

73. ZJAZD CHEMIKOV

6. – 10. september 2021
Vysoké Tatry, Horný Smokovec

HLAVNÍ ORGANIZÁTORI

Slovenská chemická spoločnosť a Česká společnost chemická



v spolupráci s



ORGANIZAČNÝ VÝBOR

Monika Jerigová – predsedníčka
Ľubomír Švorc - vedecký tajomník
Michaela Halinkovičová - hospodárka
Miroslav Michalka – výkonný tajomník
Michal Procházka - technický tajomník
Jan John - organizátor za ČSCH

2Po09**POST-IONIZÁCIA METEORITOV V TOF SIMS HMOTNOSTNOM SPEKTROMETRI**

Eva Noskovičová^{1,2}, Justína Nováková¹, Vojto Szöcs², Eduard Jáné³, Dušan Lorenc^{1,2}, Monika Jerigová^{1,2}, Dušan Velič^{1,2}

¹*Prírodovedecká fakulta University Komenského, Ilkovičova 6, Bratislava, noskovic.eva@gmail.com*

²*Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, Bratislava*

³*Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta, Bratislava*

Post-ionizačný signál sekundárnych iónov pre železný meteorit Nantan, kamenný meteorit Košice, kamenno-železný meteorit NWA1245 a NWA869 a železný meteorit Sichte Alin bol nameraný v ToF SIMS hmotnostnom spektrometri. Ako zdroj post-ionizačného žiarenia bol použitý femtosekundový laserový systém Cr:Fosterite. Závislosti post-ionizačného SIMS signálu od času (doby letu sekundárnych iónov v detekčnej kolóne) boli kalibrované pomocou troch vybraných píkov na hmotnostné spektrá. Hlavnou zložkou meteoritu Košice sú kremičitany a rovnako je tomu v prípade meteoritu NWA1242, ktorý vo väčšom množstve obsahuje aj Cu a K. Meteorit NWA869 obsahuje hlavne Na, Mg, Si a K. Železné meteority Nantan a Sichte Alin sú z podstatnej časti tvorené kovovými prvkami ako je Fe a Ni.

Post-ionizačný SIMS signál bol optimalizovaný zmenou rôznych parametrov, ako napríklad vzájomnou pozíciou vzorky s laserovým zväzkom a ohniskovou vzdialenosťou optickej šošovky umiestnenej v dráhe laserového zväzku pred post-ionizovanou vzorkou.

Pre post-ionizačné SIMS závislosti vybraných meteoritov bola vykonaná PCA (analýza hlavných komponentov) a metóda CNN (konvolučnej neurálnej siete). PCA metódou boli namerané závislosti rozdelené na viacero komponentov a rôzne triedy meteoritov sú tak vzájomne porovnávané na základe amplitúd signálu jednotlivých píkov. Pomocou CNN vieme odhadnúť, do ktorej triedy môže patriť meteorit s neznámym zložením na základe nami vytvorenej databázy.

Táto práca vznikla za podpory grantovej agentúry ESA, Contract No. 4000126501/19/NL/SC

[1] Lorenc D., Jane E., Stupavska M., Jerigova M., Velic, D.: *J. Am. Soc. Mass. Spectrom.* 23, 1266 (2012).

2Po10**STUDIUM KATALYTICKÉ AKTIVITY NANOČÁSTIC PLATINY**

Miroslav Orság¹, Libor Kvítek¹, Robert Pucek¹, Aleš Panáček¹

¹*RCPTM a Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, 17. listopadu 12, 77146 Olomouc*

Platinové kovy jsou známy jako excelentní katalyzátory pro řadu chemických reakcí důležitých pro průmyslové aplikace. V nanoměřítku je ovšem jejich katalytická aktivita několikanásobně vyšší a představuje pro nás možnost jak zvýšit využitelnost katalyzátorů v praxi, a to zvýšením katalytické aktivity v souvislosti se zvýšením specifického povrchu a současně se snížením množství drahých kovů pro efektivní katalýzu.

Prezentovaná studie je zaměřena na porovnání katalytické aktivity nanočástic platiny o různých velikostech. Použita byla jedna z nejpoužívanějších modelových reakcí – redukce 4-nitrofenolu tetrahydridoboritanem sodným. Jako základní metoda přípravy nanočástic byla zvolena polyolová metoda (redukce v ethylenglykolu za přítomnosti hydroxidu sodného)¹. Poté bylo metodou postupného přidávání roztoku platičité soli o různých koncentracích dosaženo 4 velikostí částic v rozsahu velikostí 2-4 nm, které byly dále testovány na katalytickou aktivitu. Maximum katalytické aktivity bylo nalezeno pro částice o velikosti cca 3 nm.

Autoři děkují za finanční podporu vnitřního grantu UP Olomouc, projekt IGA_PrF_2021_032.

[1] Quinson, J. *et al.* Investigating Particle Size Effects in Catalysis by Applying a Size-Controlled and Surfactant-Free Synthesis of Colloidal Nanoparticles in Alkaline Ethylene Glycol: Case Study of the Oxygen Reduction Reaction on Pt. *ACS Catal.* 8, 6627–6635 (2018).

