

Studentská odborná konference
Chemie je život 2017

Sborník abstraktů

Vysoké učení technické v Brně
Fakulta chemická, 23. března 2017



Sponzorem konference je společnost Teva Czech Industries s.r.o.

Zvláštní ceny pro autory příspěvků zahrnujících zajímavé použití chemických analytických postupů věnuje firma Synthon.



Studentská odborná konference *Chemie je život 2017*
Sborník abstraktů

Editor: Ing. Petr Dzik, Ph.D.

Nakladatel: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická,
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno

Vydání: první

Rok vydání: 2017

Náklad: 100 ks

ISBN: 978-80-214-5488-0

Tato publikace neprošla redakční ani jazykovou úpravou

Obsah

Sekce středoškolských studentů Tématický okruh organická, enviromentální a biochemie

Sledování účinků kyseliny β -aminomáselné na rajče.....	10
Aneta Autratová, Anežka Zádňíková	
Stanovení ergotových alkaloidů	11
Jan Bednář	
Stanovení sójových fytoestrogenů v potravinách	12
Lenka Jílková	
Porovnávání metod měření koncentrace proteinů	13
Filip Karásek, Martin Siegl	
Růst enterotoxigenních kmenů <i>Bacillus cereus</i> v kojeneckém mléce	14
Dominika Krčálová	
Výroba a charakterizace bionafty	15
Zdeňka Hartmanová, Jitka Odehnalová	
Mikrobiologická kontaminace kosmetických výrobků	16
Lenka Pavlíková, Terezie Plucarová	
Stanovení obsahu amiloridu a hydrochlorothiazidu.....	17
Klaudie Ramszová	
Stanovení obsahu antioxidantů v zeleném čaji.....	18
Markéta Štejdířová	
Problematika výskytu farmaceutických látek v životním prostředí a možnosti jejich eliminace.....	19
Jan Vespalec	

Sekce středoškolských studentů Tématický okruh anorganická chemie, materiálové vědy a inženýrství

Studium paschenova zákona.....	21
Gabriel Janovský	
Vliv doby krystalizace a teploty při krystalizaci na fotokatalytické účinky TiO ₂ :3 a ZrO ₂ v látkovém poměru	22
Petr Lodňánek	
Závislost chemiluminiscence na reakčních podmínkách	23
Jakub Martikan, Vojtěch Musil	

Struktura nukleových kyselín na površích elektrod.....	24
Dan Prokop	
Validace rentgenového fluorescenčního spektrometru NITON XL ₃ GOLDD+.....	25
Natálie Říhová	
Optimalizace stanovení isoform metalothioneinu pomocí kapilární elektroforézy	26
Alžběta Sedláčková	

*Sekce studentů bakalářských a magisterských studijních programů
Tématický okruh organická, environmentální a biochemie*

Tvorba svetlom indukovaných proteolytických enzýmů vláknitej huby <i>Trichoderma atroviride</i>	28
Bc. Helena Galádová	
Využitie magnetických častíc pre izoláciu DNA zo sušenej papriky.....	29
Bc. Martina Gaňová	
Monitoring psychoaktívnych látok na území Moravy	30
Bc. Nikolas Gróf	
Využití magnetických částic při izolaci DNA z rybízových džemů	31
Bc. Aneta Hronová	
Možnosti využití iontových kapalin pro separaci biocidů na bázi halogenovaných organických kyselin z vod	32
Barbora Kamenická	
Anaeróbne spracovanie výpalkov z výroby liehu	33
Bc. Dominik Krafčík	
Využití výlisků z výroby vína pro odstraňování mědi z odpadních vod	34
Bc. Jakub Křikala	
Modifikácie hyaluronanu kyselinou cholovou a využitie týchto derivátov pre nosičové aplikácie	35
Klaudia Kvaková	
Bioresorbovatelné polyuretány s riaditeľnými mechanickými vlastnosťami	36
Bc. Emil Letavaj	
Zařízení pro izolaci DNA magnetickými částicemi.....	37
Bc. Milan Němeček,	
Anaeróbne spracovanie biomasy z výroby penicilínu a jeho kofermentácia s odpadovou biomasou z výroby cystínu	38
Matúš Palguta	
Využití magnetických částic při izolaci DNA z cibule a brokolice	40
Bc. Lucie Ráčková	
Identifikace mikroorganismů v kosmetických výrobcích s obsahem probiotik.....	41

Bc. Denisa Romanovská	
Vplyv vybraných liečiv na rýchlosť odstraňovania organického substrátu.....	42
Bc. Petra Szabová	
Analýza mikrobiálneho zložení vybraných probiotických výrobkov metodou PCR.....	43
Bc. Barbora Tomanová	
Využití neuronových sítí k urychlení cesty biotechnologie Hydal na globální trh.....	44
Martin Vaněk	
Ovplyvnenie molekulovej hmotnosti kyseliny hyalurónovej zmenou fermentačného procesu	45
Monika Wikarská	

*Sekce studentů bakalářských a magisterských studijních programů
Tématický okruh anorganická chemie, materiálové vědy a inženýrství*

Elektrochemická charakterizácia Cu katalyzátorov.....	47
Jana Bodišová	
Příprava a studium reaktivity série N,N' -alkylovaných derivátů DPP pro organickou elektroniku	48
Bc. Martin Cigánek	
Syntéza organických pevnofázových fluorescenčních barviv na bázi para-bis(2- thienyl)phenylenu	49
Bc. Ján Jančík	
Catalyzed Conversion of Lignin.....	50
Anton Lisý	
Vedlejší energetické produkty jako surovinová základna budoucnosti	51
Bc. Michal Marko	
Lehké kompozity na bázi fluidních filtrových popílků.....	52
Jakub Palovčík	
Tvarování hydroxyapatitu na mikro úrovni metodou freeze-casting pro přípravu kostních náhrad	53
Lucie Pejchalová	
Pressureless Sintering of Boron Carbide	54
V. Rákošová	
Výroba metanolu z tuhého komunálního odpadu.....	55
Patrik Šuhaj	
Vliv strukturních a procesních parametrů na vlastnosti polymerních nanokompozitů	56
Bc. Klára Zárybnická	

*Sekce studentů doktorských studijních programů
Tématický okruh organická, environmentální a biochemie*

Förster Resonance Energy Transfer in Cationic Micelles Using Perylene-Fluorescein as Donor-Acceptor System	58
Zuzana Adamcová	
Preparation and characterization of liposomes as cosmetic delivery systems	59
Jitka Bokrová	
Determination of Lipid Membrane Properties and Influence of Cholesterol	60
Jana Burdíkova	
Astaxanthin production by <i>Haematococcus pluvialis</i> under various stress conditions	61
Ing. Dana Byrtusová	
Development of a Micro Method for DNA Isolation Using Magnetic Nanoparticles.....	62
Ing. Lenka Fialová	
Use of terrestrial gastropods in the ecotoxicological research	63
Mgr. Pavel Fojt	
Time-resolved Fluorescence of Prodan in Micellar Solution of Cetyltrimethylammonium Bromide	
Petra Holínková	
The comparison of the concentrations of platinum and palladium in Brno and Moscow	65
Stanislav Ježek	
Development of Materials Based on Hyaluronic Acid's Hydrogels for Myocardial Regeneration	66
Lenka Kohutová	
Occurrence of Macrolide Antibiotics in Waste Waters	67
Pavλίna Landová	
Use of Fluorescence and Bacterial Autofluorescence in Biotechnological Processes.....	68
Lucie Müllerová	
Analysis of Black Inkjet Prints by Atomic Force Microscope Infrared-Spectroscopy (AFM-IR) and Surface-Enhanced Infrared Absorption Spectroscopy (SEIRAS)	69
Michal Oravec	
High-Throughput Optimization of Red Yeast Cultivation Conditions Using FITR And Raman Spectroscopy.....	70
Marek Rapta	
Development of DGT technique for determination of hazardous metals in food matrixes: Step I – preparation of sorption gel.....	71
Marek Reichstädter	

Comparison of metabolic activity, morphology and potential use of carotenogenic yeasts for production of high value products using fluorescence techniques	72
Martin Szotkowski Nadzeya Mikheichyk, Ivana Márová	
Removal of Pharmaceuticals by Combinations with Ozone	73
Tereza Švestková	
Artificial sweeteners and their occurrence in the environment	74
Libuše Vítková	
Screening of Yeast Strains for Simultaneous Saccharification and Fermentation of Waste Paper	75
Miroslava Zichová	

Sekce studentů doktorských studijních programů
Tématický okruh anorganická chemie, materiálové vědy a inženýrství

Morphology study of 2-ethylhexyl acrylate/cellulose acetate propionate microcapsules prepared via solvent evaporation technique	77
Tomáš Arvai	
Mechanochemical treatment of talc.....	78
Jan Bednárek	
Thin Films of Tetravinylsilane Characterized by Spectroscopic Ellispometry	79
Martin Bránecký,	
Possibilities of elimination of ammonia slip from technological water in power plants.....	80
Hajzler Jan, Ing.	
Synthesis of Metallic Nanoparticles by Electrical Discharge in the Liquid.....	81
Jakub Horák	
Screen Printing and Characterization of Thick Layer Electroluminescence Panels	82
Michal Hrabal	
Hydrogels based on cationic polyelectrolytes	83
Sabína Jarábková	
Characterization of colloid particles by excited-state proton transfer with advanced fluorescence techniques	84
Jan Kotouček Miloslav Pekař, Jakub Mondek	
Effect of Solvent in the Deformation Behavior of Hydrogels.....	85
Eva Kulovaná	

Involvement of photovoltaic panels and heat pumps for family houses and their subsequent regulations to obtain maximum energy self-sufficiency	86
Petr Levek	
Comparison of peroxides for radical induced grafting of maleic anhydride onto polypropylene via reactive extrusion.....	87
Jana Matláková	
Screen Printing of Organic Electrochemical Transistor for real-time cell culture monitoring.....	88
Lukáš Omasta	
Development of Novel Chiral Biphenyl-Based Bis(thiourea) Organocatalysts for Asymmetric Henry Reaction	89
Jan Otevřel	
The study of aging of writing inks in blue ballpoint pens by GC-MS	90
Silvia Parciová	
Nanoscratch Testing of Thin Films Prepared by Plasma Polymerization from the Vapour Phase of Tetra vinylsilane Monomer.....	91
Tomáš Plichta	
Full printed organic electrochemical transistors	92
Stanislav Stříteský, Lukáš Omasta,	
Effect of counterion on rheological properties of hydrogels prepared from hyaluronan and oppositely charged surfactant.....	93
Tomáš Velcer	

Sekce středoškolských studentů

Tématický okruh organická, environmentální a biochemie

Sledování účinků kyseliny β -aminomáselné na rajče

Aneta Autratová, Anežka Žádníková

konzultant: Mgr. Hana Holubová

konzultant: Mgr. Martin Solanský

Střední průmyslová škola chemická, příspěvková organizace

Vranovská 65, 621 00 Brno, Česká republika

anetauratova@seznam.cz, chroaza@gmail.com

V této práci jsou sledovány účinky kyseliny β -aminomáselné (BABA) na rostlinu rajčete jedlého (*Solanum lycopersicum* cv. *Marmande*) z hlediska koncentrace BABA a doby jejího působení. BABA je aminokyselina vyznačující se tím, že se u některých rostlin chová jako elicitor. To znamená, že umí vyvolat podobnou obrannou reakci, jakou vyvolává patogenní organismus, kdy posílí celkovou odolnost rostliny vůči celému spektru patogenních mikroorganismů. Toho by se v budoucnu mohlo využívat pro biodegradabilní postřiky, které by rostlinu přirozenou cestou ochránily před patogenními organismy.

Stanovení ergotových alkaloidů

Jan Bednář

Externí vedoucí a konzultant: Ing. Martina Čumova, Ph.D.

Školní vedoucí práce a konzultant: Ing. Tomáš Burianek

Střední průmyslová škola chemická Brno, Vranovská, příspěvková organizace

Vranovská 65, 614 00, Brno – Husovice, Česká republika

Jan.Bednar.96@seznam.cz

Ergotové alkaloidy jsou mykotoxiny produkovány převážně houbami z rodu *Claviceps*, které parazitují na obilovinách a některých travách. Tato práce se zabývá stanovením těchto alkaloidů ve sklerociích, jejichž množství je legislativně regulováno jak v potravinách, tak v krmivech.

V rámci předkládané studie byla vyvinuta a optimalizována metoda, využívající moderní analytické postupy a instrumentaci založené na využití kapalinové chromatografie ve spojení s hmotnostně spektrometrickou detekcí. Tato metoda byla použita pro monitorování obsahu alkaloidů ve sklerociích, které pocházely z různých odrůd ječmene, pěstovaného v různých lokalitách v České republice. Dalek byl stanoven obsah ergotových alkaloidů v pšeničných sklerociích a v krmivech.

Klíčová slova – hmotnostní spektrometr; krmivo; mykotoxiny; namelové alkaloidy; QuEChERS; sklerocie; ultra účinný kapalinový chromatograf

Stanovení sójových fytoestrogenů v potravinách

Lenka Jílková
Mgr. Tomáš Kašparovský, Ph.D.
Ing. Tomáš Buriánek

*Střední průmyslová škola chemická Brno, příspěvková organizace,
Vranovská 65, 614 00 Brno-Husovice
lenka.jilek@email.cz*

Fytoestrogeny jsou látky, které vykazují blahodárné účinky na zdraví člověka a jsou produkty rostlin a vykazují estrogenní aktivitu podobně jako lidské pohlavní hormony. V sóji se vyskytují tři hlavní látky: daidzein, genistein a glycitein. Mohou být součástí řady krmných komponent běžně používaných ve výživě vysokoprodukčních dojnic. Při jejich metabolismu dochází k prostupu mimo jiné i do mléka a tím přispívají ke zvýšení jeho zdravotního benefitu.

Má práce se zabývá stanovením fytoestrogenních látek v mléce či jiných mléčných produktech metodou vysokoúčinné kapalinové chromatografie s detektorem pro hmotnostní spektrometrii.

Klíčová slova: Equol, daidzein, fytoestrogeny, isoflavony, mléko, jogurt, hmotnostní spektrometrie

Porovnávání metod měření koncentrace proteinů

*Filip Karásek, Martin Siegl
doc. Mgr. Lukáš Žídek, Ph.D.*

*Střední průmyslová škola chemická Brno, příspěvková organizace,
Vranovská 65, 614 00 Brno-Husovice
rhl22@hotmail.cz*

Práce pojednává o metodách měření koncentrace proteinů. Proteiny jsou stěžejní součástí organismů a podílejí se na jeho správném fungování. Měření koncentrace proteinů lze provádět pomocí mnoha různých metod fungujících na různých principech. V práci se snažíme porovnat jednotlivé metody, a to jak z hlediska jejich účinnosti, tak i z pohledu rychlosti provedení metody apod. Práce je rozdělena na část teoretickou a část praktickou. V teoretické části přinášíme informace o použitých metodách a v praktické části uvádíme jednotlivé postupy měření a konkrétní výsledky. V práci je také uveden popis prokaryotického expresního systému bakterie *E. coli*, pomocí něhož byl připraven protein MAP2c, na kterém jsme následně prováděli daná měření. Neobvyklou částí naší práce je pak nukleární magnetická rezonance (NMR), která se běžně k určování koncentrace proteinů nepoužívá, ovšem my jsme se rozhodli do naší práce tuto metodu začlenit, abychom ji vyzkoušeli a mohli její výsledky porovnat s výsledky ostatních metod.

Klíčová slova: Protein, stanovení koncentrace, spektrometr, exprese, metoda

Růst enterotoxigenních kmenů *Bacillus cereus* v kojeneckém mléce

Dominika Krčálová

Vedoucí: MVDr. Šárka Bursová, Ph.Dr

Konzultant: Mgr. Luboš Holý, Ph.Dr

*Střední průmyslová škola chemická, příspěvková organizace
Vranovská 65, 614 00, Brno-Husovice,
domca.krcalova@gmail.com*

Cílem práce bylo posoudit schopnost růstu a produkci toxinů u vybraných sbírkových kmenů *Bacillus cereus* v obnoveném kojeneckém mléce (počáteční kojenecká sušená mléčná výživa), a to v závislosti na teplotě skladování (8, 15 a 24 °C) a počáteční koncentraci spor v sušeném mléce (nízké inokulum – řádově 10^1 KTJ.g⁻¹ a vysoké inokulum – řádově 10^3 KTJ.g⁻¹). K detekci přítomnosti diarhogenních enterotoxinů byla použita imunochromatografická metoda GLISA (Gold Labelled ImmunoSorbent Assay). Oproti původnímu záměru byla studie rozšířena také o hodnocení produkce emetického toxinu – cereulidu, a to na základě detekce markerového proteinu, který je syntetizován společně s emetickým toxinem. I v tomto případě byla využita metoda GLISA.

Klíčová slova: *Bacillus cereus*, GLISA, enterotoxiny, emetický toxin

Výroba a charakterizace bionafty

Zdeňka Hartmanová, Jitka Odehnalová
Konzultant: Ing. Josef Janků

Střední průmyslová škola chemická, příspěvková organizace
Vranovská 65, 614 00, Brno-Husovice,
jitka136@email.cz

Naše práce pojednává o stručných informacích o bionaftě a její výrobě. Rozebraly jsme problematiku bionafty, její vliv na životní prostředí a na pohonné systémy automobilů. Dále Vás seznámíme s problémy při výrobě bionafty, se kterými jsme se setkaly v průběhu naší výroby. Na závěr Vám povíme celkové výsledky našeho měření, jejich zhodnocení, naplnění našich cílů a naše názory na používání bionafty jako paliva pro denní užívání.

Klíčová slova: alkohol, bionafta, esterifikace, katalyzátor, olej, palivo, životní prostředí

Mikrobiologická kontaminace kosmetických výrobků

Lenka Pavlíková, Terezie Plucarová
Vedoucí práce: Ing. Andrea Hároníková, Ph.D.,
Ing. Štěpánka Trachtová, Ph.D.

Střední průmyslová škola chemická v Brně
Vranovská 65, 613 00, Brno, ČR
Email: lenka-pavlikova@seznam.cz

V naší práci se zabýváme mikrobiologickou kontaminací kosmetických výrobků – konkrétně vlivem dvou konzervantů o různých koncentracích na výskyt a růst mikroorganismů v krémech. Jejich patogenní kmeny představují pro spotřebitele zdravotní riziko.

Ověření účinnosti konzervantů jsme provedly prostřednictvím specifických mikrobiologických testů pro kosmetické výrobky (MIC test, Koko Schülke test) i metod molekulární biologie (PCR). Byla provedena řízená kontaminace krémů vybraným druhem bakterie a kvasinky, na kterých byl dále sledován vliv již zmíněných konzervantů.

Klíčová slova: krém, kontaminace, MIC test, Koko Schülke test, Polymerázová řetězová reakce

Stanovení obsahu amiloridu a hydrochlorothiazidu

Klaudie Ramszová

vedoucí práce: Ing. Dana Vaňková, Ph.D

konzultant: Ing. Myslivec Jiří

*Střední průmyslová škola chemická akademika Heyrovského, Ostrava,
příspěvková organizace
obor: Aplikovaná Chemie
Středoškolská 2854/1, Ostrava-Zábřeh, 700 30
13ramszova@spsch.eu*

V této práci jsem se zabývala stanovením obsahu látek v tabletách Amilorid. V úvodu je nastíněn cíl mé práce. V teoretické části je pak popis samotného přípravku a metoda HPLC, se kterou jsem pracovala. V praktické části naleznete přesný postup práce a dále výsledky. V závěru jsou tyto výsledky zhodnoceny.

Klíčová slova: HPLC, Amilorid, Chromatograf, Kolona, Stacionární faze, Mobilní faze, Separace, Retenční čas, Vzorky

Stanovení obsahu antioxidantů v zeleném čaji

*Markéta Štejdířová
Ing. Michal Škavrada, Ph.D.,
doc. Ing. Jan Fischer, CSc.*

*Gymnázium, Polička, nábřeží Svobody 306 572 01 Polička
marky.stej@gmail.com*

Tato práce se zabývá analytickým stanovením obsahu antioxidantů ve vzorcích zeleného čaje. První část je věnována stanovení antioxidační aktivity těchto látek pomocí spektrofotometrických metod ABTS a DPPH, které využívají schopnosti antioxidantů zhášet syntetické radikály. Po provedené optimalizaci uvedených metod bylo provedeno stanovení antioxidační aktivity u 5 vzorků porcovaného a 5 vzorků sypaného zeleného čaje. V druhé části práce bylo provedeno kvantitativní stanovení 21 fenolických látek odpovědných za antioxidační aktivitu v 6 vybraných vzorcích zeleného čaje. K tomuto účelu bylo využito optimalizované metody HPLC/MS s využitím MRM přechodů.

Klíčová slova: zelený čaj, antioxidační aktivita, katechiny, fenolické látky, VIS spektrometrie, ABTS, DPPH, HPLC/MS

Problematika výskytu farmaceutických látek v životním prostředí a možnosti jejich eliminace

Jan Vespalec
prof. RNDr. Milada Vávrová, CSc.

Střední průmyslová škola chemická Brno
Vranovská 65, 614 00 Brno, ČR
Jan.Vespalec@gmail.com

Tato práce vypracovaná v rámci SOČ pojednává o problematice farmaceutických látek vyskytujících se jako kontaminanty v odpadních vodách. Teoretická část je zaměřena na objasnění vlivu pokročilých oxidačních procesů (AOP) u třech skupin farmaceutických látek, a to nesteroidních antiflogistik (NSAID), makrolidových antibiotik (MAK) a sulfonamidových antibiotik (SAM). Práce popisuje přítomnost těchto léčiv v čistírnách odpadních vod, ve vztahu k životnímu prostředí. Experimentální část je zaměřena na výběr a aplikaci vhodné analytické metody ke stanovení vybraných léčiv ve vodě. Pro zkoncentrování a přečištění analytů byla použita extrakce tuhou fází (solid phase extraction – SPE). Finální analýza byla provedena metodou kapalinové chromatografie s UV/VIS a MS detekcí. Optimalizovaná metoda byla následně použita k analýze uměle kontaminovaných vzorků pitné vody před a po oxidaci pomocí AOP.

Klíčová slova: životní prostředí, nesteroidní antiflogistika (NSAID), makrolidová antibiotika (MAK), sulfonamidová antibiotika (SAM), extrakce tuhou fází (SPE), kapalinová chromatografie (LC), hmotnostní spektrometrie (MS), odpadní voda.

Sekce středoškolských studentů

*Tématický okruh anorganická chemie,
materiálové vědy a inženýrství*

Studium paschenova zákona

Gabriel Janovský

vedoucí práce: Ing. Dana Vaňková, Ph.D

konzultant: Doc. Mgr. Michal Fárník, Ph.D., DSc.

Střední průmyslová škola chemická akademika Heyrovského, příspěvková organizace

Středoškolská 2854/1, Ostrava-Zábřeh, 700 30

13janovsky@spsch.eu

Ročníková práce se zabývá fyzikálními podmínkami pro zapálení doutnavého výboje v plynech, zejména závislostí zápalného napětí na součinu tlaku a vzdálenosti elektrod, kterou dobře popisuje takzvaný Paschenův zákon. Cílem práce je praktické potvrzení Paschenova zákona, analýza případných odchylek měření od jeho obecně platné charakteristiky, a nakonec vysvětlení jejich příčiny.

Klíčová slova: Paschenův zákon, doutnavý výboj, zápalné napětí, Paschenova křivka

Vliv doby krystalizace a teploty při krystalizaci na fotokatalytické účinky TiO₂:3 a ZrO₂ v látkovém poměru

Petr Lodňánek
Ing. Dana Vaňková, Ph.D.

Střední průmyslová škola chemická akademika Heyrovského, příspěvková organizace
Středoškolská 2854/1, Ostrava-Zábřeh, 700 30

Tato ročníková práce se zabývá přípravou směsi TiO₂ a ZrO₂ v látkovém poměru 7:3 pomocí podkritické vody a její fyzikálně-chemickou charakterizací, konkrétně fotokatalytickou aktivitou. Práce je složena z teoretické části, praktické části, výsledků, hodnocení a závěru. V rámci teoretické části jsou popsány vlastnosti Ti, TiO₂, Zr a ZrO₂ a jejich praktické využití. Dále je vysvětlen způsob přípravy těchto oxidů a to hydrolýza titanyl sulfátu a zirkoniumoxonitrátu, princip fotokatalýzy a vysvětlení analytické metody: UV-VIS spektrometrie. Praktická část skýtá postup přípravy směsi oxidů, který byl použit, provedení krystalizace, jak při změně objemu, tak teploty a způsob zjišťování vlivu doby krystalizace a teploty na fotokatalytickou aktivitu dané směsi a zjištění fotokatalytické aktivity oxidací azobarviva AO7

Klíčová slova: TiO₂, ZrO₂, fotokatalytická aktivita

Závislost chemiluminiscence na reakčních podmínkách

Jakub Martikan, Vojtěch Musil
vedoucí práce: Mgr. Radek Matuška

Střední průmyslová škola chemická Brno, Vranovská 65
Střední průmyslová škola chemická Brno
vojtamusil@email.cz

Tato práce je vytvořena za účelem proměřit a zhodnotit doposud neproměřené závislosti chemiluminiscence na reakčních podmínkách. Dále se v naší práci zabýváme objektivním zhodnocením syntézy luminolu z běžně dostupných zdrojů.

V laboratoři organické chemie byl syntetizován luminol dle námi odladěného postupu. Na meziprodukty a závěrečný produkt byla úspěšně aplikována metoda TLC a zjištění bodu tání pomocí Koflerova bloku. Závislosti chemiluminiscence byly naměřeny na námi sestaveném luminimetru.

Proměření chemiluminiscenčních závislostí dopadlo velice zdařile. Po vyhodnocení dat byly částečně popsány neočekávané a překvapivé výsledky. Zejména délky svítivosti a intenzity luminiscence, které nebyly dříve popsány.

Námi zjištěné data se dají použít jako kvalitní základ pro další zkoumání v oblasti chemiluminiscenčních reakcí. V práci byly navrženy další nepříliš prozkoumané, avšak zajímavé směry výzkumu. Data jsou také pro zdokonalení chemiluminiscenčních reakčních poměrů pro forenzní analýzu (např. krevních stop).

Klíčová slova: luminiscence, emise světla, reakční podmínka, excitace, katalyzátor

Struktura nukleových kyselin na površích elektrod

Dan Prokop

Školitel: doc. RNDr. Miroslav Fojta, CSc.

*Akademie věd České republiky, Biofyzikální ústav,
Královopolská 135, 612 65 Brno
dan.prokop.23tekk@gmail.com*

Nukleové kyseliny jsou zodpovědné za vzhled a funkce všech živých organismů. Poškození DNA nebo změny v její struktuře mohou zapříčinit řadu nemocí, či dokonce nádorové bujení. Pro pochopení a možné odvrácení výše uvedeného je nutné věnovat úsilí výzkumu nukleových kyselin.

Tato práce je zaměřena na rozvoj elektrochemických metod vhodných pro strukturní analýzu nukleových kyselin, zejména v oblasti tzv. nekanonických (alternativních) struktur DNA, především tzv. vlásenek a kvadruplexů.

Cílem tohoto projektu je prozkoumat elektrochemické vlastnosti řetězců nukleových kyselin s využitím metod nevyžadujících externí značení („label-free“ detekce). Studie se zabývá chováním nekanonických struktur DNA na rtuťových elektrodách se záporným potenciálem. Hlavními sledovanými znaky jsou zejména schopnost se adsorbovat a desorbovat na površích elektrod, dále oxidační a redukční pochody nukleových bází.

Získané informace jsou porovnány s chováním kanonických struktur. Bylo zjištěno, že tvorba kvadruplexů silně ovlivňuje přístupnost nukleobází pro redoxní pochody, a složení jednořetězcových konců kvadruplexových struktur má vliv na adsorpčně-desorpční vlastnosti řetězce jako celku. Výsledky jsou přínosem na poli výzkumu bioanalytických metod a DNA nanotechnologií.

Klíčová slova: elektrochemie, lineární voltametrie, AC voltametrie, nukleové kyseliny, nekanonické struktury, G-kvadruplex, label-free detekce

Validace rentgenového fluorescenčního spektrometru NITON XL3_t GOLDD+

Natálie Říhová

Bc. Dalibor Slanař, Ing. Jakub Zaoral

*Střední průmyslová škola chemická akademika Heyrovského, příspěvková organizace
Střeškovská 1, 700 30 Ostrava-Zábřeh, Česká republika
natalie.riha@seznam.cz*

Obsahem práce byla validace nového programu OCEL-1 na přístroji NITON XL3_t GOLDD+. Tento program byl vytvořen za účelem zlepšení dosavadních parametrů přístroje. Při ověřování zmíněného programu metodou lineární regrese byly v prvním kroku analyzovány vzorky CRM. V dalším kroku byla data zpracována a vyhodnocena pomocí statistického software QC.Expert. Z protokolů a grafů byla vytvořena tabulka s výsledky, které podávaly podrobné informace o kalibrační závislosti jednotlivých analyzovaných prvků. Tyto parametry byly porovnány s původní validací přístroje při továrním nastavení. Z porovnání vyplynulo, že program OCEL-1 nesplnil všechny požadavky pracovníků FCHZ.

Klíčová slova: validace, OCEL-1, NITON XL3_t GOLDD+, CRM

Optimalizace stanovení isoform metalothioneinu pomocí kapilární elektroforézy

Alžběta Sedláčková

*Vedoucí práce: Mgr. Markéta Vaculovičová, Ph.D. - Ústav chemie a
biochemie Mendelovy univerzity v Brně*

Školní konzultant: PhDr. Mgr. Luboš Holý

Střední průmyslová škola chemická,

Vranovská 65, 614 00 Brno

alzbetasedlackova@centrum.cz

Cílem práce bylo optimalizovat jednotlivé isoformy MT (metalothioneinu) pomocí kapilární elektroforézy. Byly stanoveny lidské a králičí isoformy MT v různých separačních podmínkách, v odlišných elektrolytech a ředidlech. Byla zkoumána jejich absorbance a mobilita. Metoda byla aplikována na klinické vzorky lidské krevní plazmy pacientů.

*Sekce studentů bakalářských a magisterských
studijních programů*

Tématický okruh organická, environmentální a biochemie

Tvorba svetlom indukovaných proteolytických enzýmov vláknitej huby *Trichoderma atroviride*

Bc. Helena Galádová
Ing. Matej Maťaľa PhD., doc. Ing. Martin Šimkovič PhD.

*Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav biochémie a mikrobiológie
Radlinského 9, 81237 Bratislava, Slovenská republika
galadova.helena@gmail.com*

Mykoparazitické huby rodu *Trichoderma* sú vysoko adaptabilné na studené aj teplé klimatické podmienky. Dokážu prežívať v najrôznejších podmienkach od nehostinných až po prostredie bohaté na živiny. Počas svojej existencie produkujú veľké množstvo sekundárnych metabolitov a enzýmov, ako sú napr. celulózy, β -glukanázy, chitinázy alebo proteázy, ktoré využívajú na degradáciu organických substrátov, ako je rozpadujúce sa drevo alebo súčasti rastlinných tiel, najmä ich koreňových častí. Následne využívajú vnútrobunkový obsah hostiteľa na vlastné prežitie. *Trichoderma* má široké využitie v poľnohospodárstve v boji proti patogénom, zlepšuje rast a prispieva k ochrane pred toxickými látkami. Tieto enzýmy majú využitie aj v potravinárskom priemysle (celulózy), v chove hospodárskych zvierat (xylanázy) a v poslednej dobe sa aplikujú na výrobu farmaceutických látok (metabolity antibiotík). Konidiácia u húb tohto rodu môže byť ovplyvnená rôznymi abiotickými faktormi ako je svetlo, pH, pomer dusíka a uhlíka, endogénny cyklus, extracelulárny vápnik alebo mechanické porušenie mycélia. Stimul svetla prináša zmeny v klíčení, vegetatívnom a reprodukčnom raste, metabolizme a morfológii. Jedným z hlavných cieľov tejto práce je definovať vplyv konidiácie indukovanej svetlom na tvorbu proteolytických enzýmov u *T. atroviride*. Ďalším cieľom je zymografická analýza proteolytického profilu homogenátov získaných z povrchového mycélia huby vyrastenej za rôznych svetelných podmienok a charakterizácia molekulových vlastností proteáz technikou hmotnostnej spektrometrie.

Kľúčové slová: *Trichoderma*, konidiácia indukovaná svetlom, proteolytické enzýmy

Využitie magnetických častíc pre izoláciu DNA zo sušenej papriky

Bc. Martina Gaňová
RNDr. Aleš Kovařík, CSc., doc. RNDr. Alena Španová, CSc.,
doc. Ing. Bohuslav Rittich, CSc.

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie potravin a biotechnologií
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Česká Republika
xcganova@fch.vut.cz

Izolácia DNA z rastlinného pletiva v požadovanej kvalite je veľmi komplikovaná, hlavne z dôvodu prítomnosti látok, ktoré môžu interferovať pri amplifikácii DNA. Týmito látkami sú hlavne polyfenoly, polysacharidy, proteíny a rôzne farbivá. Chemická rôznorodosť takýchto látok môže mať významný vplyv na výťažok a kvalitu DNA pri použití jedného izolačného postupu. Hlavným cieľom práce bolo vyhodnotiť použitie jedného izolačného protokolu u príbuzných matric na kvalitu izolovanej DNA ako aj zhodnotenie vplyvu inhibítorov izolovaných spolu s nukleovou kyselinou na jej amplifikáciu v polymerázovej reťazovej reakcii (PCR).

DNA bola izolovaná z troch potravinárskych produktov papriky (*Capsicum annuum*): sušená paprika sladká, sušená paprika pikantná a žitavská paprika sladká. V prvej fáze bolo pletivo homogenizované s použitím lyzačného roztoku s cetyl trimetyl amónium bromidom (CTAB). Následne bola DNA purifikovaná pomocou reverzibilnej adsorbcie na magnetické nosiče. Celkom bolo testovaných šesť rôzne modifikovaných nosičov. Koncentrácia a čistota získanej DNA bola stanovená spektrofotometricky meraním absorpcie roztoku DNA v TE pufre. Kvalita rastlinnej DNA bola overená amplifikáciou v PCR. Boli použité priméry špecifické pre rastlinnú ribozomálnu DNA (rDNA). Priméry F_18S a R_5,8S amplifikovali úseky intragenového transkribovaného medzerníku (ITS1) o dĺžke 700 bp. Prítomnosť a správna veľkosť produktov PCR bola dokázaná agarózovou gélovou elektroforézou.

Bolo zistené, že použitou mikrometódou je možné izolovať DNA odpovedajúcej čistoty, ktorá je vhodná pre genetickú analýzu pomocou PCR. Boli zistené rozdiely medzi magnetickými nosičmi, ktoré boli testované pre izoláciu DNA.

Kľúčové slová: paprika, izolácia DNA, magnetické častice, PCR

Monitoring psychoaktívnych látok na území Moravy

*Bc. Nikolas Gróf
doc. Ing. Tomáš Mackuľak, PhD.*

*Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej
technológie, Oddelenie environmentálneho inžinierstva
Radlinského 9, 812 37 Bratislava
nikolas.grof@gmail.com*

Cieľom práce bol monitoring šiestich psychoaktívnych látok na území Moravy. Monitoring prebiehal počas jedného týždňa na troch čistiarnach odpadových vôd (ČOV Zubří, ČOV Valašské Meziříčí, ČOV Vsetín). Počas tohto týždňa sa na danom území konali festivaly ako napríklad Guláš Fest a Vandaalfest.

Vzorky boli odoberané každých 30 minút po dobu 24 hodín z prítoku na ČOV pomocou automatického odberového zariadenia. Vzorky sa odoberali od 17.7.2014 do 25.7.2014 pre ČOV Valašské Meziříčí, od 14.8.2014 do 22.8.2014 pre ČOV Zubří a od 18.9.2014 do 26.9.2014 pre ČOV Vsetín.

Analýza vzoriek sa uskutočňovala pomocou prístroja LC – MS/MS.

Na všetkých troch ČOV na Morave boli detegované nasledovné látky: kotinín, amfetamín, MDA, metamfetamín, THC – COOH a na ČOV Valašské Meziříčí bola zvýšená koncentrácia kokaínu. Počas festivalu Guláš Fest bolo zaznamenané najväčšie zvýšenie koncentrácie látky MDA, amfetamínu a metamfetamínu. Uprostred festivalu Vandaalfest sme zistil nárast koncentrácie látky amfetamínu a metamfetamínu. Zaujímavým zistením u ČOV Vsetín bolo zvýšenie koncentrácie látky THC – COOH v strede týždňa (streda).

Kľúčové slová: monitoring, psychoaktívne látky, čistiareň odpadových vôd.

Využití magnetických částic při izolaci DNA z rybízových džemů

Bc. Aneta Hronová
RNDr. Aleš Kovařík, CSc., doc. RNDr. Alena Španová, CSc.,
doc. Ing. Bohuslav Rittich, CSc.

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie potravin a biotechnologií
Purkyňova 464/118, 612 00, Brno, Česká republika
xchronova@fch.vutbr.cz

Při identifikaci falšovaných potravin se v poslední době začínají uplatňovat metody založené na genetické analýze. Podmínkou úspěšné analýzy je dostupnost kvalitní DNA. Izolace DNA z tepelně zpracovaných výrobků rostlinného původu je však velmi komplikovaný proces. Hlavním problémem je skutečnost, že rostlinné tkáně obsahují velké množství látek, které nepříznivě ovlivňují kvalitu a amplifikovatelnost DNA v polymerázové řetězové reakci (PCR). Jedná se především o polyfenoly, polysacharidy a proteiny. Z tohoto důvodu je nutné tyto látky ze vzorku odstranit nebo alespoň snížit jejich množství. Další překážkou při izolaci DNA je její degradace, ke které dochází během přípravy a během tepelného zpracování potravinového výrobku.

Cílem práce byla izolace DNA za pomoci magnetických částic z tepelně zpracovaných potravinových výrobků (džemů) vhodná pro PCR a další analýzy. Pro analýzu byly vybrány rybízové džemy, které byly připraveny různými postupy (přítomnost či nepřítomnost ztužovacího přípravku). Džemy byly za chladu homogenizovány různými postupy a získané homogenáty byly následně použity pro izolaci DNA magnetickými částicemi. Byly provedeny dva typy homogenizace – plastový kopist a stomacher. K homogenátu byl přidán lyzační roztok, který ze vzorku odstraňuje polysacharidy a polyfenoly. Jedná se o komplexní roztok obsahující cetyl trimetyl amonium bromid (CTAB) s přísadkou merkaptoethanolu. Dále byl testován vliv chloroform-oktanolu a izopropanolu na deproteinizaci vzorku. Po odstředění komplexů CTAB s proteiny, polyfenoly a polysacharidy byla hrubá frakce DNA purifikována vazbou na magnetické částice. Byly testovány dva druhy magnetických nosičů: mikročástice poly(hydroxyethylmethakrylát-co-glycidylmethakrylát) P(HEMA-co-GMA) a nanočástice oxidu železa pokryté poly(L-lysinem).

Izolovaná DNA byla podrobena spektrofotometrické analýze, kde byla zjišťována její koncentrace a stupeň kontaminace polyfenoly a proteiny. Poté byla testována amplifikovatelnost DNA v reakci PCR. Pro amplifikaci byly využity primery specifické pro rostlinnou ribosomální DNA (dvojice primerů 18S_for a 5,8S_rev amplifikující podoblast ITS1). Produkty PCR s očekávanou délkou 700 bp byly detekovány agarózovou gelovou elektroforézou. V práci bylo prokázáno, že z džemů lze pomocí testovaných magnetických nosičů izolovat DNA v dostatečné kvalitě vhodné pro PCR.

Klíčová slova: izolace DNA, magnetické mikročástice, magnetické nanočástice, PCR

Možnosti využití iontových kapalin pro separaci biocidů na bázi halogenovaných organických kyselin z vod

Barbora Kamenická
Tomáš Weidlich

*Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 95, Pardubice 532 10
st38856@student.upce.cz*

Biocidy jsou prostředky určené k hubení rostlinných a živočišných škůdců. Použití biocidů jsou vystaveny všechny složky biosféry – vzduch, voda, půda, rostliny a živočichové. Mezi biocidními přípravky jsou i látky na bázi halogenovaných organických kyselin. V této práci byla testována jejich separace s využitím iontových kapalin. Iontové kapaliny představují z hlediska struktury a především fyzikálně-chemických vlastností značně různorodou skupinu. Chemická struktura iontových kapalin je obvykle tvořena organickým kationtem a anorganickým nebo organickým aniontem. Mezi typické vlastnosti iontových kapalin lze zařadit iontovou vodivost, elektrochemickou stabilitu, nízkou tenzi par a nehořlavost. Jejich bod tání se často pohybuje pod 100 °C. Vykazují schopnost výměny aniontu, čímž lze měnit fyzikální a chemické vlastnosti (např. rozpustnost). Jedná se tedy o iontovou výměnu s použitím kapalného iontoměniče. Tyto vlastnosti iontových kapalin lze využít pro odstraňování organických kyselin z vod.

Cílem práce bylo ověření schopnosti odstranění Picloramu (4-amino-3,5,6-trichlorpyridin-2-karboxylová kyselina) a Clopyralidu (kyselina 3,6-dichlorpyridin-2-karboxylová, přípravek Lontrel) z vodných roztoků pomocí iontových kapalin jako je například Aliquat, benzalkonium chlorid, dilauryldimethylamonium bromid, didecyldimethylamonium bromid, alkyldimethylbenzylkonium chloridu nebo cetyltrimethylamonium bromid. Bylo testováno využití těchto iontových kapalin spolu s adsorpcí na aktivní uhlí nebo křemelinu. Byly též provedeny experimenty využívající kombinaci působení iontové kapaliny a anorganického koagulantu jako je síran železitý nebo hlinitý. Účinnost jednotlivých procesů separace těchto dvou herbicidů byla hodnocena na základě stanovení AOX ve vodných vzorcích.

Jako neúčinnější separace Picloramu z vodného roztoku se dle výsledků jeví použití vodného roztoku Aliquatu a benzalkonium chloridu rozpuštěným v roztoku $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ s následnou sorpcí na aktivní uhlí. V tomto případě byl parametr AOX snižen o 99,8 %. Naopak separace Picloramu adsorpcí na granulované aktivní uhlí byla nejméně účinná. U Clopyralidu byla neefektivnější separace pomocí roztoku $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$ a alkyldimethylbenzylkonium chloridu, přičemž opět nejméně účinná metoda snížení parametru AOX u vodného roztoku Clopyralidu byla při použití aktivního uhlí.

Obecně lze konstatovat, že využití iontových kapalin k separaci biocidů na bázi halogenovaných kyselin je relativně účinné a mohlo by být využito i pro praktické aplikace. Ze získaných výsledků lze také usuzovat, že využitím některých iontových kapalin v kombinaci s koagulantem při separaci halogenovaných kyselin z vod dochází k úspore použitého práškového aktivního uhlí při téměř stejné účinnosti odstranění AOX. Dalo by se také uvažovat i o využití roztoků některých iontových kapalin v kombinaci s koagulanty místo samotné adsorpcí na práškové aktivní uhlí.

Anaeróbne spracovanie výpalkov z výroby liehu

*Bc. Dominik Kraščík
Prof. Ing. Miroslav Hutňan, CSc.*

*Slovenská technická univerzita v Bratislave
Fakulta chemickej a potravinárskej technológie
Oddelenie environmentálneho inžinierstva
Radlinského 9, 812 37 Bratislava
dominik.krascik@gmail.com*

Práca sa zaoberá spracovaním výpalkov pri výrobe liehu v anaeróbnom prostredí. Žiadaným produktom je bioplyn, ktorého hlavné zložky sú metán a oxid uhličitý. Jeho spaľovanie prispieva k vylepšeniu ekonomickej bilancie liehovaru.

Výpočtová časť sa zaoberá návrhom anaeróbného reaktora pre konkrétny liehovar, ktorý spracováva vedľajší produkt pri výrobe liehu - výpalky. Výpočet zahŕňa objem a rozmery reaktora, množstvo vzniknutého bioplynu, výpočet tepelných strát a tepla potrebného na ohrev substrátu, energetické využitie bioplynu na výrobu vysokotlakovej pary a alternatívne riešenie využitia – spracovanie v kogeneračnej jednotke a jej návrh. V práci je taktiež opísané možné nakladanie s kalovou vodou a sú vyzdvihnuté výhody jej využitia ako hnojiva. V závere sú porovnávané energetické výťažky 3 spôsobov spracovania kukurice – pri priamej výrobe bioplynu z kukurice, pri výrobe liehu z kukurice a pri kombinácii výroby liehu z kukurice so spracovaním výpalkov.

Kľúčové slová: bioplyn, anaeróbne spracovanie, výpalky

Využití výlisků z výroby vína pro odstraňování mědi z odpadních vod

Bc. Jakub Křikala

Vedoucí práce: doc. Ing. Pavel Diviš, Ph.D.

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie potravin a biotechnologií
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Česká Republika
xckrikala@fch.vut.cz

S rozvojem těžkého průmyslu se v posledních letech stále více zvyšuje riziko znečištění životního prostředí tzv. těžkými kovy, které na rozdíl od dalších polutantů nejsou biodegradabilní a zůstávají dlouhou dobu v životním prostředí. K znečištění životního prostředí kovy nejčastěji dochází prostřednictvím odpadních průmyslových vod, které jsou špatně vyčištěny nebo přímo vypouštěny do povrchových vod.

Mezi obvyklé způsoby odstraňování kovů z odpadních vod patří zejména srážení, elektrolyza, iontová výměna a adsorpce na aktivním uhlí. Tyto metody jsou však v průmyslovém měřítku po technické i ekonomické stránce velmi náročné, proto se pozornost začíná obracet na možné využití biomasy z potravinářského průmyslu jako levně dostupného adsorbentu. Jen vinné révy se ročně sklídí přes 60 milionů tun, z čehož je asi 80 % využito na výrobu vína, při které vzniká kolem 9 milionů tun výlisků, jejichž chemická struktura je bohatá na různorodé funkční skupiny, které mohou vázat kovové ionty. Odpadní biomasa z potravinářského průmyslu se tak může stát dobrou alternativou místo finančně nákladných syntetických adsorbentů používaných k čištění odpadních vod.

Měď je důležitým biogenním prvkem nezbytným jednak pro krvetvorbu a také tvoří součást koenzymů. Přestože měď nepatří mezi významně toxické prvky, tak při dlouhodobé expozici může dojít k akutní otravě měďnatými ionty, která může vyústit až v cirhózu jater. Vysoký obsah mědi v organismu může taktéž působit jako inhibitor enzymatických reakcí. Nejvíce mědi obsahují odpadní vody ze slévárenského a galvanického průmyslu.

V této práci bylo ověřováno potenciální využití výlisků z výroby vína jako snadno dostupného přírodního adsorbentu pro odstraňování mědi z odpadních vod. I po vylisování moštu obsahují zbylé matoliny vysoký podíl organických kyselin, cukrů a zejména polyfenolických látek, jejichž chemická struktura umožňuje adsorpci kovových iontů z vodných roztoků. Přítomnost a charakter funkčních skupin odpovědných za adsorpci byly zjištěny pomocí IČ spektrometrie. V rámci experimentu byla porovnána adsorpce mědi na matoliny průtokovou a vsádkovou metodou, přičemž bylo nejprve stanoveno optimální pH vodného roztoku mědi. Adsorpce vsádkovou metodou byla provedena s roztoky mědi o různých počátečních koncentracích, u kterých byl navíc sledován také vliv kontaktního času na adsorpční kapacitu použitého materiálu. Nejvíce mědi bylo na výlisky adsorbováno v rozmezí pH 3 – 4 a při vsádkové metodě byly provedeny adsorpční experimenty s kontaktními časy 30, 60 a 90 minut. Maximální adsorpční kapacity byly vypočítány z Langmuirova modelu adsorpční izotermy a při stanoveném pH zásobních roztoků mědi činily 0,260 4 mg.g⁻¹ Cu při průtokové metodě a 1,246 2 mg.g⁻¹ Cu po 30 minutách adsorpce vsádkovou metodou. Výsledky práce potvrdily dobrý adsorpční potenciál výlisků pro odstraňování mědi z odpadních vod. Adsorpční kapacita materiálu by se dala ještě navýšit další optimalizací metody nebo chemickým ošetřením adsorbentu.

Klíčová slova: kovy, měď, odpadní voda, výlisky, Langmuirova izoterma

Modifikácie hyalurónanu kyselinou cholovou a využitie týchto derivátov pre nosičové aplikácie

Kludia Kvaková

Gloria Huerta-Angeles, Vladimír Velebný

*Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická,
Ústav fyzikální a spotřební chemie
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Česká republika
xckvakova@fch.vut.cz*

Za fyziologických podmienok kyselina hyalurónová existuje vo forme polyaniónu označovaného ako hyalurónan. V štruktúre hyalurónanu je prítomných viacero funkčných skupín (-OH, -COOH), má unikátne biologické vlastnosti, je biokompatibilný a biodegradabilný. Pomocou chemických modifikácií sa dá pripraviť z natívneho hyalurónanu vhodnejší materiál pre ďalšie aplikácie. Zaujímavé sú deriváty hyalurónanu založené na esterifikácii. Kyselina cholová je jednou zo žľových kyselín, vykazuje dvojaký charakter, v jej štruktúre sa nachádzajú hydrofóbné uhľovodíkové skupiny a hydrofilné hydroxylové skupiny. Medzi jej vlastnosti patria okrem amfifility tiež chiralita, biokompatibilita a chemická stabilita steroidného jadra.

Esterifikáciu hydrofilnej kyseliny hyalurónovej s hydrofóbnou časťou kyseliny cholovej bol pripravený amfifilný derivát. V prvom kroku syntézy došlo k aktivácii kyseliny cholovej v prítomnosti trietylaminu (TEA), benzoylchloridu (BC) v tetrahydrofuráne (THF), pričom vznikol zmiešaný aromaticko-alifatický anhydrid. V druhom kroku bol pripravený hydrofobizovaný cholát kyseliny hyalurónovej reakciou vzniknutého anhydridu s hyaluronanom v zmesi vody a THF. Ako katalyzátor reakcie bol použitý 4-(dimetylamino)pyridín (DMAP). Produkty reakcie boli charakterizované pomocou nukleárnej magnetickej rezonancie (NMR), infračervenej spektroskopie s Fourierovou transformáciou (FT-IR), vylučovacej chromatografie (SEC-MALLS) a reologickej analýzy. U vybraných derivátov boli použité chromatografické metódy na zistenie enkapsulačnej účinnosti nepolárnych látok, pretože silno hydrofobizovaný hyalurónan nachádza využitie v oblasti nosičov nepolárnych látok vo vodnom prostredí. Pomocou NMR a FT-IR bola potvrdená štruktúra pripraveného derivátu. Z výsledkov SEC-MALLS a reologickej analýzy bolo zistené, že vzniknutý cholát mal v dôsledku agregácie očividne vyššiu molekulovú hmotnosť a bol viskóznejší v porovnaní s vstupnou kyselinou hyalurónovou. Derivát teda vo fyziologickom prostredí tvorí agregáty a zároveň zostáva vo vode rozpustný. Stanovením enkapsulačnej účinnosti bolo zistené, že esterifikovaný hyaluronan dokáže viazať koenzým Q10 a kurkumín do nanoagregátov.

Bioresorbovateľné polyuretány s riaditeľnými mechanickými vlastnosťami

Bc. Emil Letavaj
Ing. Vojtěch Kupka, Ph.D.

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie materiálů
Purkyňova 118, 612 00, Brno
xcletavaj@fch.vut.cz

Elastické polyuretánové (PUR) filmy boli pripravené reaktívnym liatím v jednom kroku bez použitia organických rozpúšťadiel. Neprítomnosť rozpúšťadiel predstavuje veľkú výhodu z dôvodu ich toxicity a následného odstraňovania z výsledného produktu. Ďalšou výhodou tejto techniky je možnosť prípravy komplikovaných tvarov. Syntéza PUR prebiehala pod inertnou atmosférou polyadičnou reakciou z hydrofobného poly-(ϵ -kaprolaktónu) (PCL) a hydrofilného poly(etylénglykolu) (PEG) spoločne s hexametylén diizokyanátom (HDI). Práca pod inertnou atmosférou bola nutná z dôvodu vedľajšej reakcie izokyanátu so vzdušnou vlhkosťou, ktorá zapríčiňuje vznik poréznych filmov namiesto spojitéch. Štruktúra pripravených filmov bola charakterizovaná pomocou diferenčnej kompenzačnej kalorimetrie (DSC) a rentgenovej difrakcie (XRD), mechanické vlastnosti potom pomocou ťahových skúšok. Polyuretánové filmy pripravené iba z PEGu a HDI vykazovali krehké chovanie ($\epsilon \approx 40 \pm 8 \%$), zatiaľ čo vzorky s vyšším obsahom PCL boli ťažné a elastické ($\epsilon \approx 270 \pm 10 \%$). Príčinou týchto vlastností bola rozdielna schopnosť PCL kryštalizovať v štruktúre polyuretánovej siete. Pripravené PUR filmy by mohli byť vďaka svojim elastickým vlastnostiam využité v biomedicíne ako napr. cieвне štepy.

Kľúčové slová: polyuretán, elastomér, biomedicína.

Zařízení pro izolaci DNA magnetickými částicemi

*Bc. Milan Němeček,
RNDr. Hanniel Dubský, CSc., Doc. RNDr. Alena Španová, CSc.,
Doc. Ing. Bohuslav Rittich, CSc.*

*Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie potravin a biotechnologií
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Česká Republika
xcnemecek@fch.vutbr.cz*

S rozvojem molekulárně biologických metod se zvyšuje zájem o nové postupy izolace DNA o vysoké kvalitě. Izolace DNA se provádí z hrubých lyzátů buněk mnoha technikami např. fenolovou extrakcí, vysolováním nebo adsorpcí na pevnou fázi. Klasická izolace DNA, jakou je fenolová extrakce je poměrně složitá a časově náročná. Z toho důvodu byly vyvinuty nové alternativní metody izolace DNA využívající reverzní imobilizaci DNA na pevnou fázi. Velmi rozšířené je používání magnetických nosičů, které umožňují izolovat DNA ve vysoké kvalitě přímo z hrubých lyzátů buněk komplexních vzorků.

Současná metoda adsorpce DNA na povrch magnetických částic neposkytuje v některých případech při analýze komplexních vzorků (např. potravin) dostatečně čistou DNA. Část inhibitorů polymerázové řetězové reakce (PCR) se zřejmě adsorbují na stěny zkumavky a v následném kroku eluce DNA dochází k jejich uvolnění do roztoku a následnému ovlivnění kvality DNA (např. snížení citlivosti amplifikace v PCR).

Principem vyvíjeného postupu je konstrukce zařízení, které využívá přenos magnetických částic paramagnetickou jehlou z jedné Eppendorfovy zkumavky do druhé, ve které probíhá další zpracování vzorku. Přenosem pomocí jehly se zabráňuje přenosu kontaminujících nečistot. Navržené zařízení umožňuje realizovat výše uvedený postup. Funkčnost zařízení byla ověřena při izolaci plasmidové pUC19 DNA.

Klíčová slova: izolace DNA, magnetické částice, zařízení pro přenos částic

Anaeróbne spracovanie biomasy z výroby penicilínu a jeho kofermentácia s odpadovou biomasou z výroby cystínu

Matúš Palguta

Juan José Chávez-Fuentes, Miroslav Hutňan

*FCHPT STU Oddelenie environmentálneho inžinierstva
Radlinského 9,821 37 Bratislava
matuspalguta@gmail.com*

Práca sa zaoberá anaeróbnym spracovaním dvoch odpadových materiálov, a to penicilínového mycélia, ktoré je vedľajším produktom v procese výroby penicilínu a odpadovej biomasy, vznikajúcej pri produkcii L-Cystínu ako potravinárskeho aditíva. Penicilínové mycélium má vysokú hodnotu CHSK, tiež obsah dusíka a celkovú sušinu na úrovni 22 až 25 %. Biomasa z výroby cystínu obsahuje nadmerné koncentrácie organických látok, síranov a dusíka.

Prvá časť práce je primárne venovaná samostatnému anaeróbnemu spracovávaniu penicilínového mycélia v miešanom reaktore v objemom 6 litrov pri mezofilných podmienkach (37°C) a jeho vplyvu na celý proces. Úvodných 28 dní bolo zaťaženie reaktora 0,5 g SŽ.l-1 .d-1. Špecifická produkcia bioplynu (ŠPB) sa pohybovala v rozmedzí 420 až 560 l.kgSŽ-1. Koncentrácie voľného amoniaku nepresiahla v tejto fáze hodnotu 28 mg.l-1 a koncentrácia S2- bola maximálne 3,75 mg.l-1.

Druhá časť začala zvýšením zaťaženia reaktoru na 1 g SŽ.l-1 .d-1 v 29. dni experimentu. Táto zmena so sebou priniesla výrazný pokles špecifickej produkcie bioplynu až na hodnotu 260 l.kgVS-1. V období okolo 55. dňa sa reaktor pomaly adaptoval na podmienky, ŠPB sa začala zvyšovať na hodnoty v intervale 500 až 700 l.kg.SŽ-1.

V tretej časti, v 86. dni, sa pristúpilo ku kofermentácii penicilínového mycélia a biomasy z výroby cystínu v pomere 9:1. Zaťaženie reaktora sa udržiavalo stále na hodnote 1 g SŽ.l-1 .d-1 . Počas nasledujúceho obdobia výsledky sledovaných parametrov ukázali, že biomasa z výroby cystínu nemá pozitívny vplyv na proces. Výrazne začala stúpať koncentrácia sulfidov (10 - 74 mg.l-1) a voľného amoniaku (145 - 319 mg.l-1) v reaktore, čo má za následok postupnú inhibíciu mikroorganizmov, čo je možné vidieť na kontinuálne rastúcej hodnote CHSK, dosahujúcej koncentráciu až 10 000 mg.l-1 . Ku koncu tejto fázy tento ukazovateľ postupne klesal. V ukazovateli ŠPB je možné vidieť, ako robilo mikroorganizmom problém pridanie nového substrátu, a to tak, že ukazovateľ klesol z hodnôt približne 600 l.kgSŽ-1 na 250 l.kgSŽ-1 v 150. dni. Od tohto dňa bol trend tohto ukazovateľa rastúci a dosahujúci cca 700 l.kgSŽ-1 . V bioplyne však výrazne stúpla koncentrácia sulfánu na hodnotu približne 5000 ppm a obsah metánu sa udržiaval tesne nad hodnotou 58 %. Napriek tomu v mnohých ukazovateľoch bolo vidieť zlepšenie a postupné vyrovnávanie sa so zaťažením.

V poslednej fáze v 200. dni sa pomer kofermentácie zmenil z 9:1 na 8:2 (penicilínové mycélium k cystínu), pričom zaťaženie zostalo na 1 g SŽ.l-1 .d-1. V nasledujúcich deväťdesiatich dňoch výkon reaktora poklesol približne na polovicu a väčšina ukazovateľov sa začala zhoršovať, niektoré až na kritické hodnoty. Produkcia bioplynu sa dostala z hodnôt v oblasti 550 l.kgSŽ-1 na hodnoty 310 l.kgSŽ-1. Ukazovateľ CHSK jednoznačne dokazuje inhibíciu v procesoch fermentácie keďže zo 6 000 mg.l-1 stúpila až na 30 000 mg.l-1. Taktiež sa zvýšilo množstvo dusíka a síry v reaktore. Prejavilo sa to v zložení bioplynu, ktorý v sebe obsahoval už iba približne 30 % CH₄ a 20 000 ppm H₂S.

Napriek problémom sa dá povedať, že odpadové materiály sú pomerne ľahko degradovateľné pomocou anaeróbnej digestie. Pri samostatnom spracovávaní mycélia bola konverzia CHSK na bioplyn rovná priemerne 56 %, kde najvyššia hodnota konverzia bola až 89 %. V období kofermentácie bol priemerný stupeň premeny na úrovni 67 %. Organické látky, ktoré sa nepremenili na bioplyn, sa odvádzali v podobe odoberaného kalu, alebo sa akumulovali v reaktore alebo boli spotrebované na tvorbu nových mikroorganizmov. Z poslednej časti práce vyplýva, že pri vyššom obsahu cystínu pridávaného do procesu nastáva inhibícia mikroorganizmov a nie je možné jeho kontinuálne spracovávanie bez zabezpečenia potrebných opatrení potlačujúcich inhibíciu.

Využití magnetických částic při izolaci DNA z cibule a brokolice

Bc. Lucie Ráčková

*RNDr. Aleš Kovařík, CSc., doc. RNDr. Alena Španová, CSc.,
doc. Ing. Bohuslav Rittich, CSc.*

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická,

*Ústav chemie potravin a biotechnologií Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Česká republika
xcrackoval@fch.vutbr.cz*

V současné době se řeší problémy autenticity potravin. Jedním ze způsobů analýzy falšování jsou metody založené na analýze DNA, které se používají k detekci určitých druhů. Izolace rostlinné DNA bývá komplikovaná, z důvodu obsahu celé řady různých metabolitů, jako jsou polyfenoly, polysacharidy či proteiny, které můžou inhibovat v polymerázové řetězové reakci (PCR).

V této práci byla ověřována mikrometoda izolace rostlinné DNA z cibule, brokolice a potravinového výrobku (francouzská rostlinná pomazánka) v kvalitě vhodné pro konvenční PCR. Mikrometoda umožňuje izolaci pomocí magnetických nosičů z hrubých lyzátů, získaných přímou homogenizací rostlinných tkání. Byly porovnávány různé způsoby homogenizace a zpracování homogenátů. Deproteinace probíhala v lyzačním pufru s obsahem cetyl trimetyl amonium bromidu (CTAB). Poté byl testován vliv organických extrakčních činidel na následné purifikační kroky: vzorky byly rozděleny na část bez přídavku chloroform-oktanolu, s přídavkem chloroform-oktanolu a s přídavkem chloroform-oktanolu a isopropanolu. Následně byla DNA purifikována reverzibilní adsorpcí na magnetické nosiče (testovány celkem čtyři různé typy matrice). U izolovaných vzorků DNA bylo provedeno spektrofotometrické stanovení koncentrace a čistoty. Poté jsme testovali amplifikovatelnost DNA v reakci PCR. Byly použity specifické primery pro rostlinnou ribosomální DNA (rDNA). Podoblast ITS1 byla amplifikována primery 18S_for a 5,8S_rev poskytující specifický produkt délky 700 bp. Podoblast genu 26S rDNA byla amplifikována primery 26S_for a 26S_rev s předpokládanou velikostí produktu odpovídající 220 bp. Produkty PCR byly detekovány agarózovou gelovou elektroforézou pomocí fluorescenčního interkalátoru ethidium bromidu.

Byly prokázány rozdíly ve výtěžku a kvalitě DNA v závislosti na způsobu homogenizace, zpracování homogenátů a použitých magnetických nosičů. Navržený postup byl testován pro izolaci kvalitní amplifikovatelné DNA z potravinových produktů obsahující rostlinný materiál.

Klíčová slova: Izolace rostlinné DNA, mikrometoda, magnetické nosiče, PCR

Identifikace mikroorganismů v kosmetických výrobcích s obsahem probiotik

Bc. Denisa Romanovská

Ing. Štěpánka Trachtová, Ph.D., Ing. Andrea Hároniková, Ph.D.

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie potravin a biotechnologií
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Česká Republika
xcromanovska@fch.vut.cz

Probiotické výrobky jsou nedílnou součástí současného trhu. Mezi nové výrobky obsahující přidané probiotické kultury se mimo jiné řadí také kosmetické výrobky.

Práce se zabývá izolací bakteriální DNA z kosmetických výrobků Ryor, Yoghurt of Bulgaria, FeminaMed a Lactovit Activit, a to v kvalitě vhodné pro amplifikaci v PCR. DNA byla izolována metodou fenolové extrakce a magnetickými nosiči. Další část práce se zabývá testy na schopnost přežití bakterií v prostředí prezervačních látek, které jsou v kosmetických výrobcích obsaženy. Pro tyto testy byly použity sbírkové kmeny bakterií rodu *Lactobacillus*. Přítomnost bakterií rodu *Lactobacillus* byla prokázána rodově specifickou PCR a byla provedena optimalizace druhově specifické PCR pro identifikaci *Lactobacillus pentosus*.

Bylo prokázáno, že kosmetické výrobky jsou z hlediska matrice obtížně zpracovatelné vzorky obsahující látky, které mohou komplikovat izolaci DNA nebo inhibovat samotnou PCR. Bylo také prokázáno, že DNA izolovaná z výrobků magnetickými nosiči i fenolovou extrakcí je vhodná pro amplifikaci v PCR specifických pro rod *Lactobacillus* a pro probiotické druhy.

Klíčová slova: probiotika, kosmetické výrobky, izolace DNA, PCR

Vplyv vybraných liečiv na rýchlosť odstraňovania organického substrátu

*Bc. Petra Szabová
Ing. Lucia Ivanová, prof. Ing. Igor Bodík, PhD.*

*Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Oddelenie environmentálneho inžinierstva
Radlinského 9, 812 37 Bratislava
petaszabova@gmail.com*

Cieľom práce bolo definovať vplyv vybraných mikropolutantov na rýchlosť odstraňovania organického znečistenia v procesoch čistenia odpadových vôd. V laboratórnych podmienkach boli dlhodobo sledované dva modely aktivácie. Do prvého reaktora bol dávkaný ľahko rozložiteľný organický substrát, makronutrienty (dusík a fosfor) a liečivá napr. ibuprofen, amoxicilín, cetirizín, diklofenak o rôznej koncentrácii. Do druhého reaktora bol dávkaný len ľahko rozložiteľný organický substrát a makronutrientov.

Na zistenie vplyvu liečiv na rýchlosť odstraňovania organického substrátu boli použité respirometrické merania. Merania sa uskutočňovali s adaptovaným a neadaptovaným kalom na liečivá a s obidvoma substrátmi, ktoré boli použité ako substrát pre laboratórne modely.

Prvá fáza dlhodobého sledovania vplyvu liečiv na aktivovaný kal bola založená na odstránení liečiv nachádzajúcich sa v dovezenom z ČOV. Tu bolo vidieť, že CHSK sa účinne odstraňovala a v modeli počas celého testu prebiehal aj proces nitrifikácie.

V druhej fáze sme do prvého reaktora pridávali substrát s liečivami. Na základe výsledkov sme zistili, že dochádzalo k odstraňovaniu organického znečistenia aj k odstraňovaniu amoniakálneho dusíka pomocou nitrifikácie.

V tretej fáze sme zvýšili koncentráciu liečiv. CHSK na výstupe mierne vzrástla, ale účinnosť odstránenia bola naďalej vysoká. Proces nitrifikácie účinne prebiehal ďalej.

V štvrtej fáze meraní sme ešte zvýšili koncentráciu liečiv v substráte, pričom sme už pozorovali zníženie účinnosti odstraňovania CHSK. Došlo aj k poklesu účinnosti odstraňovania amoniakálneho dusíka v reaktore, do ktorého bol dávkaný substrát s liečivami.

Namerané výsledky poukázali nato, že pri jednorázovom zaťažení neadaptovaného kalu dochádza k poklesu respiračnej rýchlosti takého kalu. V prípade, že kal je adaptovaný na prítomnosť liečiv pokles respiračnej rýchlosti je len minimálny.

Kľúčové slova: Kal, liečivá, respirometrické meranie.

Analýza mikrobiálního složení vybraných probiotických výrobků metodou PCR

Bc. Barbora Tomanová
Ing. Štěpánka Trachtová, Ph.D., doc. RNDr. Alena Španová, CSc.

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie potravin a biotechnologií
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Česká republika
xctomanovab@fch.vutbr.cz

Probiotické výrobky jsou nedílnou součástí současného trhu. Kromě tradičního zastoupení mléčných probiotických výrobků však v současné době dochází také ke značnému rozšiřování sortimentu netradičních probiotických výrobků. Znalosti o složení mikrobiální komunity, jejích změnách a **potenciálních mikrobiálních interakcích** v matricích jsou zásadní pro zajištění produkce bezpečných a kvalitních výrobků. Vzhledem k možnostem poměrně přesné detekce, identifikace a kvantifikace lze pro analýzu mikrobiálního složení probiotických výrobků využít metody polymerázové řetězové reakce (PCR).

Pro práci byly vybrány různé druhy netradičních probiotických výrobků (probiotický krém, probiotické tampóny, orální probiotikum a sójový nápoj s probiotiky). Metodami fenol-chloroformové extrakce a magnetické separace byla z těchto komplexních matric izolována DNA v kvalitě vhodné pro metodu PCR. DNA byla použita pro následnou identifikaci deklarovaných bakteriálních rodů a druhů. Ve výrobcích byly prokázány bakterie rodu *Lactobacillus* a *Bacillus*. Po optimalizaci druhově specifických PCR byly prokázány také příslušné bakteriální druhy *Lactobacillus pentosus*, *Lactobacillus fermentum* a *Lactobacillus rhamnosus*. Výsledky byly porovnány s údaji deklarovanými výrobcí.

Klíčová slova: probiotické výrobky, izolace DNA, PCR identifikace

Využití neuronových sítí k urychlení cesty biotechnologie Hydal na globální trh

*Martin Vaněk
Přemysl Soldán*

*Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Centrum materiálového výzkumu
Purkyňova 118, 612 00 Brno, Česká republika
xcvanekm@fch.vut.cz*

Biotechnologie Hydal je v současnosti jedinou technologií, která umožňuje přeměnu odpadů v bioplasty. Poskytuje hned dvojitou výhodu pro životní prostředí a lidstvo – odstraňuje nebezpečný odpad a produkuje plně biodegradabilní polymer biologického původu – polyhydroxybutyrát. Jako u každé technologie i její reálné uplatnění závisí na ekonomičnosti celé výroby. Součástí vývoje je tak i optimalizace jednotlivých procesů včetně klíčového fermentačního procesu, který je v případě biotechnologie Hydal mimořádně komplikovaným vícefázovým systémem. Prezentovaná práce se zabývala matematickou a statistickou analýzou experimentálních dat ze čtvrtprovozu a matematickým modelováním procesu pomocí jedné z metod umělé inteligence – neuronových sítí. Bylo dosaženo specifikace vhodných rozmezí některých parametrů procesu, tyto specifikace vedou ke standardizaci (stabilizaci) procesu a zvýšení výtěžnosti výroby. Z testovaných variant neuronových sítí některé dosahují obzvláště vysoké míry vystižení systému i při poskytnutí pouze základních a snadno nastavitelných parametrů, které lze při procesu snadno a levně kontrolovat (např. rychlost dávkování oleje a zdroje dusíku, okysličování,...). Neuronové sítě se tak ukazují jako vhodné pro modelování komplikovaného vícefázového systému vznikajícího při fermentaci v bioreaktoru. Projekt byl financován z rozpočtu města Ostravy ev. č. smlouvy 0934/2016/ŠaS.

Klíčová slova: neuronové sítě, optimalizace, polyhydroxybutyrát, umělá inteligence

Ovplyvnenie molekulovej hmotnosti kyseliny hyaluronovej zmenou fermentačného procesu

Monika Wikarská
Vladimír Velebný, Lukáš Franke, Ivana Márová

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická Purkyňova 464/118, 612 00 Brno
xcwikarska@fch.vut.cz

V súčasnosti existujú dva komerčné procesy produkcie HA. Prvým je extrakcia z tkanív zvierat a ďalším aplikácia systému bakteriálnej expresie predovšetkým mikroorganizmami rodu *Streptococcus*. Dôležitým parametrom kvality komerčného produktu HA vzhľadom na jeho reologické vlastnosti a ovplyvňovanie fyziologických reakcií je molekulová hmotnosť. V závislosti na dĺžke reťazca má široké aplikácie v medicíne, potravinárstve a kozmetike. Bakteriálna produkcia poskytuje HA o vysokej molekulárnej hmotnosti a čistote. HA nižšej molekulovej hmotnosti je vyrábaná kontrolovanou depolymerizáciou vysokomolekulárnej HA v čistej forme radou fyzikálnych a chemických opatrení, ožarovania a enzymatickou hydrolýzou hyaluronidázami. Prísun kyslíka značne ovplyvňuje tvorbu HA, s jej rastúcou koncentráciou sa však zvyšuje viskozita média, ktorá prestup kyslíka zhoršuje. Prídavok hyaluronidáz počas fermentácie je predpokladom pre zvýšenie výťažku HA.

Kyselina hyaluronová bola pripravená vsádkovou kultiváciou mikroorganizma *Streptococcus equi* subsp. *zooepidemicus*. V priebehu fermentácie sa do bioreaktorov pridával enzým hyaluronát 4-glykanohydroláza (BTH) o rôznej koncentrácii v rôznom čase kultivácie. Výťažok HA bol stanovený gravimetricky. V produkčnom médiu bola zistená optická hustota spektrofotometricky pri vlnovej dĺžke 640 nm, ktorá podávala informáciu o množstve buniek v médiu. Čistota kultúry bola potvrdená mikroskopicky. Dynamická viskozita produkčného média bola zistená rotačným viskozimetrom, molekulová hmotnosť a polydispersita metódou separácie GPC s detekciou rozptylovým fotometrom a koncentrácia zbytkového cukru bola stanovená spektrofotometricky.

Prídavok hyaluronidázy BTH bol uskutočnený v rôznych hodinách fermentácie a o rôznej koncentrácii. Najviac sa osvedčil jej prídavok v nulte hodine fermentácie hneď po zaočkovaní fermentorov, pretože enzým pracoval dlhšie, mal väčšiu účinnosť a prídavok bol technicky najjednoduchší. Vo väčšine prípadov prevedených experimentov vznikali vysokomolekulárne útvary. Až po prídavku 2000 jednotiek enzýmu na gram vyprodukovanej HA klesla viskozita produkčného média z 219,7 mPa·s na 0,07 mPa·s, čo odpovedalo poklesu molekulovej hmotnosti z počiatočných 1,64 MDa na 74,7 kDa. Výťažok HA sa výrazne nemenil, medzi koncentráciou vzniknutej HA a zostatkovej glukózy bola ale potvrdená korelácia.

Bola dokázaná modifikácia molekulovej hmotnosti HA množstvom prídavku BTH v priebehu fermentačného procesu. Až po pridaní 2000 jednotiek BTH na gram vyprodukovanej HA vznikala nízkomolekulárna HA. Je potrebné vykonať ďalšie experimenty s vyššou koncentráciou hyaluronidázy. Potenciálne zvýšenie výťažku HA nenastalo z dôvodu veľmi nízkej koncentrácie zbytkovej glukózy.

Kľúčové slová: Kyselina hyaluronová, 4-glykanohydroláza, BTH, *Streptococcus zooepidemicus*, Molekulová hmotnosť

*Sekce studentů bakalářských a magisterských
studijních programů*

*Tématický okruh anorganická chemie,
materiálové vědy a inženýrství*

Elektrochemická charakterizácia Cu katalyzátorov

Jana Bodišová
Miroslav Gál

*Slovenská technická univerzita v Bratislave
Fakulta chemickej a potravinárskej technológie
Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov
Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika
bodisova.jana@gmail.com*

Elektrochemická charakterizácia katalyzátorov je perspektívnou metódou štúdia ich vlastností. Cyklická voltampérometria je populárnou potenciodynamickou metódou, pričom sa využíva najmä na kvalitatívnu analýzu elektrochemických reakcií. Voltampérometrická charakterizácia je citlivá metodika, vhodná na rozlišovanie zlúčenín s katalytickou aktivitou. Abrazívna cyklická voltampérometria je špeciálnym typom cyklickej voltampérometrie, pri ktorej sa vzorka práškového katalyzátora aplikuje na povrch uhlíkovej pastovej elektródy, ktorú je možné pripraviť napr. homogenizáciou práškového uhlíka a vazelíny.

Našími skúmanými látkami boli katalyzátory na báze pyrofosfátov medi. Zaujímalo nás presnejšie zloženie z kvalitatívneho hľadiska s ohľadom na ich praktické využitie. Našou zvolenou metodikou bola cyklická voltampérometria, keďže sme očakávali redoxné reakcie medi v roztoku elektrolytu. Našou pracovnou elektródou bola uhlíková pastová elektróda, ktorú sme zvolili vzhľadom na nerozpustný charakter študovaných zlúčenín. Pracovali sme v dvoch prostrediach, a to v 0,1 M roztoku KOH a 0,1 M roztoku PBS. Zvolenými štandardmi boli Cu_2O a CuO , ktoré sme rovnako ako študované zlúčeniny, polarizovali v kladnom aj zápornom smere.

Po vykonaní experimentov a vyhodnotení cyklických voltampérogramov štandardov a vzoriek katalyzátorov sme mohli vysloviť závery o ich zložení so zameraním na prítomnosť zlúčenín medi. Z nameraných výsledkov pri polarizácii elektródy v zápornom smere v oboch prostrediach vyplýva, že všetky študované katalyzátory Mek1, Mek8, Mek9, Mek27, Mek28 a Mek29 obsahujú meď v oxidačnom stupni Cu^{II} . Ak sme však pracovnú elektródu s imobilizovanými vzorkami katalyzátorov polarizovali najskôr v oxidačnom smere a následne sme tieto vzorky v spätnom skene reredukovali, pozorovali sme rozdiely v zložení jednotlivých katalyzátorov. Pri katalyzátoroch Mek1, Mek8 a Mek27 sme v počiatočnom kladnom smere polarizácie nepozorovali žiadne píky podobne ako pri CuO . Avšak ak sme imobilizovali katalyzátory Mek9, Mek28 a Mek29 na pracovnej elektróde a následne sme uskutočnili polarizáciu najskôr v oxidačnom smere, tak pozorujeme v oboch roztokoch elektrolytov vznik oxidačného píku ako v prípade Cu_2O .

Z našich meraní môžeme konštatovať, že katalyzátory Mek9, Mek28 a Mek29 obsahujú meď v oxidačných stupňoch Cu^{II} a Cu^{I} .

Kľúčové slová: abrazívna cyklická voltampérometria, katalyzátor, pyrofosfáty medi

Příprava a studium reaktivity série N,N' -alkylovaných derivátů DPP pro organickou elektroniku

Bc. Martin Cigánek
Ing. Jozef Krajčovič, Ph.D.

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav fyzikální a spotřební chemie
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Česká republika
xcccigane@fch.vut.cz

Diketopyrrolopyrroly (DPPs) se řadí díky své výrazné barevnosti a elektrické vodivosti mezi tzv. „vysoce výkonné pigmenty“, nacházející uplatnění v široké škále oblastí organické elektroniky, např. na výrobu organických solárních článků (OSC), polem řízených tranzistorů (OFET) nebo světlo emitujících diod (OLED). Nesubstituované základní deriváty jsou však nerozpustné ve většině známých rozpouštědel, což značně omezuje jejich využitelnost. V této práci jsou popsány přípravy základních derivátů DPP, thiofenového a fenylového, které byly následně modifikovány nukleofilní substitucí alkylovými řetězci – nerozvětveným dodecylem, rozvětveným 2-ethylhexylem a cyklickým ethyladamantylem. Inkorporace alkylových řetězců na heteroatomy dusíku molekuly DPP zamezí tvorbě intermolekulárních vodíkových vazeb, což má za následek zvýšení rozpustnosti a tedy výrazné rozšíření aplikovatelnosti a využitelnosti výsledných derivátů. Charakter alkylového řetězce má vliv také na jejich prostorové uspořádání, optické i elektrické vlastnosti. Bylo však zjištěno, že z důvodu přítomnosti kyslíkových atomů v molekule DPP dochází ke vzniku možných tautomerních forem. Nukleofilní substituce je tak značně neselektivní a kromě majoritního N,N' -alkylovaného produktu vznikají vedlejší N,O' - a O,O' -alkylované deriváty DPP. V práci se dále zabýváme vlivem charakteru alkylového řetězce na vznik vedlejších produktů substituce za obdobných reakčních podmínek. Následně je popsán vliv polohy alkylového řetězce na optické vlastnosti nových materiálů. U derivátu N,N' -ethyladamantyl-thiofen DPP byly struktura a prostorové uspořádání studovány pomocí X-Ray analýzy.

Klíčová slova: diketopyrrolopyrrol, organická elektronika, substituce, alkylace

Syntéza organických pevno-fázových fluorescenčních barviv na báze para-bis(2-thienyl)phenylenu

Bc. Ján Jančík
Ing. Jozef Krajčovič, Ph.D.

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav fyzikální a spotřební chemie
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno-Medlánky Česká republika
xcjancik@fch.vut.cz

Vývoj pevno-fázových luminiscenčních organických barviv je vysoce atraktivní z pohledu široké škály jejich možných aplikací, mezi které se řadí organické pevno-fázové lasery, optická vlákna, fluorescenční sondy pro zobrazování DNA a mnohé další. Para-bis(2-thienyl)fenylen představuje nadějnou alternativu s vysokým potenciálem pro výše zmiňované aplikace. V uvedené práci jsme se zaměřili na vliv fluoru jako elektronakceptorního substituentu alokovaného na centrální fenylové jednotce i vliv pozice (in, out) solubilizačních dodecylových postranních řetězců na thiofenových jednotkách na kvantové výtěžky fluorescence v pevné fázi. Další neméně důležitou zkoumanou vlastností byla termická stabilita a schopnost prostorové organizace molekul. Pro detailní pochopení vplyvu struktury *vs.* optické vlastnosti molekul byl studován vliv objemné a značně stabilní ethyl-adamantylové skupiny substituované na para-bis(2-thienyl)fenylenu na kvantové výtěžky fluorescence v pevné fázi. Zavedením ethyl adamantylového fragmentu do molekuly para-bis(2-thienyl)fenylen, bylo dosaženo několik pozoruhodných vlastností mezi které patří, dramatické zvýšení termické stability systému, z 55 °C na 250 °C ve srovnání s dodecylovým analogem a signifikantní zvýšení fluorescence v pevné fázi ze 4 % na 50 %.

Vzhledem k možným cíleným chemickým modifikacím centrálního para-bis(2-thienyl)fenylenového skeletu lze modifikovat jeho vlastnosti a přesně je přizpůsobovat k potenciálnímu využití v organické elektronice.

Klíčová slova: fluorescence v pevné fázi, termická stabilita, adamantan, fluorescenční sondy, fluor, thiofen, organická elektronika

Catalyzed Conversion of Lignin

*Anton Lisý
Aleš Ház*

*Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Ústav polymérnych
materiálov,*

*Oddelenie Dreva, celulózy a papiera
Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika
tono.lisy@gmail.com*

This paper is dedicated to finding a way of efficient lignin waste refining by catalytic conversion in conditions of thermo-baric reactor or direct pyrolysis with catalyst.

Lignin is usually produced by pulp mills in form of black liquor, where it is dissolved along with other organic compounds and inorganic salts. It is then burned in recovery boiler to generate heat and electricity, along with regenerating cooking chemicals. By burning it, we lose a rather compound rich mixture, which we can convert to more efficient source of energy or chemicals.

Isolation of lignin is also important. If we can retain inorganic compounds in state from which we can regenerate them to cooking mixture, it helps with economy of process, although this is not addressed in this paper. If lignin is separated from mixture, it provides a resource with low cost and complex chemical composition. Converting lignin with catalyst in thermo-baric reactor may yield a blend containing interesting chemicals, in term of cost, rarity or chemical structures. Isolation may be problematic, because products tend to have similar properties for two or more compounds.

Lignin used for experiments in this paper, was isolated from black liquor from non-sulfuric process supplied by OP Papírna, s.r.o. (Olšany, Česká republika). It was isolated by addition of sulphuric acid and washing by deionized water, followed by drying in lyophilizator and storing for later use in dry dark container. In conditions of thermo-baric reactor, addition of oxalic acid and platinum coated carbon was used as catalyst. Products were separated and analyzed in gas chromatograph with mass spectrometer. In addition to this experiment, series of pyrolysis of lignin with variety of catalyst were realized. Iron oxide, nickel oxide and zeolite in Y-sit H-form were used.

Results shows that used procedures may prove effective if optimal conditions are set. Products were mixtures of organic compounds, containing mainly phenolic compounds and its derivates. Specifically guaiacol, 4-ethylguajacol, derivates of vanillin, phthalic acid and others. As mentioned, separation will be problematic as varieties of derivates with similar properties were created.

Vedlejší energetické produkty jako surovinová základna budoucnosti

Bc. Michal Marko

*Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie materiálů Purkyňova
464/118, 612 00 Brno, Česká republika xcmarmomch.vut.cz*

Tato práce reaguje na celosvětový problém týkající se hledání alternativních zdrojů nerozstných surovin. Práce se zabývá analyzováním vzorků vysokoteplotních a fluidních popílků z produkce elektráren v České republice a následným experimentálním ověřením možnosti separace některých žádoucích složek. Na základě prvkového a fázového složení byla navržena a laboratorně testována možnost separace hliníku, titanu a železa extrakcí do roztoku kyseliny sírové za následného rozdělení těchto složek vhodnými dělicími metodami. Separace vybraných prvků z popílkové matrice byla provedena za laboratorní teploty a následně při teplotě varu použitého rozpouštědla.

Klíčová slova: druhotné suroviny, surovinová základna, popílký, využití popílků.

Lehké kompozity na bázi fluidních filtrových popílků

*Jakub Palovčík
Tomáš Opravil*

*Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemické, Ústav chemie materiálů
Purkyňova 118, 612 00 Brno, Česká republika
xcpalovcik@fch.vutbr.cz*

Práce se zabývá možnostmi využití vedlejšího energetického produktu ze spalování uhlí ve fluidním kotli pro přípravu pojiva a kompozitních materiálů na bázi tohoto pojiva. Jsou zde studovány a analyzovány vybrané fyzikální a chemické vlastnosti fluidních filtrových popílků, jako je například obsah volného vápna, nebo fázové a chemické složení. Rovněž byly studovány vybrané vlastnosti dalších vstupních materiálů. Na základě výsledků těchto analýz byla připravena pojiva na bázi fluidních filtrových popílků. Pojiva byla dotována různými běžně dostupnými přísadami s cílem úpravy reologických vlastností, poklesu objemové hmotnosti a nárůstu pevnosti v tlaku a v tahu za ohybu. V práci byla testována možnost využití odpadních polyesterových vláken, která byla dispergována jako výztuž v matricích na bázi výše zmíněných pojiv. Připravené vzorky pojiv a kompozitů byly testovány na pevnost v tahu za ohybu a na pevnost v tlaku po 28 dnech a byl sledován vývoj jejich objemových hmotností. **Fázové složení vybraných vzorků** bylo analyzováno pomocí rentgenové difrakční analýzy.

Klíčová slova: fluidní spalování, fluidní popílek, pevnost v tlaku, objemová hmotnost.

Tvarování hydroxyapatitu na mikro úrovni metodou freeze-casting pro přípravu kostních náhrad

*Lucie Pejchalová
Jakub Roleček, David Salamon*

*Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická,
Purkyňova 464/118 61200, Brno, Česká republika*

Vhledem k celosvětovému stárnutí populace, dochází k častější potřebě opravy pohybového aparátu. V některých případech je proto nutno přejít v konečné fázi k implantaci kostní náhrady. Nejčastěji je pro svoji biokompatibilitu a bioaktivitu využíván hydroxyapatit, který je v kostech přirozeně zastoupen.

Využití hydroxyapatitu jako materiálu pro kostní náhrady je omezeno mechanickou stabilitou v porézních systémech. Metoda, při které bylo dosaženo nejlepšího poměru mechanické stability a porozity, se nazývá freeze – casting. Tato metoda využívá tvorbu ledu (v případě vodných suspenzí) ke tvorbě lamelární struktury během kontrolovaného mražení. Dalším krokem je odstranění ledových krystalů lyofilizací. Následně je výsledná porézní lamelární struktura zpevněna slinutím. Změnou složení suspenze nebo podmínek mražení lze dosáhnout různé mezilamelární vzdálenosti, spojení lamel a porozity.

V této práci byly připraveny keramické suspenze v objemovém zastoupení hydroxyapatitu 7,5%, 10%, 15% a 20%, které byly použity při přípravě porézních kostních náhrad metodou freeze – casting. Během mražení byla do struktur implementována 3D mřížka, která posloužila jako šablona pro síť kanálků (v průměru cca 800 μm). Po lyofilizaci byly následným ohřevem odstraněny z materiálu organické látky, včetně 3D mřížky.

Výsledná biokeramická struktura dosáhla porozity víc než 90% a velmi dobrého poměru mechanické stability a porozity. Implementace 3D mřížky se ukázala být vhodnou metodou pro kontrolovanou tvorbu kanálků s dostatečným rozměrem, sloužící k zvýšení bioaktivity materiálu.

Klíčová slova: bio keramika, freeze-casting

Pressureless Sintering of Boron Carbide

V. Rákošová

L. Bača

*Department of Inorganic Materials, FCHPT STU,
Radlinského 9, 81239 Bratislava*

Boron carbide is an important non-metallic material, which has found an extensive application in various industries. Owing to its unique properties such as high hardness, wear resistance and low density, it became very useful in nuclear and armour industry. The current production techniques, such as hot pressing or spark plasma sintering, are used for sintering of simple shapes and are considered as expensive methods. Based on these reasons, there is a need for a cheaper and simpler process. One of the alternatives to gain as great densification as possible and therefore obtain excellent mechanical and physical properties is using method of pressureless sintering. Boron carbide reaches final density less than 90% and by itself is very hard to sinter, so the purpose of this study was to investigate the effect of graphite (used as a sintering aid) on densification, mechanical and physical properties. In conclusion, based on the literature and this research, next steps to improve pressureless sintering have been proposed.

Key words: pressureless sintering, boron carbide, carbon addition

Výroba metanolu z tuhého komunálneho odpadu

*Patrik Šuhaj
Juma Haydary*

*Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie,
Ústav chemického a environmentálneho inžinierstva
Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika
suhajpato@gmail.com*

Tuhý komunálny odpad nemá vhodné vlastnosti na tepelné spracovanie a preto sa pristupuje k jeho úprave na tuhé alternatívne palivo. Splyňovaním tuhého alternatívneho paliva sa vyrába plyn, ktorý má potenciál byť použitý ako syntézny plyn na výrobu metanolu. V programe Aspen Plus sa nasimulovala prevádzka na spracovanie tuhého alternatívneho paliva s definovaným zložením a výhrevnosťou. Navrhnutá prevádzka sa skladala zo splyňovania s čistým kyslíkom, čistenia vyrobeného plynu, syntézy metanolu a separácie metanolu. Simuláciou sa zistili optimálne prevádzkové parametre pre splyňovanie ako je pomer hmotnostných tokov kyslíka k surovine a vodnej pary k surovine, tak aby sa syntézou vyrobil plyn bohatý na vodík a oxid uhoľnatý. Čistenie plynu prebiehalo v dvoch absorpčných kolónach, v prvej sa využíval na absorpciu roztok hydroxidu sodného a v druhej kolóne amínový vodný roztok monoetanolamínu. Pre druhú absorpčnú kolónu a reaktor na syntézu metanolu sa zistili optimálne prevádzkové parametre ako je tlak a teplota. Separácia metanolu prebiehala v dvoch rektifikačných kolónach, v prvej sa z kvapalného surového metanolu odseparovali plyny a v druhej kolóne sa odseparovali od metanolu kvapaliny. Pre obidve kolóny sa zistil optimálny počet teoretických etáží, refluxný pomer a poloha nástrekovej etáži. Simuláciou sa ukázalo, že pri spracovaní 15 t/h definovaného tuhého alternatívneho paliva je možné vyrobiť 9 t/h čistého metanolu. Optimalizovalo sa využitie všetkých tepelných prúdov a zistilo sa, že pri splyňovaní a syntéze metanolu sa nevygeneruje dost' vodnej pary na pokrytie spotreby. Chýbajúca para sa vyrábala spaľovaním zemného plynu a odplynov pochádzajúcich z čistenia plynu a separácie metanolu.

Kľúčová slova: tuhý komunálny odpad, splyňovanie, syntézny plyn, metanol, Aspen Plus

Vliv strukturních a procesních parametrů na vlastnosti polymerních nanokompozitů

*Bc. Klára Zárybnická
prof. RNDr. Josef Jančář, CSc.*

*Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav materiálů.
xczarybnicka@fch.vut.cz*

Polymerní nanokompozity mohou dosahovat výrazně vyšší tuhosti, pevnosti či termické stability při velmi malém obsahu nanoplňiva v porovnání s plasty plněnými tradičním plnivem o rozměrech v řádu mikrometrů. Cílem práce je studium strukturních a procesních parametrů, které řídí disperzi nanočástic v roztocích polymerů, aby bylo možno reprodukovatě připravovat polymerní nanokompozity s požadovaným prostorovým uspořádáním nanočástic. Je řešen především vliv různých komponent jako je polymerní matrice, nanočástice a rozpouštědla, ve kterých dochází k mísení matrice a nanočástic. Použité komponenty mají vliv na rozdispergování částic a tím jsou ovlivněny i vlastnosti materiálu jako je např. teplota skelného přechodu nebo tuhost materiálu. Většina dnes používaných inženýrských materiálů byla vyvinuta s přímým řízením struktury v rozměrech mikronů. Proto lze tvrdit, že nanotechnologie otevírají širokou škálu možností, jak ovlivňovat uspořádání materiálu na úrovni dříve nedosažitelných rozměrů. Možnost kontrolovat samouspořádávání nanočástic by mohla být cestou k syntéze biomimetických materiálů. Jako příklad lze uvést systémy, ve kterých jsou obsaženy sférické nanočástice hydroxylapatitu – zubní sklovina nebo napodobeniny kosti. Kontrola uspořádávání nanočástic je tedy unikátní možností ke konstruování systémů inspirovaných přírodou.

Klíčová slova: nanokompozity, samouspořádávání, termo-mechanické vlastnosti.

*Sekce studentů doktorských
studijních programů*

Tématický okruh organická, environmentální a biochemie

Förster Resonance Energy Transfer in Cationic Micelles Using Perylene-Fluorescein as Donor-Acceptor System

Zuzana Adamcová
Filip Mravec, Miloslav Pekař

Brno University of Technology, Faculty of Chemistry,
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno
xcadamcovaz@fch.vut.cz

This contribution is focused on using FRET between perylene as a donor fluorophore and fluorescein as an acceptor in three different systems of cationic micelles (consisting of three cationic surfactants with different hydrophobic chain length – TTAB (C_{14}), Septonex (C_{15}) and CTAB (C_{16})) as form of a nanoscale ruler. Concentration of perylene in micelles was kept constant and the amount of fluorescein (hydrophilic probe located in the solution surrounding micelles) varied up to ratio 1:10. Occurrence of energy transfer in each sample was quantified by measuring donor lifetime in presence of increasing amount of the acceptor. Two parameters were compared – effectivity of the energy transfer, which depends on decrease of donor lifetime in presence of acceptor in close proximity to the donor molecule and binding, which describes percentage of FRET pairs (ratio of perylene molecules undergoing FRET vs. complete amount of perylene molecules in the system) based on comparing relative amplitudes of donor and quenched-donor lifetimes. Effectivity of FRET is in direct relation to the distance between donor and acceptor. With increasing amount of fluorescein in the system, increase of the effectivity of energy transfer was observed as there were more and more fluorescein molecules in the system which caused interactions between perylene and fluorescein on the shortest possible distance in particular micellar system. As certain perylene-fluorescein ratio was reached, the effectivity didn't increase anymore. On the other hand, binding increased sample from sample with growing fluorescein concentration.

Distance between donor molecule solubilized inside micelles and acceptor molecules attached to their hydrophilic parts was gained at constant effectivity of the energy transfer. Characteristic distance was slightly higher for surfactants with longer hydrophobic chains – $3,54 \pm 0,03$ nm in TTAB micelles, $3,64 \pm 0,02$ nm in Septonex and $3,78 \pm 0,01$ nm in case of CTAB. To compare these results, fluorescence correlation spectroscopy was used to measure diffusion coefficients of all micellar system with perylene solubilized inside. After recalculating obtain diffusion coefficients using Stokes-Einstein equation, micelle diameter were determined: $3,16 \pm 0,01$ nm for TTAB micelles, $3,42 \pm 0,01$ nm for Septonex and $4,56 \pm 0,07$ nm for CTAB, which show the same trend. However larger differences between studied micellar systems were found using this method. It is possible, that perylene is not solubilized exactly in the center of the micelle, or fills most of the hydrophobic core volume, which makes only small differences for surfactants with slightly varying hydrophobic chain lengths.

Keywords: FRET, perylene, fluorescein, cationic micelles

Preparation and characterization of liposomes as cosmetic delivery systems

Jitka Bokrová

Petra Matoušková, Kamila Tilšarová, Ivana Márová

*Materials Research Centre, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic
xcbokrova@fch.vutbr.cz*

Besides finding some new sources, cosmetic producers tend to adopt well-known and popular ingredients already used in the health and food sectors.

Presented work is focused on characterization of some complex natural sources of phenolics and their encapsulation into liposome nanoparticles.

Total phenolics, flavonoids and antioxidant activity of plant extracts was determined spectrophotometrically. Extracts were then packed into liposome particles. Size of prepared liposomes was evaluated by dynamic light scattering and their stability was determined using zeta potential. Encapsulation efficiency of active compounds was evaluated by spectrophotometrical methods. Liposome particles with antioxidant properties were tested for possible genotoxic effects as well as pure extracts.

In this work it was found that selected natural sources of phenolics could be packed into liposome particles with high encapsulation efficiency. Neither prepared particles nor pure extracts show genotoxic effect on model organism. Liposome particles with antioxidant ingredients can enhance the effectiveness of cosmetic products and could be also used in modern food supplements.

Keywords: liposomes, phenolics, genotoxicity

Acknowledgements: This work was supported by project „Materials Research Centre – Sustainability and Development“ No. LO1211 (Ministry of Education, Youth and Sport of the Czech Republic).

Determination of Lipid Membrane Properties and Influence of Cholesterol

Jana Burdíkoviá
Leoš Doskočil, Miloslav Pekař

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

Membrane properties such as a fluidity and degree of a lipid chain order are the key variables in design of new liposomal drug delivery systems. Hence, the lipid order parameter and phase transition temperature of mixed lipid system were studied by means of steady-state fluorescence spectroscopy.

The phase transition temperature was obtained by analyzing of laurdan emission spectra at different temperatures. Laurdan molecule is solubilized in the acyl chain region of the membrane. The shape of the laurdan emission spectra depends on the presence of water molecules in the vicinity of the naphthalene moiety. The red shift in laurdan emission spectra indicates the increased concentration of water in the bilayer and its increased mobility.

The increase of the phase transition temperature was observed in case of all studied cationic lipid/phospholipid mixtures.

The degree of a lipid acyl chain order in liposomes and the membrane fluidity were studied by means of fluorescence anisotropy, which measures depolarization of fluorophores excited by polarized light, where the depolarization depends on the membrane fluidity. Diphenylhexatriene is a suitable fluorescence probe for the anisotropy measurements.

The increase of lipid order was observed with increasing ratio of phospholipid in the lipid mixture.

By mixing of biocompatible zwitterionic phospholipid with cationic lipid we get composite structures with tailored mechanical properties which could be utilized in drug delivery systems. Moreover, interactions with a polyelectrolyte could be controlled by cationic lipid/phospholipid ratio.

The inclusion of cholesterol molecule in the acyl chain region has different effect on the membrane fluidity depending on acyl chain saturation and degree of order in the headgroup area (ratio of cationic lipid/phospholipid).

Keywords: lipid, membrane, liposome, fluorescence spectroscopy, laurdan, diphenylhexatriene

Astaxanthin production by *Haematococcus pluvialis* under various stress conditions

Ing. Dana Byrtusová
prof. RNDr. Ivana Márová, CSc., Ing. Radka Kočí, Ph.D.

Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Food Chemistry and Biotechnology
Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic
xcbyrtusova@fch.vutbr.cz

The green microalgae strain *Haematococcus pluvialis* is the best producer of astaxanthin, the red pigment, which is known for antioxidant activity that is higher than other carotenoids and vitamin E. Astaxanthin is localized in the thick-walled cysts, which are produced under unfavorable environmental conditions. The present study was aimed to investigate the effect of different stress factors on astaxanthin production.

The growth characterization was performed by optical density at 680 nm and 720 nm in Photobioreactor FMT 150 under optimal growth conditions: cultivation media BG11, white light of intensity 100 $\mu\text{mol photons m}^{-2} \text{s}^{-1}$, 22 °C, aeration with the air enriched by 2 % of CO₂. During cultivation the cell growth phases and number of cells were observed by optical microscope. Photochemical quantum yield was monitored by pocket size instrument AquaPen (PSI). In the last part of work, the influence of selected stress effects on astaxanthin production was studied. Followed stress factors were used: high intensity of light (1 000 $\mu\text{mol photons}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$), low nitrogen concentration (2.2 mM) and combined addition of sodium chloride and sodium acetate (0.5% NaCl, 2 mMNaAc).

The best yield of astaxanthin was obtained under strong illumination. Oppositely, minimal production was showed in presence of salt stress.

Keywords: astaxanthin, *Haematococcuspluvialis*, stressconditions

Acknowledgements: This work was supported by the project „Materials Research Centre – Sustainability and Development“ Nr. LO1211 of the MSM.

Development of a Micro Method for DNA Isolation Using Magnetic Nanoparticles

Ing. Lenka Fialová
doc. RNDr. Alena Španová, CSc.
doc. Ing. Bohuslav Rittich, CSc.
RNDr. Aleš Kovařík, CSc.²

Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Food Science and Biotechnology
Purkyňova 464/118, 612 00, Brno, Czech Republic
xfialoval@fch.vutbr.cz

DNA-based methods are an important part in the detection of food adulteration. These methods require highly purified DNA allowing enzymatic treatments. However, the quality of DNA isolated from food products is often low due to phenolic and polysaccharide contaminants.

The aim of this work was to develop a micro method for isolation of DNA from plant-based food products. The ultimate goal was an optimized protocol which would provide DNA suitable for application in molecular diagnostics. Samples of DNA from different jams, in particular red currant, chokeberry and peach jam, were isolated using magnetic nanoparticles. The jam samples were processed by a modified cetylammmonium bromide (CTAB) method (treatment with CTAB-containing buffer, chloroform and isopropanol). After the separation of polyphenolic and polysaccharide CTAB complexes partially purified DNA was bound to magnetic nanoparticles covered by poly(L-lysine). Two different methods of DNA isolation were compared: a separation based on condensation of DNA and its adsorption on the surface of magnetic particles and the separation of DNA from the sample by electrostatic forces. The quality of isolated DNA was determined by UV spectrophotometry. The spectrophotometric determination showed a contamination of the samples by various compounds. Some DNA samples were successfully amplified using conventional PCR. The experiments mentioned above will be continued and the optimization of the method is in progress.

Keywords: DNA isolation, magnetic nanoparticles, PCR

Use of terrestrial gastropods in the ecotoxicological research

Mgr. Pavel Fojt

MVDr. Helena Zlámalová Gargošová PhD.

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

The main aim of this work is to present the possibility of using a cosmopolitan terrestrial organism and its two different life stages for evaluation of the possible effect of environmental contaminants. The organism used in this study is a pulmonate gastropod *Helix aspersa aspersa* (syn. *Cantareus aspersus* or *Cornu aspersum*), or the brown garden snail in common. For this study, we selected two different life stages of this snail: eggs and juvenile individuals. The assessed substance was cadmium chloride (CdCl_2). There were three main parts of the study: standard growth inhibition test with juvenile snails, hatching success test with the eggs and embryotoxicity test. In the first case, the juvenile snails were exposed to different concentrations of cadmium (0 – 500 mg/l) and the toxicant was spiked onto a filter paper on the bottom of the breeding boxes. This test lasted for 28 days and the monitored endpoints were: mass and shell diameter. Second part of study - exposition of eggs was performed in small Petri dishes with a filter paper on the bottom and the concentrations of cadmium were the same as in the first case. The exposure of the eggs lasted for 14 days and the percentage of successfully hatched snails was evaluated. In the last case, we observed the effect of cadmium in a low concentration (6mg/l) on the embryos in different time periods from the start of the test. This test lasted also for 14 days and the endpoints were: size and state of the embryo, morphological and physiological changes.

The results showed significant differences between the sensitivity of eggs and juvenile snails and also negative effects of cadmium chloride on the development of the snail embryos. The present study summarizes a scale of different endpoints, which could help for better understanding the effects of toxicants on the environment.

Time-resolved Fluorescence of Prodan in Micellar Solution of Cetyltrimethylammonium Bromide

*Petra Holínková
Miloslav Pekař*

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Physical and Applied
Chemistry
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno
xcucekajova@fch.vutbr.cz*

In this paper we investigate the fluorescence measurement of the molecular probe Prodan in cationic micellar solution of cetyltrimethylammonium bromide (CTAB). Photophysical behaviour of Prodan is strongly dependent on polarity of its environment. The excited molecules of Prodan can exist in two different forms – the locally-excited state (LE), from which molecules of Prodan can switch to lower-energy intramolecular charged transfer state (ICT) due to strong interaction with molecules of solvent. In nonpolar environments Prodan emits from LE state, while in polar environments the emission is from ICT state. Time-resolved fluorescence spectra (TRES) and deconvolution of steady-state emission enable an interpretation of three different locations of Prodan molecules in micellar aggregates.

Keywords: Prodan, CTAB, TRES, micelle

The comparison of the concentrations of platinum and palladium in Brno and Moscow

Stanislav Ježek
Renata Komendová

*Faculty of Chemistry, Brno University of Technology
Institute of Chemistry and Technology of Environmental Protection
xcjezek@fch.vutbr.cz*

The study is focused on comparing the occurrence of platinum and palladium in urban areas in Brno and Moscow.

This thesis includes the monitoring of released amount of platinum and palladium to the environment, especially due to intensive car traffic. In this work we were compare two selected types of matrix - herbaceous vegetation and soil matrix. Acquired data of measurements confirmed that the soil matrix seems to be preferable matrix for monitoring the concentration of platinum and palladium in the environment. It is caused due to lower absorption in vegetation and more difficult detectability in biotic samples. Poor absorption may be caused by climatic conditions, especially rinse contaminated plant parts by atmospheric rainfall.

The sampling sites were chosen in places with the highest rate of car traffic. These were mainly near busy intersections and busy road sections.

Concentrations of metals from the center of Moscow were approximately 3 times higher than the city center in Brno. Values from the sampling sites MKAD (Moskovskaya Koltsevaya Line avtomobilnaja doroga) were up to 10 times higher than the value from Brno. The result of such high concentrations of platinum and palladium is extremely frequency of automobile traffic and constantly forming columns with driving style „start - stop“.

The major environmental platinum and palladium pollution is their use in automotive catalyst. Surface of the catalyst is attacked during chemically, physically and rapid alternating redox conditions, high temperature and mechanical wear. This wear leads to emission of platinum and palladium into the surrounding environment. The highest accumulation of these metals is in the vicinity of roads, mainly in the large urban areas. So, just **people** living near these busy roads are the most **endangered group** in terms of influencing their health by present metals with emergence of possible allergic reactions and other disabilities.

Keywords: Platinum, palladium, platinum group metals, the environment, atomic absorption spectrometry, extraction, ICP-OES

Development of Materials Based on Hyaluronic Acid's Hydrogels for Myocardial Regeneration

Lenka Kohutová

Martin Pravda, Miloslav Pekař, Garry Duffy, Vladimír Velebný

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Materials Chemistry
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic
kohutova@contipro.com*

Heart failure following myocardial infarction (MI) causes morbidity and mortality worldwide. The field of tissue engineering has developed several potential therapies for treating MI including cell therapy. Cells could be incorporated into the hydrogels to prolong their retention in the site of application. These injectable biomaterials have the potential to be delivered minimally invasively by catheter.

Hyaluronan-tyramine derivative (HA-TA) could be used for this purpose. It is capable to form covalently crosslinked hydrogels by horseradish peroxidase (HRP 0,1–0,5 U/ml) mediated reaction. Crosslinking reaction is initiated by addition of highly diluted H_2O_2 (0,3–1,7 mM). To enhance cell adhesion, HA derivative (HA-PH-RGD) bearing both hydroxyphenyl moiety and RGD cell adhesive sequence, have been prepared. The capacity of scaffolds to carry the high number of cells is very important to achieve effective treatment of damage heart tissue after myocardial infarction. It has been prepared hydrogel capable to contain a huge number of cells. HA-aldehyde (HA-Ox), commonly prepared by selective oxidation of native HA, could be used as other possibility. Gelation is initiated by addition of diamine O,O'-1,3-propanediylbishydroxylamine dihydrochloride (POA) into HA-Ox solution. In this work the properties of listed materials have been evaluated and compared to select suitable material for intended application.

The viscosity of precursor solutions was evaluated using rheometer ARG2. The critical gel point (GP) was detected at 37 °C as cross-over point where the elastic and viscous moduli were equal ($G' = G''$). Young's modulus (Y), compressive stress at breaking point and toughness (T) were measured in compression using device Instron 3342. Measuring of mechanical properties was repeated 3 times with variability $\pm 10\%$. The swelling ratio of the samples was determined from their weight increase from the original to the swollen state. Up to 50 mil stem cells were encapsulated per ml of hydrogel and cultivated for 28 days.

HA based hydrogels are prepared by non-cytotoxic reaction. HA-TA/HA-HP-RGD hydrogels fulfil criteria for incorporation of large number of cells up to $50 \cdot 10^6$ cells/ml of hydrogel. Moreover, the low precursor solution viscosity enables to deliver the material through the catheter into the damaged heart tissue. All these aspects predispose these materials as suitable cell seeded scaffold for myocardial regeneration.

This work has received funding from the European Union's Seventh Framework Programme for research and technological development and demonstration under Grant Agreement no. 604531 (AMCARE).

Occurrence of Macrolide Antibiotics in Waste Waters

*Pavína Landová
Milada Vávrová*

*The Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Environmental Chemistry
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic
xclandova@fch.vutbr.cz*

Antibiotics are pharmaceuticals used to treat diseases caused by bacteria. They are widely used in human and veterinary medicine. Macrolides are after penicillins the second most prescribed group of antibiotics in the Czech Republic.

After administration, the drugs are excreted from the body in the form of metabolites or unchanged via urine or feces. These compounds are then discharged into the waste water and in most cases enter the wastewater treatment plants (WWTPs). Antibiotic can negatively affect biological processes of treatment, where microorganisms are essential for proper functioning WWTP. In many cases the efficiency of antibiotics removal is not sufficient, thus WWTPs are considered as major point sources of environmental contamination by these compounds. The presence of antibiotics in the environment can lead to the development of bacterial resistance to antibiotics which is one of the biggest threats to mankind nowadays.

In this work, we examined the presence of macrolide antibiotics (azithromycin, clarithromycin, erythromycin and roxithromycin) in waste water (in both, inflow and outflow from treatment plant) from three different WWTPs – WWTP Brno-Modřice, WWTP Mikulov and WWTP of The University of Veterinary and Pharmaceutical Sciences Brno. As pre-concentration step was used solid phase extraction (SPE) and HPLC coupled to MS detection was used as a final analytical technique.

The total occurrence of macrolides in 26 collected samples was 100 % for azithromycin, clarithromycin and erythromycin and 96 % for roxithromycin. In general, the highest concentrations were observed in WWTP of Brno-Modřice and the lowest concentrations were determined in WWTP of The University of Veterinary and Pharmaceutical Sciences Brno. The comparison of concentrations of individual substances shows, that the concentrations of azithromycin and clarithromycin were one or two orders of magnitude higher than the concentrations of erythromycin and roxithromycin (concentration scale of ng L^{-1} to $\mu\text{g L}^{-1}$). Calculated removal efficiencies of antibiotics were ranging from 13 to 100 %.

Keywords: waste water, macrolide antibiotics, liquid chromatography, mass spectrometry, solid phase extraction

Acknowledgment: This study has been worked out under the project No. LO1408 „AdMaS UP - Advanced Materials, Structures and Technologies“, supported by Ministry of Education, Youth and Sports under the „National Sustainability Programme I“ and under the project FCH-S-17-4766 from the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic.

Use of Fluorescence and Bacterial Autofluorescence in Biotechnological Processes

Lucie Müllerová
Stanislav Obruča, Filip Mravec, Kateřina Bílková

Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Food Science
Purkyňova 486/118, 612 00, Brno Medlánky
Lucie.Mullerova@vut.cz

Cellular autofluorescence can affect the sensitivity of fluorescence microscopic or flow cytometric assays by interfering with the detection of low-level specific fluorescence. **On the contrary, autofluorescence can be used to distinguish microbial cells from abiotic particles in flow cytometry analysis or, moreover, it can even serve as a marker of physiological state of the microbial culture of the interest, for instance during biotechnological process.** Therefore, our aim is to use the green autofluorescence of bacteria *Cupriavidus necator H16* and its mutant strain *Cupriavidus necator PHB-4* as a marker in various biotechnological processes. Time resolved fluorescence spectra of cellular autofluorescence using variety of excitation lasers are presented, and so are the possibilities of using fluorophores whose spectra do not overlap with the native green fluorescence.

Flow cytometry and fluorescence microscopy are complementary techniques used in this work. Combining their strengths, i.e. the ability of flow cytometer to analyse millions of cells in a very short time, and the high resolution of fluorescence microscopy when analysing single cell, we are able to obtain much more reliable data than when using just one of these techniques.

Keywords: fluorescence, bacterial autofluorescence, biotechnological processes, flow cytometry, fluorescence microscopy

Analysis of Black Inkjet Prints by Atomic Force Microscope Infrared-Spectroscopy (AFM-IR) and Surface-Enhanced Infrared Absorption Spectroscopy (SEIRAS)

*Michal Oravec
Katsuya Miura, Michal Čeppan*

*Slovak University of Technology in Bratislava,
Faculty of Chemical and Food Technology,
Institute of Natural and Synthetic Polymers
Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic
michal.oravec@stuba.sk*

Nowadays the preparation of colloidal nano-structures with surface enhanced activity for surface spectroscopy methods is a very active field of research. Particularly in cases where the low concentration of the sample is studied. We analysed three only black inkjet prints using Surface-Enhanced Infrared Absorption Spectroscopy (SEIRAS) and these three samples were measured using Atomic Force Microscope Infrared-Spectroscopy AFM-IR. The present work deals with the micro-destructive method of document analysis from the point of view of forensic examination of questioned documents. We analysed samples spectra acquired directly from the document. The colloid of silver nanoparticles (AgNPs) were synthesized and applied in SEIRAS measurements. The purpose of enhancement effect of colloids on analysed samples was to improve the resolution of the absorption signal from noise. Size and shape of prepared AgNPs were characterised using scanning electron microscopy (SEM).

The experiment was performed by measuring spectra in infrared range to gain signal of inkjet outprints. Nexus 670 FT-IR device, in ATR mode with Smart Dura Scope accessories – diamond crystal, resolution 4 cm^{-1} , 32 points of scans in the range of $4000\text{ to }700\text{ cm}^{-1}$ was used. Using Smart Dura Scope, the AgNPs treated area of outprints could be focused more precisely than visually. Measured spectra were compared with AFM-IR (nanoIR2, Analysis Instruments) spectral data acquired in two ranges of $1000\text{ to }2000$ and from $2500\text{ to }3600\text{ cm}^{-1}$ with a resolution of the device setting to the 4 cm^{-1} and probe size $20 - 30\text{ nm}$. The spectral measurements were performed afterwards the AFM images were captured. The structure of printed paper could be observed and the spot of examination could be selected.

Both methods provide an insight into the chemical structure of the inkjet-printed document. We, therefore, consider the AgNPs would be promising for applications in the forensic analysis of documents when routine methods are not effective.

Keywords: AFM-IR, SEIRAS, inkjet

High-Throughput Optimization of Red Yeast Cultivation Conditions Using FTIR And Raman Spectroscopy

Marek Rapta

Volha Shapaval, Achim Kohler, Boris Zimmermann, Valeria Tafintseva,
Martin Szotkowski, Dana Byrtusová, Nadieżda Mikheichyk, Iveta
Kostovová, Ivana Márová

Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Food Science and
Biotechnology
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno
marek.rapta@vut.cz

Oleaginous red yeasts (*Rhodotorula*, *Cystoflbasidium* and *Sporobolomyces*) are non-conventional yeasts with ability to utilize a wide range of cheap waste substrates (whey, glycerol, animal fat etc.). These strains also accumulate significant amounts of lipids and lipid-soluble metabolites as sterols and pigments. Using waste substrates could lead to the low-cost biotechnological production of enriched biomass that could be used in pigment production or alternative way in biodiesel production.

Traditional cultivation methods in shaking flasks are time-consuming and with lower reproducibility. Microcultivation system offers reproducible high-throughput way for large screenings of different fermentation conditions in order to develop an efficient bioconversion of different substrates into lipid-rich yeast biomass. Fourier-transformation infrared (FTIR) and Raman spectroscopy has shown a large potential to be used in extensive screenings, especially when screening metabolites are lipids and/or pigments. These complementary techniques allow to perform high-throughput analysis of intact cells obtained from microcultivation system. Combination of these techniques allows fast and efficient way how to obtain complete biochemical profiling of biomass and allow more specifically focus on lipid/pigment profiling.

In the study, twelve red yeast strains were tested on the media with glucose and glycerol as carbon source, yeast extract and ammonium sulphate as nitrogen sources and different C/N ratios. The screening was performed in 24-deep well microtiter plates in Microtiter Plate System. For the evaluation of lipid accumulation FTIR and Raman spectroscopy was used. It was observed that spectral data from both FTIR and Raman have correlation with the reference data from GC and HPLC. The influence of carbon and nitrogen source, as well as C/N ratios on the lipid and carotenoid accumulation was investigated.

Keywords: Red yeast, Carotenoids, Single-cell oils, Microcultivation, Fourier-transformation infrared spectroscopy, Raman spectroscopy,

Development of DGT technique for determination of hazardous metals in food matrixes: Step I – preparation of sorption gel

*Marek Reichstädter
Pavel Divoš, Jaromír Pořízka*

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Food Science and
Biotechnology
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic
marek.reichstadter@vut.cz*

Diffusive gradient in thin films technique (DGT) has become a routine tool for speciation analysis of metals in natural waters, soils and sediments. Since its introduction in 1994, more application possibilities appeared - one of them in food chemistry e.g. lead determination in soy sauces.

Since the concentration of toxic metals in food matrixes is usually very low, the application of DGT technique with appropriate gel discs is very suitable for their determination. Not only that DGT technique extracts metals from the food matrixes, it has also allowed to determinate very low concentrations of metals due to its preconcentration ability. The usage of DGT technique for determination of some metals in food matrixes requires special types of sorption gel discs, because the commercially available gel discs are not able to effectively bind these metals from matrixes with high concentration of natural ligands, such as chlorides or organic acids. A typical example of this occurrence is the determination of mercury by DGT technique.

In the presented work new sorption gel disc with thiol functional group for DGT technique was prepared by immobilization of L-cysteine on amino-modified silica via reaction with glutaraldehyde. The prepared sorbent was characterized by FTIR-DRIFT technique and presence of cysteine was confirmed by many absorption bands in spectre. In synthesis of following sorbents, different concentrations of L-cysteine were used resulting into different load of thiol groups content on sorbents. These sorbents were characterized by CS elemental analysis technique and after optimisation of L-cysteine concentration, the sorbent was incorporated into polyacrylamide hydrogel layer. In the further work the performance of prepared sorption gel for determination of mercury in food matrixes by DGT technique will be tested.

Comparison of metabolic activity, morphology and potential use of carotenogenic yeasts for production of high value products using fluorescence techniques

Martin Szotkowski
Nadzeya Mikheichyk, Ivana Márová

Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Food Science and
Biotechnology and Materials Research Centre
Purkyňova 464/118, Brno 612 00
xcszotkowski@fch.vut.cz

Carotenoids are natural pigments occurring in plants and many microorganisms, such as algae, yeast and bacteria. They represent the most common group of antioxidants with significant biological effect. Lipids represent an essential component of all living organisms. They are the source and the reservoir of energy for organisms, which can also be used in the petrochemical industry for the production of biofuels and in pharmacy as dietary supplements. This thesis deals with the production of carotenoids and lipids by selected strains of yeasts and their morphology, in order to apply the acquired knowledge and find cheap suitable alternatives for biotechnological production of these metabolites using waste substrates.

In this work yeast genera *Sporobolomyces*, *Cystofilobasidium* and *Rhodotorula* were used. Yeasts were cultivated on media with different carbon sources – glucose, glycerol and whey as waste material. Carotenoids, coenzyme Q and ergosterol in cells were determined by HPLC/PDA/MS. The lipid content and fatty acid profiles were analyzed by gas chromatography (GC/FID). Cell morphology and localization of selected metabolites were analyzed by fluorescence lifetime imaging microscopy, fluorescence microscopy and flow cytometry. The highest carotenoid production was found in *S. pararoseus*, *C. capitatum* and *R. mucilaginoso* cells, while the highest lipid yield was observed in strains of *C. infirmominiatum* and *S. metaroseus*.

The results showed that use of whey and glycerol seems to be appropriate carbon sources for growth of carotenogenic yeasts and production of carotenoids and selected lipidic substances as products with higher added value. Further optimization of nutrient medium on the given substrates is needed for higher production of selected metabolites. Techniques of fluorescence microscopy and flow cytometry have proved to be suitable options for localization of the observed metabolites in the cells, their amount and cell viability.

Acknowledgements: This work was supported by the project „Materials Research Centre – Sustainability and Development“ Nr. LO1211 of the MSMT.

Removal of Pharmaceuticals by Combinations with Ozone

Tereza Švestková

Paolína Landová, Tomáš Macsek, Michal Úterský, Milada Vávrová,

Petr Hlavínek

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

The pharmaceuticals are widely used in human and veterinary medicine every day. Due to their stability and possibility of bioaccumulation they are significantly represented in all components of environment especially in wastewater. Conventional purifying methods on WWTPs are insufficient for elimination of certain xenobiotics. Especially for xenobiotics which are difficult, slowly or impossible to eliminate by conventional (mechanical -biological) methods. Due to these facts we dealt with the possibility of removal xenobiotics by advanced oxidation processes (AOP).

We chose three groups of pharmaceuticals. First group is Nonsteroidal anti-inflammatory drugs (ibuprofen, diclofenac, naproxen, ketoprofen) which are most consumed pharmaceuticals in Czech Republic. Second group is macrolide antibiotics (azithromycin, clarithromycin, erythromycin, roxithromycin) and third is sulphonomide antibiotics (sulfamethoxazole, sulfathiazol, sulfamethazin). The experiments were doing on AOP unit which works with ozone, hydrogen peroxide, UV radiation and their combinations. This presentation will be focused on the removal by combinations with ozone.

Solid-phase extraction technique (SPE) was used for extraction, preconcentration and purification of target compounds. High-performance liquid chromatography coupled with DAD and mass spectrometry detection (HPLC-DAD-MS) was used for final analysis, identification and quantification.

This study has been worked out under the project FCH-S-17-4766 from the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic and under the project No. LO1408 "AdMaS UP - Advanced Materials, Structures and Technologies", supported by Ministry of Education, Youth and Sports under the "National Sustainability Programme I".

Artificial sweeteners and their occurrence in the environment

*Libuše Vítková
Josef Čáslavský*

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Chemistry and
Technology
of Environmental Protection
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno
xcvitkova@fch.vut.cz*

This study is focused on artificial sweeteners and their occurrence in the environment, in particular on their presence in waste and surface waters.

Artificial sweeteners are synthetic sugar substitutes. They are much sweeter than beet sugar and have a wide range of applications. Mostly they are used in the food industry, but they also found their use in pharmaceutical industry and in personal care products. They contain almost no energy and thus do not increase blood sugar levels. For this reason they are used by many people with diabetes or dieting.

Due to their persistence and ubiquitous occurrence in the aquatic environment, artificial sweeteners were newly classified as environmental pollutants. Sucralose (SUC) and Acesulfame K (ACS) do not subject to biotransformation, thus they are not removed on a biological purification step of waste water treatment. Artificial sweeteners SUC and ACS are used as potential markers of contamination of surface water and groundwater by domestic waste water. Sweeteners can get into groundwater due to leakage of landfill leachates.

The predominant occurrence of sweeteners in the various countries is due to the extent of their use. E. g. in the US high levels of SUC were found, whereas in the European countries mainly ACS prevails.

Some sweeteners are evaluated as a potential carcinogens or potential toxics and this is another reason why their monitoring is important.

Keywords: artificial sweeteners, environment, waste water

Screening of Yeast Strains for Simultaneous Saccharification and Fermentation of Waste Paper

Miroslava Zichová
Eva Stratilová, Libor Babák, Michal Rosenberg

Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Food Science and
Biotechnology
Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic
xczichova@fch.vut.cz

In this work, five non-*Saccharomyces* yeast strains and commercial strain *Saccharomyces cerevisiae* were examined for the production of bioethanol from the waste paper. Cellulose in the paper has to be hydrolysed to fermentable sugars, which can be then utilized by fermenting yeast. Here, the method of simultaneous saccharification and fermentation (SSF) was applied. A combined process diminishes the inhibition of cellulolytic enzymes by sugars. However, the major limitation of SSF is the different temperature optimum of cellulolytic enzymes (around 50 °C) and the fermenting yeasts (30 °C). Therefore, it would be very useful to identify thermotolerant microorganism with good ethanol production efficiency. Experiments were conducted both at 30 °C and 40 °C. Among the strains tested, *Pichia kudriavzevii* and *Saccharomyces cerevisiae* produced the highest concentrations of ethanol. *P. kudriavzevii* was the only strain with resistance to higher temperature of 40 °C. On the other hand, *Kluyveromyces marxianus*, often used for its thermal tolerance, did not show to be suitable for the production of ethanol at 40 °C in our work. This work would also like to highlight the ethanol production ability of *Wickerhamomyces anomalus*. Even though this yeast strain is not very examined, the ethanol production is comparable with other strains that are considered to be good ethanol producers.

Keywords: yeast, simultaneous saccharification and fermentation, bioethanol

*Sekce studentů doktorských
studijních programů*

*Tématický okruh anorganická chemie,
materiálové vědy a inženýrství*

Morphology study of 2-ethylhexyl acrylate/cellulose acetate propionate microcapsules prepared via solvent evaporation technique

*Tomáš Arvai
Ivana Chamradová
Josef Jančář*

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Materials Chemistry
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic
tomas.arvai@vut.cz*

Novel 2-ethylhexyl acrylate (2-EHA)/cellulose acetate propionate (CAP) microcapsules with mononuclear core-shell morphology are potentially an interesting model system for polymerization inside microcapsules. Microencapsulation was performed by solvent evaporation technique from dichloromethane solution dispersed in poly(vinyl alcohol) solution. Microcapsule morphology, which evolved from partially raspberry-like to a bowl-like due to premature shell formation and subsequent solvent evaporation, was captured by microscopy imaging techniques. Thus it has been concluded that kinetics of CAP shell formation play a crucial role in preparation of 2-EHA/CAP microcapsules. Moreover, microcapsules were ruptured in compression under microscope in order to evaluate fracture type. Ductile fracture of microcapsule shell was observed. Shell thickness of 0.3 μm was estimated by scanning electron microscopy. Even though bowl-like morphology of microcapsules was not favorable for polymerization inside microcapsules, some microcapsules gained irregular crumpled shape which facilitated formation of microporous hollow particles after drying the microcapsule suspension. These microporous particles may promise further research potential for development of particles with controlled release profile.

Keywords: bowl-like morphology, microporous particles, polymerization inside microcapsule

Mechanochemical treatment of talc

Jan Bednárek
prof. Ing. Jaromír Havlica, DrSc.

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická

With the development of blended cements and alkali activated materials, the importance of an use of pozzolanic materials constantly grows. One of the most frequently used pozzolanic materials is metakaolin, a product of thermal dehydroxylation of kaolinite. It is not possible to prepare a meta stable phase of talc, the most common magnesium silicate clay mineral, this way, due to its quick recrystallization to enstatite over 800 °C. On the other hand it was found out that a preparation of this phase, called meta talc, is possible via mechanochemical activation, a process where a raw material (talc in our case) is exposed to high level of mechanical energy. This process is typically carried out in high energy mills (vibrating mill, planetary mill, attritor). This contribution is focused at an investigation of an effect of milling time in a vibrating mill on structure and properties of talc Luzenac H70. A progress of loss of crystallinity during mechanochemical activation was studied by X-Ray diffractometry. Simultaneous TG-DTA was used for studying of dehydroxylation progress and thermal behaviour of mechanochemically activated talc. It was found out that an amorphisation of both main phases of talc sample used in this work, talc and clinocllore, makes its biggest progress in first 10 minutes and with increasing time the amorphisation rate decreases. TG curves showed that a mass loss during heating increases with prolonged milling. DTA curves indicate that prolonged high energy milling leads to structure changes like dehydroxylation of phyllosilicate sheets and creation of water coordinated and adsorbed on talc surface.

Thin Films of Tetravinylsilane Characterized by Spectroscopic Ellispometry

*Martin Bránecký,
Vladimír Čech*

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Materials Chemistry
Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic
E-mail: xcbranecky@fch.vut.cz*

We prepared thin films from vapor of tetravinylsilane (TVS) monomer using plasma-enhanced chemical vapor deposition (PECVD) with a process gas pressure of 2.7 Pa at a monomer flow rate of 3.8 sccm. Thin films were deposited at different powers using continuous wave (10-70 W) and pulsed (2-150 W) plasmas (13.56 MHz). In situ phase-modulated spectroscopic ellipsometer (UVISEL, Jobin-Yvon) operated in range 250-830 nm was used to determine the film thickness and optical properties like refractive index and extinction coefficient in a form of dispersion curves. For a selected wavelength of 633 nm, the refractive index increased from 1.7 to 2.3 and the extinction coefficient was ranging from 0 to 0.15 with enhanced power. The dielectric function of films evaluated by spectroscopic ellipsometry was fitted by Tauc-Lorentz formula to determine the band gap, which decreased from 2.7 eV (2 W) to 0.7 eV (150 W) with enhanced power. The optical properties of films dependent on the power were similar for continuous wave and pulsed plasmas. The deposition rate for continuous wave and pulsed plasmas varied from 82 to 262 nm/min as a function of power.

Keywords: PECVD, Spectroscopic Ellispometry, Refractive Index, Extinction Coefficient, Band gap

Possibilities of elimination of ammonia slip from technological water in power plants

*Hajzler Jan, Ing.
Opravil Tomáš, Ing., Ph.D.*

*Brno University of Technology,
Faculty of chemistry,
Institute of Materials Chemistry
xchajzlerj@fch.vutbr.cz*

This paper deals the possibilities of eliminating or separation of ammonium shares from technological water from plants; where a secondary method of flue gas denitrification (SCR, SNCR) is introduced. The necessity of ammonium shares elimination arose after introduction of emission cap, which have been tightened since January 2015. The denitrification technologies were installed on devices that did not comply with the new limits. The description of combustion processes, as a fluid, and high temperature combustion of solid fuels, mechanisms of emissions and their reduction options is here introduced. The contents of the ammoniacal nitrogen in technological waters used in electricity and heating facilities to transport, or from which are separated by solid products of some processes such as desulfurization is discussed. Some options of the ammonium salts removal from technological waters are also discussed. The obtained experimental results showed an appropriate method of determination of ammoniacal nitrogen, and the possibilities of its elimination by conversion to insoluble compound. Last but not least, the work deals with the real possibilities of their application in practice.

Keywords: Ammonia slip, SCR, SNCR, Nitrogen determination

Synthesis of Metallic Nanoparticles by Electrical Discharge in the Liquid

Jakub Horák

Anton Nikiforov, Christophe Leys, Ke Vin Chan, František Krčma

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry,
Institute of Physical and Applied Chemistry
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic
xchorakj@fch.vut.cz*

Nanoparticles synthesis and their application for many different purposes belong to hottest topics of the current research. Commercially offered nanoparticles suffer from agglomeration in time and therefore they are unsuitable for long-term storage. This work deals with development of a new method of preparation silver and copper nanoparticles in-situ. Nanoparticles are prepared by bottom-up process from their inorganic salts solutions by electrical discharge at normal conditions (room temperature and atmospheric pressure). It is observed that particles with size below 100 nm are produced in the cathode zone of the discharge apparatus. Remarkably, the nanoparticles are prepared without use of any stabilization agent and free of agglomeration during the storage. Nanoparticles prepared under various operational conditions were characterized by ultraviolet-visible spectroscopy (UV-Vis) and scanning electron microscopy (SEM). Following research will be focused on nanoparticle properties and quantity improvement. Prepared particles will be consequently used for further research of their antibacterial activity on various substrates.

Keywords: nanoparticles, electrical discharge

Screen Printing and Characterization of Thick Layer Electroluminescence Panels

*Michal Hrabal
Lukáš Omasta, Martin Vala, Martin Weiter*

*Brno University of Technology,
Faculty of Chemistry,
Institute of Physical and Applied Chemistry
Purkyňova 464/118
612 00 Brno
xchrabalm@fch.vut.cz*

Electroluminescence (EL) is an opto-electrical phenomenon where a material emits light when a strong electric field is applied. The printing of thick layer alternating current electroluminescent (AC-EL) panels is currently the most suitable technology for fabrication of large area, highly patterned light emitting sources. The whole structure can be printed on both glass or polymer substrate so it is possible to prepare flexible devices in various shapes and sizes. Screen printing is ideal technique for preparation of AC-EL panels due to its ability to deposit thick layers with limitless possibility of patterns.

Our device is fully printed via screen printing machine RokuPrint SD 05 where the first layer is a transparent indium-tin oxide (ITO) as a front electrode. Next layer is an active phosphor material (ZnS) with thickness around 30 μm which is covered by double layer of dielectric (BaTiO_3) ~ 17 μm thick. The last layer is silver rear electrode with conductive busbar around 10 μm thick. Thickness of the layers was taken by mechanical profilometer Dektak XT. The working panel is then encapsulated to minimize risk when operating the device. Optimal printing parameters such as velocity of printing, off contact distance, stress, etc. were found when printing on either glass or plastic substrates.

AC-EL panel was connected to an alternating current high frequency power source and irradiance and wavelength of emitted light was taken by fibre optic spectrophotometer. It can be seen from profilometry and optical measurement that critical step is to print the active layer to improve performance of our light emitting panels. More work will be done to achieve smooth and above all homogeneous active layer.

Keywords: Screen printing, Electroluminescence, ZnS, Dielectric, Phosphor

This work was supported by Ministry of Industry and Trade via project No. FV 10278-1, research infrastructure was supported by projects MŠMT No. LO1211 and FCH-S-16-3393.

Hydrogels based on cationic polyelectrolytes

*Sabína Jarábková
Filip Mravec, Jiří Smilek, Miloslav Pekař*

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry,
Institute of Physical and Applied Chemistry
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic
xcjarabkova@fch.vut.cz*

The main aim of this work is laboratory preparation and characterization of hydrogels based on cationic polyelectrolytes. Cationic polyelectrolytes can interact with oppositely charged surfactants via electrostatic forces. Interactions between cationic polyelectrolytes and anionic surfactants can generate physical gels (under proper conditions such as temperature, pH, ionic strength) and surfactants are able to form micellar structures suitable for solubilizing hydrophobic compounds in aqueous environment of the gel. Resulting materials are hydrogels which contain hydrophobic nanodomains so it is possible to use like porters in drug delivery in medicine, e.g. hydrophobic drugs for topical applications (wound healing and so on). The presence of hydrophobic nanodomains was tested by solubilization tests with the help of hydrophobic dyes (e.g. Oil red O, prodan). Mechanical properties of prepared materials were tested rheologically (in dependence of their composition). This work is focused on the preparation of gels from positively charged polysaccharides dextran hydrochloride and negatively charged surfactant sodium dodecyl sulphate.

Keywords: hydrogel, polyelectrolyte, surfactant, nanodomain, micelles, rheology, solubilization test

Characterization of colloid particles by excited-state proton transfer with advanced fluorescence techniques

*Jan Kotouček
Miloslav Pekař, Jakub Mondek*

*University of Technology, Faculty of Chemistry,
Institute of Physical and Applied Chemistry
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic
xkotoucek@fch.vut.cz*

The deprotonation characteristics of fluorescent probes α -naphthol and 8-hydroxypyrene-1,3,6-trisulphonic acid (HPTS) were studied in this thesis, using steady-state and time resolved fluorescence spectroscopy. Two cationic surfactants, Septonex and cetyltrimethylammonium bromide (CTAB), were studied. These surfactants were measured in the complex with hyaluronan ((1500 – 1750 kDa). Steady-state fluorescence was used for determination of critical aggregation concentration of each surfactant and pKa*.

Time-resolved fluorescence decays were used to calculate the average lifetimes and the deprotonation constants of naphthol and HPTS. The measurement with hyaluronan were compared with the polystyrenesulfonate (PSS 1 MDa) – surfactant system. The effect of hydration shell of hyaluronan on hyaluronan – surfactant complex formation results from the comparison of above mentioned systems. Large differences were found in the deprotonation characteristic between surfactants and even between individual molecular weights of hyaluronan.

The measurement shows that the hydration shell is located near to the dissociated carboxyl groups of hyaluronan chain, where the interaction with the positively charged surfactants occurs.

Keywords: ESIPT, ESPT, α -naphthol, HPTS, CTAB, Septonex, hyaluronan, polystyrene sulfonate, deprotonation rate constants, hydration shell.

Effect of Solvent in the Deformation Behavior of Hydrogels

*Eva Kulovaná
Jan Žídek*

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Materials Science
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic
xkulovana@fch.vut.cz*

Solvents have a crucial influence of the properties of materials. This work deals with the effect of water to the deformation of hydrogels. The hydrogels are three-dimensional networks consisted of chemically and/or physically-crosslinked hydrophilic polymers that are solvated with water. It was found that the water forms hydrogen bonds (that are shorter than 2 Å) with macromolecular chain of polyethylene glycol. Water can form bridges (WCL) that can act as temporary ionic crosslinks. These bridges change the structure and behavior of network during the deformation. The water molecules work on the similar principle as covalent chemical crosslinks, which were investigated recently. Both types of crosslinks have similar influence to the modification of structure but different influence to the deformation behavior. With increased degree of chemical crosslinking, the network was structurally more similar to the covalent network (elastic response). The presence of 'water bridges' appears up charge $\delta_o = -0.6$ and causes the more viscoelastic response of network. Next investigated property is a structural recovery, which is ability of material to return spontaneously to the structure before deformation. The physical gel is recovered until the deformation 75 %. At 100 % deformation, structure recovery is not observed and permanent fibrillar structure is observed. Analogously, when the charge of macromolecular chains equaled to -1.0 (high content of WCL, 100% deformation), no recovery was observed. When the charge of macromolecular chains equaled to zero (no WCL), recovery was observed. However, it seems that presence of WCL has not the essential role in the recovery.

Keywords: Bjerrum length, deformation behavior, hybrid model, structural recovery, water bridge

Involvement of photovoltaic panels and heat pumps for family houses and their subsequent regulations to obtain maximum energy self-sufficiency

*Petr Levek
Josef Kotlik*

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry,
Institute of Environmental Chemistry
Purkyňova 118, 612 00 Brno
petr.levек@vut.cz*

For more than 15 years of photovoltaic panels and their use for house owners in a conventional manner using renewable resources. The number of households using photovoltaic panels are growing every year despite a reduction in government subsidy programs in photovoltaics. Thanks to the reduction in purchase prices, particularly of photovoltaic panels, it is not today that this kind of solar energy is unavailable for homeowners who want to gain many benefits from renewable sources. This does not mean however, that the customer is already interested in a return, on the contrary, it is still one of the major factors in the selection system. Another major factor in the selection is the possibility of achieving energy self-sufficiency in the shortest possible time.

The best systems with optimum involvement for houses with a yield of 12 to 15 years, use solar panels, battery repository, and heat pumps at the same time. The combination of these systems seems to be according to the results of measurements optimal and could during its lifetime achieve with proper regulation values up to 70% of energy self-sufficiency. It is therefore obvious that to achieve similar energy self-sufficiency and acceptable return leads in addition to the optimal implementation of appropriate elements, reduce consumption, use modern energy-saving appliances, efficient use of energy needed, in particular the possibility of regulation, thanks to the data and predictions. For larger investments, but automatically lengthening the payback period of up to unprofitable levels can according to long-term monitoring and results achieve complete energy independence much earlier. Our aim during the project with the participation of companies such as Ekoenergie.org, is to not increase investments in similar systems or achieve better values, but rather reduce investments for faster returns and increase energy self-sufficiency with the assistance of maximum optimization and proper regulation on the basis of long-term results of our measurements and tests. With the use of our results and regulation, we plan to achieve energy self-sufficiency level of around 80%, in the first year from the date of commissioning of the system.

Keywords: Photovoltaics, solar panels, regulation, energy self-sufficiency

Comparison of peroxides for radical induced grafting of maleic anhydride onto polypropylene via reactive extrusion

Jana Matláková
František Kučera, Josef Jančář

Jana Matláková
Brno University of Technology, Faculty of chemistry, Department of Materials Chemistry
Purkyňova 464/118, 61200 Brno
xcmatlakova@fch.vutbr.cz

Efficiencies of two peroxides were tested in the course of the free radical-induced modification of polypropylene (PP) using maleic anhydride (MAH) as monomer. The influence of the initiator structure, decomposition mechanism and concentration on the grafting yield was observed and it was found that the grafting yields is influenced by the structure of the generated primary radicals and their reactivity. The experimental results compared grafting yields of MAH onto PP initiated using trifunctional 3,6,9-triethyl-3,6,9-trimethyl-1,4,7-triperoxonan (Trigonox 301) and bifunctional 2,5-dimethyl-2,5-bis(*tert*-butylperoxy)hexan (Luperox L101). The decomposition mechanism of Trigonox 301 was suggested based on the similarity to another trifunctional peroxide. The area of the theoretical values of the initial grafting rate R_g has been determined and subsequently compared with the experimental values of R_g . The influence of the structure and concentration of the peroxide was evaluated using the melting flow rate (MFR) and the rheological curves of PP-*g*-MAH.

Keywords: grafting, polypropylene, reactive extrusion, maleic anhydride

Screen Printing of Organic Electrochemical Transistor for real-time cell culture monitoring

*Lukáš Omasta
Ota Salyk, Stanislav Stříteský, Michal Hrabal,
Martin Vala, Martin Weiter*

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

Organic electronic devices offer a convenient solution for bioelectronic sensor applications due to the biocompatibility of organic semiconductors and biologic tissues. So-called biosensors can convert electrochemical processes connected to cell membranes into electronic signals. A matrix of such biosensors can simultaneously scan a number of biological samples as well as living tissue in the body. Device with great potential which arise from this field is the organic electrochemical transistor (OECT), which can be easily patterned by printing, individually functionalized, and directly interfaced with biomolecules and living cells. In our research we focused on preparation and characterization of OECTs based on conductive polymer (poly(3,4-ethylenedioxythiophene) doped with poly(styrene sulfonic acid) (PEDOT:PSS) as the active layer. The microplate with multielectrode array of 96 OECTs was developed and fabricated by screen printing method. It consists of a 12x8 chimney – well array with transistors on the bottom. The OECT is circular with a channel of 1.5 mm² in the centre surrounded by the circular gate electrode. The device is designed for electrogenic cells monitoring. For this purpose we designed multi-layered OECT with lateral architecture. All layers were screen printed on flexible substrate polyethylene naphthalate (PEN) using semiautomatic screen printing device RokuPrint SD 05. Electrical properties of screen printed OECTs were investigated by testing output, transfer and transient characteristics in phosphate buffered saline (PBS). The device was also tested on 3T3 fibroblasts cell culture and the sudden environmental changes were recorded.

Keywords: organic electrochemical transistor, PEDOT:PSS, screen printing, organic electronic

This work was supported by Czech Science Foundation via project No. 17-24707S, research infrastructure was supported by projects MŠMT No. LO1211 and FCH-S-16-3393.

Development of Novel Chiral Biphenyl-Based Bis(thiourea) Organocatalysts for Asymmetric Henry Reaction

Jan Otevřel
Pavel Bobál

UVPS Brno, Faculty of Pharmacy, Department of Chemical Drugs.
Palackého 1946/1, 612 42 Brno, Czech Republic.
otevrel@vfu.cz.

The stereoselective Henry reaction is a powerful C–C bond forming process providing a source of enantioenriched nitroaldols, which are ubiquitously used as building blocks for pharmaceuticals and agrochemicals.

In the organocatalyzed asymmetric Henry reaction, the homogeneous chiral thiourea catalysts proved their excellent effectiveness and selectivity. However, the currently known chiral thiourea organocatalysts for the enantioselective nitroaldol reaction of aromatic aldehydes are associated with limited possibilities of further functionalization of their structure, expensive resolution agents, difficult low-yield syntheses involving precious transition-metal complexes and chromatographic purification, cumbersome isolation of the final nitroaldol products from the reaction mixture and none or low (predominantly *anti*) diastereoselectivities.

In our current work, we focused on a simplification of the chiral backbone of the catalysts to the “bare minimum” and present the four novel C₂-symmetric bis(thiourea) organocatalysts based on axially chiral biphenyls. Catalysts were prepared via high-yield and scalable syntheses avoiding transition-metal complexes, protecting groups and chromatography using inexpensive resolution agents. Modification of a chiral biphenyl backbone allowed us to incorporate tertiary amine functionalities to the structure of the catalysts that eliminates the need of auxiliary base during the reaction. All synthesized catalysts were fully structurally elucidated and prepared in both enantiopure forms. The above organocatalysts were tested in the asymmetric Henry reaction of mainly aromatic and heteroaromatic aldehydes with linear nitroalkanes. Under the optimized reaction conditions, the excellent chemical yields (up to 99%), very good to excellent enantioselectivities (up to 97% ee) and remarkable *syn*-diastereoselectivities (up to 10:1) were observed, especially for the electron-deficient substrates.

The viability of the newly developed catalytic process, offering operationally simple isolation of the respective β -nitroalcohols, was proved in syntheses of enantiopure (*S*)-econazole and (*R*)-mirabegron a late-stage intermediate.

The preliminary kinetic and spectroscopic experiments were conducted in order to gain better insight into the reaction mechanism of the above transformation. Accordingly, quite interesting temperature and solvent effects were observed.

Keywords: bis(thiourea) organocatalysts, asymmetric synthesis, enantioselective Henry reaction, *syn*-diastereoselectivity, mirabegron, econazole.

The study of aging of writing inks in blue ballpoint pens by GC-MS

Silvia Parciová
Aleš Ház, Milena Reháková

*Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology,
Institute of Natural and Synthetic Polymers, Radlinského 9, 812 37, Bratislava, Slovakia
silviaparciova@gmail.com*

Documents have been used for many centuries. A breakthrough period of their use is a period of the Industrial revolution. In forensic examination of documents, very frequently questions are concerning authenticity of documents and period of their creation. Chemical analysis of writing inks is one of the ways how to answer these questions.

The aim of this work was to study the aging process of ballpoint pen inks, characterized by the evaporation of volatile solvents. The most common solvent in blue ballpoint pens is 2-phenoxyethanol (PHE). It was found in more than 80 % of the blue ballpoint pens in different concentrations. To analyze a quantity of volatile solvent was used method of gas chromatography with mass spectroscopy (GC/MS), which combines high separation effectiveness gas chromatography with specific detection of the mass-spectrometer. We can also obtain information on the structure of unknown participating substances. We were used two different methods in this experiment. The first one compared the content of 2-phenoxyethanol in fresh samples of extracted inks with the samples which were subjected to the thermal aging. The second one used a derivatization of inks samples before analyzing. The samples in the first method were prepared in two series. One part of inks spread on office paper was fresh and the second part was subjected to the thermal aging at $70^{\circ}\text{C} \pm 5^{\circ}\text{C}$, 70 minutes. The samples of both series were cut on small pieces, put into micro vials and poured extracting agent – acetonitrile with internal standard – diphenylamine. The samples in the derivatization method were cut on small pieces, too, put into micro vials and sealed by derivatization mixture containing tetrahydrofuran, pyridine and MSTFA in a ratio 5:1:1. The measurements were realized on the device GC 7890A Agilent Technologies; capillary GC column HP5-MS (Agilent; 30 m, 250 μm internal diameter, 0,25 μm film thickness of stationary phase).

Trying both mentioned methods we decided to use the first one. Based on the results of the method comparing the content of 2-phenoxyethanol in samples subjected to the thermal aging with non-aged samples we can say if the analyzed document is older or younger than 2 years. The disadvantage of using the method in practice is the destructivity. In further experiments, it is necessary to determine the smallest analyzable amount of sample.

Nanoscratch Testing of Thin Films Prepared by Plasma Polymerization from the Vapour Phase of Tetravinylsilane Monomer

*Tomáš Plichta
Vladimír Čech*

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Materials Chemistry
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic
tomas.plichta@vut.cz*

One of the most important properties that determined application possibilities of thin films is their adhesion to the substrate. Value of the critical load obtained by nanoscratch test is the normal force which is evaluated from the measured load curves and corresponding to the first significant lateral force component fluctuation which correlates with the adhesion failure of the film. In addition, this critical load is load at which the adhesive failure occurs in the scratch track observed by atomic force microscopy.

Thin films of hydrogenated amorphous carbon-silicon (a-SiC:H) alloy were deposited on silicon wafers from tetravinylsilane (TVS) monomer by plasma-enhanced chemical vapor deposition (PECVD). The pretreatment of silicon wafers was carried out with argon or oxygen plasmas (10 sccm, 5.7 Pa, 5-200 W) using continuous wave for 10 min to clean the surface from adsorbed gases and reach reproducible adhesion of films. A mass flow rate of TVS used for film deposition was 3.8 sccm at a pressure of 2.7 Pa. Pulsed plasma was employed to deposit thin films at an effective power ranging from 2 to 150 W. Thin films of 0.1 μm thickness were tested by scratch test using a conical (90°) diamond tip (radius of 1 μm) with the peak load of 6 mN at a loading rate of 12 mN/min and using a scratch length of 10 μm .

Measurements demonstrated that the scratch test resulted in the same values of the critical load over the entire surface of the samples regardless of the exact position on the sample. Good reproducibility of the film adhesion was found for the individual depositions. It was discovered that the critical load also does not depend on the loading rate. Different powers (5-200 W) applied for wafer pretreatment with argon or oxygen plasmas did not affect the film adhesion. We revealed that the critical load for a-SiC:H films increased with enhanced power from 1.6 mN (2 W) up to 4.6 mN (75 W) and was invariable for higher power 4.4 mN (150 W). No aging effects were observed in the first 850 days after film deposition.

Keywords: PECVD, thin films, adhesion, nanoscratch test.

Full printed organic electrochemical transistors

*Stanislav Stržiteský, Lukáš Omasta,
Martin Weiter*

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Material Research Centre
Purkyňova 464/118, 612 00, Brno, Czech Republic
xcstritesky@fch.vutbr.cz*

The organic electrochemical transistor (OECT) has a potential for development of innovative biomedical devices. The straightforward fabrication, low-cost printing techniques, individually functionalized and directly interfaced is an advantage of printed OECT. Our research is focused on preparation and characterization of fully printed OECT based on (poly(3,4 ethylenedioxythiophene) doped with poly(styrene sulfonic acid) (PEDOT:PSS) as the active layer and printed gold resin as biocompatible electrodes. Here, we printed electrochemical transistor with planar architecture consisting of gold resin to form circuit matrix, PEDOT:PSS as an active layer and silicone rubber to mask and insulate underlying structures. Gold resin was printed by Fujifilm Dimatix Material Printer (DMP) 2800 on glass slide. All other layers were screen printed on annealed (450°C) glass slide using semi-automatic screen printing device RokuPrint SD 05. Devices were prepared using commercially available PEDOT:PSS Clevios S V3. Electrical properties of printed OECTs were investigated by testing output and transfer characteristics in phosphate buffered saline (PBS). The maximum transconductance 4 mS was achieved. The OECTs were used for cultivation of cardiomyocytes. This work was supported by the Grant Agency of the Czech Republic (project 17-24707S) and by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (project LO1211).

Keywords: OECT, PEDOT:PSS

Effect of counterion on rheological properties of hydrogels prepared from hyaluronan and oppositely charged surfactant

*Tomáš Velcer
Miloslav Pekař*

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Physical and Applied
Chemistry
Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic
xcvelcer@fch.vut.cz*

This study deals with the properties and behaviour of phase-separated hydrogels prepared by interaction of hyaluronan (Hya) with oppositely charged surfactants. Three representatives of surfactants, namely cetyltrimethylammonium bromide, chloride and p-toluensulfonate (CTAB, CTAC, CTAT), were selected for comparison. Using the method of rheology, the fact that the system of Hya-CTAT forms the most rigid hydrogels has been proved. Higher molecular weight of hyaluronan has also direct influence on the volume and stiffness of the newly formed hydrogels. Preparation methods were compared as well. Mixing the stock solutions of entry components appeared to be the most suitable. The results of this study indicate that given gels are to a certain extent competitive and incorporation of hyaluronan into their structure is desirable with respect to its biological activity. This offers a potential usage of these substances in the field of medical applications.

Keywords: hyaluronan, surfactants, hydrogels, rheology

Hledáte práci ve stabilní firmě? Chcete být součástí týmu, který se podílí na výzkumu a výrobě, které mají skutečně smysl? Láká Vás možnost práce v moderním prostředí s nejlepším vybavením? Pokud si navíc přejete pracovat v kolektivu motivovaných lidí, jste na správné adrese. Synthon je rostoucí špičková mezinárodní farmaceutická společnost a leader v oblasti humánních generických léčiv. Naším posláním je zajištění finančně lépe dostupné zdravotní péče prostřednictvím vysoce kvalitních generických přípravků. Sídlo společnosti se nachází v Nizozemsku a pobočky má v dalších sedmi zemích. Pobočka v Blansku se zaměřuje na vývoj a výrobu aktivních léčivých substancí (API), disponuje dvěma výrobními halami, moderním centrem výzkumu a vývoje a pracuje zde přes 220 zaměstnanců.



NABÍZÍME VÁM

- moderní pracovní prostředí a špičkové vybavení
- zázemí mezinárodní firmy
- přátelská a podporující atmosféra
- práce, která má skutečný smysl
- nadstandardní péče o zaměstnance a firemní benefity (týden volna navíc, příspěvky na životní a důchodové připojištění, příspěvek na stravování ad.)
- podpora při dojíždění a přestěhování
- společenské a sportovní aktivity

POŽADUJEME

- talentované absolventy chemických oborů, kteří chtějí dělat smysluplnou práci
- kolegy, kteří přemýšlí v souvislostech a uvažují o svojí práci v širokém kontextu
- týmové hráče, kteří se rádi dělí o své znalosti a zkušenosti

KONTAKT

Renata Šebelová

Recruiter

T: +420 516 427 569 | M: +420 727 971 593 | www.synthon.com