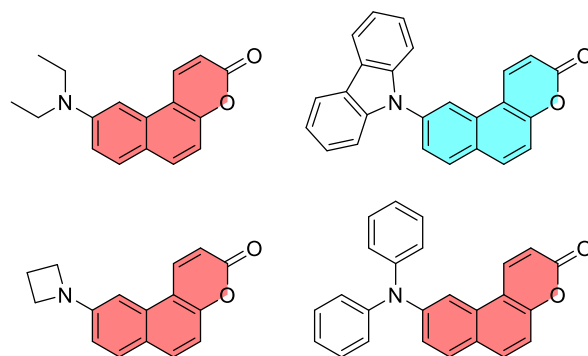


Fig. 1 Structures of prepared benzocoumarins. (red: bathochromic shift, blue: hypsochromic shift)

This study was financially supported by the Research and Development Agency of the Slovak Republic under contract No. APVV-23-0556.

- [1] Liu X., Cole J.M., Waddell P.G., Lin T.C., Radia J., Zeidler A.: *J. Phys. Chem. A* 116, 727-737 (2012).
- [2] Ren P., He Z., Xing T., Manar K.K., Sampson J., Jin J., Wang L.: *ASC* 364, 3155 (2022).
- [3] Moon H., Xuan Q.P., Kim D., Kim Y., Park J.W., Lee C.H., Kim H.J., Kawamata A., Park S.Y., Ahn K.H.: *Cryst. Growth Des.* 14, 6613-6619 (2014).

3Po15

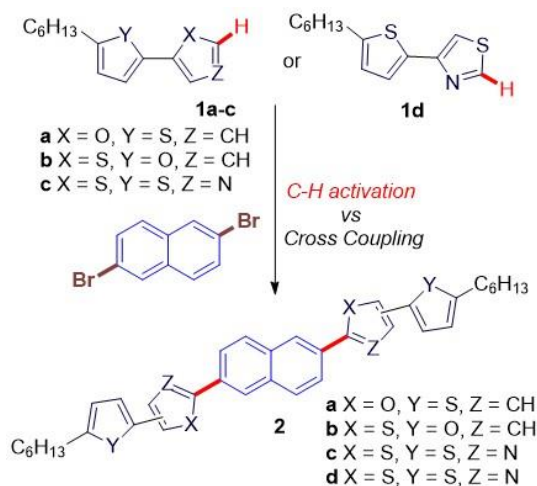
SYNTHESIS OF HETEROARYL-NAPHTHALENE COMPOUNDS BY C–H ACTIVATION

Madhav Pathak, Iveta Kmentova, Martin Putala

Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovakia, pathak2@uniba.sk

C–H activations are considered as environmentally friendly alternative of traditional cross-coupling reactions for formation of C(sp²)–C(sp²) bond. Their advantage over cross-coupling reactions for synthesis of organic π -conjugated small molecules was described for mostly thiophene based compounds, which are used in organic electronic devices as OFETs, OPV or OLEDs [1]. Substituted bithienyl-naphthalene containing compounds already showed good properties as p-type also n-type organic semiconductors (OSC) [2,3]. To access new heteroaryl-naphthalene compounds for material chemistry, it is necessary to develop new synthetic routes. By substitution of thiophene with other heterocycles the new OSC materials may have other interesting properties, as luminescence, but their synthesis is challenging due unavailability of pre-functionalised starting materials. Also, C–H

activation reported in literature focus mainly for formation of heteroaryl-heteroaryl, or heteroaryl-phenyl bond. We are currently exploring reaction conditions for C–H activation of thiazole, furan and thiophene heterocycles with hexylthienyl or hexylfuryl side chains 1a-d to access the corresponding compound 2a-d with central naphthalene core (Scheme 1). The optimization of reaction condition towards 2a-d compounds with both C–H activation and also their alternative synthesis strategy using traditional cross-coupling reactions (Negishi, Suzuki, Kumada, or Stille coupling) will be presented on poster.



Scheme 1 Synthesis of oligoaryl compounds.

This study was financially supported by the Research and Development Agency of the Slovak Republic under contract No. APPV-23-0529.

- [1] Okamoto K., Zhang J., Housekeeper J., Marder S., Luscombe C.: *Macromolecules* 46, 8059-8078 (2013).
- [2] Misicak R., Novota M., Weis M., Cigan M., Siffalovic P., Nadazdy P., Kozisek J., Koziskova J., Pavuk M., Putala M.: *Synth. Met.* 233, 1-14 (2017).
- [3] Feriancová L., Cigán M., Gmucová K., Kožíšek J., Nádaždy V., Putala M.: *New J. Chem.* 45, 9794-9804 (2021).

3Po16

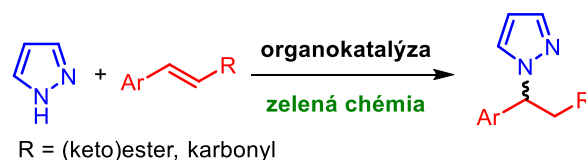
AZA-MICHAELOVA ADÍCIA PYRAZOLU NA RÔZNE TYPY AKCEPTOROV

Tibor Peňaška, Mária Mečiarová, Radovan Šebesta

Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského
 v Bratislave, Katedra organickej chémie, Mlynská
 dolina, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava,
 tibor.penaska@uniba.sk

Aza-Michaelova reakcia je typom konjugovanej 1,4-adície dusíkatých nukleofilov na α,β -nenasýtené akceptory pri ktorej dochádza k tvorbe C–N väzby [1]. Zohráva významnú úlohu v syntéze biologicky aktívnych zlúčenín a štúdium

stereoselektívneho priebehu tohto typu reakcie umožňuje prípravu enantioméne obohatených molekúl, čo je veľmi dôležité najmä z pohľadu vývoja a syntézy liečiv (napr. ruxolitinib) [2]. Organokatalýza predstavuje veľmi účinný nástroj v syntéze chirálnych látok a rôznych prekursorov a v kombinácii so zelenochemickými prístupmi (napr. Mechanochemická aktivácia v guľovom mlyne) možno predpokladať i vysoký aplikačný potenciál tejto metodológie [3]. Predkladaný príspevok je zameraný na štúdium asymetrickej aza-Michaelovej adície pyrazolu na rôzne typy substrátov, napr. estery, ketoestery, aldehydy a ketóny, resp. chalkóny. V súčasnosti je publikovaných iba niekoľko prác, ktoré sú zamerané na podobný typ reakcie v guľovom mlyne, a chirálny priebeh adície pyrazolu na ketoestery nie je v literatúre opísaný vôbec. Práve tento fakt bol našou inšpiráciou testovať rôzne typy organokatalýzy pre spomínané substráty (PTC katalýza, enamínová aktivácia, aktivácia prostredníctvom tvorby vodíkových väzieb, katalýza chirálnymi kyselinami a pod.). Niektoré východiskové substráty boli pripravované s využitím mechanochemickej aktivácie v guľovom mlyne bez potreby použitia rozpúšťadla. Práve kombinácia adície dusíkatých heterocyklov s aplikáciou princípov zelenej chémie je jedným z cieľov našej práce (Obr. 1).



Obr. 1 Adícia dusíkatých heterocyklov s aplikáciou princípov zelenej chémie.

Financované EÚ NextGenerationEU prostredníctvom Plánu obnovy a odolnosti SR v rámci projektu č. 09I03-03-V04-00118.

- [1] Enders D., Wang Ch., Liebich J.X.: *Chem. Eur. J.* 15, 11058-11076 (2009).
- [2] Lin Q., Meloni D., Pan Y., Xia M., Rodgers J., Shepard S., Li M., Galya L., Metcalf B., Yue T., Liu P., Zhou J.: *Org. Lett.* 11, 1999-2002 (2009).
- [3] Némethová V., Krištofiková D., Mečiarová M., Šebesta, R.: *Chem. Rec.* 23, e202200283 (2023).

3Po17**MECHANOCHEMICAL SYNTHESIS OF (BENZO)COUMARINS**

Karin Schniererová, Henrieta Stankovičová, Martin Putala

Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava, Slovakia, karin.schniererova@uniba.sk

Coumarins and their fused analogues, benzocoumarins, represent a valuable class of heterocycles with broad applications in medicinal chemistry and functional dye development [1]. While coumarins have been extensively studied for their biological activities and as fluorescent probes, their fused derivatives remain comparatively less explored. However, the presence of a fused benzene ring in benzocoumarins extends the π -conjugation system, leading to favorable photophysical properties such as bathochromic shifts and enhanced Stokes shifts [2].

Despite their potential, efficient and sustainable methods for their preparation are still limited. We focused on the synthesis of 7-hydroxycoumarins and 9-hydroxybenzo[f]coumarins bearing electron-withdrawing groups at the C(3) position, and developed a mechanochemical approach based on Knoevenagel condensation between salicylaldehyde derivatives and active methylene compounds (Fig. 1). The reaction conditions were systematically optimized by screening different organic and inorganic bases and evaluating the effect of liquid-assisted grinding (LAG) additives. This solvent-free strategy not only aligns with green chemistry principles, but also provides efficient access to coumarin scaffolds suitable for further derivatization.

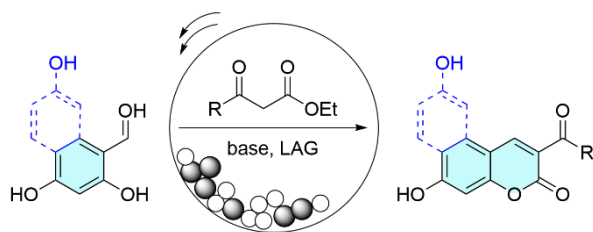


Fig. 1 Mechanochemically activated Knoevenagel synthesis of (benzo)coumarins.

This work was supported by the Comenius University Grant for Young Researchers, Project No. UK/1308/2025.

- [1] Cao D., Liu Z., Vewilst P., Koo S., Jangjili P., Kim J.S., Lin W.: *Chem. Rev.* 119, 10403-10519 (2019).
 [2] Dai M., Yang Y.J., Sarkar S., Ahn K.H.: *Chem. Soc. Rev.* 52, 6344-6358 (2023).

3Po18**3D TISKNUTELNÉ BIO-KOMPOZITY Z BAKTERIÁLNI CELULÓZY**

Radim Stríž¹, Patrycja Bober², Helena Hudečková¹, Adriana Kovalčík¹

¹*Fakulta chemická VUT v Brně, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, ČR, radim.striz@vut.cz*

²*Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v. v. i., Heyrovského náměstí 2, 162 00 Praha 6, ČR*

Biopolymery se v současné době dostávají do popředí zájmu napříč mnoha obory díky svému udržitelnému původu, biologické odbouratelnosti a široké škále použití. Patří mezi ně i bakteriální celulóza (BC), která se vyznačuje výbornými mechanickými vlastnostmi, vysokou čistotou a biokompatibilitou. Její struktura umožňuje snadnou chemickou modifikaci a kombinaci s dalšími polymery, čímž vznikají nové funkční materiály [1].

V této práci byla BC funkcionalizována pomocí pektinu a vodivého polymeru polypyrrolu (PPy) za účelem vytvoření bioaktivních kompozitních struktur. Polypyrrol může být využit ke zlepšení elektrických vlastností materiálu, což je klíčové pro aplikace v oblasti biosenzorů, tkáňového inženýrství nebo stimulace buněk. Pektin pak podporuje biologickou odbouratelnost a bioaktivitu. Kompozity založené na BC a PPy mohou být využity pro adsorpci a následnou fotokatalytickou redukci toxických šestimocných iontů chromu na ionty trojmocné [2].

Kompozity připravené v této práci byly testovány z hlediska možnosti 3D tisku, morfologie, vodivosti, antioxidační a antimikrobiální aktivity. Dále byla zjišťována bobtnavost připraveného materiálu, která ovlivňuje difuzní vlastnosti a je důležitým faktorem pro potencionální řízené uvolňování bioaktivních látek. Připravené kompozity ukazují možnost jejich využití v medicínských aplikacích, elektronice nebo obalových technologiích.

Autoři tohoto příspěvku by rádi poděkovali za podporu Grantové agentury ČR (GAČR, projekt č. 25-15806S) a internímu projektu Fakulty chemické VUT v Brně (projekt č. FCH-S-25-8818).

- [1] Girard V.-D., Chaussé J., Vermette P.: *J. Appl. Polym. Sci.* 141, e55163 (2024).
 [2] Striz R., Minisy I.M., Bober P., Taboubi O., Smilek J., Kovalcik A.: *ACS Appl. Polym. Mater.* 6, 6383-6392 (2024).

3Po19**Mn(III)-PORFYRÍNY V BOJI PROTI NEURODEGENERATÍVNYM OCHORENIAM A RAKOVINE**

Ladislav Šoltés¹, Jürgen Arnhold², Peter Rapta³, Matúš Šedivý⁴, Petr Neugebauer⁴, Svetlana Hrouzková⁵, Agneša Szarka⁵, Mojmir Mach¹, Katarína Valachová¹

¹Centrum experimentálnej medicíny SAV, v.v.i., 841 04 Bratislava, Slovensko, katarina.valachova@savba.sk

²Inštitút medicínskej fyziky a biofyziky, Univerzita v Lipsku, 041 07 Lipsko, Nemecko

³Ústav fyzikálnej chémie a chemickej fyziky, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, 812 37 Bratislava, Slovensko

⁴Vysoké učenie technické v Brne, Stredoeurópsky technologický inštitút, 612 00 Brno, ČR

⁵Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, 812 37 Bratislava, Slovensko

Redoxné vlastnosti Mn(III)-porfyrínov ovplyvňujú oxidačné a antioxidačné procesy v biologických systémoch. Študovali sme pro- a antioxidačné vlastnosti Mn(III)-2-TE-PyP⁵⁺ a Mn(III)-4-TE-PyP⁵⁺ v roztoku vysokomolekulového hyalurónanu degradovaného iónmi Cu(II) a askorbátom, kde dochádzalo k rozkladu hydroperoxidov hyalurónanu na alkyloxylové radikály, ktoré podliehajú štiepnym reakciám. Ako metódu sme použili rotačnú viskozimetriu. Ďalšími metódami boli oximetria, elektrónová paramagnetická rezonancia a plynová chromatografia s hmotnostnou spektrometriou, ktoré objasnili mechanizmus redoxných vlastností derivátov Mn(III)-porfyrínov. Výsledky ukázali, že Mn(III)-2-TE-PyP⁵⁺ urýchľuje degradáciu hyalurónanu. Naopak, jeho štrukturálny izomér Mn(III)-4-TE-PyP⁵⁺ pôsobil ako antioxidant, pretože eliminuje tvorbu alkyloxylových radikálov. Naše zistenia poskytujú nový pohľad na selektívne terapeutické aplikácie týchto derivátov a navrhujú stratégie pre cielenú liečbu rakoviny a prevenciu neurodegeneratívnych ochorení. Na základe našich experimentálnych výsledkov sme navrhli mechanizmus pôsobenia Mn(III)-2-TE-PyP⁵⁺ ako významného prooxidantu, ktorý účinne ničí obal maskujúci rakovinovú bunku pred pôsobením imunitného systému.

Experimenty boli realizované s podporou grantu VEGA 2/0008/23.

3Po20**SULFATAČE FLAVONOIDŮ POMOCÍ MIKROBIÁLNÍ ARYLSULFOTRANSFERASY: CESTA K LIDSKÝM METABOLITŮM**

Jiří Vrba¹, Veronika Zapletalová¹, Barbora Papoušková², Kateřina Valentová³

¹Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta Univerzity Palackého, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc, ČR, j.vrba@upol.cz

²Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého, Tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, ČR

³Mikrobiologický ústav, Laboratoř biotransformací, Akademie věd České republiky, Videňská 1083, 142 00 Praha, ČR

Flavonoidy tvoří velkou skupinu sloučenin patřících mezi tzv. sekundární rostlinné metabolity. Vyskytují se ve všech vyšších rostlinách, a jsou proto běžnou součástí rostlinné stravy nebo přípravků z léčivých rostlin. Flavonoidy se částečně vstřebávají v tenkém střevu, přičemž ve střevu a játrech podléhají metabolickým procesům, jako jsou sulfatace nebo glukuronidace. Při studiu biologické aktivity flavonoidů je žádoucí zkoumat nejen účinky původních sloučenin, ale také jejich metabolitů, které jsou však komerčně často nedostupné. Cílem naší práce proto bylo připravit sulfatované deriváty významných flavonoidů a ověřit, zda mohou představovat skutečné lidské metabolity. Sulfatace flavonoidů byla provedena s využitím mikrobiální arylsulfotransferasy z *Desulfitobacterium hafniense* a *p*-nitrofenylsulfátu, který byl zdrojem sulfátové skupiny. Touto enzymovou metodou bylo sulfatováno osm flavonoidů různých strukturních typů, a to flavon apigenin, flavanony naringenin a hesperetin, flavanoly fisetin, kvercetin a myricetin, flavanonol ampelopsin a isoflavon genistein, přičemž byly ve všech případech získány monosulfatované deriváty [1-3]. Testované flavonoidy byly dále inkubovány s rekombinantními lidskými cytosolovými sulfotransferasami (SULT) od firmy Cypex (Velká Británie), které využívají jako zdroj sulfátu kofaktor 3'-fosfoadenosin-5'-fosfosulfát (PAPS). Následná analýza metodou LC-MS prokázala, že monosulfáty čtyř flavonoidů připravené pomocí mikrobiálního enzymu se shodují s produkty lidských sulfotransferas, a jsou tedy potenciálními metabolity vznikajícími v lidském organismu.

Tato práce vznikla s podporou grantu GAČR 23-04654S.

[1] Kanova K. et al.: *J. Agric. Food Chem.* 68, 11197-

11206 (2020).

- [2] Petraskova L. et al.: *Int. J. Mol. Sci.* 23, 5743 (2022).
 [3] Brodsky K. et al.: *ChemSusChem* 15, e202201253 (2022).

3Po21

CONTROLLING TRIARYLHYDRAZONE PHOTOSWITCHING EFFICIENCY THROUGH STRUCTURAL VARIATION IN HETEROARYL UNITS

Lea Hegedúsová¹, Šimon Budzák², Miroslav Medved^{2,3}, Lukáš F. Pašteka^{4,5}, Juraj Filo¹, Bernard Mravec¹, Anna M. Grabarz^{4,6}, Marek Cigán¹

¹Department of Organic Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University Bratislava, Ilkovičová 6, 842 15 Bratislava, Slovakia, hegedusova37@uniba.sk

²Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Matej Bel University, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica, Slovakia

³Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Czech Advanced Technology and Research Institute, Palacký University Olomouc, Křížkovského 511/8, 779 00 Olomouc, Czechia

⁴Department of Physical and Theoretical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University Bratislava, Ilkovičová 6, 842 15 Bratislava, Slovakia

⁵Van Swinderen Institute for Particle Physics and Gravity, University of Groningen Groningen 9747AG, The Netherlands

⁶Institute of Advanced Materials, Faculty of Chemistry, Wrocław University of Science and Technology, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50370 Wrocław, Poland

Triarylhydrazones constitute a noteworthy extension of the P-type diarylhydrazones-based family of photoswitches. These photochromic systems typically exhibit enhanced molar absorption coefficients and respond to irradiation at longer-wavelengths of the electromagnetic spectrum, while retaining remarkable thermal stability of both isomers and excellent separation of absorption maxima. [1] Nonetheless, their limitation is low $Z \rightarrow E$ photoisomerization efficiency, primarily arising from strong excited-state intramolecular hydrogen bonding (IHB) in the Z -isomer. Although this non-covalent interaction facilitates a pronounced spectral separation between absorption maxima of both isomers, it concurrently enables competing pathways that lower the $Z \rightarrow E$ photoisomerization quantum yields [1, 2].

In the present study, we propose a strategy focused on heteroaryl modification aimed at modulating of IHB strength. This approach yields a notable enhancement in $Z \rightarrow E$ photoisomerization

efficiency while preserving good addressability, resulting from diminished intensity of the $S_0 \rightarrow S_1$ transition and the concurrent emergence of intense higher-energy excited states characteristic of the E -isomer [3].

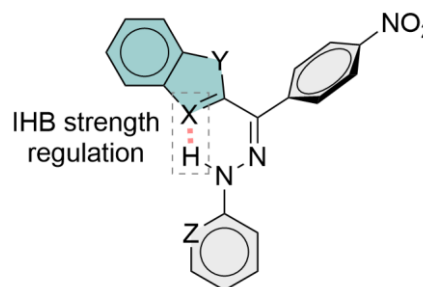


Figure 1 – Graphical abstract.

Funded by the EU NextGenerationEU through the Recovery and Resilience Plan for Slovakia under the project No. 09I03-03-V04-00068 (B. M.). This project was also financially supported by Slovak Research and Development Agency, APVV-20-0098 (M. M.) and Scientific Grant Agency of the Slovak Republic, VEGA 1/0664/25 (M. C.; L. H.).

- [1] Hegedúsová, L., Blaise, N., Pašteka, L.F., Budzák, Š., Medved', M., Filo, J., Mravec, B., Slavov, C., Wachtveitl, J., Grabarz, A.M., Cigán, M.: *Chem. - Eur. J.* 30, e202303509 (2024).
 [2] Mravec, B., Budzák, Š., Medved', M., Pašteka, L.F., Slavov, C., Saßmannshausen, T., Wachtveitl, J., Kožíšek, J., Hegedúsová, L., Filo, J., Cigán, M.: *J. Org. Chem.* 86, 11633 (2021).
 [3] Hegedúsová, L., Budzák, Š., Medved', M., Pašteka, L.F., Filo, J., Mravec, B., Grabarz, A., Cigán, M.: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, submitted manuscript.

3Po22

PRÍPRAVA A CHARAKTERIZÁCIA POVLAKOV POLYMÉRNEHO NITRIDU UHLÍKA

Sylvia Patakyová, Michael Kubát, Petr Dzik

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, ČR, Sylvia.Patakyova@vut.cz

Nitrid uhlíka predstavuje perspektívny polovodičový materiál pre fotokatalytické a fotoelektrochemické aplikácie v oblasti udržateľných technológií. Spomedzi populárnych fotokatalyzátorov vyniká svojou chemickou stabilitou, nízkou toxicitou a pásmovým usporiadaním. Medzi jeho najvýznamnejšie formy patria grafitický karbonitrid ($g\text{-C}_3\text{N}_4$), poly(heptazin imid) (PHI) či poly(triazín imid) (PTI). Zatiaľ čo $g\text{-C}_3\text{N}_4$ vyniká vysokou chemickou stabilitou a citlivosťou k viditeľnému svetlu, jeho praktické využitie obmedzujú slabá vodivosť a zlá spracovateľnosť. Naopak PHI disponuje výbornou schopnosťou

tvoriť stabilné vodné formulácie a gélové systémy, čo umožňuje efektívnu prípravu homogénnych a mechanicky stabilných vrstiev bez potreby spojív [1,2].

Cieľom predkladanej práce bolo pripraviť a charakterizovať tenké povlaky na báze PHI a jeho zmesí s g-C₃N₄ pomocou sol-gel a suspenzných techník. Povlaky boli nanášané metódami doctor blade či drop casting. Výsledné vrstvy boli analyzované z hľadiska morfológie, štruktúry a fotoelektrochemickej aktivity. Preukázal sa potenciál vodou rozpustného PHI ako vhodného prekursora pre tvorbu fotoaktívnych vrstiev s možnosťou využitia v oblasti fotokatalytických a fotoelektrochemických konverzných systémov.

Táto práca bola finančne podporená Grantovou agentúrou Českej republiky prostredníctvom projektu 23-06843S.

- [1] Adler, C., Krivtsov, I., Mitoraj, D., Dos Santos-Gómez, L., García-Granda, S. et al.: *ChemSusChem*. 14, 2170-2179 (2021).
- [2] Song, H., Luo, L., Wang, S., Zhang, G., Jiang, B.: *Chin. Chem. Lett.* 35, 109347 (2024).

3Po23 ENZÝMOVÁ PRÍPRAVA ALKYLGLYKOZIDOV

Lucia Černáková, Peter Haluz, Mária Mastihubová,
Vladimír Mastihuba

Laboratórium biokatalýzy a organickej syntézy,
Chemický ústav SAV, v.v.i., Dúbravská cesta 9, 845 38
Bratislava, lucia.cernakova@savba.sk

Alkylglykozidy sa radia k neiónovým biodegradovateľným povrchovo aktívnym látkam nachádzajúcim použitie v kozmetike, domáciach a

priemyselných čistiacich prostriedkoch či v biochemických separáciách [1]. Popri chemickej príprave možno anomérne čisté alkylglykozidy pripraviť aj ekologicky čistejšími enzymatickými postupmi - reverznou hydrolýzou alebo transglykozyláciou.

Študovaná bola príprava série β-D-glukopyranozidov, β-D-galaktopyranozidov a β-rutinozidov s alifatickými aglykónmi rôznej dĺžky reverznou hydrolýzou glukózy a transglykozyláciou vychádzajúcou z celobiózy, laktózy a rutínu fungálnymi a rastlinnými glykozidázami. Potvrdil sa trend klesajúcej reaktivity s rastúcou dĺžkou glykozylovaného alkoholu. Problém odstránenia vysokovrúcich alkoholov z reakčnej zmesi bol vyriešený adsorpciou produktov na stĺpec oxidu hlinitého.

Táto práca vznikla vďaka podpore agentúry VEGA grantom č. 2/0111/22 a podpore z Programu grantov pre doktorandov SAV grantom č. APP0609.

Ku vzniku tejto práce prispeli tiež vedecké interakcie, tvorivé prostredie a vzájomné zdieľanie vedomostí a nápadov v riešiteľskom kolektíve akcie COST CA22102.

- [1] Rather, M.Y., Misgra, S.: *J. Sust. Chem. Proc.* 1, 7 (2013).
- [2] Vera, C., Guerrero, C., Aburto, C., Cordova, A., Illanes, A.: *Biochim. Biophys. Acta – Proteins and Proteomics* 1868, 140271 (2020).

POSTERY - SEKCIA 4 VYUČOVANIE, POPULARIZÁCIA A HISTÓRIA CHÉMIE

4Po01 DIGITÁLNE ZDROJE VO VÝUČBE AKO JEDNA Z OBLASTÍ ROZVOJA DIGITÁLNYCH KOMPETENCIÍ UČITEĽOV CHÉMIE

Ivana Sotáková, Petra Letošníková, Mária Ganajová
Oddelenie didaktiky chémie, Ústav chemických vied,
Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika
v Košiciach, Moyzesova 11, 040 01 Košice,
ivana.sotakova@upjs.sk

Príspevok informuje o výsledkoch výskumu, ktorého cieľom bolo zistiť a vyhodnotiť vplyv inovačného vzdelávania “Výučba chémie na strednej škole so zameraním na rozvoj digitálnej a vedeckej gramotnosti” na rozvoj digitálnych kompetencií učiteľov chémie v súlade s požiadavkami Európskeho rámca digitálnych kompetencií pedagógov (DigCompEdu) [1]. Cieľom inovačného vzdelávania bolo sprístupniť učiteľom poznatky o vyučovaní chémie so zameraním na rozvoj digitálnych kompetencií prostredníctvom aktivizujúcich metód, integrácie digitálnych technológií do výučby a využívania digitálnych vzdelávacích zdrojov a nástrojov na hodnotenie žiakov. Výskumnú vzorku tvorili stredoškolskí učelia chémie v kombinácii (N=15) z troch krajov na Slovensku. Výskum prebiehal

počas 1. polroka v školskom roku 2024/2025. Vo výskume bol použitý jednoskupinový dizajn pretest-posttest. Výskumným nástrojom bol dotazník DigCompEdu Check-in [2], ktorý vyplnili učitelia pred a po absolvovaní vzdelávania. Analýza výsledkov vo vybranej oblasti *Digitálne zdroje* ukázala, že pri výbere digitálnych zdrojov učitelia zohľadňujú ich kvalitu a spoľahlivosť, a zároveň uprednostňujú zdroje, ktoré podporujú záujem žiakov o učenie.

Príspevok vznikol s podporou národného projektu „Digitálna transformácia vzdelávania a školy“ (DiTEdu), ktorý je financovaný z Európskeho sociálneho fondu plus cez Program Slovensko 2021 - 2027. Taktiež bol podporený grantami: VEGA 1/0051/25 „Model rozvoja digitálnych kompetencií budúcich učiteľov prírodných vied“, KEGA 001UPJŠ-4/2023 „Implementácia formatívneho hodnotenia do výučby na základnej škole so zameraním na digitálnu formu“, IPEL VVGS 2024-3405 „Inovácia výučby predmetu Didaktika chémie II implementáciou digitálnych úloh sumatívneho a nástrojov formatívneho hodnotenia“ a IPEL VVGS 2025-3464 „Tvorba nástrojov sumatívneho a formatívneho hodnotenia pre výučbu predmetu Špeciálne praktikum školských pokusov I“.

- [1] Redecker C.: European Framework for the Digital Competence of Educators: DigCompEdu (JRC107466). Seville, Spain: Joint Research Centre (2017).
- [2] Ghomi M., Redecker C.: CSEDU 2019 1, 541-548 (2019).
- [3] (<http://www.prirodnejavy.eu/pokusy/>)

POSTERY - SEKCIA 5 CHEMPROGRESS – CHEMICKÉ TECHNOLÓGIE

5Po01 PRÍPRAVA KOVOVÝCH NANOČASTÍČ POMOCO PULZNEJ LASEROVEJ ABLÁCIE V KVAPALNOM PROSTREDÍ

Jaroslav Bruncko, Miroslav Michalka

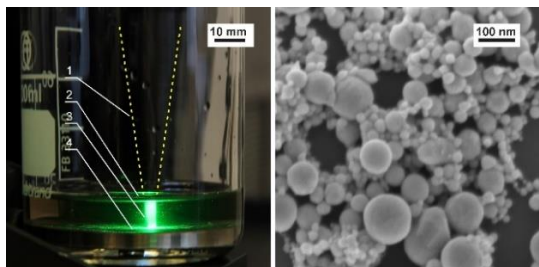
Medzinárodné laserové centrum CVTI SR,
Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava 4, Slovenská republika

Kovové nanočastice predstavujú významnú tému, ktorá priťahuje širokú pozornosť tak teoretických ako aj experimentálnych štúdií. Ich vlastnosti sa

často odlišujú od zdrojového materiálu v prípade „makrozmerov“ aj napriek totožnému chemickému zloženiu. Ako súčasť v chemických procesoch, v prípade katalytických reakcií prejavujú vyššiu reaktivitu a významným spôsobom prispievajú k zvýšeniu celkovej kinetiky procesu. Na ich prípravu sú používané rôzne technologické postupy. Jednou zo zaujímavých, principiálne jednoduchých a lacných metód prípravy kovových nanočastíc je pulzná laserová ablácia v kvapalnom prostredí (Pulsed Laser Ablation in Liquid).

Proces sa odohráva v kvapalnom prostredí (najčastejšie voda), v ktorom je umiestnený zdrojový materiál (terč). Po ožiarení povrchu terča intenzívnym laserovým pulzom dochádza k ablácii materiálu z povrchu terča v podobe mikroexplózie s vývinom plazmy, ktorá je

v okolitej kvapaline prudko ochladená so súčasnou kondenzáciou odpareného materiálu v podobe sférických nanočastíc vo forme koloidu. V závislosti od parametrov procesu (vlnová dĺžka žiarenia, výkonová hustota, vlastnosti kvapalného prostredia, vlastnosti terča...) majú nanočastice rozmery v rozsahu jednotiek až stoviek nm, s rozličnou distribúciou ich rozmerov.



Obr. vľavo – Záznam z prípravy koloidu Ag nanočastíc v deionizovanej vode (1 – laserový pulz, 2 – povrch kvapaliny, 3 – ablačná plazma, 4 – povrch terča), laser Quanta Ray Pro 250, 1064 nm, 20 ns, 150 mJ/pulz; vpravo – SEM záznam Ag nanočastíc po vysušení koloidu.

Pod'akovanie: práca bola finančne podporená agentúrou APVV, projekt č. APVV-23-0083 (Fotovoltaická perovskitová štruktúra: korelácia chemicko-priestorových parametrov a dynamiky nosičov náboja)

5Po02

EFFECT OF THE TYPE OF PHOTOCATALYST ON THE EFFICIENCY OF PHOTOCATALYTIC DEGRADATION

Jiří Palarčík, Natálie Tesařová

Institute of Environmental and Chemical Engineering, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Czech Republic, jiri.palarcik@upce.cz

Photocatalysis is a reaction that occurs in the presence of a semiconductor and light [1]. The semiconductor is also a catalyst that accelerates the reaction and is often a metal oxide, most often TiO_2 [2]. Photocatalysis is one of the Advanced Oxidation Processes (AOP), which utilize the high reactivity of hydroxyl radicals ($\cdot\text{OH}$), which makes them effective in degrading a wide range of contaminants. Another great advantage of AOP is that they occur under normal conditions (especially pressure and temperature), which facilitates their application.

The aim of the work was to evaluate the efficiency of dimethyl sulfoxide and methylene blue degradation using four types of TiO_2 -based photocatalysts (P25, AV01, PRETIOX CG100 and UV100) under various experimental conditions. The effect of the photocatalyst concentration, the intensity of the radiation, etc. were observed. It

was found that of the tested photocatalysts, P25 and AV01 were the most effective, while PRETIOX CG100 was evaluated as the least suitable for applications in aqueous environments.

The authors wish to acknowledge financial support from the University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology.

- [1] Ameta, R and Ameta, S. C. Photocatalysis: principles and applications. Online. 20161021. Boca Raton: CRC Press, (2017). ISBN 978-1-4822-5493-8.
- [2] Andreozzi, R. Advanced oxidation processes (AOP) for water purification and recovery. Online. Catalysis Today, 53, 1, p. 51-59. (1999). ISSN 09205861.

5Po03

PROVOZNÍ PODMÍNKY MOBILNÍHO ZDROJE ENERGIE S PEM PALIVOVÝM ČLÁNKEM

Martin Paidar¹, Martin Prokop¹, Francesco Mazzeo¹, Lukáš Polák², Michaela Plevová¹

¹Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav anorganické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR, plevovamscht.cz

²ÚJV Řež, a. s., Hlavní 130, 250 68 Husinec-Řež, ČR

Palivový článok s protonově vodivou membránou (PEM – z angl. Polymer Exchange Membrane) je efektivní technologií pro přeměnu chemické energie na elektrickou. Mezi jeho hlavní výhody patří vysoká účinnost, jednoduchý provoz, flexibilita, tichý chod a netoxické produkty – vzniká pouze voda, teplo a elektřina. Díky tomu je vhodný i pro použití v uzavřených prostorech nebo v blízkosti lidí. Mobilní PEM jednotky mohou sloužit jako dočasný zdroj energie, například pro telekomunikační vysílače při výpadech.

Aby bylo možné zajistit spolehlivý provoz v různých podmínkách, je nutné navrhnout vhodný řídicí systém. Výkon palivového článku je ovlivněn okolní teplotou, vlhkostí a kvalitou vzduchu. V laboratorních podmínkách byl proto zkoumán vliv těchto faktorů – konkrétně teplota okolí, vlhkost plynů a přebytek vodíku či vzduchu.

Pomocí zátěžových křivek a analýzy elektrochemických impedančních spekter při různých napětích bylo možné identifikovat provozní režimy, které vedou ke snížení výkonu. Tyto poznatky budou využity při tvorbě algoritmů pro řízení mobilní jednotky PEM palivového článku.

Tato práce byla realizována s podporou Technologické agentury ČR v rámci projektu TK050200013.

AUTORSKÝ INDEX

A

Alföldyová B.....	82
Ali Y.....	114
Almáši M.....	77, 142, 148, 150
Ambati R.	83
Andreana M.	142
Andrejčák S.	152
Androvič L.....	95
Andrys R.....	97, 152
Arenillas A.....	138
Arnhold J.	162
Asenjo J. P.	77
Atri S.....	113
Augustín M.....	69

B

Baláž M.	82
Bálintová M.	116
Baran P.	90
Baráth M.....	82, 128
Barek J.....	69, 73
Barták P.	127
Bednárek J.	69, 129
Bedrnová E.	150
Benadada O.....	136
Benediková M.	137
Benesova S.....	97, 152
Benköová M.....	135
Bilská K.....	145
Bláhová E.	70
Blecha T.	132
Bober P.....	161
Boča M.	83, 88, 132
Bodík M.....	92
Bortňák D.	91
Bouzek K.	106, 107
Braunová A.....	100
Brázda V.....	117
Bruňáková K.	116
Bruncko J.....	123, 129, 165
Buchlová T.....	109
Budzák Š.....	92, 98, 163
Bujdák J.....	145
Bujdáková H.	145
Buzek F.....	115

C

Čákyová V.	70
Čambal P.	71, 109
Čapková P.....	136
Čarný T.....	93, 158
Čársky J.	103
Cejkova B.	115
Čekan P.....	98
Čerňanská M.	81
Červeňáková M.	84
Červený D.....	95
Ceznerová E.....	157
Chatterjee S.....	155
Chovan J.	72
Cibulková Z.	115, 117, 119, 125
Čierny O.	84
Cigán M.....	92, 98, 153, 163
Čmelík R.....	116
Čolláková K.	87
Čtrnáctová H.	102
Čubová K.....	71
Cucchiari A.	117
Curik J.	115

D

Daňhel A.....	116, 125
Das R.....	152
Dečmanová V.....	139
Dědeček J.....	85, 133
Demeterová J.	123
Denk K.	106
Derat E.....	97
Dobrovolná M.....	117
Dömötörövá M.....	121
Dostálková L.....	109
Doušova B.	140
Doušová B.	150
Dragounová A. K.	69
Drahoš B.....	85
Dubaj T.....	115, 117, 119, 125
Dube A.	71
Žuračková M.	114
Đurđić S.....	86
Dušková T.....	136
Džik P.....	132, 163

Dzurnáková L..... 153

E

Eckstein-Andicsová A. 153
 Ederer J..... 133
 Etrych T..... 100

F

Farkaš P..... 82
 Fedorková A. S. 77
 Feranc J..... 135
 Ferancová Z. 135
 Fícel M. 71
 Fiedler A..... 106
 Filip R..... 79
 Filipi D. 134
 Filo J..... 92, 98, 153, 163
 Fischer J..... 80, 112
 Flores-López S. L. 138
 Franc M. 95
 Friess K..... 136
 Fuchsova A. 152
 Furdíková K. 66

G

Galamboš M..... 74, 110, 113, 139
 Ganajová M. 102, 165
 Gardenö D..... 136
 Gavlová A. 69, 128, 129
 Gemeiner P. 86, 87, 109
 Gorejová R..... 72
 Grabarž M. A. 163
 Gregová K..... 86
 Greguš V..... 136
 Gubóová A. 77, 78
 Gurská M. 153

H

Habala L. 134
 Hajdúchová Z..... 135
 Hajduová D..... 99
 Haluz P. 164
 Hamala V..... 116, 125
 Hamalová K. 154
 Harbuťáková K..... 135
 Haško D..... 72, 124
 Haško M..... 81
 Hatala M. 87

Havlíček D. 73
 Havlíček M. 157
 Havlíčková K. 73
 Havlíková T. 109
 Hegedúsová L. 98, 163
 Henych J. 133
 Herchel R. 87
 Hergott P..... 154
 Herich P..... 73, 140
 Híveš J. 107
 Hlaváčková A..... 157
 Hlinková M..... 91
 Hnát J. 106, 107
 Hochvaldová L. 144
 Holotová V..... 68
 Horváthová E. 154
 Hoskovec J..... 136
 Hrachovinová I..... 157
 Hrašková E..... 94
 Hrdá E. 95
 Hrdá J. 145
 Hrdlička V. 76, 111
 Hricovíni M. 118
 Hricovíniová J. 134, 154
 Hricovíniová Z. 154
 Hrobárik P..... 130, 131, 141, 148
 Hrouzková S. 162
 Hrstka R..... 125
 Hruška A..... 69
 Hruška O..... 75, 94, 95
 Hudáková L. 142
 Hudečková H. 161
 Huliár S..... 153
 Human M. 145
 Huntošová V. 142
 Hupian M..... 110
 Huska L. 155
 Hvizdošová Annušová A. 157

I

Illášová M..... 110
 Ľnan S. 139
 Ivakh S..... 73
 Ivanisko M. 78

J

Jackova I..... 115
 Janata M. 94
 Janek M. 135
 Jarčuška P. 126
 Jarolímková J. 136, 138

Jarolímková K.	105
Jašňáková N.	74
Jendželovská Z.	139
Jendželovský R.	139, 142
Jerga R.	127
Jerigová M. ...	82, 110, 118, 119, 122, 123, 124, 127, 128, 129
Jirák D.	95
Jozefíková F.	88
Juračka D.	74, 110

K

Kamada K.	130, 141
Karban J.	116, 125
Kasák P.	82, 122, 128
Kastratovic N.	139
Kaule P.	136
Kelemenová T.	119
Kello M.	137
Kelnar I.	94
Kepeňová M.	137
Kerner L.	156
Kinnertová E.	150
Király N.	77, 79, 148
Király S.	126
Klempová T.	119
Kmentová I.	155, 159
Knapovská P.	120
Knittelova K.	97
Kodešová Z.	143
Kodým R.	106
Kohoutova Z.	97, 152
Kolářová H.	144
Koloušek D.	150
Kolská Z.	138, 143, 154
Konefał R.	100
Kořená L.	138
Kotlín R.	157
Kotulřáková K.	103
Kováč M.	86, 87
Kováčiková L.	97
Kováčová M.	157
Kovalčík A.	161
Kovalčín M.	153
Kovarik Z.	97
Kowalczyk S.	75
Kožišek J.	92
Kozmon S.	114, 120
Kracíková L.	95
Králová M.	132
Kreps F.	75, 94, 95
Krepsová Z.	95

Křížová A.	94
Krizova B.	152
Kromka A.	69, 106
Krtíl P.	68
Kubát M.	163
Kubešová J.	70
Kubíčková A.	112
Kubíková B.	88
Kuchár J.	142
Kudíková B.	132
Kumar P.	155
Kupcová E.	75
Kurjan J.	139
Kusumkar V.	139
Kusumkar V. V.	113
Kuzina A.	113
Kuzniarová M.	121
Kvítek L.	121, 144, 147

L

Labzova O.	111
Laga R.	95, 100
Lal H.	122
Lamberti A.	109
Langmaier J.	76
Lazar P.	92
Letošníková P.	102, 165
Lhotka M.	140, 150
Li X.	142
Lintnerová L.	140
Liška T. J.	96
Lištiak M.	88
Litecká M.	134, 137, 139
Lochyński P.	80
Lorenc D.	122
Lorencová L.	67, 110
Luptáková L.	82

M

M. J. X.	118
Mach M.	162
Mácová P.	147, 149, 158
Magdolen P.	153
Májek M.	67, 152
Májeková M.	97
Malinak D.	97, 152
Maršálek R.	103
Marton M.	69
Mašláňová H.	104
Masnicová K.	75, 94, 95
Mastihuba V.	164

Mastihubová M.	164
Mathradan A.	141
Matselko O.	88, 132
Matvieiev O.	111
Matyašovský J.	98
Maxová K.	150
Mayer B.	158
Mazzeo F.	166
Mečiarová M.	160
Medvecová V.	137
Medveď M.	92, 98, 163
Mergny J.	117
Micháliková M.	121
Michalka M.	165
Michalková R.	96
Michel'ová K.	142
Michnová K.	70
Migasová A.	142
Milata V.	91, 99, 103
Mlynáriková J.	88, 143
Mojžišová I.	72, 123
Moncol' J.	84, 88, 89
Moravcová D.	116
Mosnáček J.	153
Mosnáčková K.	153
Mravcová D.	93, 158
Mravec B.	92, 98, 163
Musilek K.	97, 152

N

Nádaždy P.	145
Navrátil J.	121
Navrátil T.	76, 111
Neděla V.	147
Nemec I.	89, 151
Netriová Z.	132
Neubertová V.	133, 138, 143, 154
Neugebauer P.	162
Niščáková V.	77
Noga J.	131
Nosko M.	87
Noskovičová E.	122, 123
Nutterová S.	81

O

Oboňová B.	134
Olbert M.	147
Ondruška A.	91
Oriňáková R.	70, 72, 74, 77, 78, 79, 123, 124, 126
Orovčík L.	82, 122, 128
Orság J.	159

Orvoš J.	84
Ostatná V.	116, 125
Osuský P.	141

P

Paidar M.	166
Palarčík J.	166
Panáček A.	121, 144, 147
Papoušková V.	162
Paračková M.	77, 78
Pasák M.	157
Pašková L.	134
Pašteka F. L.	92, 163
Patakyová S.	163
Patel N.	83
Pathak M.	159
Pavilek B.	99
Pavlík V.	83
Pechar M.	95, 100
Pedan A.	144
Peňaška T.	160
Perná I.	149
Perveen S.	89
Petrash D. A.	115
Petroš R.	103
Petrovová E.	82
Petrželová K.	104
Pfeifer R.	106
Pilař L.	150
Pisárčík M.	122
Plevová M.	107, 166
Pocklanová R.	121
Podrojková N.	77, 78
Pogány L.	89
Pokorná B.	82
Pola R.	100
Polák L.	166
Potocký Š.	106
Potočník I.	96, 137, 139
Prakash S.	80
Prášilová J.	104
Pražáková L.	80, 112
Prchalova E.	97
Pribus M.	145
Procházková E.	92
Prokop M.	166
Provazníková D.	157
Prucek R.	121
Pryjmaková J.	146
Puchoňová M.	88
Putala M.	100, 155, 156, 159, 161
Pytlíková S.	100

R

R. Š. X.	158
Ráhel J.	158
Rajamani R.	130, 131, 141, 148
Rakovský E.	130
Rapta P.	79, 162
Řepečká L.	129
Rontová F.	82
Roszkopfová O.	74, 110
Růžička A.	92
Rýček L.	109
Ryšánek P.	136

S

Šagátová A.	84
Šalitraš I.	84, 89
Salvadori K.	112
Samolová E.	96, 137
Sankaran K. J.	106
Sarvaš D.	118, 123, 124, 129
Schniererová K.	161
Schwarzová-Pecková K.	70, 71, 80, 109
Šebest P.	125
Šebesta R.	93, 101, 158, 160
Šedivý M.	162
Sedlák E.	68
Sedničková M.	157
Šefčík M.	80, 112
Seibert R.	115
Sekerová L. D.	94
Šelešovská R.	111
Semelová M.	71
Serbin R.	148
Serdiuk M.	156
Sesuraj B. A.	131
Ševčík R.	147, 149, 158
Sharma D. K.	106
Shepa I.	70, 79
Shepa J.	74, 79, 123, 124, 126
Shpotyuk Y.	82
Šícha V.	136
<u>Siegel J.</u>	146
Šiffalovič P.	92
Sigmundová I.	153
Silliková V. D.	132
Silná Z.	113
Šimko F.	143
Šimon P.	117, 125
Šimunková M. M.	88
Singh V.	113
Siri O.	112

Šišková-Opálková A.	87
Šišoláková I.	74, 79, 123, 124, 126
Sklenák Š.	85
Sklenářová T.	157
Skopalová J.	76, 127
Škvorová M.	136
Slabejová L.	124
Slašťanová S.	81
Šlouf M.	100
Šlouf M.	146
Slovák V.	75, 89, 138
Slušná P. S.	145
Šmídová A.	94
Smolárová N.	75
Smolko L.	139
Smolková R.	139
Smutná K.	128, 129
Sojková M.	145
Sokolová R.	109
Šoltés L.	162
Soták T.	113
Sotáková I.	102, 165
Souček I.	108
Soukupová E.	147
Sovová S.	135
Sovová Ž.	157
Špánek I.	66
Speranza R.	109
Špitálský Z.	157
Šramel P.	97
Stachurová T.	129
Stankovičová H.	159, 161
Štarha P.	90
Stehlík J.	121
Stehlík Š.	106
Steinhübllová B.	93, 158
Štěpánková Š.	126
Šterbinská S.	90
Števuřová R.	107
Stiborová S.	133
Štibrány L.	107, 108
Štolbová D.	127
Stratilová B.	114, 120
Strečková M.	77, 78
Stríž R.	161
Stupavská M.	122, 129
Suchánková L.	121, 147
Suman S.	106
Šupová M.	149
Šurinčíková I.	153
Suttner J.	157
Švandová V.	105
Švec P.	92

Svitková B.	90, 140
Svojanovská L.	116
Švorc L.	81, 86
Švorčík V.	138
Szabó O.	69, 106
Szarka A.	162
Szmuc K.	82

T

Takácsová M.	127
Taylor A.	80
Tesařová N.	166
Thalekela K. M.	148
Timková I.	68
Titiš J.	84
Tkáč J.	82, 128
Tokarová V.	133
Tóth Š.	108
Trejbal J.	108
Truchan D.	157

U

Uher M.	103
Unterhuber A.	142
Urbanová M.	133

V

Vadkertiová R.	154
Valachová K.	162
Valentová J.	90, 134, 140
Valentová K.	162
Válková L.	144
Valovičová M.	146
Varga R.	88
Vargová N.	148
Vargová Z.	135
Vasková Z.	88

Vaštyl M.	69
Végh D.	91
Vegso K.	92
Venhardt M.	66
Veselovsky F.	115
Veselý M.	132, 134
Viglasova E.	139
Viglašová E.	113
Vikartovský A.	82, 87, 110, 128
Vilková M.	96, 137
Vítová E.	120
Vitushkina S.	142
Vojs M.	106
Volarevic V.	139
Vostrá J.	108
Vráblová M.	129
Vrba J.	162
Vrbková E.	91, 149
Vykydalová A.	153
Vyskočil V.	69
Vyskočilová E.	91, 94, 149

Z

Zachrdlová D.	126
Zahornacký O.	126
Zahradníková E.	85, 151
Žaloudková L.	116
Zapletal M.	149
Zapletalová V.	162
Zárybnická L.	147, 149, 158
Zauška L.	150
Zelená L.	150
Zeleňák T.	148
Zelenka T.	148, 150
Zelenková G.	148
Zelinka M.	116
Zich M.	80
Ziółkowska N.	95
Zorbaz T.	97

PROGRAM PREDNÁŠOK

Pondelok 01.09.2025

🕒 13:00	Príchod účastníkov, registrácia a ubytovanie
🕒 17:00	Slávnostné otvorenie zjazdu, príhovory hostí
🕒 18:00	Martin VENHART BUDE OGANESÓN POSLEDNÝ? <i>plenárna prednáška</i> <i>Sála GRAND BELLEVUE</i>
🕒 19:00	Uvítací večierok

Utorok 02.09.2025

🕒 08:30	Katarína FURDÍKOVÁ VINUM REGUM, REX VINORUM: TOKAJ – SKRYTÝ KLENOT SLOVENSKEHO VINÁRSTVA <i>predsedajúci: Peter Šimon</i> <i>pozaná prednáška</i> <i>Sála BELLEVUE I</i>
------------	--

Sekcia 1 – Analytická chémia a fyzikálna chémia

predsedajúci: Renáta Oriňaková
Sála BELLEVUE I

🕒 09:40	Tomáš Navrátil FENTANYLY, JEJICH DERIVÁTY A SMĚSI S JINÝMI NÁVYKOVÝMI LÁTKAMI – JEJICH ANALÝZA A FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÉ CHARAKTERIZACE
🕒 10:00	Peter Rapta REDOX ACTIVITY AND CYTOTOXICITY OF COPPER AND ZINC COMPLEXES WITH A TMS-SUBSTITUTED INDOLO [2,3-C]QUINOLINE-DERIVED SCHIFF BASE
🕒 10:20	Kristína Masnicová MUCHOVNÍK – ZDROJ ANTIOXIDAČNE AKTÍVNYCH LÁTKOK
🕒 10:40	Kávová prestávka

Sekcia 5 – Chemprogress - chemické technológie

predsedajúci: Ján Híveš
Sála BELLEVUE II

🕒	Ladislav Štibrányi SORPTION EFFICIENCY OF NEW ZEOLITE-MINERAL COMPOSITES, HUMIC PREPARATES, AND BIO-BASED CARBON TYPE PROTOTYPES ON PCBs CONTAINED IN HIGHLY CHLORINATED PREPARATION OF DELOR 106
🕒	Karel Denk VLIV SEPARÁTORU NA TRANSPORT HMOTY A NÁBOJE V ALKALICKÉM ELEKTROLYZÉRU VODY: MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ A EXPERIMENTÁLNÍ ANALÝZA
🕒	Alexander Kromka NANOSTRUCTURED BORON-DOPED DIAMOND ELECTRODES FOR HIGH-PERFORMANCE ELECTROCHEMICAL SUPERCAPACITORS
🕒	Kávová prestávka

	<i>predsedajúci: Peter Rapta, Sála BELLEVUE I</i>		<i>predsedajúci: Ján Híveš, Sála BELLEVUE II</i>
🕒 11:00	Lubomír Švorc VSÁDZKOVÁ INJEKČNÁ ANALÝZA S ELEKTROCHEMICKOU DETEKCIOU AKO UŽITOČNÝ PROSTRIEDOK V POTRAVINÁR- SKEJ A FARMACEUTICKEJ PRAXI	🕒	Michaela Plevová PŘÍPRAVA NIFE LDH KATALYZÁTORU PRO REAKCI VÝVOJE KYSLÍKU POMOCÍ ELEKTRODEPOZICE NA NIKLOVOU PĚNU
🕒 11:20	David Havlíček CHEMICKÉ SLOŽENÍ PODZEMNÍCH VOD V DEMÁNOVSKÉ DOLINĚ JAKO NÁSTROJ PRO HLEDÁNÍ SOUVISLOSTÍ MEZI JESKYNNÍMI SYSTÉMY ŠTEFANOVÁ A DEMÁNOVÁ	🕒	Jana Vostrá TECHNICKO-EKONOMICKÉ POSOUZENÍ VÝROBY E- METHANOLU
🕒 11:40	Elena Kupcová LPME AKO ÚČINNÁ TECHNIKA PRE ISOLÁCIU ANALYTŮ Z KOMPLEXNÝCH VZORIEK	🕒	Renáta Števuľová PRÍTOMNOSŤ PCB NA SLOVENSKU – SPÔSOB SANÁCIE
🕒 12:00	Karolina Schwarzková-Pecková ELECTROCHEMICAL CELLS WITH BORON DOPED DIAMOND ANODES FOR OF OXIDATION OF XENOBIOTICS		
🕒 12:15	Obed		

Utorok 02.09.2025

🕒 13:30	Lenka LORENCOVÁ MXÉNY: PERSPEKTÍVA Z POHLADU BIO/SENZOROV <i>predsedajúci: Lubomír Švorc pozvaná prednáška Sála BELLEVUE I</i>		
------------	---	--	--

	Cena Shimadzu <i>komisia: Shimadzu, SChemS a ČSCH</i> <i>Sála BELLEVUE I</i>		Sekcia 3 – Organická chémia a polyméry <i>predsedajúci: Tomáš Čarný</i> <i>Sála BELLEVUE II</i>
🕒 14:40	Zuzana Silná POROVNANIE ZEOLITOV A KYSLÝCH IÓNOMENIČOV AKO KATALYZÁTOROV PRE PRÍPRAVU ADITÍVA DO DIESELOVÝCH PALÍV	🕒	Magdaléna Májeková ALDOSE REDUCTASE INHIBITORS – STRUCTURE, MODE OF ACTION, AND SELECTIVITY
🕒 15:00	Martina Illášová ANALÝZA MIERY ROZLOŽITEĽNOSTI VLHČENÝCH UTIEROK	🕒	Tomáš Ján Liška HYBRIDNÉ AKRIDÍN- TIAZOLIDINÓNY: SYNTÉZA, NMR A DFT CHARAKTERIZÁCIA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA
🕒 15:20	Tatiana Buchlová SÓL-GÉLOVÉ SPOJIVÁ PRE TLAČENÉ KOMPOZITNÉ BIOCHAR/TiO ₂ PROTIELEKT- RÓDY V INTERIÉROVÝCH FARBIVOM SENZI- BILIZOVANÝCH SOLÁRNYCH ČLÁNKOCH	🕒	David Maliňák HALOGENATED PYRIDINIUM OXIMES REACTIVATING ORGANOPHOSPHATES-INHIBITED CHOLINESTERASES
🕒 15:40	Kávová prestávka	🕒	Kávová prestávka

	<i>komisia: Shimadzu, SChemS a ČSCH, Sála BELLEVUE I</i>		<i>predsedajúci: Michal Májek, Sála BELLEVUE II</i>
⌚ 16:00	Marek Hupian SEPARÁCIA RÁDIOIZOTOPOV Ni A STANOVENIE ICH AKTIVITY VO VZORKE RÁDIOAKTÍVNEHO ODPADU S VYUŽITÍM 3D TLAČE	⌚	Tomáš Čarný MECHANOCHEMICAL CROSS-COUPPLINGS OF ORGANOZINC COMPOUNDS
⌚ 16:20	Vesaj Singh ADSORPTIVE REMOVAL OF RADIOACTIVE ¹³³ Ba USING MXENE-BASED MATERIAL: INFLUENCE OF pH AND CONTACT TIME	⌚	Radovan Šebesta MECHANOCHEMICKÉ PALÁDIOM-KATALYZOVANÉ CROSS-COUPLINGOVÉ A KARBONYLAČNÉ REAKCIE
⌚ 16:40	Lucie Pražáková MONITOROVÁNÍ DEGRADACE LÉČIV: SROVNÁNÍ ON-LINE A OFF-LINE PŘÍSTUPU	⌚	Martin Putala C–H ARYLATION OF BIARYL SUBSTRATES
⌚ 17:00	Oleksandra Labzova A NEW METHOD FOR DETECTING TRAZODONE IN BIOLOGICAL FLUIDS	⌚	Bernard Mravec HETEROARYL ESIP-BASED HYDRAZONE PHOTOSWITCHES
⌚ 17:20	Karolína Salvadori STUDIUM KOMPLEXAČNÍCH VLASTNOSTÍ MOČOVINOVÝCH RECEPTORŮ PREORGANIZOVANÝCH AZACALIXARENÝMI NOSIČI	⌚	Marek Cigáň PHOTOSWITCHING OF TRIARYLHYDRAZONES IN THE SOLID STATE
⌚ 17:40	Lucie Dostálková USE OF IR SPECTROELECTROCHEMISTRY AND MASS SPECTROMETRY TO STUDY THE OXIDATION MECHANISMS OF SYNTHETIC SELAGINPULVILINS	⌚	František Kreps VZNIK CYTOTOXICKÉHO GAMATOKOFLERYLCHINÓNU POČAS VYPRAŽANIA HRANOLIEK V REPKOVOM OLEJI
⌚ 18:00	Večera		
⌚ 20:00	Posterové prezentácie, Pívno-vínny večer		

Streda 03.09.2025

⌚ 08:30	Michal MÁJEK REAKCIE VYVOLANÉ PRENOSOM ELEKTRÓNU – POMOCOU SVETELNEJ, ELEKTRICKEJ A MECHANICKEJ ENERGIE <i>predsedajúci: Viktor Milata pozvaná prednáška Sála BELLEVUE I</i>
------------	---

	Sekcia 1 – Analytická chémia a fyzikálna chémia <i>predsedajúci: Lubomír Švorc Sála BELLEVUE I</i>		Sekcia 3 – Organická chémia a polyméry <i>predsedajúca: Magdaléna Májeková Sála BELLEVUE II</i>
⌚ 09:30	Eva Bláhová VOLTAMETRICKÉ CHOVÁNÍ OXYSTEROLŮ	⌚	Branislav Pavilek VYUŽITIE DERIVÁTOV KYNURÉNOVEJ KYSELINY V LIEČBE ALZHEIMEROVEJ CHOROBY
⌚ 09:50	Michal Augustín PILOTNÍ STUDIE ELEKTROCHEMICKÉ REDUKCE VYBRANÝCH NUKLEOTIDŮ A DVOUVLÁKNOVÉ DNA NA NEMODIFIKOVANÝCH MIKROKRISTALICKÝCH DIAMANTOVÝCH ELEKTRODÁCH DOPOVANÝCH BOREM PŘI VELMI NEGATIVNÍCH POTENCIÁLECH	⌚	Dušan Bortňák SYNTÉZA AMFIFILNÝCH DERIVÁTOV BENZIMIDAZOLU AKO POTENCIÁLNÝCH ANTINEOPLASTÍK

🕒 10:10	Peter Čambal REDUCTION OF AZO DYES IMMOBILIZED ON THE SURFACE OF BORON DOPED DIAMOND ELECTRODE FOR FURTHER BIOFUNCTIONALIZATION	🕒	Ondrej Hruška ENKAPSULÁCIA KYSELINY ASKORBOVEJ PRE POUŽITIE V KOZMETICKOM GÉLI
🕒 10:30	Kávová prestávka	🕒	Kávová prestávka
	<i>predsedajúci: Tomáš Navrátil, Sála BELLEVUE I</i>		<i>predsedajúci: Branislav Pavílek, Sála BELLEVUE II</i>
🕒 10:50	Renáta Oriňaková INOVATÍVNE KATALYZÁTORY PRE ELEKTROCHEMICKÝ ROZKLAD VODY	🕒	Ivan Kelnar MODIFIKACE VLASTNOSTÍ A STRUKTURY CHITIN- GLUKANOVÉHO KOMPLEXU S VYUŽITÍM IONTOVÝCH KAPALÍN
🕒 11:10	Natália Podrojková PRECHODNÉ KOVOVÉ FOSFIDY AKO PERSPEKTÍVNE ELEKTROKATALYZÁTORY PRE REAKCIU VYLUČOVANIA VODÍKA	🕒	Richard Laga DESIGN OF POLYMER THERANOSTICS FOR HETERONUCLEAR MR IMAGING AND TARGETED CANCER THERAPY
🕒 11:30	Mária Paračková VÝVOJ A CHARAKTERIZÁCIA VIACPRVKOVÉHO KATALYZÁTORA PRE ALKALICKÚ ELEKTROLÝZU VODY	🕒	Lada Dolejšová Sekerová MOLECULAR IMPRINTING: OPTIMIZING REACTION PARAMETERS FOR TARGETED EXTRACTION
🕒 11:50	Michal Fícel ŠTÚDIUM ELEKTRODEPOZÍCIE VYBRANÝCH KOVOV Z IÓNOVÝCH KVAPALÍN	🕒	Michal Pechar STIMULI-RESPONSIVE SUPRAMOLECULAR POLYMER SYSTEMS FOR DRUG AND GENE DELIVERY
🕒 12:10	Dominik Juračka VALIDÁCIA PRACOVNÉHO POSTUPU NA STANOVENIE UHLÍKA-14 VO VZORKÁCH POCHÁDZAJÚCICH Z JADROVÝCH ZARIADENÍ	🕒	Ján Matyašovský PRÍPRAVA A VYUŽITIE OLIGONUKLEOTIDOV S TERMINÁLNOU DIFOSFÁTOVOU SKUPINOU
🕒 12:30	Obed		

Streda 03.09.2025

🕒 13:30	Petr KRTIL RACIONÁLNI DESIGN (ELEKTRO)KATALYTICKY AKTIVNÍCH MATERIÁLŮ – ZÁKLAD ENERGETICKÉ KONCEPCIE TŘETÍHO TISÍCILETÍ <i>predsedajúca: Renáta Oriňaková pozvaná prednáška Sála BELLEVUE I</i>		
------------	---	--	--

Sekcia 1 – Analytická chémia a fyzikálna chémia <i>predsedajúca: Ivana Šišoláková Sála BELLEVUE I</i>		Sekcia 2 – Anorganická chémia a materiálová chémia <i>predsedajúci: Ivan Šalitroš Sála BELLEVUE II</i>	
🕒 14:30	Radka Gorejová DEPOZÍCIA HYDROXYAPATITU NA PRÁŠKOVÝ ZINOK AKO VÝCHODISKOVÝ MATERIÁL PRE PRÍPRAVU BIODEGRADOVATELNÝCH IMPLANTÁTOV	🕒	Jindra Valentová MEĎNATÉ KOMPLEXY SCHIFFOVÝCH ZÁSAD ODVODENÉ OD PYRIDÍN-2- KARBALDEHYDU-N-OXIDU: ŠTÚDIUM ICH INTERAKCIE S BIOMOLEKULAMI (DNA, BSA) A PROTINÁDOROVEJ AKTIVITY
🕒 14:50	Viktória Čákyová ROZLOŽITEĽNÉ ZINKOVÉ BIOMATERIÁLY S PLA POVLAKOM	🕒	Matúš Lištiak SALICYLÁTOMEĎNATÉ KOMPLEXY

			S FENANTROLÍNOM V SLUŽBÁCH BIOLÓGIE
🕒 15:10	Samuel Kowalczyk MATERIÁLY PRO SELEKTIVNÍ ADSORPCI BIOMOLEKUL	🕒	Slavomíra Šterbinská NOVEL HALF-SANDWICH Rh(III) COMPLEXES AS POTENTIAL ANTICANCER DRUGS
🕒 15:30	Kávová prestávka	🕒	Kávová prestávka
	<i>predsedajúci: David Havlíček, Sála BELLEVUE I</i>		<i>predsedajúca: Jindra Valentová, Sála BELLEVUE II</i>
🕒 15:50	Jana Shepa GLUKÓZOVÉ SENZORY NA BÁZE TiO ₂ MATERIÁLOV	🕒	Radovan Herchel VYUŽITIE KVANTOVEJ CHÉMIE PRE VÝSKUM MAGNETIZMU KOMPLEXOV ŽELEZA
🕒 16:10	Nikola Jašňáková VYUŽITIE ZLATÝCH NANOČASTÍČ PRI DETEKCII RÔZNYCH BIOANALYTŮV	🕒	Michaela Červeňáková MAGNETOAKTÍVNE ZLÚČENINY MEDI - CESTA KOVOVÝCH KOMPLEXOV K CIEĽU MOLEKULY DNA
🕒 16:30	Sofia Ivakh ON-SITE DETECTION OF SALINOMYCIN USING TUNED AMALGAM PRINTED ELECTRODE PLATFORMS	🕒	Oliver Čierny LIGHT-INDUCED ISOMERIZATION OF AZOPHENYL MOIETY IN SCO ACTIVE Fe(II) COMPLEX
🕒 16:50	Veronika Niščáková OD VANÁDU K ORGANICKÝM MOLEKULÁM: NOVÁ GENERÁCIA ELEKTROLYTOV PRE PRIETOKOVÉ BATÉRIE	🕒	Ivan Šalitroš THERMALLY AND LIGHT-INDUCED SPIN CROSSOVER IN IRON(III) COMPLEXES WITH BENZOPHENONE-BASED PENTA- AND HEXADENTATE SCHIFF BASE LIGANDS
🕒 17:10	Jan Bednárek ODSTRANĚNÍ KONTAMINANTŮ Z VOD POMOCÍ AKTIVNÍHO UHLÍ NA BÁZI ŠÍŠEK BOROVICE ČERNÉ	🕒	Blanka Kubíková SOLUBILITY INVESTIGATION OF SELECTED RE ₂ O ₃ IN (LIF-NAF)EUT VS (LIF-NAF-REF ₃) MOLTEN SYSTEMS
🕒 17:30	Daniel Haško THE CARLA PROGRAMS AS A FRAMEWORK FOR MULTIDISCIPLINARY CAREER PATHWAYS IN PHOTONICS	🕒	Miroslav Boča KEY ASPECTS IN CORROSION OF SUPERALLOYS IN MOLTEN FLUORIDE SALTS
🕒 18:00	Večera		
🕒 20:00	Slávnostný večierok	Odovzdávanie ocenení	Výhodnotenie posterových súťaží

Štvrtok 04.09.2025

🕒 09:00	Erik SEDLÁK METÓDY EVOLÚCIE PROTEÍNOV VO VÝVOJI ENZÝMOV <i>predsedajúci: Tomáš Navrátil pozvaná prednáška Salónik SILVER</i>		
	Sekcia 2 – Anorganická chémia a materiálová chémia <i>predsedajúci: Matej Baláž</i> <i>Salónik SILVER</i>	Sekcia 4 – Vyučovanie, popularizácia a história chémie <i>predsedajúca: Mária Ganajová</i> <i>Salónik KRISTAL</i>	
🕒 10:00	Miroslav Kováč VYUŽITIE BIOCHARU V SIEŤOTLAČENÝCH ELEKTROCHEMICKÝCH SENZOROCH NA DETEKCIU SARKOZÍNU	🕒	Viktor Milata SPOLOČNÉ ZJAZDY SLOVENSKÝCH A ČESKÝCH CHEMIKOV V BANSKEJ ŠTIAVNICI
🕒 10:20	Bohuslav Drahoš OPTIMALIZACE SYNTÉZY	🕒	Hana Čtrnáctová ODBORNÁ SKUPINA CHEMICKÉHO

	MAKROCYKLICKÝCH LIGANDŮ S VYUŽITÍM LINEÁRNÍCH PUMP A PRŮTOČNÉHO REAKTORU		VZDĚLÁVÁNÍ JAKO VÝZNAMNÁ SOUČÁST ČSCH
🕒 10:40	Jiří Dědeček NEW ACTIVE SITE FOR ACTIVATION OF MOLECULAR OXYGEN BY SPLITTING – NON-PARALLEL NON-AXIAL BINUCLEAR Fe SITES	🕒	Kamila Petrželová OD ZÁŽITKU K POROZUMĚNÍ: AFEKTIVNÍ PŘÍNOS EXKURZÍ VE VÝUCE PRŮMYSLOVÉ CHEMIE
🕒 11:00	Kávová prestávka	🕒	Kávová prestávka
	<i>predsedajúci: Jiří Dědeček, Salónik SILVER</i>		<i>predsedajúca: Katarína Kotuláková, Salónik KRISTAL</i>
🕒 11:20	Katarína Gregová UDRŽATEĽNÁ MODIFIKÁCIA 3D TLAČENÝCH UHLÍKOVÝCH SENZOROV: PLAZMOVÁ DEGRADÁCIA PLA A ELEKTROPOLYMERIZÁCIA VODIVÉHO POLYMÉRU PEDOT	🕒	Mária Ganajová ROZVOJ DIGITÁLNYCH KOMPETENCIÍ BUDÚCICH UČITEĽOV PRÍRODNÝCH VIED
🕒 11:40	Matej Baláž MECHANOCHEMICKÁ SYNTÉZA HYDROXYAPATITU ZA VYUŽITIA VAJEČNEJ ŠKRUPINY: PREDPOKLADY A PRVÉ EXPERIMENTY	🕒	Jana Prášilová JE TRÍHODINOVÁ PŘEDNÁŠKA PŘEŽITKEM?
🕒 12:00	Marek Baráth SYNTHESIS OF $Ti_3C_2T_x$ MXENE BY ETCHING WITH VARIOUS FLUORIDES	🕒	Veronika Švandová UČIT SE UČIT – WEBOVÝ PORTÁL NA PODPORU STUDENTŮ UČITELSTVÍ
🕒 12:20	Eva Vrbková CATALYTIC PERFORMANCE OF MODIFIED MONTMORILLONITES IN THE PRINS REACTION OF INDENE WITH PARALDEHYDE	🕒	Roman Maršálek VYUŽITÍ CHATGPT PRO TVORBU ÚLOH Z OBLASTI CHEMICKÝCH VÝPOČTŮ
🕒 12:40	Václav Slovák VRSTVA PORÉZNÍHO UHLÍKU NA KERAMICKÉM NOSIČI	🕒	Katarína Kotuláková RODOVÉ ROZDIELY V ROZVOJI SPÔSOBILOSTÍ VEDECKEJ PRÁCE
🕒 13:00	Obed		



Štvrtok 04.09.2025

Workshop Metrohm

14:00 – 14:15	Privítanie a otvorenie workshopu	
14:15 – 15:00	Predstavenie jednotlivých úloh a úvodné prednášky	
15:00 – 16:30	Práca na jednotlivých úlohách	
16:30 – 16:45	Kávová prestávka	
16:45 – 18:15	Práca na jednotlivých úlohách	
18:15 – 18:25	Spoločné fotografovanie	
18:30 – 20:00	Večera	
20:00 – 24:00	Spoločenský večer	



Piatok 05.09.2025

Workshop Metrohm

08:30 – 10:00	Práca na jednotlivých úlohách	
10:00 – 10:15	Kávová prestávka	
10:15 – 11:45	Práca na jednotlivých úlohách	
11:45 – 12:30	Diskusia	
12:30 – 12:45	Ukončenie workshopu	
12:45 – 14:00	Obed	