2Po11**MALDI-TOF/TOF ANALÝZA SACHARIDOVÝCH ZLOŽIEK LIPOPOLYSACHARIDU Z BAKTÉRIE VIBRIO CHOLERAE O139**

Filip Pančík¹, Zuzana Pakanová¹, Jana Mečárová¹, Alžbeta Čížová¹, Slavomír Bystrický¹, Stanislav Kozmon¹, Peter Baráth¹

¹*Chemický ústav SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, chemfilp@savba.sk*

Aj napriek vedeckému pokroku je cholera pretrvávajúcím problémom predovšetkým

v chudobných krajinách s nedostatkom pitnej vody. Každoročne pribudne 3 až 5 miliónov prípadov tohto ochorenia, pričom 100 000 až 120 000 z nich končí fatálne [1].

Cholera je spôsobená baktériou *Vibrio cholerae*, pričom pandemickú cholera spôsobujú séroskupiny O1 a O139. Snaha o vytvorenie nových vakcín proti *V. cholerae* O139 z bakteriálnych zdrojov, ako sú lipopolysacharidy, je stále mimoriadne dôležitá. Lipopolysacharidy pozostávajú z lipidovej časti, O-špecificky viazaného polysacharidu (OSP) a tzv. jadra (z ang. *core - c*) [2].

V tejto práci sme sa zamerali na analýzu vzoriek jadra a OSP (OSPc) z *V. cholerae* O139 s využitím metód MALDI-TOF a MALDI-TOF/TOF. Metódou MALDI-TOF boli identifikované signály OSPc štruktúrnych foriem s jednou alebo dvoma kolitózovými jednotkami, ktoré sú popísané aj v literatúre [3]. Pre získanie viacerých informácií o týchto štruktúrach sme vykonali aj MALDI-TOF/TOF analýzu im prislúchajúcich signálov. Výsledky týchto analýz nám umožnili lepšie pochopiť proces fragmentácie jednotlivých štruktúrnych foriem OSPc.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja – projekt č. APVV-18-0336. Táto práca bola podporovaná Ministerstvom zdravotníctva Slovenskej republiky v rámci projektu s registračným číslom 2019/7-CHÚSAV-4. Táto publikácia vznikla s podporou Operačného programu Integrovaná infraštruktúra pre projekt Štúdia štruktúrnych zmien komplexných glykokonjugátov v procese dedičných metabolických a civilizačných chorôb, ITMS: 313021Y920, spolufinancovaný z Európskeho fondu regionálneho rozvoja. Práca bola podporená projektom VEGA 2/0137/20.

- [1] ALI, M., NELSON, A.R., LOPEZ, A.L., SACK, D.A., *PLoS Negl Trop Dis*, 9 (6), (2015)
- [2] LU, X., PFISTER, H.B., SOLIMAN, S.E., KOVÁČ, P., *Eur J Org Chem*, 2018 (23), (2018)
- [3] COX, A. D., PERRY, M. D., *Carbohydr Res*, 290 (1), (1996)

2Po12

REDOX BEHAVIOR OF COPPER(II) COMPLEXES WITH THIOSEMICARBAZONES AS POTENTIAL ANTICANCER DRUGS STUDIED BY CYCLIC VOLTAMMETRY AND IN SITU SPECTROELECTROCHEMISTRY

Peter Rapta¹

¹*Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Slovak Technical University of Technology, Radlinského 9, 81237 Bratislava, Slovak Republic, peter.rapta@stuba.sk*

It is well accepted that the mode of action of Cu(II) anticancer complexes is related to their ROS(reactive oxygen species)-inducing ability, which is directly linked to their electrochemical activity. Variety of new redox active copper(II) complexes and respective proligands based on thiosemicarbazones were recently studied by in situ EPR and UV-vis spectroelectrochemical experiments. It was shown that the proligands were mostly not redox active within the biologically accessible range. Cyclic voltammograms of investigated copper complexes confirmed their redox activity in the cathodic range. The first reduction peak can be attributed to a Cu(II) → Cu(I) transition. A large peak-to-peak separation suggested the significant structural differences between the Cu(II) and Cu(I) redox states where the electron transfer in Cu(I/II) systems was shown to involve an unusually large change in coordination geometry. The reduction of investigated Cu(II) complexes clearly occurs within the biologically accessible range both in water and in organic solvents. Upon the first reduction step the paramagnetic Cu(II) state is converted into the EPR silent Cu(I) state as confirmed by a strong decrease of the characteristic EPR signal. The redox behavior observed for the first reduction step can be explained by an electrochemical dual-pathway square scheme.

The study was supported by VEGA grant 1/0504/20 and by the Slovak Research and Development Agency for financial support under the contract No. APVV-19-0024.

- [1] Stepanenko I., Babak M. V., Spengler G., Hammerstad M., Popovic-Bijelic A., Shova, S., Büchel E. G., Darvasiová, D., Rapta, P., Arion, V. B.: *Biomolecules* 2021, 11, 862 (2021).
- [2] Milunovic, M., Palamarciuc, O., Sirbu A., Shova, S., Dumitrescu, D., Dvoranová, D., Rapta, P., Petrasheuskaya, T. V., Enyedy, E. A., Spengler, G., Ilic, M., Sitte, H. H., Lubec G., Arion, V. B.: