

Studentská odborná konference  
*Chemie je život 2023*

## **Sborník abstraktů**

Vysoké učení technické v Brně  
Fakulta chemická, 30. listopadu 2023

*Sponzorem konference je společnost Teva Pharmaceuticals CR, s.r.o.*



Studentská odborná konference *Chemie je život 2023*  
Sborník abstraktů

Editor: Ing. Jan Pernica

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

Vydání: první

Rok vydání: 2023

Náklad: 80 ks

ISBN: 978-80-214-6204-5

Tato publikace neprošla redakční ani jazykovou úpravou

# Obsah

## *Sekce středoškolských studentů*

Porovnání metod MALDI-TOF a biochemických testů pro identifikaci bakterií.....10 Kristýna Blažková	
Vliv vysolovacího efektu na účinnost mikroextrakce na tuhou fázi při analýze vín .....11 Tomáš Budínský, Michal Gross	
Nanočástice mědi deponované na oxidu křemičitém a jejich katalytická aktivita při dehydrogenaci ethanolu .....12 Tereza Jelínková, Jakub Sotolář	
Analýza přítomnosti bílkovin v polysacharidech pomocí voltametrie se střídavým proudem .....13 Vít Rumlena, Jan Skládáný	
Dysregulace mikroRNA jako marker relapsu u pacientů s mnohočetným myelomem.....14 Kristýna Uhljarová	
Hodnocení dlouhodobého vlivu poly-3-hydroxybutyrátu na růst a viabilitu rostliny <i>Lemna minor</i> .....15 Hana Žbořilová, Petra Procházková, Helena Zlámalová Gargošová	
Kultivace buněčných linií pro mikrofluidiku .....16 Zuzana Weisová	

## *Sekce studentů bakalářských a magisterských studijních programů*

Odstraňování tenzidů z odpadních vod.....18 Leona Bačovská, Martina Repková, Jan Vespalec	
Vplyv substituentov na entalpiu disociácie O–C väzby metoxylovej skupiny derivátov guajakolu .....19 Lucia Boldišová, Erik Klein, Monika Biela	
Produkce kopolymerů na bázi polyhydroxyalkanoátů pomocí bakterie <i>Schlegelella thermodepolymerans</i> .....20 Vojtěch Černý, Iva Buchtíková, Xenie Kouřilová, Veronika Řeháková, Vendula Hrabalová, Stanislav Obruča	
První totální syntéza selamoelleninu A a B a ohodnocení jejich biologické aktivity .....21 Barbora Dopitová	

Vliv přírodních látek z čaje na G-kvadruplexy a vazebné a transaktivační vlastnosti proteinu p53.....	22
Klára Foltanová, Lucie Šislerová, Václav Brázda	
Indolyl substituted benzazepinediones .....	23
Ema Freudová, Dušan Berkeš	
Optimalizácia extrakčných postupov na stanovenie reziduí pesticídov vo včelích produktoch.....	24
Natália Grigová, Ján Hrouzek, Tamara Pócsová, Agneša Szarka, Svetlana Hrouzková	
Studium metabolických vlastností bakterie Schlegelella thermodepolymerans v kontextu biosyntézy polyhydroxyalkanoátů .....	26
Viktorie Chvátalová, Iva Buchčíková, Vendula Hrabalová, Xenie Kouřilová, Veronika Řeháková, Stanislav Obruča	
Fotokatalytické kompozitní povlaky grafitického karbonitridu a siloxanového pojiva.....	27
Michael Kubát	
Stanovení reziduí fosetylu a kyseliny fosforité v lyofilizovaném ovoci .....	28
Eva Ludvíčková, Ing. Jana Rýparová Kvirencová, doc. Vojtěch Hrbek	
Je lignín odpad, alebo obnoviteľný zdroj použiteľný v energetickom priemysle? ..	30
Matúš Majerčiak, Richard Nadányi, Aleš Ház	
Tenké tištěné vrstvy oxidu wolframového připravené materiálovým tiskem z vodných prekurzorů.....	31
Eliška Martinková	
Studium vlivu faradaických reakcí na elektroporaci.....	32
Dominik Martinů	
Vývoj analytickej metódy na detekciu a stanovenie polyaromatických uhľovodíkov, ftalátov a alkylfenolov vo vzorkách sedimentov .....	33
Katarína Rusiňáková, Marcel Brenkus, Veronika Koperová Návojevová, Agneša Szarka, Michal Kirchner, Svetlana Hrouzková <sup>1</sup>	
Příprava polymerů na bázi diketopyrrolopyrrolů (DPP) pro využití v organické elektronice .....	35
Lukáš Solanský, Martin Cigánek, Jozef Krajčovič	
Establishment of luxAB-based Bioluminescence HTP Assay for Screening of Monoxygenases.....	36
Berenika Stloukalová, Andrea Nigl, Jelena Spasic <sup>1</sup> , Robert Kourist	
Nové deriváty diketopyrrolo[2,3-f]indolu (DPI) pro organickou elektroniku .....	37
Jiří Šípek, Martin Cigánek, Josef Krajčovič	
Cieľovo-špecifická izolácia biomarkerov pomocou modifikovaných povrchov .....	38
Viktória Štefancová, Lucia Uhelská, Petra Babiaková, Veronika Némethová, Filip Rázga	

Synthesis and Properties of Small-Ring Analogues of Romandolide .....	40
Michaela Tóthová, Artem Nikipelov, Vladimír Dacho, Philip Kraft <sup>2</sup> , and Peter Szolcsányi	
Termodynamika štiepenia O–C väzby metoxylovej skupiny v izoflavónoch.....	42
Veronika Vanková, Erik Klein, Monika Biela	
Elektrochemické děje na neurostimulačních elektrodách.....	43
Čeněk Vašíček	
Syntéza stavebních bloků pro bio-inspirovanou organickou elektroniku .....	44
Vojtěch Viceník, Jan Richtár, Jozef Krajčovič	
Simulace pohybu léčivých nanočástic ve 2D modelu srdce .....	45
Matouš Vrána, Darya Zhurauliova, Miloslav Pekař	

*Sekce studentů doktorských  
studijních programů  
Tematický okruh vědy o živé přírodě a environmentální vědy*

SERS-TAGs: Selective immobilization and detection of bacteria using specific antibodies and surface-enhanced Raman scattering.....	47
Markéta Benešová, Zdeněk Pilát, Silvie Bernátová, Ota Samek, Martin Kizovský	
Plasma Activated Water: A Promising Approach to Sustainable Agriculture .....	49
Ludmila Čechová, Daniel Holub, Kristína Trebulová, Kateřina Lišková, Tomáš Vozár, Pavel Pořízka, František Krčma, Zdenka Kozáková, Jozef Kaiser	
Quantification and Spatial Distribution of Enrofloxacin in Earthworms after its Uptake from Contaminated Soil .....	50
Jan Fučík, Rea Jarošová, Andreas Baumeister, Sascha Rexroth, Jitka Navrkalová, Anna Amrichová, Marie Hamplová, Marián Sedlář, Helena Gargošová Zlámalová, Ludmila Mravcová	
Interaction of Platinum Derivatives with Cancerous Cells.....	52
Simona Kožnarová, Michaela Vašinová Galiová, Roman Hrstka	
Biochar as an Effective Material for the Development of Miniaturized Sensors for Water Decontamination .....	53
Timea Ema Krajčovičová, Veronika Svitková, Michal Hatala, Pavol Gemeiner, Katarína Nemčeková	
Study of IFI16 Protein Binding to DNA G-quadruplex Secondary Structure.....	55
Libuše Kratochvilová, Natália Valková, Václav Brázda	
Study of physicochemical properties of skin creams with the addition of liposomes.....	57
Kristýna Müllerová; Vojtěch Enev	
The influence of different wheat bran pretreatment methods on the yield and purity of isolated ferulic acid after alkaline hydrolysis.....	59
Jakub Nábělek, Pavel Diviš, Jaromír Pořízka	

Characterization of the Stability of Edible Plant Oils Using Infrared Spectrometry.....	60
Chi Mai Nguyenová, Jan Poustka	
Study of the stress response and its connection with PHA metabolism in bacterium <i>Rhodospirillum rubrum</i> .....	61
Viktorie-Alexandra Pacasova, Katerina Mrazová, Eva Slaninova, Stanislav Obruca	
Study of Low Temperature Plasma Direct Application on Yeast <i>Candida Glabrata</i> And Bacteria <i>Escherichia Coli</i> and <i>Staphylococcus Epidermidis</i> .....	63
Veronika Petrová, František Krčma, Zdenko Machala , Kristína Trebulová, Julie Hoová	
Smart Antibacterial Nanoparticle Delivery System for the Treatment of Infected Wounds .....	64
Veronika Poláková, Zdenka Fohlerová, Lucy Vojtová	
Lyophilisation as a useful method of carrier system preparation .....	65
Marek Řihák <sup>1</sup> , Vojtěch Enev <sup>2</sup> , Tereza Venerová <sup>2</sup>	
Self-entrapment of Plant Growth Promoting Rhizobacteria by gelation of their exopolysaccharides .....	66
Martin Sůkeník <sup>1</sup> , Diana Černayová <sup>2</sup> , Petr Sedláček <sup>1</sup>	
Characterization and Bio-Applications of Plasma Activated Water.....	68
Kateřina Šindelková, Ludmila Čechová, Zdenka Kozáková, František Krčma	
Was slower replication of mtDNA the reason for extinction of <i>Homo sapiens neanderthalensis</i> ?.....	69
Lucie Šislerová, Václav Brázda, Anne Cucchiari, Jean-Luis Mergny	
First Screening of PHA Production in Cold-Adapted Bacteria from Antarctica .....	70
Katarína Šlosárová, Dana Byrtusová, Iva Pernicová, Volha Akulava, Margarita Smirnova, Eva Slaninová, Stanislav Obruča and Volha Shapaval	
Soil enzymatic activity and soil microbial communities response to plasma activated water application to soil.....	71
Kateřina Šťastná, Ludmila Čechová,, Vojtěch Enev, Zdenka Kozáková, František Krčma	
Antimycotic effects of the plasma gun tested on <i>C. glabrata</i> on different surface materials .....	72
Kristína Trebulová, Inna Orel, Eric Robert, Jan Hrudka, František Krčma	
Effect of Freeze Drying and Hot Air Drying on Fruit Quality and Shelf Life .....	73
Kristina Trenzová; Jiří Malíšek; Anna Prystupa; Markéta Vykydalová; Pavel Diviš; Eva Vítová	

*Sekce studentů doktorských  
studijních programů  
Tematický okruh materiálové vědy*

Synthesis of organic semiconductors with amino acid side chain for bioelectronics .....	76
Katsiaryna Arkhiptsava, Jan Richtár, Jozef Krajčovič	
Printed colorimetric amine indicator for food packaging .....	77
Vojtěch Dobiáš, Michal Veselý	
Flavins – Nature-inspired Photosensitisers for Sustainable Future .....	78
Lucia Ivanová, Jan Truksa, Jozef Krajčovič	
3D Collagen-based Scaffolds Loaded with Bioactive Molecules for Regenerative Medicine .....	79
Dávid Izsák, Veronika Pavliňáková, Zdenka Fohlerová, Tereza Szotkowská, Marcela Buchtová, Lucy Vojtová	
Polyethylene glycol hydrogels with different cross-linking type and density .....	80
Kristýna Janáková	
Delignification of wheat straw using deep eutectic solvents-like mixtures .....	81
Veronika Jančíková, Michal Jablonský, Katarína Voleková	
Sufficiency of various de-aging methods of PTCR ceramics based on BaTiO <sub>3</sub> .....	82
Kryštof Koller, Petr Ptáček	
Temperature Effect on Kinetic Profile of Ziegler Natta Catalyst in Propene Polymerization .....	83
Vít Kolomazník, Igor Cejpek, Miroslav Skoumal	
The study of adhesion and proliferation of cells on 3D printed PHB/PLA surfaces – the influence of surface roughness and wetting characteristics .....	84
Štěpán Krobot, Veronika Melčová, Radek Přikryl	
Optical Properties of Bi-Based Perovskite Single Crystals.....	85
Stevan Gavranovic, Salvatore Valastro, Ioannis Deretzis, Martin Vala, Emanuele Smecca, Antonino La Magna, Alessandra Alberti, Klara Castkova and Giovanni Mannino	
Combined Analysis of an Rf Plasma Source .....	87
Zuzana Měšťánková, Karel Juřík, K. Mrózek, A. Obrusník, F. Krčma, P. Drexler	
Photocatalytic layers of graphitic carbon nitride and siloxane binder.....	88
Sylvia Patakyová, Petr Dzik	
Study of Matrix Effects of Nitro Compounds and Explosives in Various Water Samples.....	89
Tamara Pócssová, Tímea Lelkesová, Laura Korčoková, Iveta Bitterová, Svetlana Hrouzková	

Size and elemental composition of fine particles from li-ion battery cell explosion .....	91
Lukáš Preisler, Simona Jonášová	
PAHs concentration in particulate matter from the combustion of torrefied agricultural crops .....	92
Miroslav Prchal, Tereza Zlevorová	
Dispersing agent DISPERBYK® as a tool for ensuring low viscosity and kinetic stability during 3D printing of highly filled ceramic suspensions .....	93
Patrik Sokola, Michal Kalina	
Structure-Property Relationship of Symmetric and Unsymmetric Croconaine Dyes .....	94
Strada Rebecca, Vorba Michal, Dunlop David, Slanina Tomáš, Šebej Peter	
Uptake of Methylmercury by Local Microalgae from Huelva Province, Spain .....	95
Samuel Šimanský, Ivana Márová, Živan Gojkovič, Carlos Vílchez	
Photovoltaic Microparticles for Controlled Production of Hydrogen Peroxide.....	96
Anna Tvrdoňová, Marie Jakešová, Eric Daniel Głowacki	
Basic Analysis of Concentrate From Membrane Processes on The Site of an Industrial Laundry.....	97
Jan Vespalec, Martina Repková	
Modelling the Controlled Release of Substances through a Polymer Membrane in a Biological Environment.....	98
Darya Zhurauliova, Miloslav Pekař	



*Sekce středoškolských studentů*

# Porovnání metod MALDI-TOF a biochemických testů pro identifikaci bakterií

*Kristýna Blažková*

*Kristýna Blažková, pracovní instituce: SEVARON PORADENTSTVÍ, s.r.o.  
Blanenská 2034/12b, 664 34 Kuřim, studijní instituce: Střední průmyslová škola  
chemická, Brno, Vranovská 65*

Tato práce se zabývá porovnáním metod pro identifikaci různých druhů bakterií. Konkrétně jsem využila metodu MALDI-TOF, jedná se o maticí asistovanou laserovou desorpci/ionizaci s detektorem doby letu hmotnostní spektrometrii. Pomocí této metody lze identifikovat aerobní i anaerobní bakterie, kvasinky, mykobakterie, ale také určit rod a druh vláknitých mikromycet. Dále jsem využila metodu biochemických testů, a to konkrétně API testy od firmy Biomérieux a MIKRO-LA-TEST od firmy Erba Mannheim.

Cílem práce bylo identifikovat 55 neznámých vzorků bakterií pomocí jednotlivých vybraných metod a analyzovat jejich klíčové parametry, mezi tyto parametry jsem zařadila časovou efektivitu jednotlivých metod (od příjmu vzorku, přes subkultivaci až po identifikaci bakterie), účinnost identifikace, finanční nákladovost, přesnost identifikace, rozsah databáze, praktická proveditelnost a aktualizaci a rozvoj těchto metod do budoucnosti.

Výsledky ukazují, že metoda MALDI-TOF přináší významné výhody v čase, účinnosti a přesnosti identifikace, ačkoliv je nutné na začátku zvážit finanční investici (vysoká pořizovací cena). Zatímco biochemické testy API a MIKRO-LA-TEST prokázaly svou hodnotu v některých aspektech, jejich omezení v rychlosti a šíři identifikace by měla být brána v úvahu při výběru diagnostické metody. Tato studie poskytuje ucelený pohled na klíčové faktory rozhodující při výběru mikrobiologické diagnostické metody a nabízí perspektivu pro budoucí vývoj v oblasti mikrobiologie.

## Poděkování

Ráda bych poděkovala své konzultantce a vedoucí Diagnostické laboratoře SEVARON PORADENTSTVÍ, s.r.o. Mgr. Ditě Kellnerové, která mi zprostředkovala tuto práci a pomohla s jejím zhotovením.

# Vliv vysolovacího efektu na účinnost mikroextrakce na tuhou fázi při analýze vín

*Tomáš Budínský<sup>1</sup>, Michal Gross<sup>2</sup>*

- 1) *Střední průmyslová škola chemická Brno, Vranovská 65, 614 00 Brno, Česko, budinsky.tomas20@spschbr.info*
- 2) *Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie potravin a biotechnologií, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Česko*

Analýza potravin je zásadní nástroj pro kontrolu jejich kvality a bezpečnosti, ať už je jejím cílem zjišťování nutriční hodnoty výrobku, jeho mikrobiální stability, (ne)přítomnosti kontaminantů nebo stanovení látek typických pro danou komoditu jako průkaz dodržení výrobních postupů, použití předepsaných surovin apod. Zejména u produktů s vysokou přidanou hodnotou, např. u olejů, sýrů nebo vín, je kontrola kvality účinnou prevencí proti klamání spotřebitele a umožňuje stahování falšovaných výrobků z tržní sítě.

V poslední době se jedním z nejpoužívanějších extrakčních postupů stala mikroextrakce na tuhou fázi (SPME). Mezi její hlavní přednosti patří široká využitelnost, vysoká citlivost, absence rozpouštědel a minimalizace nutných předúprav vzorků. Má však i jistá negativa, v analýze potravin jde zejména o matricový efekt, který se při SPME projevuje. Návrh a optimalizace dostatečně robustních metod jsou proto výzva pro dnešní analytické chemiky. V případě analýzy těkavých látek réвовých vín v uspořádání HS-SPME je jedním z problémů kvantitativnost jejich přechodu z kapaliny do plynné fáze. Jedním z možných řešení je využití vysolovacího efektu, tedy zvyšování iontové síly roztoku např. přidávkem solí. Cílem práce bylo ověřit, že přídatek chloridu sodného zvyšuje účinnost HS-SPME, a určit jeho optimální velikost pro další rutinní analýzy vína pomocí GC-MS.

Výsledky měření ukázaly, že přídatek NaCl má na účinnost extrakce pozitivní vliv, protože množství extrahovaných těkavých látek významně vzrostlo. Jako optimální byl určen přídatek 1,0 g NaCl do vzorku 3 ml vína. Vedlejším pozitivním efektem bylo i snížení relativní odchylky naměřených hodnot u jednotlivých analýz při opakování měření.

# Nanočástice mědi deponované na oxidu křemičitém a jejich katalytická aktivita při dehydrogenaci ethanolu

*Tereza Jelínková, Jakub Sotolář*

*Střední průmyslová škola chemická Brno, Vranovská 65, 614 00 Brno, Česká republika,  
Sotolar.kuba@seznam.cz, jelinkovat05@gmail.com*

Tato práce se zabývá přípravou katalyzátoru pro dehydrogenaci ethanolu, jakožto alternativu zisku acetaldehydu. Jenž se v nynější době získává z ropy. V této práci představíme nanočástice mědi deponované na oxidu křemičitém. Bylo proměřováno chování katalyzátorů o různé koncentraci mědi, teplotě kalcinace či typu nosiče. V rámci SOČ byl připraven syntetický oxid křemičitý, který byl následně také použit jako nosič.

V práci používáme k deponaci metodu suché impregnace, která se z předchozích studií ukázala jako neúčinnější a zároveň nejjednodušší.[2] Pro charakterizaci nosičů jsme použili porozimetr. Připravené katalyzátory byly pak proměřeny na rentgenovém práškovém difrakturom, IR spektrometru a transmisním elektronovém mikroskopu.

Samotná katalýza probíhala v koloně napojené k plynovému chromatografu, který výsledky katalýzy charakterizoval

## Poděkování

Tímto bychom rádi poděkovali vedoucím naší dlouhodobé maturitní práce Mgr. Aleši Stýskalíkovi, Ph.D. a Mgr. Tomáši Pokornému za všestrannou pomoc, poskytnutí materiálů a možnosti konání praktické části práce. Také za množství cenných rad a nápadů na zlepšení práce, podnětů, doporučení, a hlavně za velkou trpělivost a ochotu. Dále velké poděkování patří také školnímu konzultantovi Ing. Tomáši Buriánkovi, který nám poskytl možnost podílet se na této práci a ochotně s námi konzultoval všechny její okolnosti a nejasnosti.

# **Analýza přítomnosti bílkovin v polysacharidech pomocí voltametrie se střídavým proudem**

*Vít Rumlina, Jan Skládavý*

*Střední průmyslová škola chemická Brno, Vranovská 65, 614 00 Brno, Česká republika  
vitekrum@seznam.cz*

Naše práce se zabývá studiem polysacharidů, a to hlavně polysacharidem PS 5 izolovaného z rostliny *Haberlea rhodopensis*, na nabitých površích použitím elektrochemické metody tzv. voltametrie se střídavým proudem.

Naším cílem bylo zjistit, zda je tato elektrochemická metoda vhodná pro detekci kontaminace polysacharidů proteiny. Porovnali jsme voltametrické odpovědi polysacharidu PS5 a proteinu, v našem případě sérového albuminu. Voltametrické odpovědi se lišily zejména při vysoce negativních potenciálech a bylo možné detekovat sérový albumin v koncentraci 200 ng/ml v roztoku polysacharidu PS 5. Podobné výsledky jsme získali i pro jiné polysacharidy.

Z našich výsledků vyplývá, že navržená metoda je schopna rozlišit přítomnost proteinů v roztocích polysacharidů. Metodu je nutno ještě optimalizovat, aby mohla najít širší uplatnění.

## Poděkování

Rádi bychom poděkovali naši školitelce Dr. Veronice Ostatné z Biofyzikálního ústavu AV ČR, v.v.i. a grantové agentuře GAČR za poskytnutí finanční podpory projekt č. 22-26590.

# Dysregulace mikroRNA jako marker relapsu u pacientů s mnohočetným myelomem

*Kristýna Uhljarová*

*Střední průmyslová škola chemická Brno, Vranovská 65, 614 00 Brno, Česká republika  
kikina.u@email.cz*

Mnohočetný myelom je druhé nejčastější hematologické onemocnění starších lidí s incidencí 6/100 000 lidí v ČR. Poslední desetiletí přineslo vlnu nových léků, které zásadním způsobem změnily přežívání pacientů s touto nemocí. Problémem je, že i přesto většina pacientů relabuje, což vede až k refrakternímu onemocnění.

Z tohoto důvodu jsou pro dnešní medicínu zabývající se léčbou onkologických, ale i jiných onemocnění, důležité tzv. biomarkery. Tyto biomarkery slouží jako ukazatel, díky kterému je možné včas zachytit nadcházející relaps, a tak zabránit zhoršení zdravotního stavu pacienta. Jako možný marker nadcházejícího relapsu může sloužit dysregulace v expresi mikroRNA.

Dysregulace mikroRNA je potenciální marker, díky němuž může dojít ke zkvalitnění lékařské péče o pacienta – konkrétně zavedením tekuté biopsie. Výhodami této diagnostické metody oproti tkáňové biopsii jsou: méně bolestivý odběr vzorku, snadnější a neinvazivní přístup ke vzorku, opakovatelnost a rychlejší získání laboratorních výsledků.

Tato práce se zaměřuje na identifikaci dysregulace mikroRNA v periferní krvi pacientů v prvním relapsu mnohočetného myelomu. K analýze byly použity vzorky pacientů po prvním relapsu onemocnění, kteří byli rozděleni do skupin A a E. Skupina A obsahovala vzorky pacientů, jenž prodělali první relaps během 6 měsíců po vyléčení a skupina E se skládala ze vzorků pacientů, jenž prodělali relaps po více než 5 letech. Z této analýzy nelze zatím zjistit jednoznačný výsledek, jelikož se nepodařilo získat vzorky v dostatečné kvalitě. Dále je potřeba samotný výzkum provést v mnohem větším měřítku tzn. s několikanásobně větším počtem různých vzorků.

## Poděkování

Chtěla bych poděkovat Ing. Tomáši Buriánkovi za pomoc při výběru zaměření práce a osvětlení možných variant prací SOČ. Dále bych chtěla poděkovat Mgr. Olze Strouhalové, která souhlasila s mou prosbou stát se mým konzultantem. Děkuji za její cenné rady a ochotu. Speciální poděkování patří Bc. Kláře Baďurové, která mě od samotného začátku prováděla práci v laboratoři. Získala jsem od ní spoustu důležitých zkušeností do budoucna, co se praxe i vědomostí týče. To největší poděkování ovšem patří doc. RNDr. Sabině Ševčíkové, Ph.D. za odborné vedení, poskytnutí důležitých materiálů ke studiu, odborné konzultace a trpělivost. V neposlední řadě bych chtěla poděkovat organizaci JCMM, která finančně podpořila mnou zpracovávané téma práce SOČ.

# Hodnocení dlouhodobého vlivu poly-3-hydroxybutyrátu na růst a viabilitu rostliny *Lemna minor*

*Hana Zbořilová<sup>1</sup>, Petra Procházková<sup>2</sup>, Helena Zlámalová Gargošová<sup>2</sup>*

1) Střední průmyslová škola chemická Brno, Vranovská 65, 614 00 Brno, Česká republika  
*petrajanickova9@gmail.com*

2) Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno,  
Česká republika

Plasty, zejména mikroplasty a nanoplasty v této době zásadně znečišťují životní prostředí, a to je závažným ekologickým problémem. Mikroplasty mohou být nalezeny všude kolem nás – ve vodě, v půdě, i v ovzduší. Škodí organismům, které si je mohou pozřít, a kvůli falešnému pocitu sytosti zahynout, ale mohou je neúmyslně konzumovat i lidé. Je tu proto snaha navrhnout alternativy k běžným konvenčním plastům. V této práci pojednáváme právě o možné alternativě, a to biodegradabilním plastům. Tyto plasty mají podobné vlastnosti jako syntetizované plasty, ale rozkládají se působením mikroorganismů jako jsou bakterie, houby či řasy. Tato biodegradace však může být časově náročný proces a prozatím není dostatečně prozkoumán vliv rozložených polymerů na životní prostředí.

Práce se zabývá hodnocením vlivu poly-3-hydroxybutyrátu na růst a viabilitu rostliny *Lemna minor*. Poly-3-hydroxybutyrát (P3HB) byl testován ve dvou velikostních frakcích (částice <63  $\mu\text{m}$  a 63-125  $\mu\text{m}$ ). Na základě předchozích testů s touto rostlinou, kdy jedinou sledovanou změnou byl nárůst délky kořene, byla vybrána pouze koncentrace 100 mg mikročástic P3HB na 1 litr média, doba expozice rostliny v suspenzi P3HB byla 12 týdnů. Suspenze byla jednou týdně měněna a byly hodnoceny sledované parametry. Pro kontrolu byla rostlina *L. minor* inkubována v samotném médiu.

# Kultivace buněčných linií pro mikrofluidiku

*Zuzana Weisová*

*Střední průmyslová škola chemická Brno, Vranovská 65, 614 00 Brno, Česká republika,  
zuzi.weisova@seznam.cz*

Nad rakovinným bujením se snažíme vyhrát již velmi dlouhou dobu.

Kultivace i lyze buněk může velmi efektivně posunout výzkum léčby rakoviny na vyšší úroveň – hlavně co se analýzy jednotlivých proteinů, enzymů a signálních drah ve zmutovaných buňkách samotných týče. Může se nám zdát, že o signálních drahách a rakovinném bujení víme již téměř vše, ale zdání klame. Jako každý živý organismus se i rakovinné buňky dokáží evolučně vyvíjet a získávat tak vyšší odolnost vůči různým lékům či způsobům léčby proti zhoubným nádorovým onemocněním. V momentě, kdy díky lyzi jednotlivých buněk budeme moci velmi důkladně prozkoumat její životní procesy, zvládneme rozšířit i povědomí o detailnějších funkcích každé části jejich organel nevyjímaje třeba proteinu p53.

Mikrofluidika patří mezi nejnovější a nejpobulárnější způsoby zkoumání v oblasti bioaplikací i pro studium buněk, živých soustav a biomolekul. Mikročipy, do kterých jsou přiváděny chemické látky a zkoumané buňky, si laboratoř Ústavu analytické chemie AV vyrábí sama – na míru upravené každému experimentu.

Převést osamostatněné buňky do jednotlivých kapek v mikročipu není lehký úkol. Abychom mohli v budoucnosti řádně prozkoumat jednotlivé orgány buněk, je zapotřebí zlyzovat buněčnou membránu. K tomu nám velmi dobře poslouží lyzační činidla. Výchozí činidlo, se kterým započala naše práce, byl Triton X-100. Předmětem výzkumu bylo určit hodnotu co nejnižší koncentraci činidla pro úplnou lyzi buněk s ohledem na finanční náklady.

Po sérii experimentů s různými koncentracemi lyzačního činidla bylo po vyhodnocování jednotlivých snímků buněk určeno, že koncentrace Tritonu X-100, která ještě způsobovala téměř 100% lyzi byla 0,008 %. Tato koncentrace byla následně užita i pro lyzi buněk při následné kapénkové mikrofluidice, kde docházelo k rozkladu stěny jednotlivých HeLa buněk v samostatných kapkách roztoku.



*Sekce studentů bakalářských a magisterských  
studijních programů*

# Odstraňování tenzidů z odpadních vod

*Leona Bačovská  
Martina Repková, Jan Vespalec*

*Vysoké učení Technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie a technologie ochrany  
životního prostředí, Purkyňova 464/118, 61200 Brno, Leona.Bacovska@vutbr.cz*

S rapidní urbanizací a rozvojem průmyslových odvětví, například farmaceutického, textilního, prádelenského a těžebního, roste množství odpadní vody, která obsahuje perzistentní a toxické organické sloučeniny. Tyto biologicky obtížně rozložitelné sloučeniny mohou vykazovat karcinogenní a toxické účinky, a mohou tak vést k vážnému poškození zdraví a životního prostředí. Proto se vyvíjejí technologie, které umožní efektivní čištění těchto odpadních vod a minimalizují tak jejich negativní dopad na životní prostředí. Mezi tyto technologie se řadí například pokročilé oxidační procesy, které se ukazují jako vhodné technologie pro odstranění organického znečištění. Využívají se především pro čištění odpadních vod. Výhodou je, že jsou schopné odstranit i látky, které konvenční mechanicko-biologická čistírna odpadních vod nedokáže účinně odstranit.

Tato práce sleduje aktuální pohled na problematiku odstraňování tenzidů z odpadních vod se zaměřením na pokročilé oxidační procesy.

Tenzidy jsou velmi perzistentní a ve vodě rozpustné kontaminanty. Jako modelový tenzid byl vybrán dodecylsírán sodný (SDS), neboť je používán nejčastěji v mnoha domácích i průmyslových detergentech. Využití SDS se zvyšuje rok za rokem. Odhaduje se, že SDS dnes představuje okolo 40 % ze všech využívaných detergentů. Nebezpečnost SDS tkví v jeho akumulaci v životním prostředí a organismech. SDS se řadí mezi xenobiotika a pokud se dostane do povrchových vod, může způsobit vážné poškození vodních ekosystémů.

Degradace SDS byla sledována v destilované vodě a v prádelenské modelové vodě. Všechny experimenty probíhaly na poloprovozní AOP jednotce a byly použity tyto tři reakční systémy: UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, UV/O<sub>3</sub> a UV/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>/O<sub>3</sub>. V destilované vodě a v prádelenské modelové vodě byla prokázána účinnost všech zmiňovaných systémů, kdy došlo ke snížení koncentrace dodecylsíránanu sodného o 68 – 69 % v destilované vodě, a o 53 – 56 % v prádelenské modelové vodě.

# Vplyv substituentov na entalpiu disociácie O–C väzby metoxylovej skupiny derivátov guajakolu

*Lucia Boldišová, Erik Klein, Monika Biela*

*Oddelenie fyzikálnej chémie FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, xboldisoval@stuba.sk*

Guajakol sa v širokej škále používa v priemyselných aplikáciách alebo medicíne. Okrem hydroxylovej skupiny naviazanej na benzenové jadro, ktorá umožňuje guajakolu pôsobiť mechanizmami primárnych antioxidantov, je v súčasnosti predmetom štúdií aj metoxylová skupina predstavujúca dôležité reakčné centrum pri rôznych chemických a biochemických procesoch.

Naša práca sa zameriava na teoretické štúdium entalpie disociácie O–C väzby metoxylovej skupiny 15 para-substituovaných derivátov guajakolu a príslušných fenoxidových aniónov. Výpočty sa uskutočnili pomocou metódy funkcionálu elektrónovej hustoty (DFT) s funkcionálom M06-2X a bázou funkcií atómových orbitálov 6-311++G\*\*.

Porovnanie vypočítaných reakčných entalpií s dostupnými experimentálnymi a teoretickými hodnotami vypočítanými ab initio metódou G4 potvrdilo vhodnosť zvolenej metódy. Entalpie disociácie O–C väzieb v molekulách, BDE, a aniónoch, BDE(A), para-substituovaných derivátov guajakolu sa študovali vo vodnom prostredí. Na zohľadnenie efektu rozpúšťadla bol použitý implicitný model solvátácie. Získané entalpie disociácie O–C väzby boli korelované s Hammettovými konštantami  $\sigma_p$  a Brownovými a Okamotoovými konštantami  $\sigma_p^+$ .

Výsledky ukazujú, že prítomnosť elektrónovo donornej hydroxylovej skupiny a jej zapojenie do intramolekulovej vodíkovej väzby s OCH<sub>3</sub> skupinou spôsobuje pokles entalpie disociácie O–C väzby metoxylovej skupiny v molekulách para-substituovaných guajakolov. Pre fenoxidové anióny guajakolov, vzniknuté deprotonizáciou fenolovej OH skupiny, pozorujeme ďalší pokles entalpie disociácie O–C väzby. Deprotonizácia OH skupiny súčasne významne tlmí efekt študovaných substituentov.

Poděkování

Tento příspěvek vznikl s podporou projektů VEGA 1/0461/21 a APVV-19-0024.

# Produkce kopolymerů na bázi polyhydroxyalkanoátů pomocí bakterie *Schlegelella thermodepolymerans*

*Vojtěch Černý, Iva Buchtíková, Xenie Kouřilová, Veronika Řeháková,  
Vendula Hrabalová, Stanislav Obruča*

*Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie potravin a biotechnologií,  
Purkyňova 118, 612 00 Brno, Česká republika, 225894@outbr.cz*

Polyhydroxyalkanoáty (PHA) jsou polymery produkované mikroorganismy, které jim slouží jako zásoba energie a zdroj uhlíku. Jejich výhodou oproti syntetickým polymerům je biokompatibilita a biodegradabilita, avšak výrobní cena biotechnologického procesu je vyšší. Snížení výrobních nákladů by mohlo být dosaženo použitím odpadních materiálů jako substrátů či využitím extremofilních producentů.

Extremofilní organismy jsou takové, které vyžadují pro život extrémní podmínky. U termofilů je to vyšší teplota a například u halofilů vysoká koncentrace solí. Tyto organismy se zdají být ideálními kandidáty pro biotechnologické účely, je lze kultivovat v semisterilním či dokonce nesterilním prostředí.

Cílem této práce bylo prostudovat schopnost různých kmenů termofilní bakterie *Schlegelella thermodepolymerans* inkorporovat do struktury polyhydroxyalkanoátů (PHA) různé monomerní jednotky a tvořit tak kopolymer. Byly testovány prekurzory pro produkci monomerů mclPHA, 4hydroxybutyrátu (4HB) a 3hydroxyvylerátu (3HV). Byly použity čtyři bakteriální kmeny *S. thermodepolymerans* pocházející z různých veřejných sbírek mikroorganismů. Po sérii prvotních screeningů byla jako nejvýhodnější prekurzor vyhodnocena kyselina levulová, která je prekurzorem 3hydroxvalerátu. Použité kmeny dosahovaly nejvyšších výtěžků produkce kopolymeru PHA, pokud byl prekurzor přidán na začátku produkční fáze. Také byla provedena kultivační série koncentrační řady daného prekurzoru, kde bylo zjišťováno, jak množství prekurzoru ovlivní růst bakteriální kulturu a také složení kopolymeru. Při zvyšování množství prekurzoru klesalo množství biomasy a PHA, avšak vznikly velmi zajímavé materiály s vysokým obsahem 3HV. Při přidání 8 g/l bylo dosaženo 52 mol. % zastoupení 3HV v kopolymeru. U výsledných kopolymerů byla také stanovena molekulová hmotnost. Nejvyšší molekulová hmotnost byla naměřena u vzorku s nejnižším zastoupením 3HV. Zároveň bylo do toho vzorku přidáno nejméně prekurzoru. Druhá nejvyšší molekulová hmotnost byla však naměřena u vzorku s největším zastoupením 3HV a největším množstvím přidaného prekurzoru.

Poděkování

Tato studie byla podpořena projektem GA22-108455 Grantové agentury České republiky (GAČR).

# První totální syntéza selamoelleninu A a B a ohodnocení jejich biologické aktivity

*Barbora Dopitová*

*Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, 17. listopadu 1192/12, 779 00 Olomouc, baru.dopitova@gmail.com*

V rostlinách můžeme nalézt malé organické látky (sekundární rostlinné metabolity) s širokým spektrem biologické aktivity, tyto látky se však v rostlinách vyskytují jen v mikrogramových množstvích a tím pádem nemůžeme stoprocentně determinovat jejich strukturu a zhodnotit s přesností jejich biologickou aktivitu. [1]

Tato práce se zabývá přípravou dvou strukturně velmi podobných přírodních látek, selamoelleninu A (izolován v roce 2017) a selamoelleninu B (izolován v roce 2018).[2,3] Obě zmíněné látky obsahující benzofuranový skelet byly izolovány z rostliny *Selaginella moellendorffii* Hieron.[2,3] Selamoellenin B byla následně také izolován v roce 2021 také z citrusu *Citrus medica* L. var. *Sarcodactylis*. [4]

Cílem práce byla jejich příprava, na kterou jsme cílili ze dvou důvodů: (a) připravit dané látky a tak nezávisle (porovnáním fyzikálně-chemických dat s izolovanými látkami) potvrdit strukturu izolovaných přírodních látek, (b) otestovat biologickou aktivitu nejenom obou látek, ale také jednotlivých připravených intermediátů.

Syntéza probíhala dvěma postupy, při nichž bylo využito reakcí katalyzovaných tranzitními kovy, mikrovlnným zářením ale i standardních a dlouho známých reakcí. Biologická aktivita byla zkoumána především s ohledem na anthelmintickou a cytotoxickou aktivitu.

## Poděkování

Nejprve bych chtěla poděkovat panu doc. Jiřímu Pospíšilovi Ph.D. za to že mě přijal jako nejmladšího člena do své skupiny, také za jeho odborné vedení, pomoc v laboratoři, trpělivost, čas a také za velkou pomoc při sepisování mé práce. Dále bych chtěla poděkovat Mgr. Markétě Fuksové a Mgr. Danieli Chrenkové za pomoc v laboratoři.

# Vliv přírodních látek z čaje na G-kvadruplexy a vazebné a transaktivační vlastnosti proteinu p53

*Klára Foltanová  
Lucie Šislerová, Václav Brázda*

*Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie potravin a biotechnologií  
Purkyňova 118, 612 00 Brno, Česká republika 225489@outbr.cz*

Nádorový supresorový protein p53 patří mezi nejdůležitější regulátory buněčného cyklu při poškození DNA. Kromě zástavy buněčného cyklu a navození apoptózy, interaguje protein p53 s jinými proteiny a DNA. Mutace genu TP53 kódující protein p53 jsou společným znakem lidských nádorových onemocnění. V naší práci jsme zkoumali přírodní látky z čaje, které by mohly hrát pozi-tivní roli v aktivaci proteinu p53 u nádorových onemocnění a uplatnit se v podpoře léčby. V teoretické části této práce byly popsány sekundární struktury DNA, konkrétně struktura a vlastnosti G-kvadruplexů, dále protein p53 a jeho vazebná aktivita k sekundárním strukturám DNA. Dále jsme se zaměřili na charakterizaci kyseliny gallové a apigeninu – tedy přírodních látek vyskytujících se v čajích a potravinách, u kterých byla zároveň ukázána interakce s nukleovými kyselinami. V experimentální části jsme ověřili schopnost těchto látek interagovat se strukturálními motivy DNA, tzv. G-kvadruplexy, in vitro a také možnost jejich stabilizace v kvasinkovém expresním systému. V tomto modelovém isogenním systému jsme testovali vliv na intenzitu transaktivace proteinu p53. Interakce kvartérních struktur s G4 ligandy, včetně kyseliny gallové a apigeninu, byla ověřena in vitro pomocí ThT fluorescenčního testu a luciferázového reportérového testu. Bylo zjištěno, že G4 ligandy o koncentraci 30  $\mu\text{M}$  po 20 hodinách inkubace nevykazují výraznější vliv na testované kvasinkové kultury. Při koncentraci G4 ligandů 60  $\mu\text{M}$  bylo pozorováno navýšení produkce proteinu p53 a zvýšení transaktivace, patrně vlivem buněčného stresu způsobeného přítomností G4 ligandů. Výsledky ukazují na možnost regulace genové exprese pomocí malých přírodních molekul.

# Indolyl substituted benzazepinediones

*Bc. Ema Freudová, doc. Ing. Dušan Berkeš, CSc*

*Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37, Bratislava, ema.freud@gmail.com*

New methyl 1-substituted 5-hydroxy-2-oxo-2,3-dihydro-1H-benzo(b)azepine-4-carboxylate with estimated excellent drug-like properties have been recently found. These compounds exhibited potent cytotoxic activities in various cancer cell lines. Data support the idea that seven-membered lactam-based analogues could be valuable for further development as a new type of antimitotic agents and kinase inhibitors.

In our laboratory, we focused on modifying position C-3 which has yet not been explored. New derivatives which show high antibacterial activities against methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA) were synthesized using oxo-, aza-, sulfa-, and phospho-Michael addition to new highly electrophilic benzazepinedione.

We aimed to synthesize derivatives with the formation of a new C-C bond. We focused on the reaction with indoles because of the construction of medicinally crucial molecular framework. The targeted indolyl benzazepinediones feature the bent structure of the skeleton and stable enol form.

We were able to find optimal reaction conditions using a molecular iodine catalyst. No desired product was observed in the absence of the I<sub>2</sub> catalyst even after a week. Products were easily isolated by filtration and recrystallized in appropriate solvents.

Acknowledgement

APVV-20-0298 and VEGA 1/0411/ 22

# Optimalizácia extrakčných postupov na stanovenie rezíduí pesticídov vo včelích produktoch

*Natália Grigová, Ján Hrouzek, Tamara Pócsová, Agneša Szarka,  
Svetlana Hrouzková*

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

Životné prostredie je zaťažované množstvom polutantov, ktoré ohrozujú život významných organizmov v prírode. Jedným z nenahraditeľných organizmov je včela medonosná, ktorá nám poskytuje vysokohodnotné produkty, ako včelí vosk, peľ, propolis, med, či materskú kašičku. Rezíduá škodlivých látok sa z tela včely dostávajú aj do jej produktov, a následne s nimi prichádzajú do kontaktu aj ľudia ako konzumenti. Hoci je kontrola kontaminácie nevyhnutná, výskum sa doteraz venoval prevažne medu a včeliemu peľu, a štúdium ďalších včelích produktov je zatiaľ relatívne obmedzené, najmä čo sa týka komerčne dostupných spracovaných foriem propolisu, ako sú cukríky, tinktúry či kapsuly.

Propolis je komplikovaná zmes, ktorú tvoria najmä živice, vosky a esenciálne oleje. Pri analýze rezíduí látok v propolise sa kvôli tomu stretávame s výraznými matricovými efektami, ktoré by nám bez vhodného extrakčného a čistiacieho postupu znemožnili stanovenie. Pri úprave vzorky včelích produktov sa preukázal ako vhodný postup QuChERS (Quick, Easy, Cheap, Effective, Rugged and Safe, teda rýchla, jednoduchá, lacná, účinná, robustná a bezpečná). Ide o dve rôzne za sebou idúce extrakcie, a to LLE (extrakcia v systéme kvapalina-kvapalina) a d-SPE (disperzná extrakcia tuhou fázou). Na analýzu extraktov včelích produktov sa prevažne využíva plynová a kvapalinová chromatografia s hmotnostno-spektrometrickou detekciou.

Táto práca je sústredená na optimalizáciu úpravy vzorky propolisovej tinktúry za účelom minimalizovania matricových vplyvov a dosiahnutia požadovaných hodnôt extrakčnej výťažnosti pre 47 pesticídov. Postupy úpravy vzorky, ktoré porovnávame, sa líšia využitím rôznych kombinácií sorbentov v postupe QuChERS, ako napríklad C18 (silikagél modifikovaný oktaedecylovými funkčnými skupinami), PSA (primárny sekundárny amín), či Florisil, líšia sa krokom filtrácie propolisovej tinktúry, prídavkom citrátových solí na úpravu pH, či úpravou tzv. EMR-Lipid (Enhanced Matrix Removal - Lipid). Inštrumentálne analýzy boli realizované plynovým chromatografom GC 6890N (Agilent, USA) s hmotnostným spektrometrom 5975. Testovali sme použitie a výhody prístroja GC 8890 (Agilent, USA), kde sme poukázali na potenciál využitia nosného plynu vodíka ako alternatívneho nosného plynu.

Významným cieľom práce je aj štúdium matricových efektov. Porovnávali sme výsledky analýzy matricového štandardu a porovnávacieho zmesného rozto-



ku pesticídov. Pre každý sledovaný pesticíd boli vyhodnotené a kategorizované matricové faktory. Identifikovali sme niekoľko interferujúcich látok, čo nám pomôže pri určovaní ďalších potrebných modifikácií postupu úpravy vzorky. Studium metabolických vlastností bakterie *Schlegelella thermodepolymerans* v kontextu biosyntézy polyhydroxyalkanoátů

#### Podakovanie

Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. APVV-19-0149 a Vedeckou grantovou agentúrou MŠVVaŠ SR a SAV na základe projektu VEGA 01/0412/20.

# Studium metabolických vlastností bakterie *Schlegelella thermodepolymerans* v kontextu biosyntézy polyhydroxyalkanoátů

Viktorie Chvátalová<sup>1</sup>, Iva Buchtíková<sup>1</sup>, Vendula Hrabalová<sup>1,2</sup>, Xenie Kouřilová<sup>1,2</sup>, Veronika Řeháková<sup>1,2</sup>, Stanislav Obruča<sup>1,2</sup>

- 1) Ústav chemie potravin a biotechnologií, Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Brno, Česká republika
- 2) Centrum materiálového výzkumu, Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Brno, Česká republika, 232630@vutbr.cz

Polyhydroxyalkanoáty (PHA) jsou skupina biodegradabilních polymerů, které produkují některé druhy bakterií, mimo jiné i termofilní bakterie. Tyto biopolymery jsou mnohem udržitelnější, jelikož jsou vyráběny z obnovitelných zdrojů a jsou biologicky rozložitelné. Výhodou produkce polyhydroxyalkanoátů pomocí termofilních bakterií je, že se snižuje riziko kontaminace mezofilními bakteriemi a tím se snižuje i finanční náročnost, jelikož samotná produkce nemusí být vedena sterilně. Termofilní bakterie jsou mikroorganismy, které dokážou přežívat a prosperovat při teplotách nad 45 °C. Mezi slibné termofilní producenty PHA patří *Schlegelella thermodepolymerans*.

Cílem práce bylo pochopení metabolismu a utilizace různých sacharidů termofilní bakterie *S. thermodepolymerans* v závislosti na čase kultivace. V práci byly použity dva bakteriální kmeny, M 15344 a DSM 15344, a jako substráty byly použity xylóza, glukóza, celobióza a jejich kombinace. V rámci jednotlivých růstových křivek byl sledován nárůst optické hustoty, množství biomasy, produkce polyhydroxyalkanoátů a také byl stanoven průběh utilizace sacharidů, pomocí měření zbytkového sacharidu metodou HPLC. U výsledných polymerů byla také stanovena molekulová hmotnost.

Výsledky obou bakterií byly mezi sebou porovnány a vyhodnoceny. Bakterie DSM 15344 prokazovala vyšší produkci P(3HB), než kmen M 15344 a jako nejvhodnější substráty pro produkci P(3HB) se zdá být kombinace sacharidů xylózy a celobiózy, kde polyhydroxyalkanoáty dosahovaly až 52 % PHA v suché biomase. Dále se zjistilo, že bakteriální kmeny se lišily ve schopnosti utilizace sacharidů. Bakteriální kmen M 15344 byl schopen utilizovat glukózu, ale ne xylózu, kdežto u bakteriálního kmenu DSM 15344 docházelo k opačnému případu (utilizace xylózy, ale ne glukózy). Také je pozoruhodné, že kmen DSM 15344 preferuje celobiózu, která je složená ze dvou glukózových jednotek, ale glukóza mezi preferované sacharidy nepatří, což ovlivňuje růst na celobióze, protože dochází ke štěpení celobiózy i extracelulárně.

## Poděkování

Tato studie byla podpořena projektem GA22-10845S Grantové agentury České republiky (GAČR).

# Fotokatalytické kompozitní povlaky grafitického karbonitridu a siloxanového pojiva

Michael Kubát

*Ústav fyzikální a spotřební chemie, Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Brno, Česká republika, Michael.Kubat@vut.cz*

Rychlý růst urbanizace a industrializace vede k masivnímu využívání zdrojů fosilních paliv, což vyvolává rostoucí obavy z globální energetické krize a environmentálních problémů. V zájmu řešení této výzvy se neustále hledají technologie šetrné k životnímu prostředí, jako je fotokatalýza se schopností přeměny sluneční energie na chemickou. V posledních několika desetiletích byly vyvinuty a použity různé druhy fotokatalyzátorů a jedním z nich je grafitický karbonitrid (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>), který vzbudil značnou pozornost jako polovodičový materiál reagující na viditelné světlo. Díky relativně snadné syntéze za použití levných prekurzorů bohatých na dusík s vynikající tepelnou a chemickou stabilitou, úzkým zakázaným pásem (2,7 eV) a nízkou toxicitou se jeví jako zajímavá alternativa k oxidickým polovodičům (WO<sub>3</sub>, TiO<sub>2</sub>). Avšak čistý g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> má nízkou elektrickou vodivost a rychlá rekombinace nosičů náboje omezuje jeho praktické využití v elektrochemických aplikacích. Velkou výzvou je také jeho imobilizace a příprava fotokatalyticky aktivních vrstev, čímž se zabývá i tato práce.

Cílem práce bylo prostudovat možnosti přípravy vrstev grafitického karbonitridu a siloxanového pojiva, které jsou citlivé na světlo a vykazují fotokatalytický účinek na modelové polutanty. Experimentální část této práce se proto soustředila na optimalizaci kapalně formulace pro depozici vrstev grafitického karbonitridu.

Dále bylo cílem prostudovat nanosené vrstvy grafitického karbonitridu pomocí metody doctor blade a také prostudování elektrických a chemických vlastností připravených vrstev, které jsou použity jako fotoanody, pomocí choppované lineární voltametrie a chronoamperometrie. Zvláštní důraz byl kladen na efektivitu využití světla pro indukci redukčních a oxidačních účinků materiálu. Fotokatalytické aktivity grafitického karbonitridu byly sledovány pomocí úbytku fluorescencce rhodaminu B, který byl degradován pomocí záření z 365 nm LED diod. Jedna z důležitých částí byla úprava vrstev pomocí nízkoteplotního plazmatu, která by mohla zlepšit fotokatalytické vlastnosti vrstev bez nutnosti termálních úprav za vysokých teplot.

Na základě provedených měření byla potvrzena fotokatalytická aktivita vrstev připravených z kapalně formulace, která se skládala z grafitického karbonitridu (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>), siloxanového pojiva (Sibi 1 20 hm. %) a  $\alpha$ -terpineolu v poměru 3:1:1. Tato skutečnost byla demonstrována měřením fotokatalytické aktivity nanosených vrstev pomocí degradace roztoku rhodaminu B. Elektrochemická měření s využitím připravených vrstev jako fotoanody prokázala velmi nízké hodnoty fotoproudů, což si vysvětlujeme nízkou mobilitou fotogenerovaných nosičů náboje ve studovaných vrstvách. Připravené povlaky jsou tak vhodné pro fotokatalytické oxidativní procesy.

# Stanovení reziduí fosetylu a kyseliny fosforité v lyofilizovaném ovoci

*Bc. Eva Ludvíčková<sup>1</sup>, Ing. Jana Rýparová Kvirencová<sup>2</sup>, doc. Vojtěch Hrbek, PhD.<sup>2</sup>*

*Vysoké učení Technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie a technologie ochrany životního prostředí, Purkyňova 464/118, 61200 Brno, Leona.Bacovska@utbr.cz*

Fosetyl je pesticid používaný na potravinářských a krmných plodinách jako fungicid účinkující proti různým chorobám. V průběhu času může fosetyl degradovat na kyselinu fosforitou a její soli. Z tohoto důvodu je maximální limit rezidua (MRL) fosetylu vyjádřen jako suma fosetylu, kyseliny fosforité a jejích solí. Fosetyl bývá často aplikován například na jahody a další drobné červené ovoce. Zmíněné druhy ovoce jsou ve většině pouze sezónní záležitost. Pokud si konzument chce dopřát jahody po celý rok, musí využít buď čerstvé jahody z dovozu nebo mražené plody. Čerstvé jahody prodávané mimo hlavní sezónu ale často nemají očekávanou chuť zralých jahod a mají obvykle vyšší cenu. Další možností jsou mražené plody, které se ale nehodí k běžné konzumaci jako ovoce, používají se spíše na vaření nebo pečení. Alternativou, jak uchovat chuť a vzhled jahodových plodů s využitím přímé konzumace je lyofilizace.

Lyofilizace neboli sušení mrazem je moderní metoda založená na sublimaci zmrzlé vody při nízké teplotě a tlaku. Voda přestupuje z pevného skupenství přímo do plynného, aniž by došlo k přeměně na kapalnou fázi. Nedochází tak k poškození struktury suroviny vlivem vysokých teplot a ovoce si zachovává nutriční hodnotu včetně vlákniny, vitamínů a minerálů.

Lyofilizované ovoce je v posledních letech oblíbenou svačinou nejen pro dospělé, ale hlavně pro děti. Používá se do snídaňových směsí, granoly nebo dezertů. Bývá často označováno jako "zdravá" svačinka a inzerováno s obrázky dětí, které konzumují tento produkt.

Dle stávající legislativy se nálezy reziduí pesticidů v lyofilizovaném ovoci přepočítávají na původní surovinu (v tomto případě – čerstvé jahody), při lyofilizaci ale dochází ke značnému zakoncentrování zmíněných reziduí. V případě, že jsou lyofilizované jahody konzumovány přímo, může docházet k násobným příjmům reziduí pesticidů (v případě, že jsou v jahodách přítomny), což je alarmující hlavně u dětí.

Cílem práce bylo provést pilotní screening lyofilizovaného ovoce dostupného v tržní síti České republiky, a to zejména jahody a maliny. Otestovat různé způsoby přípravy čerstvých plodů před lyofilizací a ověřit hodnotu procesního faktoru mezi čerstvými a lyofilizovanými jahodami.

Pro zjištění obsahu reziduí pesticidů v čerstvých jahodách byla využita metoda pro stanovení polárních pesticidů, metodika QuPPE. Pro přípravu vzorků lyofilizovaného ovoce byla provedena optimalizace této metody extrakce. Jako analytická koncovka byla použita vysokoúčinná kapalinová chromatografie ve spojení s tandemovou hmotnostní spektrometrií (UHPLC-MS/MS).

Prvotní výsledky monitoringu lyofilizovaných plodů ukazují, že na trhu existují produkty, které mají vyšší obsah zejména kyseliny fosforité a jejích solí, proto je potřeba provést monitoring v širším měřítku a zaměřit se i na analýzu širšího spektra nejen reziduí pesticidů, ale i dalších kontaminantů.

# Je lignín odpad, alebo obnoviteľný zdroj použiteľný v energetickom priemysle?

*Matúš Majerčiak, Richard Nadányi, Aleš Ház*

*Slovenská technická univerzita v Bratislave, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav prírodných a syntetických polymérov,  
Oddelenie dreva, celulózy a papiera, Radlinského 9, 812 37 Bratislava xmajerciak@stuba.sk*

Práca pojednáva o novom experimentálnom prístupe k príprave a modifikácii lignínu s cieľom vylepšiť finálne vlastnosti. Skúmalo sa použitie rôznych druhov čiernych lúhov (ČL), ktoré obsahovali rôzne vstupné suroviny. Čierny lúh je vedľajší produkt sulfátového procesu, ktorý sa v celulózo-papierenskom priemysle používa na premenu buničiny na papierovinu. Je to vodný roztok, ktorý obsahuje zvyšky lignínu, hemicelulózu a anorganické chemikálie. V práci sa ďalej porovnávali finálne vlastnosti lignínov v závislosti od použitia rôznej koncentrácie kyseliny sírovej, ktorá sa použila pri zrážaní lignínov z ČL. Z viacerých možností prípravy lignínu sa vybral postup, kedy sa pripravil požadovaný sulfátový lignín, ktorý pochádzal z čierneho výluhu (Mondi SCP, Ružomberok). Vyrobený bol postupným okysľovaním čierneho lúhu pomocou CO<sub>2</sub>. Pri procese zrážania lignínu sa sledoval vplyv podmienok (pH a teploty) na vlastnosti lignínu. Cieľom bola optimalizácia celkového procesu a podmienok – teplota, pH pri príprave lignínu. Aby sa zjednodušila komplexná náročnosť experimentu urobil sa plánovaný experiment. Výsledky z pripravených lignínov sa porovnali a ocharakterizovali pomocou analytických metód. Z optimalizácie procesu sa vybrali najvhodnejšie parametre (pH a teplota) na prípravu finálneho lignínu (FL – lignín s najlepšimi vlastnosťami). Finálny lignín sa modifikoval pomocou rôznych modifikátorov. Tu bolo cieľom využiť chemickú modifikáciu na úpravu lignínovej matrice a tým zlepšiť jeho konečné vlastnosti. Pripravené vzorky lignínov s vybranými modifikátormi sa porovnali na základe ich fyzikálnych a chemických vlastností. Následne sa vyhodnotila účinnosť modifikačných postupov na základe dostupných analytických metód UV-Vis, Kalorimetria (HHV), Termogravimetrická analýza (TGA) a FTIR analýza. Výsledné stanovenia sa porovnali a vybrali sa ligníny s najlepšimi vlastnosťami, ktoré predstavujú vhodný základ obnoviteľného zdroja použiteľného v energetickom priemysle, alebo ako nahradzajúcu surovinu na výrobu syntetických polymérov, čo prispieje k hľadaniu trvalo udržateľných, obnoviteľných alternatívnych zdrojov.

## Podakovanie

Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja pod číslami projektov APVV-22-0388 a APVV-22-0034.

# Tenké tištěné vrstvy oxidu wolframového připravené materiálovým tiskem z vodných prekurzorů

*Eliška Martinková*

*Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav fyzikální a spotřební chemie,  
Purkyňova 118, 612 00 Brno, Česká republika, 225699@vutbr.cz*

Heterogenní katalýza je zajímavá zejména jako technologie pro odstraňování organických nečistot z vody, protože je schopna zajistit kompletní oxidativní mineralizaci široké škály organických sloučenin. Jako jeden z fotokatalyzátorů pro heterogenní katalýzu se využívá oxid wolframový.

Oxid wolframový (WO<sub>3</sub>) má šířku zakázaného pásu přibližně 2,7 eV, což umožňuje využití sluneční energie pro fotokatalýzu. Používá se tedy pro šetrné čištění vod i vzduchu, což má dobrý vliv na životní prostředí. WO<sub>3</sub> je také důležitým materiálem v elektrochromních zařízeních a chemických senzorech. Pomocí různých imobilizačních technik se nanáší na povrchy substrátů a vytváří na nich tenké transparentní vrstvy. Jeho využití můžeme najít v široké škále aplikací, například v solárních panelech, detektorech plynů, „chytrých“ oknech, displejích, fotoelektrických senzorech nebo se využívá pro fotokatalytickou dezinfekci.

Tato práce se zabývá zkoumáním fyzikálních a chemických vlastností tenkých tištěných vrstev WO<sub>3</sub>, které byly připraveny materiálovým tiskem. WO<sub>3</sub> byl připraven z vodných prekurzorů metodou bottom-up a pro výslednou kompozici byly přidány vhodné filmotvorné látky, které upravovaly vlastnosti kompozice pro inkoustový tisk. Jako filmotvorné látky byly použity polyvinylpyrrolidon, polyoxyethylen(20)cetyléther, polyethylenglykol a Pluronic 123. Z těchto tenzidů byl vybrán jeden, který byl použit pro inkoustový tisk. Tisková formulace se skládala z roztoku DoPTA, Pluronicu 123, isopropylalkoholu a isobutylalkoholu. Tyto alkoholy byly přidány kvůli snížení povrchového napětí a viskozity. Na tiskárně Dimatix byly na FTO skla vytištěny vrstvy o ploše 1 cm<sup>2</sup> s různými tloušťkami. Tyto natištěné vrstvy byly charakterizovány pomocí profilometrie a pomocí elektrochemického měření.

Na základě snímání struktury povrchu vrstev bylo potvrzeno, že vrstvy nejeví žádné známky porozity a Pluronic lze považovat za filmotvorný. U nejsilnější vrstvy byla naměřena hodnota proudové hustoty okolo 0,14 mA/cm<sup>2</sup> při osvětlení UV zářením.

# Studium vlivu faradaických reakcí na elektroporaci

*Dominik Martinů*

*Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie potravin a biotechnologií,  
Purkyňova 464/118, Královo pole, 612 00 Brno*

Elektroporace, fyzikální metoda kterou lze zvýšit permeabilitu buněčných membrán, nalézá využití v molekulární biologii, genovém inženýrství, ablaci nádorů či potravinářském průmyslu. Přestože je tato metoda běžně využívána, její mechanismus je neznámý. Podstata metody spočívá v aplikaci krátkých napěťových pulzů, obvykle v řádech stovek mikrosekund, které vyvolávají změnu ve struktuře buněčné membrány. Dochází k tvorbě hydrofilních pórů, skrz které mohou do buňky difundovat nabitě částice, či makromolekuly, které by přes fosfolipidovou dvojvrstvu jinak samovolně neprošly, nebo pouze omezeně. Látková výměna probíhá také směrem z buňky do média, přičemž ztráta intracelulárních molekul ovlivňuje viabilitu buněk

Existují studie, které jako příčinu otevření pórů přisuzují pohybu transmembránových molekul vody vlivem elektrického pole, nebo například peroxidaci lipidů ve fosfolipidové dvojvrstvě, tedy produkci reaktivních kyslíkových forem (ROS) faradaickými procesy. Tyto studie zkoumají elektroporaci z pohledu molekulární dynamiky, tedy pomocí simulací. Neexistuje však experimentální studie, která by se zabývala vlivem faradaických reakcí, přesněji ROS, na účinnost elektroporace.

Je pravděpodobné, že ROS hrají klíčovou roli při permeabilizaci buněčné membrány a spolu s elektrickým polem jsou nezbytné pro efektivní elektroporaci. Pro ověření hypotézy byly navrženy elektrody s vrstvou dielektrika, které zabráňují tvorbě ROS.

Při použití standardních elektroporačních kyvet byla spektrofotometricky potvrzena přítomnost ROS po pulzování elektrickým polem. Bylo prověřeno značné množství elektroporačních protokolů v napěťovém rozmezí 100–1000 V a délkách pulzů 5 mikrosekund až 25 milisekund. Pro srovnání byly vyrobeny kapacitní elektrody z titanu, u kterých nebyla zjištěna přítomnost reaktivních kyslíkových forem. Kapacitního charakteru elektrody bylo dosaženo anodizací jejího povrchu tj. vytvořením vrstvy oxidu daného kovu. Tato úprava povrchu umožňuje přenos elektrického pole a měla by zamezit přesunu elektronů mezi médii a kovem.

Dalším logickým krokem je porovnání efektivity elektroporace při použití elektrod, které produkují významná množství ROS a kapacitních elektrod, které jejich produkci zamezují. Výsledek by měl objasnit roli reaktivních kyslíkových forem při elektroporaci.

## Poděkování

Chtěl bych poděkovat doc. Ericovi D. Glowackimu, Ph.D., jeho výzkumné skupině; Bioelektronické materiály a systémy (CEITEC VUT), a vedoucímu mé bakalářské práce, Ing. Jiřímu Ehlichovi, Ph.D. za cenné rady a pomoc při řešení této práce.



# Vývoj analytickej metódy na detekciu a stanovenie polyaromatických uhľovodíkov, ftalátov a alkylfenolov vo vzorkách sedimentov

*Katarína Rusiňáková<sup>1</sup>, Marcel Brenkus<sup>2</sup>, Veronika Koperová Návojevová<sup>2</sup>, Agneša Szarka<sup>1</sup>, Michal Kirchner<sup>2</sup>, Svetlana Hrouzková<sup>1</sup>*

- 1) Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej chémie, Ústav analytickej chémie, xrusinakova@stuba.*
- 2 Výskumný ústav vodného hospodárstva, Odbor Národného referenčného laboratória, Oddelenie organickej chémie tŕd*

Polyaromatické uhľovodíky (PAU), ftaláty (FA) a alkylfenoly (AF) sú zlúčeniny, ktoré sú výsledkom najmä ľudskej činnosti. Dnes sú súčasťou každej zložky životného prostredia, sú silne perzistentné a tiež toxické pre živé organizmy. Rámcová smernica o vode nariaďuje štátom Európskej únie sledovať výskyt a množstvo niektorých prioritných analytov týchto skupín s cieľom zabezpečiť dobrý stav povodí. Voda je komplexnou, ale zároveň pomerne jednoducho spracovateľnou maticou a tak sa analyty skupín PAU, FA a AF stanovujú najčastejšie práve vo vode. Pri stanovení týchto analytov z vody je ale nutné vedieť spoľahlivo detegovať a stanoviť tieto látky na veľmi nízkych stopových koncentráciách. Analýza z vody zároveň nemusí vypovedať o skutočnom stave vodných tokov. Zlúčeniny skupín PAU, FA a AF sa zvyknú koncentrovať v sedimentoch na dne vodných útvarov. Práca so sedimentom nie je pre rutinné laboratória atraktívna. Vzorkovanie sedimentov je komplikovanejšie ako pri vode, predúprava vzorky si vyžaduje použitie veľkých objemov rozpúšťadiel aj času, a to je neekonomické. Za posledné roky bolo publikovaných niekoľko desiatok článkov, ktoré sa zaoberali analýzou vzoriek sedimentov. Simultánna izoláciu PAH, FA a AF ale nie je bežná]. Najčastejšie aplikovanými extrakčnými technikami sú extrakcia rozpúšťadlom a Soxhletova extrakcia, ktoré ale nedosahujú optimálne validačné parametre. Mikrovlnným zariadením a ultrazvukom podoporená extrakcia realizovaná v ultrazvukovom kúpeli sa preukázali ako účinnéjšie metódy, avšak k úspore objemov rozpúšťadla nedošlo.

Cieľom práce je vyvinúť a validovať analytickú metódu, pri ktorej by sa na izoláciu analytov zo vzoriek sedimentu použilo čo najmenej extrakčného rozpúšťadla, skrátil sa proces predúpravy vzorky a zároveň by sa dosiahli požadované validačné parametre.

Doteraz boli analyzované štandardné zmesné roztoky s koncentráciou PAU a FA 100 – 10000 ng/g a s koncentráciou AF 50 – 50 000 ng/g. Na separáciu a detekciu analytov sa používa HPLC chromatograf Agilent 1200, ktorý je vybavený detektorom diodového poľa a fluorescenčným detektorom. PAU uhľovodíky (17) a FA (2) spolu s butylovaným hydroxytoluénom (BHT), pre ktorý je na Slovensku povinný monitoring, sa separujú na kolóne ZORBAX Eclipse PAH a na separáciu

AF (4) sa používa chromatografická kolóna Arion. Vyhotovené boli kalibračné krivky, ktoré boli lineárne cez 3 dekadické rady s koeficientom determinácie R minimálne 0,99 pre všetky analyty, čo značí dobrú linearitu metódy.

#### Podakovanie

Výskum bol finančne podporený projektom OP KŽP „Monitorovanie a hodnotenie stavu vôd – III. Etapa“, ITMS 310011A366 s úlohou „Špecifické výskumné úlohy Národného referenčného laboratória pre oblasť vôd na Slovensku“ financovanou Ministerstvom životného prostredia SR a tiež agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe Zmluvy č. APVV-19-0149 a Vedeckou grantovou agentúrou MŠV VaŠ SR a SAV na základe projektu VEGA 01/0412/20.

# Příprava polymerů na bázi diketopyrrolopyrrolů (DPP) pro využití v organické elektronice

*Lukáš Solanský<sup>1</sup>, Martin Cigánek<sup>2</sup>, Jozef Krajčovič<sup>2</sup>*

- 1) Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav fyzikální a spotřební chemie, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Česká republika [Lukas.Solansky@out.cz](mailto:Lukas.Solansky@out.cz)*
- 2) Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie a technologie ochrany životního prostředí, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Česká republika*

Moderní svět je zatížen řadou výzev a jednou z nich je řešení náhrady křemíku jakožto hlavní komponenty pro výrobu polovodičových součástek jako jsou tranzistory, světlo emitující diody či solární články. Křemík se pro své polovodičové vlastnosti používá už řadu let.

Jeho výroba je ale energeticky náročná, což přináší zátěž pro životní prostředí. Dále jsou také problémem jeho fyzikální vlastnosti, jelikož je těžký, křehký a neflexibilní. Odpovědí na tyto problémy se ukázaly být organické molekuly s konjugovaným systémem dvojných vazeb, které taktéž prokazují polovodičové vlastnosti, ale na rozdíl od křemíku se dají aplikovat v tenkých vrstvách na flexibilní substráty, čímž vznikají lehké a flexibilní zařízení s širším spektrem využití.

Jednou ze skupin látek zkoumaných pro tento účel jsou polymery založené na vysoce výkonných pigmentech, jakými jsou například diketopyrrolopyrroly (DPP). Molekula DPP je široce modifikovatelná, což jí dává velký potenciál pro její možné využití.

Příprava polymerů na bázi DPP byla nejprve provedena pomocí Stilleovy reakce přes organocináté intermediáty. Syntéza intermediátů však obsahovala větší množství syntetických kroků, které byly časově náročné a pro přípravu rozsáhlých sérií nevhodné. Dále vyžadovala extrémní podmínky z hlediska teploty a použitých chemikálií, což zahrnovalo užití toxických organocinátých sloučenin. Z tohoto důvodu byl přístup přípravy změněn na přímou arylaci s využitím palladiového katalyzátoru. Došlo ke snížení počtu reakčních kroků a absence extrémních podmínek přípravy. Aktuálně se připravuje rozsáhlá série čítající celkem 25 polymerů, které se odlišují kombinací přítomných postranních alifatických řetězců a aromatických komonomerních jednotek. Na této sérii bude následně provedena studie optoelektrických vlastností.

## Poděkování

Tímto bych rád poděkoval mému vedoucímu práce Ing. Martinu Cigánkovi, Ph.D., kolegům z Ústavu fyzikální a spotřební chemie a Ústavu chemie a technologie ochrany životního prostředí, Fakultě chemické a rodině za psychickou a materiální podporu při konání této práce.

# Establishment of luxAB-based Bioluminescence HTP Assay for Screening of Monooxygenases

Berenika Štloukalová<sup>1</sup>, Andrea Nigl<sup>1,2</sup>, Jelena Spasic<sup>1</sup>, Robert Kourist<sup>1</sup>

1) Graz University of Technology, Institute of Molecular Biotechnology, Petersgasse 14, 8010 Graz, Austria, xstloukalova@stuba.sk

2) acib GmbH - Austrian Centre of Industrial Biotechnology, Petersgasse 14, 8010 Graz, Austria

Well established high-throughput screening (HTS) assays are a cornerstone for the enzyme characterisation, directed evolution and protein engineering. This project aims to develop such an assay for the screening of alkane monooxygenases. The focus of this study is an alkane monooxygenase system from *Pseudomonas putida* GPo1 (AlkBGT). Among many chemically interesting reactions, this system catalyses the  $\omega$ -oxygenation of medium-chain alkanes. Its regio- and stereoselectivity, together with its broad substrate spectrum, makes it attractive for the synthesis of fine chemicals and building block compounds for the polymer production from renewable feedstock. For the efficient screening of the engineered AlkB variants, the AlkBGT system was coupled to the bioluminescence luxAB-based sensor system from *Photobacterium luminescens* by the alcohol dehydrogenase AlkJ (*P. putida* GPo1), for the *in vivo* detection of aldehydes.

The AlkBGT system, AlkJ and luxAB were successfully expressed in *E. coli* RARE, together with the transporter protein AlkL (*P. putida* GPo1). The co-expression of AlkBGT, AlkL, AlkJ and luxAB was successful in small-scale (50 ml) expression tests. To increase the assay throughput the expression was optimised and downscaled to deep-well plates. The assay could then be performed directly in the cultivation medium, greatly simplifying the screening process. Herin, the artificial enzyme cascade was tested on alkanes (n-octane, n-dodecane and n-tetradecane). To increase the uptake of longer substrates, the effect of using cell-permeabilising agents was shown. In addition to this, a positive effect of the AlkL transporter co-expression on substrate uptake was reported. Several technical aspects of the assay were fine-tuned. The assay was finally applied on the characterisation of the selected AlkB variants and homologs. Differences between the wildtype and mutant strains could be observed in the screening.

In the current state, our luxAB-based bioluminescence HTS assay is suitable for the identification of new AlkB homologs. It can also be employed to uncover alkane monooxygenases' substrate scope or the influence of different transporters on substrate uptake in whole-cell systems. To apply the screening assay to distinguish improved monooxygenase variants, the method requires further optimisation to increase its sensitivity. Finally, the substrate independent HTS assay can open the doors for further engineering and industrial applications of these enzymes.

## Acknowledgement

This study was funded by FFG – COMET Austria.

# Nové deriváty diketopyrrolo[2,3-f] indolu (DPI) pro organickou elektroniku

*Jiří Šípek<sup>1</sup>, Martin Cigánek<sup>1</sup>, Josef Krajčovič<sup>1</sup>*

*1) Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie a technologie ochrany životního prostředí, Purkyňova 464/118, 61200 Brno Jiri.Sipek@vut.cz*

V 21. století jsou mimo jiné celosvětovým tématem energie a jejich cena. V současné době je stále dominantní zisk energie z neobnovitelných zdrojů jako je například uhlí či zemní plyn. Od neobnovitelných zdrojů se však pomalu upouští, a v otázce obnovitelné energie přicházejí na scénu alternativy z oblasti organické elektroniky a fotoniky v podobě nových technologií. Technologie, ve kterých se organické polovodiče uplatňují, najdeme například v organických polem řízených tranzistorech (OFET), v organických solárních článcích (OSC) nebo organických světlo-emitujících diodách (OLED).

I přes to, že výkonem stále dominují křemíkové technologie, organické polovodiče se stále více přibližují a těší velkému zájmu z důvodu jejich zcela výjimečným vlastnostem, jakou jsou levná příprava, nízká hmotnost, mechanická flexibilita, snadné zpracování, vyladění funkcí molekulárním designem a bohatá dostupnost ve srovnání s anorganickými materiály.

Právě molekula diketopyrroloindolu (DPI), systematickým názvem 1,3,4,6-tetrarpylpyrrolo[3,2-b]-pyrrol-2,5-dion, která se řadí do skupiny vysoce-výkonných organických pigmentů a barviv, vykazuje slibnou výkonnost v technologiích organické elektroniky, jako jsou organické tenkovrstvé tranzistory a organické solární články.

Práce se zaměřuje na přípravu základního skeletu molekuly DPI tříkrokovou syntetickou cestou a následné přípravě série N,N'-alkylovaných derivátů DPI mechanismem nukleofilní substituce (SN<sub>2</sub>). Byly úspěšně připraveny 3 výsledné produkty: s rozvětveným postranním řetězcem 2-ethylhexylem, a 2 nové dosud nepopsané deriváty s lineárním dodecylovým řetězcem a objemným adamantylovým substituentem. Připravené produkty budou studovány z pohledu základní charakterizace jak fyzikálně-chemických vlastností, tak jejich funkcionality v dříve uvedených technologiích organické elektroniky.

Poděkování

Rád bych poděkoval vedoucímu práce doktoru Martinu Cigánkovi, Laboratoři syntéz pokročilých materiálů, Ústavu chemie a technologie ochrany životního prostředí a Fakultě chemické za možnost realizace této práce.

# Cielovo-špecifická izolácia biomarkerov pomocou modifikovaných povrchov

Viktória Štefancová, Lucia Uhelská, Petra Babiaková, Veronika Némethová, Filip Rázga

*Selecta Biotech SE, Istrijská 6094/20, 841 07 Bratislava, Slovenská republika,  
xstefancovav@stuba.sk*

Analýza klinicky relevantných biomarkerov u onkologických ochorení je v mnohých ohľadoch kritická, nakoľko sú zo svojej podstaty častokrát vysoko heterogénne, dynamicky sa meniace a rýchlo progredujúce, a preto je dôležitá ich včasná diagnostika. Jednou z diagnóz, u ktorej bol identifikovaný a validovaný špecifický biomarker, BCR-ABL1 onkogén, je chronická myeloidná leukémia.

Analýza prítomnosti a množstva BCR-ABL1 mRNA sa uskutočňuje pomocou metodiky využívajúcej polymerázovú reťazovú reakciu s monitorovaním v reálnom čase (RT-qPCR). Ako vstupný materiál pre RT-qPCR analýzu sa štandardne používa celková RNA, avšak konkrétna klinicky relevantná BCR-ABL1 mRNA predstavuje len zanedbateľnú frakciu celkovej RNA, čo v konečnom dôsledku znamená, že materiál vstupujúci do RT-qPCR analýzy je značne nariadený. Súčasný stav techniky tak otvára priestor pre nové metodické postupy, ktoré by umožnili cieľnú izoláciu konkrétnych biomarkerov v purifikovanej podobe bez prítomnosti klinicky nerelevantných molekúl. Táto práca takýto izolačný postup prináša.

Originálny izolačný postup popísaný v tejto práci je založený na účelovej modifikácii povrchu SiO<sub>2</sub> a Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanočastic sondou s názvom ASP210. ASP210 je vysoko-špecifický terapeutický oligonukleotid vyvinutý pre selektívnu inhibíciu BCR-ABL1 mRNA a v tejto práci bol použitý ako zachytávací sonda.

Robustnosť predmetného popísaného izolačného postupu bola testovaná na diametrálne odlišných platformách nanočastic, z ktorých každá prináša do procesu izolácie jedinečné benefity, ako aj úskalia. Každá platforma bola testovaná v dvoch nezávislých postupoch, kedy sa 1) najprv biotínom funkcionalizovaná ASP210 sonda nechala naviazať na biomarker, a následne sa takto vytvorený duplex izoloval prostredníctvom väzby na streptavidínom modifikovaný povrch nanočastice, alebo 2) najprv sa biotínom funkcionalizovaná ASP210 sonda imobilizovala na streptavidínom modifikovaný povrch nanočastice, a následne sa biomarker zachytával na sondou modifikovanej častici.

Pre vybraný metodický postup bola účinnosť izolácie stanovená pri koncentráciách analytu v rozsahu 103 - 107 molekúl/ $\mu$ L, a to samostatne, ako aj v modelovej zmesi.

Použitie SiO<sub>2</sub> nanočastic viedlo k takmer kvantitatívnej izolácii biomarkeru bez ohľadu na zvolený metodický postup, v prípade Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanočastic bola výsledná efektívnosť o viac ako 35% nižšia. V každom prípade, obe testované platformy nanočastic a oba testované postupy umožnili izoláciu biomarkeru, čo by mohlo aj

pri najnižšom dosiahnutom čiastkovom výsledku izolácie ~20% stále predstavovať výrazné, ~10 000-násobné, zvýšenie citlivosti nadväzujúcich diagnostických analýz oproti súčasným postupom využívajúcim ako vstupný materiál celkovú RNA.

**Kľúčové slová:** Chronická myeloidná leukémia; biomarker; nanočastica; izolácia RNA

**Podakovanie**

Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmlúv č. APVV-15-0215, APVV-19-0070 a grantom VEGA č. 1/0069/20.

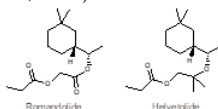
# SYNTHESIS AND PROPERTIES OF SMALL-RING ANALOGUES OF ROMANDOLIDE

Michaela Tóthová<sup>1</sup>, Artem Nikipelov<sup>1</sup>, Vladimír Dacho<sup>1</sup>, Philip Kraft<sup>2</sup>,  
and Peter Szolcsányi

1) Slovak University of Technology, Department of Organic Chemistry, Radlinského 9,  
SK-812 37, Bratislava, Slovakia; xtothovam2@stuba.sk

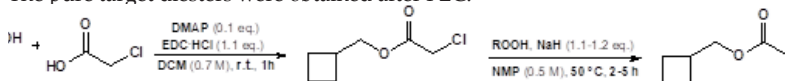
2) Symrise AG, S&C Global Innovation Fragrances, New Molecules Synthesis, Building  
D 209, Mühlenfeldstr. 1, DE-37603 Holzminden, Germany

Romandolide, prominent member of linear musks family was discovered by replacing the gem-dimethyl moiety of Helvetolide with a carbonyl group. Possessing fruity, musky character with a camphor nuance, with its threshold of 0.4 ng/L air, Romandolide found its place in perfumes like 'Murmure' (Van Cleef & Arpels, 2002) or 'Absolu' (Rochas, 2002).



Despite the vast effort on the SAR studies in this area, only one report deals with the effect of contraction and/or expansion of cyclohexane ring of Romandolide. In order to scrutinize the effect of ring size on the olfactory properties of such homologues, 5-, 7- and 8-membered ring analogues have been prepared. The result of previous study showed, however, that none of the newly prepared molecules emanated any musky scent, which could lead to the assumption that (substituted) 6-membered ring is crucial for muskiness of Romandolide. However, analogous 3- and/or 4-membered rings have not been prepared. Therefore, we decided to scrutinise the effect of cyclobutane analogues of aforementioned molecule and evaluate their fragrance.

Synthesis of designed targets started with Steglich esterification of commercially available cyclobutylmethanol with chloroacetic acid in the presence of water-soluble carbodiimide (EDC.HCl) and DMAP as a catalyst. The pure chloroester was obtained after vacuum distillation. Subsequently, this common intermediate underwent a series of parallel SN reactions with various in situ made carboxylates. The pure target diesters were obtained after FLC.





The sensory evaluation by panel of trained perfumers (Symrise Ltd.) showed that none of our molecules emanated musky scent. However, they weren't left scentless, all the products possessed pleasant fragrance, mostly with fruity, chocolate and banana notes.

#### Acknowledgement

This research was funded by the Grant Agency of the Slovak Republic (VEGA 1/0162/20).

# Termodynamika štiepenia O–C väzby metoxylovej skupiny v izoflavónoch

*Veronika Vanková, Erik Klein, Monika Biela*

*Ústav fyzikálnej chémie a chemickej fyziky, Oddelenie fyzikálnej chémie, FCHPT STU v Bratislave, Radlinského 9, 812 37, Bratislava*

Izoflavóny sú prírodné zlúčeniny, ktoré sa vyskytujú v rastlinách, najmä v sójových bôboch a ich produktoch. Vďaka antioxidantným účinkom izoflavónov môže mať pravidelná konzumácia potravín bohatých na izoflavóny mnohé zdravotné výhody. Patria do skupiny flavonoidov.

Na rozdiel od flavónov je v izoflavónoch kruh B pripojený k atómu C3. Táto zmena bodu pripojenia kruhu B z uhlíka C2 na uhlík C3 preruší  $\pi$ -konjugáciu v celej molekule v dôsledku neplanárnej štruktúry izoflavónov. V porovnaní s flavonolmi potom chýbajúca OH skupina na atóme C3 môže obmedzovať ich schopnosť zachytávať radikály.

Ich molekuly často obsahujú jednu alebo viaceré metoxylové a rôzny počet hydroxylových skupín naviazaných na aromatických kruhoch. Prítomné hydroxylové skupiny zodpovedajú za ich antioxidantný účinok. Hoci je úloha hydroxylových skupín rôznych flavonoidov v súčasnosti pomerne detailne preskúmaná, pozornosť metoxylovým skupinám sa v doterajšom výskume nevenovala napriek faktu, že O–C väzba v metoxylovej skupine je slabšia ako O–H väzba fenolových OH skupín.

V oblasti teoretického výskumu látok sú veľmi užitočné kvantovochemické metódy, ktoré umožňujú získať aj informácie, ktoré zatiaľ nie sú experimentálne dostupné. Tieto metódy umožňujú detailné skúmanie štruktúry, termodynamiky a kinetiky pôsobenia antioxidantov v rôznych prostrediach. Ich účinok a dominantný mechanizmus pôsobenia výrazne ovplyvňuje prostredie.

Zamerali sme sa na výpočty reakčných entalpií pre homolytické štiepenie O–C väzby metoxylových skupín v prostredí vody. Výpočty sme uskutočnili prostredníctvom metódy funkcionálu elektrónovej hustoty B3LYP s bázou funkcií atómových orbitálov 6-311++G\*\*. Efekt rozpúšťadla sme do výpočtov zahrnuli pomocou IEF-PCM prístupu. Entalpie disociácie O–C väzieb sme vypočítali pre skúmané izoflavóny, ich termodynamicky preferované anióny a dianióny. Zvolená skupina zlúčenín umožnila posúdiť efekt štruktúrnych odlišností jednotlivých izoflavónov a ich deprotonizovaných foriem na entalpie disociácie O–C skupín. Vypočítané reakčné entalpie sme porovnali aj s entalpiami disociácie O–H väzieb skúmaných izoflavónov, ich aniónov a dianiónov dostupnými v literatúre.

PodĎekování

Tento príspevok vznikol s podporou projektov VEGA 1/0461/21 a APVV-19-0024.

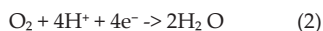
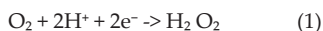
# Elektrochemické děje na neurostimulačních elektrodách

Čeněk Vašíček

*Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav fyzikální a spotřební chemie,  
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno-Královo Pole, Cenek.Vasicek@ceitec.vut.cz*

Slitina platiny a iridia se řadí k běžně využívaným materiálům v medicínské praxi, převážně v oblastech elektrické stimulace. Pro tento materiál byly zkoumány elektrochemické děje, které mohou při využití neurostimulačních protokolů nevratně probíhat, obzvláště pak reakce, při nichž dochází k redukci kyslíku (Oxygen Reduction Reaction – ORR).

Kyslík se může redukovat na vodu nebo peroxid vodíku pomocí 2- nebo 4elektronových chemických reakcí:



Peroxid vodíku se v nižších koncentracích vyskytuje v tkáních, kde slouží jako signální molekula. Během ORR dochází ke změně těchto koncentrací, přičemž následná akumulace peroxidu vodíku, lokální pokles koncentrace kyslíku, případně až hypoxie mohou být nežádoucím efektem neurostimulace, čímž může dojít k poškození nervové tkáně nebo k buněčné smrti.

Cílem je prověřit závažnost těchto dějů a kvantifikovat změny koncentrací kyslíku a peroxidu vodíku v blízkosti povrchu elektrody v různých elektrolytech s použitím stimulačních protokolů ve stejnosměrném a střídavém proudovém režimu.

## Poděkování

Chtěl bych poděkovat vedoucímu své bakalářské práce Ing. Jiřímu Ehlichovi, Ph.D., doc. Ericu Glowackimu, Ph.D. a jeho výzkumné skupině Bioelektronické materiály a systémy (CEITEC VUT) a M.Sc. Amedeu Ruggierovi za spolupráci, pomoc a rady při výzkumu a řešení problematiky týkající se této práce.

# Syntéza stavebních bloků pro bio-inspirovanou organickou elektroniku

*Vojtěch Viceník<sup>1</sup>, Mgr. Jan Richtár Ph.D.<sup>2</sup>,  
prof. Ing. Jozef Krajčovič Ph.D.<sup>2</sup>*

- 1) Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav fyzikální a spotřební chemie, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Česká republika, xvicen09@vutbr.cz*
- 2) Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie a technologie ochrany životního prostředí, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Česká republika*

Elektronika založená na křemíkových polovodičích je již desítky let nedílnou součástí běžného života. Její použití je ale v některých oblastech omezené. Její funkci v těchto případech může doplnit organická elektronika. Místo běžně používaných materiálů se využívá specificky upravených organických molekul, které mohou nahradit funkci vodičů, polovodičů nebo senzorů. Tímto organická elektronika představuje dynamicky se rozvíjející obor v mnoha oblastech, zejména pak energetiky a medicíny. Bio-inspirované materiály v organické elektronice nacházejí stále větší uplatnění díky předpokladu biokompatibility, specifické modifikovatelnosti a funkcionality vycházející z jejich rolí v přírodě. Flaviny představují jednu ze tříd těchto bio-inspirovaných materiálů. Tyto deriváty riboflavinu (vitamínu B2) své optické a redoxní vlastnosti získávají díky struktuře izoalloxazinu. Díky všestranné uplatnitelnosti těchto materiálů je potřeba nalézt univerzálnější syntetické cesty, kterými bude možné připravit široké spektrum struktur s požadovanými vlastnostmi

Tento příspěvek se zabývá syntézou 1,2-diketonů jakožto prekurzorů pro syntézu substituovaných nekondenzovaných flavinových derivátů. Pro syntézu těchto prekurzorů byly zvoleny tři syntetické metody jejich syntézy: Sonogahirova cross-couplingová reakce s následnou oxidací trojné vazby, Friedel-Craftsova acylace a benzoinová kondenzace. Tyto syntetické cesty byly ověřeny s využitím různých reakčních podmínek, jednotlivé intermediáty a cílové molekuly purifikovány a jednotlivé přístupy byly kriticky zhodnoceny. V poslední fázi byl z připraveného 1,2-diketonu syntetizován N-substituovaný nekondenzovaný flavin.

# Simulace pohybu léčivých nanočástic ve 2D modelu srdce

*Matouš Vrána, Darya Zhurauliova, Miloslav Pekař*

*Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 464/118, 602 00 Brno, Česká republika, korespondenční autor: Matous.Vrana@vut.cz*

V současné době projevují farmaceutické společnosti všeobecně velký zájem a co nejpřesnější zacílení léčivých látek za účelem optimalizace dávkování a dosažení co nejefektivnějšího využití v cílové oblasti. Mezi nejčtenější důvody tohoto zájmu se pak čítá snaha o snížení případné toxicity látky pro celý organismus a o omezení nákladů na vývoj nových látek. Takto přesného zacílení lze dosáhnout pomocí tzv. „chytrých nanočástic“, které jsou schopny uvolňovat léčivou látku na základě specifické afinity v aktivně postiženém místě.

Program COMSOL Multiphysics umožňuje kombinovat, a po vytvoření modelu simulovat co nejpřesnější reakce na okolí a fyzikální vlivy v rámci srdce. Je schopen napodobit pravděpodobné chování jednotlivých částic, což bylo také sledováno.

V samotném modelu byly nejprve nastaveny parametry pro jednotlivé části modelu, zejména geometrie, vlastnosti materiálů, tlak a velikost částic. Difusní koeficient krve byl nastaven podle provedené studie. [1] Následně byly využity fyzikálně-výpočetní moduly „Transport of Diluted species (tds)“, „Laminar Flow (spf)“ a „Particle Tracing for Fluid Flow (fpt)“ aby bylo možno sledovat přirozený tok jednotlivých částic napříč modelem srdce. Pomocí tohoto modelu je možné určit rychlost průtoku jednotlivých částic srdcem. Alternativně může být, na základě tohoto modelu, vytvořen i model, ve kterém bude možné definovat aktivně postižená místa, která jsou schopna vázat případné léčivé nanočástice.

*Sekce studentů doktorských  
studijních programů*

*Tématický okruh vědy o živé přírodě a environmentální  
vědy*

# SERS-TAGs: Selective immobilization and detection of bacteria using specific antibodies and surface-enhanced Raman scattering

*Markéta Benešová<sup>1,2</sup>, Zdeněk Pilát<sup>2</sup>, Silvie Bernátová<sup>2</sup>, Ota Samek<sup>2</sup>,  
Martin Kizovský<sup>2</sup>*

*1) Faculty of chemistry, Brno university of technology, Biophysical chemistry, Purkyňova  
464/118, 612 00 Brno Czech Republic, xcbenesovama@outbr.cz*

*2) Institute of Scientific Instruments of the CAS, Biophotonics and Optofluidics,  
Královopolská 147, 612 00 Brno-Královo Pole Czech Republic*

In clinical practice, the treatment of infections is frequently complicated by the resistance of microorganisms to antibiotics. Since the development of new antibiotics is limited it's difficult to fight against multiresistant strains of infectious bacteria, so-called superbugs. The effective lifetime of antibiotics can be shortened by using broad-spectrum antibiotics. The overuse of these antibiotics can be avoided with improved diagnostics of clinically relevant pathogens.

The non-destructive analytical technique called Raman spectroscopy (RS) is based on Raman scattering. RS is considered an emerging alternative method for the identification of pathogenic bacteria. The main drawback of RS is its low sensitivity which can cause the inability to effectively detect the pathogen. Improvement of the signal intensity can be achieved by advanced RS modifications such as surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) that allows Raman signal amplification by several orders of magnitude due to plasmonic features of metal nanoparticles or nanostructured metal surfaces.

The short range of SERS (below 5 nm) presents a significant disadvantage in the direct use of SERS substrates for the identification of live bacteria since the majority of SERS signals originate only from the cell wall. Inter-species differences in the cell wall composition are usually insufficient for reliable identification of the bacterial pathogen using SERS.

There is a specific form of detection of microorganisms through SERS that uses Raman active labels so-called SERS-tags which are based on modified gold (Au) nanoparticles. SERS-tags are used due to their selectivity, biocompatibility, high electron density, water solubility, and stability. The selectivity of SERS-tags is based on the combination of gold nanoparticles with strain-specific antibodies. The surface of gold nanoparticles is also modified with Raman reporter molecules which have intensive and specific responses in the Raman spectrum. The signal of Raman reporters is amplified when multiple gold nanoparticles are attached to the surface of the bacterial cell. In these conditions, so-called hotspots are formed between the nanoparticles, which results in the amplification of the Raman spectra of the reporters using SERS. The specificity of SERS-tags can be modified by the type

of antibody on their surface. The antibodies react with specific antigens in complex biological systems such as bacteria or other microorganisms. SERS-tags can be combined with nanoparticle-based magnetic separation or gold-covered glass chip modified with antibodies, for tandem immobilization and detection of pathogens.

In our experiments, we realized the so-called sandwich immunoassay for *Escherichia coli* detection by a combination of anti-*E. coli*-antibody-based immobilization of *E. coli* cells on a gold-covered glass chip, followed by a selective tagging of the immobilized *E. coli* with the SERS-tags prepared from gold nanorods surface modified by an anti-*E. coli* antibody and a Raman reporter 5,5'-dithiobis-2-nitrobenzoic acid (DTNB).

The arrangement of our SERS-labeled nanoprobe enables sensitive, selective, and rapid identification of bacteria especially for advanced medical diagnostics. The described sandwich immunoassay can be easily implemented on a microfluidic platform, allowing automation of the analytical procedure. In addition, the use of several SERS-tags with different antibodies and reporter molecules enables the simultaneous identification of several bacterial strains in the studied sample.



# Plasma Activated Water: A Promising Approach to Sustainable Agriculture

*Ludmila Čechová<sup>1,2</sup>, Daniel Holub<sup>1,3</sup>, Kristína Trebulová<sup>2</sup>,  
Kateřina Lišková<sup>2</sup>, Tomáš Vozár<sup>2</sup>, Pavel Pořízka<sup>1,3</sup>, František Krčma<sup>2</sup>,  
Zdenka Kozáková<sup>2</sup>, Jozef Kaiser<sup>1,3</sup>*

*1) Central European Institute of Technology, Brno University of Technology, Purkyňova 123, 612 00 Brno, Czech Republic, email of corresponding author: ludmila.cechova@vut.cz*

*2) Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118/464, 612 00 Brno, Czech Republic*

*3) Faculty of Mechanical Engineering, Brno University of Technology, Technická 2896/2 616 69 Brno, Czech Republic*

Plasma Activated Water (PAW) has recently come to the forefront of new cold plasma applications. Based on the cold plasma treatment of water, it can gain new properties, such as antibacterial effect or stimulation of plant growth. Apart from short-lived reactive oxygen and nitrogen species (RONS), such as  $\text{NO}\cdot$ ,  $\cdot\text{OH}$  or  $\cdot\text{O}_2^-$ , which are present in the plasma, long-lived RONS, such as hydrogen peroxide, nitrites, and nitrates, can be present in the water treated by cold plasma. These RONS are responsible for PAW properties. Thanks to these properties, PAW can be a new and environmentally friendly tool to increase germination of seeds and subsequently, to increase and sustain agricultural production, while it may also protect the seeds from bacteria.

In this work, PAW was utilized to increase the germination of maize (*Zea mays*) and growth of radish (*Raphanus sativus*). Apart of the study of increased germination and plant growth, effect of PAW on growth of plants contaminated with heavy metals was studied. In a short-term toxicity test, *Cannabis sativa* was grown in hydroponic medium consisting of PAW and different concentrations of cadmium and lead. Solutions of cadmium and lead in distilled water were used as a negative control. The effect of PAW was assessed by toxicological tests, and the distribution of heavy metals in plants was studied by the means of Laser-induced Breakdown Spectrometry (LIBS).

## Acknowledgement

This work was carried out with the support of grant number FCH/FSI-J-23-8250 (Brno University of Technology).

# Quantification and Spatial Distribution of Enrofloxacin in Earthworms after its Uptake from Contaminated Soil

*Jan Fučík<sup>1</sup>, Rea Jarošová<sup>2</sup>, Andreas Baumeister<sup>3</sup>, Sascha Rexroth<sup>3</sup>,  
Jitka Navrkalová<sup>1</sup>, Anna Amrichová<sup>1</sup>, Marie Hamplová<sup>1</sup>,  
Marián Sedlář<sup>4</sup>, Helena Gargošová Zlámalová<sup>1</sup>, Ludmila Mravcová<sup>1</sup>*

*1) Institute of Environmental Chemistry, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic*

*2) Veterinary Research Institute Brno, Hudcova 296/70 , 621 00 Brno, Czech Republic*

*3) Shimadzu Europa GmbH, Albert-Hahn-Straße 6, 472 69 Duisburg, Germany*

*4) CEITEC Brno University of Technology, Purkyňova 656/123, 612 00 Brno, Czech Republic*

A range of pharmaceuticals plays a key role in the management of diseases. However, up to 90% of the drug dosage can be excreted in the form of faeces or urine. These residues may subsequently enter the soil environment, e.g. through irrigation with wastewater, application of animal manure, or treated sewage sludge. Studies have shown that crops grown in contaminated soil may contain trace amounts of drug residues, raising concerns about the potential human health risks associated with long-term dietary intake of these substances and the development of antibiotic-resistance genes. Currently, it is estimated that around 1.2 million deaths worldwide and another 2.6 to 4.8 million are associated with AMR; by 2050, this number will rise to 10 million deaths per year. Furthermore, studies suggest that uptake of these compounds by earthworms can occur, which raises concerns about the potential decrease in soil quality and secondary poisoning of their predators.

Although many studies have focussed on the investigation of the fate of veterinary antibiotics in terrestrial environments, there is still a lack of knowledge on the uptake of these compounds and their metabolites by plants and soil organisms; therefore, potential environmental and health risks are not investigated thoroughly. Some studies have also suggested that these compounds could also be removed from animal manure or soil by vermicomposting (ex-situ vermiremediation).

Therefore, this novel work focussed on the quantification of enrofloxacin in earthworms after its uptake in contaminated soil environment (sampling after 1; 3 and 5 days of exposure) via extraction using the QuEChERS method, followed by LC-ESI-TQ analysis. Furthermore, the mechanism of earthworm uptake was investigated by MALDI-TOF analysis, specifically by characterising the spatial distribution of enrofloxacin within the earthworm tissue. In addition, metabolic changes in earthworms due to soil contamination were investigated by complementary mass spectrometry analyses (LC-ESI-qTOF and MALDI-TOF).

### Acknowledgement

This research was measured within the Lab4you Shimadzu student program in 2022. Furthermore, this research was financially supported by the Ministry of Education, Youth, and Sports of the Czech Republic (Project No. FCH-S-23-8297) and by Project No. VÚVeL MZE RO0523.

# INTERACTION OF PLATINUM DERIVATIVES WITH CANCEROUS CELLS

*Simona Kožnarová<sup>1,2</sup>, Michaela Vašínová Galiová<sup>1,2</sup>, Roman Hrstka<sup>3</sup>*

*1) Institute of Chemistry and Technology of Environmental Protection, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic, Simona.Koznarova@vut.cz*

*2) BIC Brno, Technology Innovation Transfer Chamber, Purkyňova 125, 612 00, Brno, Czech Republic*

*3) Research Center for Applied Molecular Oncology (RECAMO), Masaryk Memorial Cancer Institute, Žlutý kopec 7, 656 53, Brno, Czech Republic*

Exosomes are a type of extracellular vesicles that provide a form of cell-to-cell communication. Their role in the interaction between the cancer cells and platinum derivatives is not well known yet. However, exosomes have been found to have a role in the efflux of platinum derivatives from cells. The aim of this work was the confirmation of existing scientific hypotheses and the refinement of these hypotheses in the light of new information. The influence of the concentration of the drug and the duration of the treatment on the uptake and efflux of platinum by the cells was the subject of the study. All experiments were performed on ovarian adenocarcinoma cell lines. A2780 was selected to represent the treatment-sensitive line, A2780cis has acquired resistance and as the naturally resistant line SK-OV-3 was used.

Solution nebulization inductively coupled plasma mass spectrometry (SN ICP MS) was used to analyze the exosome and cell samples. Depending on the concentration of the drug in the treatment, both influx and efflux of the drug follow a linear trend. While the sensitive line excreted about 50 % of the drug at all concentrations, the two resistant lines effluxed up to 90 % of the drug. The dependency on the duration of the treatment reveals that the cells start to secrete more of the drug via the exosomes after 12 hours, but more research is necessary for better understanding on this issue.

Laser ablation inductively coupled plasma mass spectrometry (LA-ICP-MS) was used for 2D imaging, especially for the visualization of the spatial distribution of platinum. The obtained results showed that platinum accumulates in the regions of the cell nuclei. LA-ICP-MS was also used for bulk analysis of single cells. The measurements confirmed the linearity of the trend in the dependence of the amount of platinum in the cells on the concentration of the chemotherapeutic agent during treatment.

## Acknowledgement

The work was supported by the project FCH S 23 8297 of Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic and by the Czech Science Foundation Project No. EXPRO 19 29124X at the BIC Brno.

# Biochar as an Effective Material for the Development of Miniaturized Sensors for Water Decontamination

*Timea Ema Krajčovičová<sup>1</sup>, Veronika Svitková<sup>1</sup>, Michal Hatala<sup>2</sup>,  
Pavol Gemeiner<sup>2</sup>, Katarína Nemčeková<sup>1</sup>, Miroslav Gál<sup>1</sup>, Ján Híveš<sup>1</sup>,  
Tomáš Mackuľak<sup>3</sup>*

*1) Department of Inorganic Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia; timea.krajcovicova@stuba.sk*

*2) Department of Graphic Arts, Technology and Applied Photochemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37, Bratislava, Slovakia*

*3) Department of Environmental Engineering, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia*

Biochar, a carbonaceous material resulting from the thermal decomposition of organic biomass under oxygen-limited conditions, is on the rise as a significant player in various technological fields, namely, agriculture, environmental remediation, energy storage and electrochemistry. Given its origin, biochar is often presented as a versatile alternative to traditional carbon-based materials, which, despite the diversity of their applications, all share the same disadvantages – their dependence on fossil fuels and energy-demanding synthesis. The versatility of biochar lies in its ability to be customized to suit specific applications by influencing the preparation method and feedstock composition. The synthesis of biochar results in a highly stable material, with distinctive structural characteristics such as high surface area, porosity, and an abundance of surface functional groups. These qualities indicate excellent sorption capabilities of this material; therefore, it can find promising use in the issue of water system pollution.

Micropollutants in water systems include a wide range of chemicals from personal care products, pharmaceuticals, pathogens, and household chemicals, such as biocides, pesticides, and surfactants. The main goal of this work is the use of biochar as a functional eco material for the removal of micropollutants in wastewater and the determination of its sorption capacity. Adsorptive removal of micropollutants typically relies on physical adsorption, however, this work shows, that, the application of an electrochemical potential may significantly improve biochar's abilities as an adsorbent, achieving a similar or even greater pollutant removal rate in just minutes, compared to hours of physical adsorption. The effective removal of various micropollutants from water systems is achieved using an electrochemical sensor, mirroring the appearance of screen printed electrodes.

Moreover, a future goal for this work goal is to develop a flow-through simultaneous system for their real-time pollutant removal and monitoring.

## Acknowledgement

This work is supported by the Operational Program Integrated Infrastructure for the project: „Strategic research in the field of SMART monitoring, treatment and preventive protection against coronavirus (SARS-CoV-2)“, Project no. 313011ASS8, co-financed by the European Regional Development Fund.; by the project BIN SGS02\_2021\_001 funded under the Norway Grants 2014-2021 and co-funded by state budget of the Slovak Republic, by the project under the Call-3B TRONDHEIM for water pollution submitted under the Programme CZ- ENVIRONMENT financed from Norway Grants 2014-2021, and by the STU Grant scheme for Support of Excellent Teams of Young Researchers under acronym „BIOCHAR“.

# Study of IFI16 Protein Binding to DNA G-quadruplex Secondary Structure

*Libuše Kratochvilová<sup>1,2\*</sup>, Natália Valková<sup>2</sup>, Václav Brázda<sup>1,2</sup>*

*1) Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Department of Food Chemistry and Biotechnology, Purkyňova 118, 61200 Brno, Czech Republic; Libuse.Kratochvilova@vut.cz*

*2) Institute of Biophysics of the Czech Academy of Sciences, Department of Biophysical Chemistry and Molecular Oncology, Královopolská 135, 61265 Brno, Czech Republic; kratochvilova@ibp.cz*

Interferon-gamma-induced protein 16 (IFI16) belongs to the highly homologous mammalian HIN-200 protein family. The IFI16 protein contains two tandemly located C-terminal DNA binding HIN domains and an N-terminal PYRIN domain. Both HIN domains show a highly conserved topology with a different surface charge distribution that affects their binding to DNA [1]. The HIN domains of the IFI16 protein interact *in vitro* with both ssDNA and dsDNA through electrostatic interactions that are affected by salt concentrations [2], with the full-length IFI16 protein showing structure-specific binding to the G-quadruplex (G4) secondary structure [1, 2]. G4s are non-canonical local structures of DNA (or RNA) that readily form under physiological conditions in important regulatory regions of the genome or are part of the genomes of viruses and pathogens [3].

In this study, the binding of the IFI16 protein to DNA was analyzed. We tested G4 sequence from Kaposi's sarcoma-associated herpesvirus (KSHV) and its mutant variants where one, two or three guanine tracks were replaced with adenine (KSHV-1no, KSHV-2no, and KSHV-3no). The biophysical characterization of the formation of secondary structures was tested by CD spectroscopy, the ThT assay, and electrophoretic mobility shift tests in a physiological environment without and with the addition of stabilizing potassium ions. The binding properties of the IFI16 protein to the formed DNA structures were studied *in vitro* (through binding and competitive binding EMSA) and *in vivo* (by functional assays in a yeast isogenic system).

The results show that the analyzed sequences form G4 structures *in vitro*. However, compared to original KSHV derived sequence which form intramolecular G4s, the guanidine-track mutants formed mainly intermolecular complexes. *In vitro* binding and competitive binding experiments demonstrated specific binding of the IFI16 protein to G4 structures. Stabilization of G4 structures by IFI16 protein *in vivo* behind the p53 responsive element in the reporter gene promoter induced transcriptional repression of the given gene, while loss of G4-forming potential leads to increased p53 transactivation by its protein-protein interaction with IFI16. Our results point to the importance of structural features of DNA for exact gene regulation.

### Acknowledgement

This work was supported by the resources of the Department of Biophysical Chemistry and Molecular Oncology of the Institute of Biophysics of the Czech Academy of Sciences and the resources of projects BD162301015 and BD162305012BT.



# Study of physicochemical properties of skin creams with the addition of liposomes

*Kristýna Müllerová; Vojtěch Enev*

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Physical Chemistry,  
Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic, Kristyna.Mullerova@vut.cz*

This work aimed to design a formulation and prepare a native skin cream and skin creams enriched with liposomal particles with encapsulated vitamin E. The raw materials for creams were selected after thorough research. The liposomal particles were prepared by sonication method using an ultrasonic homogenizer. The prepared liposomes were stored at 4°C and the creams at a laboratory temperature of 25°C during the measurement period.

After the preparation of the skin creams, their stability and rheological properties were studied at given time intervals during storage for 12 weeks. The stability of the prepared samples was determined using a LUMiSizer analytical centrifuge with STEP-Technology. Among the rheological properties, changes in the rate of structure recovery of the formulations were monitored, as well as changes in zero and infinite viscosity, which can be presented as changes in viscosity during product storage and changes in viscosity during application and spreading on the skin. All stability and rheological tests were performed for a temperature of 25 °C, which also corresponded to the storage temperature, and for a temperature of 37 °C, which approximately corresponds to the human body temperature.

Stability tests showed that at laboratory temperature the sample of the native skin cream was the most stable, while the sample with the addition of 20 wt.% of liposomal particles was determined to be the least stable. At increased experimental temperatures, the stability of all samples decreased. The sample with 10 wt.% liposome addition showed the highest stability at increased temperature initially, however, the native lotion sample again proved to be the most stable during aging. In contrast, creams with a higher addition of liposomal particles were significantly unstable at increased temperatures.

At the storage temperature, the sample with 10 wt.% and 30 wt.% liposome addition showed the smallest changes over time in the zero-viscosity measurement. In contrast, at increased temperature, the sample with 10 wt.% liposome addition and the native sample showed the highest changes in zero viscosity. When the infinite viscosity was analyzed at laboratory temperature, it was found that the viscosity changed the least over time for the lotion without adding liposomes. In contrast, the most significant changes were observed for the sample with 10 wt.% addition of liposomal particles. When analysed at increased temperature, it was found that the sample with 10 wt.% addition immediately after preparation should be the most spreadable in practice. In contrast, the sample with 30 wt.% liposomes at 12 weeks of age was found to be the least spreadable. When thixotropic properties were studied, it was found that the native lotion sample showed the highest recovery rate at

both laboratory and increased temperature. For all samples, a general decrease in regenerative ability with aging time was observed.

The size and stability of the prepared liposomal particles with encapsulated vitamin E were monitored by DLS and zeta-potential determination. The prepared particles showed the smallest particle size ( $197.2 \pm 2.9$  nm) and polydispersity ( $0.218 \pm 0.014$ ) at 4 weeks of age after preparation, while the largest particle size ( $260.1 \pm 34.1$  nm) and polydispersity ( $0.398 \pm 0.059$ ) were measured after 8 weeks of age. Using stability analysis, it was found that except for the particles at 8 weeks of age, all reached values below  $-30$  mV, thus exceeding the stability limit of  $\pm 30$  mV and can be considered stable.

# The influence of different wheat bran pretreatment methods on the yield and purity of isolated ferulic acid after alkaline hydrolysis

*Jakub Nábělek, Pavel Diviš, Jaromír Pořízka*

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry Purkyňova 464/118, 612 00 Brno,  
Jakub.Nabelek@vut.cz*

Ferulic acid (FA) is a highly valued bioactive substance known for its significant antioxidant, antimicrobial, anticancer, antiallergic, hepatoprotective, anti-inflammatory, and antiviral effects. Due to these properties, the use of FA in the food, pharmaceutical, and cosmetic industries is growing. Recently, substantial efforts have been made to isolate this compound from residual biomass with the aim of overcoming production by petrochemical means. One of the interesting materials containing ferulic acid available in large quantities is wheat bran. According to FA-OSTAT, the world's processing of wheat produces more than 120 million metric tons of wheat bran.

In this study, the effect of applying different pre-treatment methods to wheat bran before alkaline hydrolysis and the isolation of FA was tested. A single-step pre-treatment was examined using hot water or 0.05 M NaOH, as well as a two-step pre-treatment, involving both of these steps sequentially. The yield and purity of ferulic acid obtained through these procedures were compared with the process using alkaline hydrolysis without bran pre-treatment. The alkaline hydrolysis was performed using

0.2 M NaOH at a temperature of 50°C with 2 hours of stirring. For the isolation of ferulic acid from the hydrolysate, adsorption and desorption using XAD-16 resin were performed.

The yield of FA using alkaline hydrolysis without bran pre-treatment was 1.5 mg/g; however, the purity of the isolated FA was relatively low (12%). By pre-treating wheat bran with hot water, a lower yield of FA was achieved (0.99 mg/g); however, the purity was slightly improved (16%). When 0.05 M NaOH was used for the pretreatment of wheat bran, the yield of FA was 0.87 mg/g, and the purity increased to an average of 21%. The simultaneous combination of both pretreatment methods did not lead to further improvements in the yield or purity of FA.

Tests are currently underway using hydrogen peroxide in the process of FA extraction, and preliminary results show that satisfactory yields and purities of FA over 40% can be achieved using this process.

## Acknowledgement

This research was supported by Technology Agency of the Czech Republic, project no. FW02020135 and by project no. FCH-S-21-7440 financed by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic.

# Characterization of the Stability of Edible Plant Oils Using Infrared Spectrometry

*Chi Mai Nguyenová, Jan Poustka*

*University of Chemistry and Technology Prague, Department of Food Analysis and Nutrition, Technická 3, 166 28 Prague 6, Czech Republic, nguyenox@vscht.cz*

The quality and shelf-life of plant oils play a very important role in the food industry. The stability, physico-chemical properties, and nutritional value of oils are related to their fatty acid (FA) profile. Each type of plant oil has diverse proportions of saturated fatty acids (SFAs), monounsaturated fatty acids (MUFAs), and polyunsaturated fatty acids (PUFAs). Oxidative stability, an indicator of shelf-life, primarily depends on the content of MUFAs and PUFAs. A higher degree of unsaturation increases the likelihood of oxidative degradation. Several factors such as the presence of oxygen, light, a catalyst, and temperature can contribute to the degradation processes of oils like hydrolysis, oxidation of PUFAs, and cis/trans isomerization [1,2].

Many of the analytical methods traditionally used to assess the quality of fats and oils, including peroxide value, iodine value, and acid value, are destructive, time-consuming, often employing harmful reagents and generating toxic waste. Consequently, Fourier-transform infrared (FTIR) spectroscopy has emerged as a simpler alternative to conventional methods namely due to its simplicity and reliability. FTIR spectroscopy seems to be a convenient method both to assess oil degradation and to conduct oil authentication, often coupled with chemometrics. Chemometrics classification approaches include principal component analysis (PCA), hierarchical cluster analysis (HCA), linear discriminant analysis (LDA), partial least squares discriminant analysis (PLS-DA), multiple linear regression (MLR), etc. [3].

The aim of this work is to apply FTIR spectroscopy using the measurement of attenuated total reflection (ATR-FTIR) together with chemometrics to evaluate the stability of selected plant oils (i.e. olive pomace, extra virgin olive, soybean, sunflower, rapeseed) during storage. To determine the stability of plant oils, oil samples were stored both in the dark and in the light in parallel for 1 year to simulate different ways of storage in a household. The progress of the experiments was monitored at regular intervals of 1 month. In addition to the ATR-FTIR analysis, sensory and visual evaluations were also conducted. The oils stored in the light exhibited the most significant colour changes, indicating the formation of undesirable sensory substances characteristic of rancid oils. The results demonstrate that ATR-FTIR coupled with the chemometrics data analysis is a rapid and straightforward method well suited for assessing the stability of plant oils.

# Study of the stress response and its connection with PHA metabolism in bacterium *Rhodospirillum rubrum*

Viktorie-Alexandra Pacasova<sup>1</sup>, Katerina Mrazová<sup>2</sup>, Eva Slaninova<sup>3</sup>,  
Stanislav Obruca<sup>4</sup>

- 1) Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Food Science and Biotechnology, Purkynova 464/118, Kralovo Pole, 612 00 Brno,  
Viktorie-Alexandra.Pacasova@vut.cz
- 2) Institute of Instrumentation of the Czech Academy of Sciences, Kralovopolska 147,  
Kralovo Pole, 612 00 Brno
- 3,4) Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Food Science and Biotechnology, Purkynova 464/118, Kralovo Pole, 612 00 Brno

In recent years, there have been major advances in industry, medicine, pharmaceuticals, and other scientific fields. This shift has caused an increase in the standard of living for most of humanity, but also there has been a significant increase and accumulation of human waste, especially plastic waste. This phenomenon could be reduced by materials that are degradable, such as polyhydroxyalkanoates (PHAs). These bioplastics are the products of the metabolism of various microorganisms that can later be broken down into water and carbon dioxide. One of the promising producers of PHAs is the G- mesophilic bacterium *Rhodospirillum rubrum*, mainly it is interesting for its versatile metabolic apparatus that allows it to produce various metabolites such as PHAs, hydrogen, etc. using waste gases (for example CO<sub>2</sub>), or other waste substrates (for example waste from food industry).

This work is focused on the production of PHAs and its connection with the stress response, particularly in the bacterium *Rhodospirillum rubrum* (DSM 467). In the first part of this work, PHA-producing the wild-type (*R. rubrum*) and its PHA-non-producing mutant in terms of cell morphology. These strains were also exposed to various stresses (elevated temperature, osmotic stress, freeze-thaw cycles) and the effect of PHA on the stress response was determined by advanced analytical techniques (flow cytometry and electron microscopy). Firstly, both strains were cultured under aerobic conditions in the dark for 48 and 72 hours. The viability of these samples after exposure to selected stresses was found using a fluorescent probe (propidium iodide) by flow cytometry, while cell disruption was also examined by electron microscopy (cryo-SEM and STEM). Last an additional experiment was carried out under microaerobic conditions in the light for 120 h for both wild-type and the mutant strain. Where both strains were exposed to the same selected stresses and the collected samples were also analyzed by the same analytical methods as in the previous experiments.

We were able to repeatedly confirm the ability of the wild-type strain to produce copolymer P(3HB-co-3HV) during experiments where acetate was the sole carbon source. Also, the hypothesis of the cryo-protective effect of PHA granules

during exposure to multiple freezing and thawing cycles was confirmed. In contrast, the protective properties of PHA granules against osmotic stress were not proven. Lastly, a negative impact of the prolonged time of cultivation on the viability of both strains of *Rhodospirillum rubrum* was observed.

#### Acknowledgement

This work was supported by project GA 21-15958L of Czech Science Foundation.

# Study of Low Temperature Plasma Direct Application on Yeast *Candida Glabrata* And Bacteria *Escherichia Coli* and *Staphylococcus Epidermidis*

*Veronika Petrová<sup>1</sup>, František Krčma<sup>1</sup>, Zdenko Machala<sup>2</sup>, Kristína Trebulová<sup>1</sup>, Julie Hoová<sup>1</sup>*

*1) Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Physical and Applied chemistry, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czechia, Veronika.Petrova1@vut.cz*

*2) Comenius University Bratislava, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics*

The aim of this work was to study the interactions of low-temperature microwave plasma and streamer corona discharge with yeast *Candida glabrata* and bacteria *Staphylococcus epidermidis* and *Escherichia coli*. Co-cultivations of these microorganisms were also treated. The microorganisms were treated on selected solid media.

With microwave discharge, microorganisms were treated locally. The surface wave microwave discharge was used, with argon as the working gas. Throughout the experiment, a constant gas flow rate of 5.0 Slm and power fluctuating between 8-10 W were maintained. The microorganisms treated with the surface wave microwave discharge were inhibited and uncultivable after the plasma treatment, although their cytoplasmic membrane remained intact.

With streamer corona discharge, microorganisms were treated locally and also, they were surface scan treated. The streamer corona discharge was used in the form of a corona pen. Throughout the experiment, a constant voltage of 14 kV was maintained. The distance between the needle and the agar surface was 1.0 cm. For these experiments with the streamer corona pen, metal wires were attached to the bottom of the Petri dishes. These wires had a protruding end by which the treated samples were grounded. The microorganisms treated with streamer corona discharge were inhibited, and it was found that surface scan treatment leads to better inhibition than localized treatment.

# Smart Antibacterial Nanoparticle Delivery System for the Treatment of Infected Wounds

*Veronika Poláková, Zdenka Fohlerová, Lucy Vojtová*

*CEITEC BUT, Central European Institute of Technology, Advanced biomaterials, Brno University of Technology, Purkyňova 123, 621 00 Brno, Czech Republic, Veronika. Polakova1@ceitec.vutbr.cz*

Today, infected and chronic wounds represent a significant challenge in the field of regenerative medicine, primarily due to their potential to lead to severe complications, such as sepsis, a life threatening condition. In numerous cases, traditional antibiotics have proven ineffective due to the resistance exhibited by multiple strains of bacteria. There has been a growing focus on the development of new materials enriched with antibacterial nanoparticles to target bacterial strains that have acquired antibiotic resistance. In recent years, numerous drug and nanoparticle delivery systems have been developed, featuring pH-triggered release designed for the acidic pH environment in cancer treatment. Surprisingly, there have been only a few studies that aimed to create pH-responsive delivery systems for release in the alkaline pH region of infectious wounds.

The primary objective of our work was to synthesize and characterize antibacterial copper nanoparticles using straightforward and robust method, favorably with faster release in the alkaline pH region of infectious wounds. The secondary goal was to develop a delivery material suitable for on wound application.

The synthesis of copper nanoparticles starts with chemical reduction, followed by stabilization with chitosan of both, low and medium molecular weight. We characterized prepared samples using transmission electron microscopy, dynamic light scattering, and UV-VIS spectroscopy. Copper nanoparticles coated with medium molecular weight chitosan had an average radius of 203.9 nm, while low molecular weight chitosan coated copper nanoparticles had an average radius of 170.4 nm. As a delivery material, we are developing pH-responsive reduced albumin-based hydrogel.

In conclusion, these antibacterial particles can enrich various delivery materials besides albumin based hydrogel, for example scaffolds or wound dressings.

## Acknowledgement

This work was supported by the Internal Grants of BUT (Specific Research) Reg. No. BD622303001 and by the Jaroslav Koča Bridge Fund for Veronika Poláková 2023. CzechNanoLab project LM2023051 funded by MEYS CR is gratefully acknowledged for the financial support of the measurements at CEITEC Nano Research Infrastructure.



# Lyophilisation as a useful method of carrier system preparation

*Marek Řihák<sup>1</sup>, Vojtěch Enev<sup>2</sup>, Tereza Venerová<sup>2</sup>*

*1) Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of physical and applied chemistry, Purkyňova 464/118, 602 00 Brno, Czech Republic, Marek.Rihak@vut.cz*

*2) Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of physical and applied chemistry, Purkyňova 464/118, 602 00 Brno, Czech Republic*

The aim of this study was to prepare native hyaluronan-based carrier systems using lyophilisation as a suitable method to ensure an interaction between certain drugs and the polymeric structure which would lead to an increased solubility of hydrophobic drugs. For the preparation of such a system, the tert-butyl alcohol was used as a co-solvent with the ability to support the hydrophobic effect between the drug and a hydrophobic domain of hyaluronan. Previous studies have confirmed that freeze-drying is a useful method for carrier system preparation. However, this study focuses on the preparation of such systems with samples of real drugs, which were previously replaced by fluorescence sondes. Since all drug samples have good fluorescence characteristics, fluorescence spectroscopy was used as the main method to determine the success of the preparation. Other methods included a thermogravimetric analysis and the Fourier-transform infrared spectroscopy. All the mentioned methods have confirmed that lyophilisation is a useful method for the preparation of the carrier systems with real drugs. Great results have been achieved in terms of the solubility of freeze-dried systems. In the last step, the co-solvent residues were determined by head-space solid phase microextraction. This method also provided some valuable information as well as gave the direction for future research.

Freeze-drying is a gentle technique for drying samples that could be degraded by high temperatures. We are talking primarily about biological samples such as proteins, enzymes, saccharides etc. During the process of freeze-drying, samples in vacuum are frozen. As the temperature is then slowly raised, the solvent sublimates from the sample. The drying is divided into two parts; during primary drying nearly 95 % of water sublimates, therefore the aim of secondary drying is to get rid of water residues, which are the molecules of water attached to the sample surface by adsorption. Once secondary drying is complete, the samples are fragile but retain their biological function.

# Self-entrapment of Plant Growth Promoting Rhizobacteria by gelation of their exopolysaccharides

*Martin Súkeník<sup>1</sup>, Diana Černayová<sup>2</sup>, Petr Sedláček<sup>1</sup>*

*1) Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Physical and Applied Chemistry, Purkyňova 464/118, Královo Pole, 612 00 Brno, Czech Republic,*

*Martin.Sukenik@vut.cz*

*2) Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Food Science and Biotechnology, Purkyňova 464/118, Královo Pole, 612 00 Brno*

Recently, high demands have been placed on sustainable farming to achieve similar yields using less conventional fertilizers, because of the effort to improve the environment and avoid irreversible damage to fertile land. The aim of this work was to select and characterize specific mechanisms in plant growth promoting bacteria (PGPR), commonly found in the rhizosphere of plants. The selected PGPR strain, *Azotobacter vinelandii*, is credited with a number of interesting plant growth-promoting mechanisms, such as nitrogen fixation, phosphate utilization, production of siderophores and phytohormones, and can produce the protective exopolysaccharide alginate and intracellular polyhydroxyalkanoates in the form of granules serving as a carbon source pool.

An original concept of bacteria self-encapsulation via cross-linking of alginate directly produced during their culturing was proposed by our group for the preparation of gel bioinoculants based on these PGPRs. To validate the efficacy of this concept, all selected strains had to be subjected to gelation experiments with the crosslinking agent CaCl<sub>2</sub> 2 wt. % under alginate gel formation. Three specific strains of *Azotobacter vinelandii* DSM 87, DSM 720, and CCM 289 were selected for the preparation and characterization of the bioinoculants. The material properties of the formed gels were characterized by oscillatory rheometry (amplitude test). All strains were subjected to gravimetric determination of alginate and biomass concentrations. Flow cytometry with fluorescent probe PI was used to verify cell viability immediately after culturing. To confirm the biological activity of the bioinoculants, the ability of all strains to dissolve and utilize phosphate from the agar medium was qualitatively assayed. Furthermore, the production of indole-3-acetic acid was spectrophotometrically studied for all strains. The production of siderophores was also verified qualitatively and quantitatively. Pilot cultivation experiments on the lettuce (*Lactuca sativa*) plant were performed with the addition of both liquid and gel carrier PGPR compositions; as a negative control, the plant was left without the addition of carrier PGPR composition. The diversity of soil microbiomes collected from the soil without the addition of PGPR composition, with the addition of liquid PGPR composition, and with the addition of gel PGPR composition was analyzed using BIOLOG EcoPlate™ plates. The content of chlorophyll a, chlorophyll b, and carotenoids in the leaves was spectrophotometrically detected in plants.

The ratio results from the pilot growth experiment showed a positive growth

effect of both gel and liquid PGPR compositions on the plants. At the end of the growing experiment, leaf and root system lengths were recorded after the application of both forms of PGPR composition to the soil, the average leaf length increased with the addition of gel carrier PGPR composition by  $203\pm38$  % and  $203\pm41$  % for the liquid carrier PGPR composition, the average increase of the root system length was by  $132\pm41$  % and  $125\pm46$  %, respectively. Plants grown with the addition of gel and liquid PGPR compositions increased average dry biomass by  $467\pm76$  % and  $468\pm74$  %. The highest increase of chlorophyll a, chlorophyll b, and carotenoids in the leaves was detected in plants grown with the addition of liquid PGPR composition, precisely for chlorophyll a by  $158\pm21$  %, chlorophyll b by  $130\pm34$  % and carotenoids by  $205\pm16$  %. All values are relative to a negative control that was not treated with any PGPR composition.

# Characterization and Bio-Applications of Plasma Activated Water

*Kateřina Šindelková, Ludmila Čechová, Zdenka Kozáková, František Krčma*

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Purkyňova 118/464, 612 00 Brno, Czech Republic Katerina.Sindelkova1@vut.cz*

Water that has been exposed to plasma is usually referred to as plasma activated water. The term plasma treated water (PTW) is also newly used. Thanks to the interaction of the plasma with the liquid, reactive species with long and short lifetimes are formed. Short lifetime species include hydroxyl, oxygen and hydrogen radicals, excited electrons, etc. while long lifetime species include hydrogen peroxide, nitrates, nitrites, peroxyxynitrite, ozone, etc..

In this work, plasma activated water was prepared by three different plasma systems. The first system generating plasma above the water surface was based on a dielectric barrier discharge with a liquid electrode. In the second system, the plasma is generated directly in the liquid by a high-frequency voltage applied to the pin-hole based main electrode. The plasma reactor consisted of two electrodes – the main high voltage electrode and the second (counter) electrode. The main electrode was constructed from a tungsten wire inserted into a ceramic head and an outer glass tube serving as a holder. The second (counter) electrode was a flat aluminum plate. In the third system, the plasma was not in a direct contact with the liquid. Gaseous products from an ozonizer operating in synthetic air were bubbled into the liquid. The activation time of 2 minutes was the same for all plasma systems.

PAW was characterized by measurements of pH, conductivity and concentration of RONS. For the detection of hydrogen peroxide, nitrates and nitrites formed in PAW produced from distilled water, colorimetric methods combined with the UV-VIS spectrometry were employed. The antimicrobial activity of PAW on selected microorganisms *E. coli*, *S. epidermidis* and *P. acnes* was also investigated.

## Acknowledgement

This work was carried out within the frame of the COST action CA20114 (Therapeutical applications of Cold Plasmas).

# Was slower replication of mtDNA the reason for extinction of Homo sapiens neanderthalensis?

*Lucie Šislerová, Václav Brázda, Anne Cucchiarini, Jean-Luis Mergny*

*Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie potravin a biotechnologií  
Purkyňova 118, 612 00 Brno, Česká republika, 206632@vutbr.cz*

Modern techniques of nucleic acid isolation and the processing of archaeological samples are constantly leading to advances and new insights into the genetic information of prehistoric Neandertals or Denisovans. Today, based on the latest data, we assume that modern humans *Homo Sapiens sapiens* are related to Neandertals and share 3-4% of their genetic information. What is the reason, then, that the Earth today is exclusively inhabited by us as representatives of the so-called modern human race?

We compared the number of G-quadruplexes in genomic and mitochondrial DNA of *H. sapiens*, Neanderthals and Denisovans and found a significant difference in mtDNA in the first place. In mtDNA, G-quadruplexes are mostly localized in completely identical places with one exception. But this exception is substantial, it is a long sequence of guanines directly in the D-loop region of mtDNA, which is responsible for mitochondrial DNA replication. This region is directly responsible for the quantity of mitochondria and thus also for efficient energy metabolism of the cell. Therefore, it seems that the selection advantage of better mtDNA replication in modern humans may have been one of the aspects that led to the extinction of Neanderthals.

# First Screening of PHA Production in Cold-Adapted Bacteria from Antarctica

*Katarína Šlosárová<sup>1,\*</sup>, Dana Byrtusová<sup>2</sup>, Iva Pernicová<sup>1</sup>, Volha Akulava<sup>2</sup>, Margarita Smirnova<sup>2</sup>, Eva Slaninová<sup>1</sup>, Stanislav Obruča<sup>1</sup> and Volha Shapaval<sup>2</sup>*

*1) Department of Food Chemistry and Biotechnology, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkynova 118, 612 00 Brno, Czech Republic,  
\*Katarina.Slosarova@vut.cz*

*2) Faculty of Science and Technology, Norwegian University of Life Sciences, 1432 Aas, Norway*

Some bacteria naturally produce polyhydroxyalkanoates (PHA) in order to intracellularly store carbon and energy. From a technological point of view, PHA have great potential as biodegradable versions of conventional plastics. However, their main disadvantage compared to them is the high cost of production (primarily associated with the biotechnological process itself). Therefore, the research is focusing on ways to overcome this obstacle, by screening many bacterial strains that can survive extreme conditions. The main advantage that extremophiles bring from the perspective of biotechnology is a reduction in the cost of sterility of the work, which is what benefits in conjunction with PHA. Additionally, there is limited research devoted to psychrophiles, microorganisms living in cold areas.

The results of the screening involving seventy-eight cold-adapted bacterial strains isolated from East Antarctica are presented in this work. Both genotypic and phenotypic methods were used for the selection of potential PHA producers. The polymerase chain reaction demonstrated the presence of genes encoding PHA synthases, namely PHA synthases class I and II. From the phenotypic testing, staining with Nile Red and Sudan Black B, FTIR spectroscopy in combination with a high-throughput microculture system (Duetz-MTPS), and gas chromatography were used to explore the bacterial biomass for the presence of PHA. Cultivation was conducted on five different media, four of which were limiting nutrients.

Based on the results the highest biomass production and PHA accumulation (0.6 g/L) showed *Pseudomonas* sp. belonging to the green snow isolates. Interestingly, a high synthesis of PHA, specifically P(3HB), was observed on complex BHI medium with extra glucose addition, which did not provide the nitrogen limitation that is typical for the stimulation of the PHA accumulation. Although fluorescent staining did not provide indicative results for psychrophiles and/or psychrotolerants, it can be assessed that the presence of promising producers among polar bacteria was confirmed by PCR, FTIR, and GC, and the yield of PHA can be further increased by optimizing the media composition and growth conditions.

# Soil enzymatic activity and soil microbial communities response to plasma activated water application to soil

*Kateřina Šřastná, Ludmila Āechová,, Vojřtěch Enev, Zdenka Kozáková,  
František Krřma*

*Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118/464, 612 00 Brno  
Katerina.Liskova@vut.cz*

Current research focused on cold plasma water activation for agricultural application comprises an increasing number of relevant publications. So called plasma activated water (PAW) contain various chemical species with high redox potential – short-lived species such as hydrogen or hydroxyl radicals, or long-lived species such as hydrogen peroxide, nitrites, nitrates, peroxyxynitrites, etc. (reactive oxygen and nitrogen species – RONS). Those species increase seed germination, the rooting speed and stimulate plant growth, which leads to higher crop yield. However, due to the presence of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, NO<sub>2</sub><sup>-</sup> and NO<sub>3</sub><sup>-</sup> and at low pH values, PAW shows also a very strong antimicrobial effect.

To prepare PAW, specially constructed device using dielectric barrier discharge with the liquid electrode was used. It was operating at high frequency voltage with the total power supply of (36±2) W. PAW (treatment time 0, 2, 5 and 10 min) was applied in a pot experiment to a model plant *Lactuca Sativa* for total of 90 days. After 90 days, soil dehydrogenase activity was determined using the 2,3,5-triphenyltetrazolium chloride (TTC) test. Plate count method was used to measure the population of P-solubilizing and N-fixing soil bacteria. Total culturable bacteria were enumerated by plating soil suspensions (100 μl) using Pikovskaya's and Ashby's mannitol agar respectively. The spread plates were incubated at 30°C for 7 days.

# Antimycotic effects of the plasma gun tested on *C. glabrata* on different surface materials

*Kristína Trebulová<sup>1</sup>, Inna Orel<sup>2</sup>, Eric Robert<sup>2</sup>, Jan Hrudka<sup>3</sup>,  
František Krčma<sup>1</sup>*

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

*2) GREMI, University of Orleans, 14 Rue d'Issoudun, 45067 Orléans, France*

*3) University of Chemistry and Technology Prague, Technická 5, Dejvice, 166 28 Praha 6,  
Czech Republic, E-mail: trebulovakristina@email.com*

With the ever-increasing resistance of microbes against antimicrobials, there arise an urge to find alternative treatments for many diseases not only in the human world but also in the animal and plant kingdoms. One of the diseases that needs a special attention is otitis externa (inflammation of the ear canal) in mammals. Otitis externa or so-called swimmer's ear is a condition that causes inflammation of the external ear canal, which is the tube between the outer ear and the ear drum. The disease can develop in all mammalian species but due to several different factors the dogs are the main patients for the treatment. Due to the lack of efficient treatment methods for this multifactorial disease, the veterinary doctors are striving for a new alternative treatment. In this study, the cold atmospheric pressure plasma (CAP) generated by the plasma gun with a capillary design was tested. As a model microorganism a yeast *Candida glabrata* was chosen. The preliminary tests were done on the Petri dishes to establish the basic plasma parameters. To render this research more appropriate to real life application, more complex inoculation substrates (pork skin and 3D printed models of dog ear with the ear canal) were used. The use of the plasma gun with a thin capillary allows for an endoscopic treatment inside the complex structures. It was found that the thickness of a capillary does not influence the inhibition efficiency, when the plasma parameters are adjusted accordingly. The plasma inhibition is stable in time and the microbial cells do not regain their viability even after one week time. It was also proved that using a cover (enclosed treatment) tremendously enhances the treatment efficiency. This fact is mainly caused by the accumulation of the active species (reactive oxygen and nitrogen species - RONS) under the cover. A generation of the RONS is highly dependent on the target, which is why several different inoculation substrates were tested. The results confirm high inhibition efficiency of CAP against the yeast *C. glabrata* on different surface materials. Multiple models can be used to proceed towards a real life situation.

## Acknowledgement

This work was done within the frame of a short-term scientific mission supported by the COST Action CA20114 PLASTHER.



# Effect of Freeze Drying and Hot Air Drying on Fruit Quality and Shelf Life

*Kristina Trenzová<sup>1</sup>; Jiří Malíšek<sup>2</sup>; Anna Prystupa<sup>1</sup>;  
Markéta Vykydalová<sup>2</sup>; Pavel Diviš<sup>1</sup>; Eva Vítová<sup>1</sup>*

*1) Faculty of Chemistry, Food Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 118,  
612 00 Brno-Medlánky; xcprochazkovak@vutbr.cz*

*2) Faculty of Military Leadership, Department of Logistics, University of Defense Brno*

Drying methods in the food industry are employed to convert food into a storable commodity. Thanks to the development of scientific knowledge, there has been a transition from traditional hot air-drying methods to lyophilization, involving the sublimation of water directly from the food's solid state. These methods offer the advantage of preserving nutritional and organoleptic properties while creating a highly porous structure, ensuring rapid regeneration of food to its original state. As this technology has evolved, economic demands in the process have decreased, leading to its gradual adoption in ready meals and, increasingly, in food field rations for the armed forces.

The experiment aimed to observe the impact of various drying methods on aromatic compounds in samples of selected exotic fruits (kiwi, pineapple, pitahaya, mango, and banana). Additionally, the experiment was extended by color measurement and water activity assessment after long-term storage (4 months) at 5 °C, 25 °C, and 40 °C. Aromatic substances were determined by utilized gas chromatography with solid-phase microextraction and mass spectrometry. Color was measured using the ColorFlex EZ device with the EasyMatch QC software, while water activity was determined by the WaterLab device, following ISO standard 21807. Sensory analysis was compiled according to the STANAG 2937 document.

Lyophilization emerged as a more suitable drying method for fruit samples, considering aromatic profile, sensory evaluation, and color change, with air-dried samples exhibiting larger deviations. While freeze-drying minimizes temperature-induced changes in fruits, some alterations in packaged fruit can still occur. It cannot be conclusively stated that freeze-drying is universally gentler for every fruit type. In most samples, a more varied aromatic profile is created during drying, with a more pronounced preservation of characteristic substances compared to air drying. All dried samples, based on measured water activity, were deemed suitable for long-term storage. However, freeze-dried samples stored at 40 °C were the least sensorially acceptable and did not meet the organoleptic requirements of STANAG 2937. Dragon fruit and kiwi samples were not recommended for further research based on sensory evaluation and gas chromatography measurement of volatile substances.

For future research, regarding potential applications in food field rations for the Czech Army, consideration of local fruit availability and the use of suitable

packaging that prevents moisture penetration is advisable. This ensures that dried fruits retain their properties for several years.

#### Acknowledgement

This research was supported by project no. FCH-S-23-8330 and SV23-FVL-K109-MAL financed by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic and by the grant INTAL: Implementation of new technologies and procedures in the logistics security of the Army of the Czech Republic financed by the Ministry of Defense of the Czech Republic.

*Sekce studentů doktorských  
studijních programů*

*Tématický okruh materiálové vědy*

# Synthesis of organic semiconductors with amino acid side chain for bioelectronics

*Katsiaryna Arkhiptsava<sup>1</sup>, Jan Richtár<sup>2</sup>, Jozef Krajčovič<sup>2</sup>*

*1) Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic, Katsiaryna.Arkhiptsava@vut.cz*

*2) Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Chemistry and Technology of Environmental Protection, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic*

Organic electrochemical transistors (OECTs) are increasingly used in the field of bioelectronics, as they can be a powerful platform for a variety of devices, including neuromorphic devices, stimulation elements, and biosensors. Organic electrochemical transistors (OECTs) offer several advantages: they can amplify weak electrical signals, are highly sensitive, cheap, easy to operate, and compatible with flexible and wearable devices. Compared to other ion-impenetrable transistors, OECTs can achieve over a 100-fold higher transconductance, improved biocompatibility, reduced mechanical mismatch with biological tissues, and suitable long term electrical stability in aqueous environments.

The essential component of organic bioelectronic devices is mainly polymer with a conjugated  $\pi$ -system and mixed ion-electron conductivity. Several such polymers have been developed, but they often show some limitations, including low conductivity, sensitivity, stability, or biocompatibility. The synthesis of new suitably functionalized semiconductive polymers is one of the ways to minimize the limitations.

This work is dedicated to the synthesis of a series of semiconductive polymers and copolymers with a new bioinspired side chain. Its design is inspired by poly-L-lysine, a water-soluble biopolymer consisting of repeating units of L-lysine, which possesses such properties as non-antigenicity, antibacterial activity, biocompatibility and biodegradability. The side chains of the synthesized polymers carry the amino acid L-lysine, which is linked to the main chain by glycol linkers of various lengths.

## Acknowledgement

The authors thank the Brno University of Technology and project FCH-S-23-8208.

# Printed colorimetric amine indicator for food packaging

*Vojtěch Dobiáš, Michal Veselý*

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

Meat products are prone to spoilage, as they contain a high content of proteins. The spoilage can be usually spotted by the smell of the food, which is an unpleasant experience. By using intelligent packaging, we would be able to detect a spoiled food visually, by using a color-changing indicator. That would allow the consumer to spot the spoiled food right at the store, resulting in not buying it, or throwing the food away when storing it at home.

In this contribution, a printed amine indicator is introduced. The indicator is printed using Mayer's rod on a PET foil. The dried indicator is coated with a UV-curable coating, which acts as a barrier between the indicator and the food inside the packaging.

The indicator's sensitivity to amines was tested by exposing the indicator to butylamine. The sensitivity was evaluated by the change in the indicator's color. The color change measurements were performed with a fiber-optics spectrophotometer. Reflectance spectra together with  $L^*a^*b^*$  values were gathered.

The results show that the indicator is sensitive to butylamine, and the color change can be detected by the naked eye in 80 minutes.

## Acknowledgement

This research was supported by the project OP PIK–Aplikace CZ.01.1.02/0.0/0.0/20\_321/0024435 funded by the Ministry of Industry and Trade of the Czech Republic

# Flavins – Nature-inspired Photosensitisers for Sustainable Future

*Lucia Ivanová, Jan Truksa, Jozef Krajčovič*

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Purkyňova 118, 612 00 Brno,  
Czech Republic, xcivanova@vutbr.cz*

Artificial photosynthesis mimics natural photosynthesis, producing strategic and economically valuable substances (molecular hydrogen, methane, or methanol). Thus, the energy of the largest, could-be-claimed infinite, available energy source, the Sun, is stored in the chemical bonds, introducing convenient, storable, and transportable clean chemical fuels that can be used when sunlight is unavailable.

The presented study is predominantly aimed at homogeneous partial water splitting, which is the best option for primary research. Specifically, it focuses on synthesising and applying molecular-based systems employing chromophores flavins as nature-inspired metal-free photosensitisers. Flavins are in the scope due to possessing unique properties with excellent potential for hydrogen or oxygen photocatalytic evolution, which the former studies showed.

Our research demonstrates the photocatalytic system consisting of flavin photosensitiser for light capture and electron transfer platinum co-catalyst providing active sites for the reaction. To substitute oxidative half-reaction, a sacrificial reagent was utilised. The ratio of photosensitiser to co-catalyst concentration was determined, while the system showed continuous hydrogen production over 29 hours, indicating sufficient photostability and reproducibility by repeated measurements.

Since flavins are synthetically available organic molecules with easily tunable properties through structure modification, this family of compounds offers a new possibility in sustainable green hydrogen production.

## Acknowledgement

The authors thank the project FCH-S-23-8208 and Aktion (MŠMT) No. 95p3 for financing. LI thanks the Brno City Municipality (Brno Ph.D. Talent Scholarship) for her financial support.

# 3D Collagen-based Scaffolds Loaded with Bioactive Molecules for Regenerative Medicine

*Dávid Izsák<sup>1</sup>, Veronika Pavlíňáková<sup>1</sup>, Zdenka Fohlerová<sup>1</sup>, Tereza Sztokowska<sup>2</sup>, Marcela Buchtová<sup>2</sup>, Lucy Vojtová<sup>1</sup>*

*1) CEITEC BUT, Central European Institute of Technology, Brno University of Technology, Advanced Biomaterials, Purkyňova 123, 621 00 Brno, Czech Republic, david.izsak1@ceitec.vutbr.cz*

*2) Institute of Animal Physiology and Genetics, The Czech Academy of Science, Brno*

The skin is the largest organ of the body. The skin has an immune system that protects the body from toxins and infections, and attempts to prevent autoimmunity, in addition to being a physical barrier against the external environment. Biomaterials used in skin injury have a significant effect on the production of skin extracellular matrix (ECM). This work focuses on protein-based biomaterials that have the ability to mimic the ECM and also help control biomechanical processes at the cellular level, such as cell migration, cell proliferation, and cell differentiation.

Collagen is a widely used biopolymer in regenerative medicine and tissue engineering due to its biocompatibility, low antigenicity, biodegradability, and cross-linking ability. It is used in a broad range of medical applications including pharmaceuticals, cosmetics, drug delivery, cell regeneration, and wound dressings. Additionally, its high hydrophilicity promotes moist healing, which is crucial for effective epithelium restoration. Wound healing is a multicellular process that relies on a complexly regulated signaling network. In this study, porous 3D collagen scaffolds were prepared by the freeze-drying method. To investigate the effect of additives the scaffolds were modified with antimicrobial chitosan. The hydrolytic stability of prepared scaffolds was supported by crosslinking process. Subsequently, bioactive molecules were incorporated into the scaffolds, and its release was monitored using UV-VIS analysis. The prepared carriers were characterized through various methods and analysis, including scanning electron microscopy to examine morphology and porosity, as well as FTIR, swelling and hydrolytic degradation. Cytotoxicity of the prepared samples was evaluated by *in vitro* testing on 3T3 fibroblast cells and the vasculogenic potential was evaluated *in ovo* chick chorioallantoic membrane (CAM) assay. Newly prepared scaffolds may have a potential application in surgery and regenerative medicine of soft tissues.

## Acknowledgement

This work was supported by the Ministry of Health of the Czech Republic under project No. NU22-08-00454 as well as and the European Fund for Regional Development within the project No. CZ.02.01.01/00/22\_008/0004562. CzechNano-Lab project LM2018110 funded by MEYS CR is gratefully acknowledged for the financial support of the measurements at CEITEC Nano Research Infrastructure.

# Polyethylene glycol hydrogels with different cross-linking type and density

*Kristýna Janáková*

*Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Brno, CZ, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Kristyna.Janakova@vut.cz*

Hydrogels are systems that are known in biomedicine mainly due to their application possibilities as a drug carrier, but they can also be used in tissue engineering. In recent years, natural hydrogels have been replaced by suitable synthetic ones, which have typically a well-defined structure that can be modified to provide adaptable degradability and functionality. A candidate from synthetic polymers is polyethylene glycol (PEG), which is characterized by significant toxicological safety, and which is of application for biomedicine.

This work focuses on the preparation of polyethylene glycol hydrogels and the subsequent characterization of mechanical and transport properties. A significant part of the work is the optimization of the preparation of PEGDA-thiol hydrogels created from 4-arm polyethylene glycol thiol (PEG-4SH) and polyethylene glycol diacrylate (PEGDA) by step-growth polymerization. Then, PEGDA hydrogels were prepared using radical polymerization to compare the mechanical and transport properties of another type of cross-linking. The mechanical properties of the prepared hydrogels were determined using rheological measurements. During transport experiments, the ability of the hydrogel to sorb and desorb the Rhodamine 6G was monitored using free diffusion. Molecular absorption spectrometry (UV/VIS) was used to characterize the course of these experiments.

In this work, it was found that PEGDA-thiol hydrogels stand out compared to PEGDA hydrogels with much higher values of the elastic modulus  $G'$ . Disulfide bonds, which arise between thiols because of oxidation, also play a large part in this. In sorption experiments, PEGDA hydrogels sorbed the dye more slowly, but absorbed a larger amount of dye than PEGDA-thiol hydrogels, from which it can be concluded that they have a greater sorption capacity. In the case of desorption with PEGDA hydrogels, the maximum was reached after 24 hours. On the contrary, with PEGDA-thiol hydrogels, gradual dissolution occurred after 48 hours both during sorption and desorption. In conclusion, it can be said that different type and density of cross-linking influences the different mechanical and transport properties of the resulting hydrogel formed by PEG.



# Delignification of wheat straw using deep eutectic solvents-like mixtures

*Veronika Jančíková, Michal Jablonský, Katarína Voleková*

*Department of Wood, Pulp and Paper, Institute of Natural and Synthetic Polymers,  
Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava,  
Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia; veronika.jancikova@stuba.sk*

Wheat straw, as a byproduct of wheat production, is an annually renewable, cost-effective, and rich source of natural fibers. It is considered one of the most abundant lignocellulosic agricultural residues worldwide, with a global annual production exceeding 800 million tons. Unfortunately, a significant portion of this residue is commonly disposed of through open-air burning, landfilling, or incineration.

The use of lignocellulosic biomass, which includes agricultural residues, usually requires the use of isolation processes to separate the main and minor components. Different types of pretreatments are used to remove lignin from biomass, such as organosolv, ionic liquids, ozonolysis, and many other physicochemical pretreatments. In recent years, attention has been paid to the use of green solvents. These represent an alternative and sustainable approach to the fractionation and further refining of biomass components into various end products such as biofuels, furan derivatives and other high-value chemicals.

The goal of this work was the delignification of wheat straw using a green solvent, namely deep eutectic solvents-like mixtures (DES-like mixtures) in the composition of choline chloride and lactic acid in a molar ratio of 1:5. Part of the work is also the evaluation of delignification under different conditions according to the rotation experiment. We monitored three factors affecting delignification, namely temperature, time, and the ratio of used biomass to solvent. The boundary parameters of the observed factors were as follows: temperature in the range of 80-160 °C, time 60-240 min, and the ratio of the amount of wheat straw to the solvent 1:10 to 1:60. Our goal was to achieve the lowest possible lignin content in delignified wheat straw fibers, i.e., the greatest possible removal of lignin from the original biomass after the application of DES-like mixtures. Subsequently, the next task was to characterize the obtained fibers after the application of DES-like mixtures using several methods, such as optical microscopy, FT-IR, or Ultraviolet-visible spectroscopy.

The percentage of lignin remaining in the samples after delignification varied between 16.13% and 35.49%, while the cellulose content fell within the range of 43.77% to 69.53%. To pinpoint optimal conditions for delignification, we performed calculations. The ideal lignin content of 16.44% was achieved at a temperature of 111 °C, a duration of 60 min, and a biomass to solvent ratio of 1:27.

## Acknowledgement

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contracts Nos. APVV-22-0277, APVV-22-0388, and VEGA Grant 1/0651/23.

# Sufficiency of various de-aging methods of PTCR ceramics based on BaTiO<sub>3</sub>

*Kryštof Koller<sup>1</sup>, Petr Ptáček<sup>2</sup>*

*1) Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Materials Chemistry; Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic; krystof.koller@vut.cz*

*2) Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Materials Chemistry; Purkyňova 464/118, 612 00 Brno*

The Ceramic PTCR thermistor, commonly known as a posistor, functions as a semiconductive element in electrical circuits. Its electrical resistance undergoes a significant increase within a specific temperature range after surpassing the Curie temperature (TC). At TC, barium titanate undergoes a phase transition from a tetragonal ferroelectric phase to a paraelectric cubic phase. This unique characteristic makes posistors valuable in diverse electronic applications, such as indestructible fuses for overload protection in electric motors, self-regulating heating elements, and specialized uses like compressor motor starters in refrigerators.

However, a drawback of PTCR BaTiO<sub>3</sub>-based ceramics is the decrease in one of its crucial parameters, the resistance at room temperature (R<sub>25</sub>), over time. The literature discusses various aging mechanisms, with many attributing this phenomenon to the short- and long-range motion of oxygen vacancies.

Experiments on so called de-aging of aged samples is considered by many as a promising method from which can be learned much.

In this work, change of resistance due to de-aging of aged samples with different composition in various time steps was measured. Based on data analysis, proof of stabilized lattice point defects is given.

## Acknowledgement

This work was fully supported by TDK Electronics s.r.o.

# Temperature Effect on Kinetic Profile of Ziegler Natta Catalyst in Propene Polymerization

*Vít Kolomazník<sup>1, 2</sup>, Igor Cejpek<sup>2</sup>, Miroslav Skoumal<sup>2</sup>*

- 1) *Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 464, 612 00 Brno, Czech Republic*
- 2) *ORLEN Unipetrol RPA s.r.o. – Polymer Institute Brno o.z., Tkalcovská 36/2, 602 00 Brno, Czech Republic*

Propene polymerization kinetic profiles with a commercial diether based Ziegler Natta  $MgCl_2$  supported catalyst were investigated in a stainless steel batch reactor. The initial 10 min period characterizes various temperature levels in constant volume of liquid propene. The lowest temperature level corresponds to the usual prepolymerization temperature (10 °C) and the highest level corresponds to the usual main polymerization temperature (70 °C). The effects of the starting temperature levels were evaluated by polymerization kinetics patterns computed namely from the second polymerization period carried out at 70 °C for the next 90 min. The kinetic profiles based on the heat transfer data were fitted to suitable semi-empirical equations derived from fundamental kinetic approaches using the first and the second order of the catalyst active sites decay. Both approaches adequately describe the dependence of the initial activities and deceleration constants on the temperature during the initial period.

# The study of adhesion and proliferation of cells on 3D printed PHB/PLA surfaces – the influence of surface roughness and wetting characteristics

Štěpán Krobot, Veronika Melčová, Radek Přikryl

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

Tissue engineering represents a promising and contemporary method for the restoration of bones. It possesses the capability to replace bone auto- and allografts, which are frequently scarce and challenging to obtain, with artificially manufactured. The ideal bone tissue scaffold is characterized by its biocompatibility, osteoconductivity, and osteoinductivity. Additionally, the scaffold material needs to be bioresorbable and gradually degrading to enable a formation of new tissue.

Due to its inherent characteristics, the scaffold should be designed to be both accessible and permeable to cells, requiring an appropriate 3D structure with interconnected open porosity. Achieving this can be challenging using conventional methods resulting to 3D printing techniques experiencing huge interest.

The aliphatic polyester polylactide (PLA) and its composites are the favoured materials for 3D printing in tissue engineering. The inherent limited mechanical properties of PLA can be enhanced by the blending with polyhydroxybutyrate (PHB). The combination of these two polymers exhibits a synergistic effect, offering appropriate printability as well as mechanical properties suitable for medical applications.

Irrespective of the scaffold material used, the initial point of contact with the host environment is its surface. Characteristics like surface free energy (SFE), wettability or surface roughness play a crucial role in governing the adsorption of proteins, thus influencing the interaction between cells and the scaffold.

This study aims to investigate how the surface characteristics of 3D printed scaffolds influence their suitability for supporting the growth of Saos-2 cells. Two materials, both composed of PHB/PLA plasticized blend, were studied. One of them also incorporating bioactive tricalcium phosphate (TCP). 3D printed surfaces demonstrated a notable increase in water contact angle (WCA) due to enhanced surface roughness. These alterations in wetting properties strongly impacted the behaviour of Saos-2 cells on the printed surfaces. The number of cells, quantified by DNA analysis, exhibited a linear decrease with increasing surface WCA. The highest cell density was observed on pressed samples and 3D printed surfaces composed of simple lines and with 50  $\mu\text{m}$  gap between the lines. The results suggest that surfaces with a WCA below 80° are preferred for the future design of scaffolds.

## Acknowledgment

Authors acknowledge the funding by Brno University of Technology by the Specific University Research Grant through the project FCH-S-23-8208.

# Optical Properties of Bi-Based Perovskite Single Crystals

*Stevan Gavranovic<sup>1</sup>, Salvatore Valastro<sup>2</sup>, Ioannis Deretzis<sup>2</sup>,  
Martin Vala<sup>1</sup>, Emanuele Smecca<sup>2</sup>, Antonino La Magna<sup>2</sup>, Alessandra  
Alberti<sup>2</sup>, Klara Castkova<sup>3</sup> and Giovanni Mannino<sup>2</sup>*

*1) Department of Physical and Applied Chemistry, Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 464/118, Brno, Czech Republic, e-mail: xcgavranovic@vutbr.cz*

*2) National Research Council (CNR), Institute for Microelectronics and Microsystems (IMM), Strada VIII n°5 Zona Industriale, 95121 Catania, Italy*

*3) Central European Institute of Technology (CEITEC) Brno University of Technology, Purkynova 656/123, 612 00 Brno, Czech Republic*

High energy demands of modern-day societies grapple with unstable oil and gas markets, which increase efforts to create more effective and independent energy systems. While the fossil-fuel era slowly ends, new materials emerge as cheaper, cleaner, and more effective energy converters. Metal halide perovskites (MHPs) are one of the most perspective energy harvesting materials recently emerged. Their unique optoelectronic properties: tunable bandgaps, high absorption coefficients, high charge carrier mobilities, and long diffusion lengths enabled them to cover a broad spectrum of applications – solar cells, photodetectors, LEDs, betavoltaic devices, memory devices, and artificial synapses. In less than 13 years of active research, power conversion efficiencies of MHP-based solar cells grew from 3.8 % (2009) to a remarkable 25.7 % (2021), which is higher than other thin-film photovoltaics (CdTe and CIGS) and even close to single crystal silicon solar cells (26.1 %). Tandem, perovskite-silicon solar cells can achieve efficiencies of around 30 %. Compared to the traditionally used semiconductors, MHPs are solution-processable materials that can be prepared and deposited using a variety of “cost-like” techniques. This advantage further ignited their rapid growth. Nevertheless, the presence of toxic lead Pb<sup>2+</sup>cation in the commonly used MHP and their poor moisture stability hinder the commercialization of these materials. Thus, it is of great importance to find an alternative, environmentally friendly lead substitution, that would retain the optoelectronic properties and enhance the stability of the halide perovskites. However, the performance of the chemically tailored lead-free perovskites still did not achieve the state-of-the-art form of their counterparts. Bismuth (Bi) has shown the potential to be an efficient lead replacement. Recent studies have shown outstanding stability and reduced toxicity compared to Pb-based MHP. Moreover, a higher average atomic number of Bi-based halide perovskites enhances their interaction with electromagnetic radiation. Therefore, they could be potentially used as radiation detection materials.

In this work, we present the optical properties of millimeter-sized Cs<sub>3</sub>Bi<sub>2</sub>X<sub>9</sub> (where X is halide chloride Cl<sup>-</sup>, bromide Br<sup>-</sup> or iodide I<sup>-</sup>) single crystals prepared by the hydrothermal (HT) method. The key properties, optical bandgap and excitonic peaks were determined by applying the Critical Point (CP) analysis to

data collected by spectroscopic ellipsometry. To give a better understanding of the studied properties, we supported this analysis with x-ray diffraction spectroscopy (XRD) and density theory calculations (DFT), and measured our samples in the temperature range of  $-90$  to  $90^{\circ}\text{C}$

#### Acknowledgment

S.G. acknowledges financial support from JCMM Brno Ph.D. Talent project and Interfaculty project FCH/FEKT-J-23-8288, M.V. acknowledges financial support from FCH-S-23-8208 I.D., E.S., A.M., A.A. and G.M. acknowledge financial support from the EU through projects ECS00000022 and CUP B63C22000620005)

# Combined Analysis of an Rf Plasma Source

Zuzana Měšřánková<sup>1</sup>, Karel Jurčík<sup>2</sup>, K. Mrózek<sup>3,4</sup>, A. Obrusník<sup>3,4</sup>,  
F. Krčma<sup>1</sup>, P. Drexler<sup>2</sup>

1) Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Physical and Applied Chemistry, Purkyňova 118, Brno, Czechia, xcmestankova@vutbr.cz

2) Brno University of Technology, Faculty of Electrical Engineering, Department of Theoretical and Experimental Electrical Engineering, Technická 12, Brno, Czechia

3) PlasmaSolve s.r.o., Sukova 4, Brno, Czechia

4) Masaryk University, Faculty of Science, Department

This work presents an analysis of a radiofrequency-driven low-pressure argon plasma source. The source is analysed by measuring extracted ion, electron current and by optical emission spectroscopy (OES). The results are compared with respect to the variations in operating conditions of the source.

While the extracted current shows us the general view of the optimal operating conditions, the optical emission spectroscopy reveals the relative distribution of excited states. This combination, together with a wide set of input parameters (such as the set radiofrequency power, magnetic field strength or background pressure) overcomes the relative nature of the OES results. Although we are still not able to conclusively model the whole distribution of the excited states of argon (and electron temperature), we successfully coupled the changes in the ratio of selected Ar emission lines to the general performance of the plasma source and to the variation of the input parameters.

## Acknowledgement

The preparation of this paper was assisted by the project No. FCH/FEKT-J-23-8282 of the BUT internal grant office.

# Photocatalytic layers of graphitic carbon nitride and siloxane binder

*Sylvia Patakyová<sup>1</sup>, Petr Dzik<sup>2</sup>*

*1) Institute of Physical Chemistry, Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Purkyňova 118, 612 00 Brno, Czech Republic, Sylvia.Patakyova@vut.cz*

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

Since the discovery of the photocatalytic activity of graphitic carbon nitride (GCN) in 2006, this material has attracted many interests, although, the substance is not new at all. Graphitic carbon nitride consists of tri-s-triazine rings cross-linked by trigonal N atoms. One of the main advantages is that GCN is metal free, with high thermal and chemical stability, a tuneable electronic structure, and it is a medium-band-gap semiconductor. Electronic band gap of GCN is located around 2.7 eV which is less than the electronic band gap of a photocatalytic standard, titanium dioxide (TiO<sub>2</sub>) which is 3.2 eV [3]. From the electron structure it is also apparent that the GCN should be capable of oxygen and hydrogen evolution by water splitting. Next, it is material easy and inexpensive to synthesize, which makes this semiconductor extremely attractive also for the larger scale usage.

While slurried GCN exhibits a very high specific interface area which generally (but not necessarily) results in high reaction rates of photocatalytic reactions. Immobilization inevitably results in the decrease of available active surface, but the adverse effects of immobilization can be to a certain extent reduced by controlling the roughness and porosity of the catalyst coating.

Thin layers of GCN can be prepared by numerous techniques, both from vapor and liquid phases. In this study we focus on wet coating and direct patterning processes. We report on the fabrication and properties of durable GCN coatings the adhesion a cohesion of which are secured by using proprietary oligomeric siloxane binder.

GCN was synthesized from a melamine-cyanurate complex. Crude GCN was subject to wet ball milling in isobutanol to prepare suspension of GCN particles a narrow size distribution suitable for coating. After milling, a coating formulations were mixed by adding the variable amount of oligomeric siloxane binder. Plain soda-lime glass slides and FTO substrates were coated by a Mayer film applicator. Mechanical, physical, and chemical properties of the resulting coatings were investigated in detail by various methods a photocatalytic activity was evaluated by decomposition of model dye.

We obtained durable formulation for GCN coatings with high photocatalytic activity which was strongly influenced by particle size and corresponding surface roughness. The siloxane binder provides excellent adhesion and cohesion of the coating. Thus, a delicate compromise between the mechanical properties and photocatalytic activity was found.

## Acknowledgement

This work has received financial support from the Czech Science Foundation through project



# Study of Matrix Effects of Nitro Compounds and Explosives in Various Water Samples

*Tamara Pócsová, Tímea Lelkesová, Laura Korčoková, Iveta Bitterová,  
Svetlana Hrouzková*

*Slovak University of Technology in Bratislava – Faculty of Chemical and Food Technology,  
Department of Analytical Chemistry, Radlinského 2101/9, 812 37, Bratislava, Slovakia  
tamara.pocsova@stuba.sk*

Nowadays, there are many contaminants in the environment that have negative effects on human body. This also applies for nitroaromatic compounds. They are dangerous for human because they are toxic and carcinogenic substances. Pollution and contamination of the environment with explosives occurs during the production or handling of explosives, testing, military training, and activities such as mining. Treatment and preparation of samples is an essential part of the development of analytical methods. It has a very significant impact on the quality of the data and the next steps in the analysis. Microextraction in packed syringe (MEPS) is a new technique for miniaturized solid-phase extraction. The packed syringe can be used more than 100 times, can be fully automated and takes only about one minute for each sample. This technique can be used for complex matrices.

Matrix effect describes the changes observed in the detection or quantification of an analyte when other substances are present in the sample. This influence can be positive or negative, but in any case, the signal is affected, resulting in a distorted, false determination result. Therefore, matrix effects must be evaluated when validating a method.

Sample preparation method based on MEPS coupled with gas chromatography utilizing electron capture detector (GC- $\mu$ ECD) was developed for the determination of 10 nitroaromatic compounds (NB, 2-NT, 3-NT, 4-NT, 1,2-DNB, 1,3-DNB, 1,4-DNB, 1-Cl-2,4-DNB, 2,4-DNT, 2,6-DNT) and 5 explosives (PETN, EGDN, NG, TNT, RDX) in water samples. The aim of the work was to determine the appropriate extraction parameters of a fast, efficient, and solvent-minimalized analytical method based on MEPS which influence the extraction recovery. As part of the method validation, linearity (expressed using a coefficient of determination – R<sup>2</sup>), limit of detection (LOD), limit of quantification (LOQ), lowest calibration level (LCL), precision (expressed as RSD) and recovery were evaluated. The validated method was used to investigate matrix effects in 6 different types of water samples (deionized water, river water, lake water, drinking water, wastewater, sea water). The matrix effect tests were performed by evaluating the matrix factors of various sample types. Experiments with seawater showed problems because the seawater salt clogged the sorbent in the microsyringe, so it was necessary to optimize the washing step of the microsyringe in MEPS. The method was applied on real water

samples from different origin. From the analysis, we found that nitroaromatic compounds were not detected above the detection limit in real samples.

#### Acknowledgement

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the Contract No. APVV-19-0149. The work was supported by the Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic (VEGA project no. 1/0412/20).

# Size and elemental composition of fine particles from li-ion battery cell explosion

Lukáš Preisler<sup>1\*</sup>, Simona Jonášová<sup>2</sup>

- 1) Faculty of Mechanical Engineering, Brno University of Technology, Technická 2896/2, 616 69 Brno \*Lukas.Preisler@vutbr.cz  
2) Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno

Banning cars with internal combustion engines will dramatically increase the number of electric vehicles containing lithium-ion battery cells. New technology may bring risks in firefighting that are not fully understood yet. One of the main risks is the appearance of a thermal runaway phenomenon. It occurs when the battery cell is under thermal, mechanical, or electrical load. The cause is usually by a failure of the separator by direct connection of cathode and anode. A battery cell in thermal runaway releases heat and smoke and may result in fire and explosion. The smoke contains high volume of toxic gases and fine particles released into the air. Heavy metals in fine particles may be dangerous for the human body when inhaled.

In this study cylindrical 18650 lithium-ion battery cells were subjected to controlled heating until thermal runaway occurred. The cathode chemistry of battery cell LGDBHG21865 was NMC and Sony US18650VTC5A was NMC/LMO. The state of charge of battery cells before the experiment was 100 %. The failure of the battery cells led to an explosion caused by the release of flammable electrolytes, followed by a fire. The explosions occurred within an enclosed apparatus to retain the released particles. The inner air circulated through a single filter, to capture particles across a wide size range. The following experiments employed the same battery cells and utilized a cascade impactor Dekati HT-DLPI+ to collect the released particles. The impactor captures particles in 14 stages according to their size from 14 nm to 10 µm. The particle size distribution was assessed gravimetrically. The highest mass of particles was in fraction 252 nm to 377 nm for battery cell LGDBHG21865 and 152 nm to 252 nm for battery cell Sony US18650VTC5A.

Each filter containing particles was subsequently analyzed using atomic absorption spectrometry (AAS) to determine the elemental composition of Ni, Mn, Co, Cu, and Al. The sample was atomized using an electrothermal atomizer. Samples of filters with particles were decomposed in aqua regia by microwave digestion system and determined for tested metals by AAS in device ContrAA 800. In all the filters, Nickel or Aluminum had the highest concentration among other elements. In the majority of the 14 stages filters between 4 % and 12 % of mass were detected elements. The rest remains unclear. Single filters contained 25,8 % of detected elements for LGDBHG21865 and 49,0 % for Sony US18650VTC5A. The results obtained from the study will serve to determine the negative impact on the environment and human body and to develop safe ways of firefighting with electric vehicles.

## Acknowledgement

This work has been supported by the Internal funding of Brno University of Technology No. FCH/FSI-J-23-8269.

# PAHs concentration in particulate matter from the combustion of torrefied agricultural crops

*Miroslav Prchal<sup>1</sup>, Tereza Zlevorová<sup>2</sup>*

*1) Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Chemistry and Technology of Environmental Protection, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic, Miroslav.Prchal@out.cz*

*2) Brno University of Technology, Faculty of Mechanical Engineering, Energy Institute, Technická 2896/2, 616 69 Brno, Czech Republic*

Torrefaction is a promising thermal pretreatment of biofuels which enhances mechanical and chemical properties. Torrefied product is among others characterized by lower moisture content, higher hydrophobicity, lower H/C and O/C ratios and additionally by heating values comparable to coal. Such pretreatment thus allows pellet production from agricultural crops, its co-combustion with coal and combustion in extant devices. As a result, poor-quality agricultural crops could be an inexpensive alternative to commonly used biofuels such as softwood or to fossil fuels. Increasing interest in torrefaction motivates multiple researchers, however, to this day it is impossible to find studies which sufficiently describe influence of torrefaction on combustion and emissions. Therefore, the aim of this work is to analyze gaseous emissions and mainly provide quantitative and qualitative analysis of polycyclic aromatic hydrocarbons concentration in particulate matter and exhaust gas.

Three raw materials (sunflower, grain residues and softwood as reference material) were torrefied under temperature 300 °C and pyrolyzed at 550 °C. Subsequently, all materials were burnt in an automatic pellet boiler. During the combustion gaseous emission were measured by online analyzer and more importantly particulate matter samples were collected using quartz fiber filters. The extraction was carried out in an ultrasound bath with a mixture of solvents hexane and dichloromethane (50:50). For the quantification of PAHs standard of 16 EPA PAHs was used and the quantification was performed on a Bruker EVOQ TQ (GC/MS/MS). The results showed significant influence of thermal pretreatment on gaseous emission which was related to unstable combustion conditions. In terms of PAH concentrations in particulate matter, no significant impact of torrefaction was detected.

## Acknowledgement

The authors are grateful for the funding provided within the internal inter-faculty BUT project FCH/FSL-J-23-8353: Effect of biomass torrefaction on chemical composition of exhaust gas.

# Dispersing agent DISPERBYK® as a tool for ensuring low viscosity and kinetic stability during 3D printing of highly filled ceramic suspensions

*Patrik Sokola<sup>1</sup>, Michal Kalina<sup>2</sup>*

1) Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Materials Chemistry; Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic; xcsokola@vutbr.cz

2) Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Institute of Physical and Applied Chemistry, Purkyňova 464/118, CZ-612 00 Brno, Czech Republic

Digital Light Processing (DLP), also called microstereolithography, is an additive technology used to print photocurable parts (traditionally containing photocurable resin) layer by layer using UV light. The efficiency when using DLP printing of ceramic materials depends on many parameters such as exposure time, layer thickness or dynamic viscosity of the printed medium, which should not exceed the limit of 3 Pa·s at a shear rate of 10 s<sup>-1</sup>. Ceramic suspensions for DLP printing contain ceramic powder (with suitable properties such as a small specific surface and suitable sinterability) and a photocurable resin.

If filling with ceramics occurs, highly filled suspensions have a viscosity that is too high for successful DLP printing. Therefore, different types of dispersing agents are used, such as Disperbyk, Triton or stearic acid, which act as surfactants. Furthermore, in addition to reducing the viscosity value, the given agents should effectively prevent particle agglomeration and phase separation (flocculation).

In the presented work, zirconia suspensions (filling 30 vol.%) with two types of Disperbyk reagent (specifically Disperbyk - 103 and Disperbyk - 111) were investigated, while reagents were compared on the basis of dynamic viscosity values, FTIR spectrometry, particle size analysis and kinetic stability using a unique method of evaluating the ideal concentration of the reagent on the LUMiSizer analytical centrifuge. By comparing both reagents using all the above analyses of suspensions containing ZrO<sub>2</sub>, Disperbyk - 103 was evaluated as a more effective reagent. To confirm the correctness of the analysis of the suspensions, zirconia ceramics samples were printed on a 3D printer Original Prusa and subsequently sintered objects were analyzed by scanning electron microscope, their Vickers hardness, density and porosity were determined.

## Acknowledgement

This work was supported by the Czech Ministry of Education, Youth and Sports under grant LTT18013 (Inter-Transfer).

# Structure-Property Relationship of Symmetric and Unsymmetric Croconaine Dyes

*Strada Rebecca<sup>1</sup>, Vorba Michal<sup>2</sup>, Dunlop David<sup>3</sup>, Slanina Tomáš<sup>4</sup>,  
Šebej Peter<sup>1</sup>*

- 1) RECETOX, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5, 625 00, Brno, Czech Republic, [rebecca.strada@recetox.muni.cz](mailto:rebecca.strada@recetox.muni.cz)
- 2) Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5, 625 00, Brno, Czech Republic
- 3) Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Czech Academy of Sciences, Flemingovo náměstí 542/2, Prague 6, 160 00 Czech Republic
- 4) Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Charles University in Prague, Hlavova 2030, Prague 2, 128 40, Czech Republic

Hemicroconaines and croconaines are a class of polymethine fluorescent dyes. They are higher homologues of squaraines with a five-membered central carbocycle in the chromophore. Due to their narrow and intense absorption band, good photo and thermal stability, and strong solvatochromism, such dyes have attracted considerable interest toward possible applications in photodynamic and photothermal therapy.

We prepared a small library of these dyes by condensation of croconic acid with aromatic heterocycles through the exocyclic methyl group.

The hemicroconaines possess strong absorption and emission in the visible region, while croconaines, analogously to heptamethines, in the so-called tissue transparent window (600-900 nm). In both cases, the dyes are showing relatively small Stokes shift.

The photophysical properties of the dyes in our library and their stability and photostability are studied in polar protic solvents, which are relevant to biological conditions. We are also using quantum chemical calculations to further support our observations.

## Acknowledgement

This work was supported by the Czech Science Foundation (GJ20-30004Y), CETOCOEN EXCELLENCE Teaming 2 (CZ.02.1.01/0.0/0.0/17\_043/0009632), and RECETOX RI (LM2018121).

# Uptake of Methylmercury by Local Microalgae from Huelva Province, Spain

*Samuel Šimanský<sup>1</sup>, Ivana Márová<sup>1</sup>, Živan Gojkovič<sup>2</sup>, Carlos Vilchez<sup>2</sup>*

*1) Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, INSTITUTE OF PHYSICAL AND APPLIED CHEMISTRY, Purkyňova 464, 612 00 Brno-Medlánky, Česko*

*2) Algae Biotechnology Group, CIDERTA, University of Huelva, 21007 Huelva, Spain*

Mercury (Hg) is an ubiquitous trace metal widely distributed in the natural environment, with high toxicity and bioaccumulation properties. Among the Hg species, the methylmercury or MeHg stands as one of the most pernicious contaminants. MeHg owns its high toxicity to its pronounced binding affinity with proteins. Consequently, this prompts biomagnification throughout the entire spectrum of the food chain, spanning from plankton to upper-level predators. A primary pathway for Hg entry into the food chain is the uptake and bioconcentration by phytoplankton. Evidence suggests that exposure to high concentrations of both inorganic Hg and MeHg causes toxic effects in primary producers, including reduced growth rate, decrease in photosynthetic activity, and heightened oxidative stress. This study aims to shed light on the effects of methylmercury exposition and its biomagnification and subcellular distribution by two extremophile microalgae strains from Huelva province, Spain. To the best of our knowledge, such study has not yet been performed.

## Acknowledgement

The funding of this research was provided by EU project - FEDER UHU 202065 of University of Huelva and by projects ERASMUS+, FREEMOVERS and EXCELCHEM of Brno University of Technology, Faculty of Chemistry.

# Photovoltaic Microparticles for Controlled Production of Hydrogen Peroxide

*Anna Tvrdoňová, Marie Jakešová, Eric Daniel Głowacki*

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

Light-induced production of reactive oxygen species (ROS) by nanoparticles has been discussed due to its high spatial and temporal resolution, non-invasiveness, and potential applications in diverse fields, including tissue regeneration. Light serves as a wireless power source, facilitating the transduction of energy into stimulation current, heat, or chemical reactions. The heat and/or chemical reactions can result in the generation of ROS, particularly hydrogen peroxide (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>), which offers the capability to open peroxide-sensitive ion channels, thereby triggering an action potential. Researchers use the photoexcitation of organic polymer nanoparticles to undergo an autooxidation process, thus inducing ROS production. Alternatively, a plasmonic photothermal mechanism has been employed, generating ROS simultaneously by heating gold nanoparticles

Our research focuses on the light-induced redox reactions at the surface of photovoltaic particles, aiming to control H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> generation as previously studied with macroscopic devices [3]. Utilizing organic semiconductor materials, we have successfully established photovoltaic particles, even at thickness levels less than 100 nm. The photoactive layer absorbs light in a tissue transparency window (660 nm) enabling further in vivo applications. H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> production is achieved through an oxygen reduction reaction on the photoactive layer, with the concurrent oxidation of an electron donor on a conductive layer during continuous light exposure.

This study examines the optimization of the photovoltaic microparticles production and characterization of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> evolution using spectrophotometry assay. Our findings show the potential of light-induced redox reactions on photovoltaic nanoparticles, with implications for a wide range of applications, particularly in the context of controlled tissue stimulation.

## Acknowledgement

CzechNanoLab project LM2023051 funded by MEYS CR is gratefully acknowledged for the financial support of the measurements/sample fabrication at CEITEC Nano Research Infrastructure.



# Basic Analysis of Concentrate From Membrane Processes on The Site of an Industrial Laundry

*Jan Vespalec, Martina Repková*

*Brno University of Technology, Faculty of Chemistry, Department of Chemistry and  
Technology of Environmental Protection, Purkyňova 464/118 612 00, Brno,  
Jan.Vespalec@vut.cz*

There is a limited amount of fresh water in the world. Almost everyone knows this fact, so companies are considering water reuse. In some cases, however, the thought of what waste we produce when we reuse water is overlooked.

This article deals with the classification of concentrate from membrane processes, specifically reverse osmosis concentrate. Membrane technology was used for water reuse in an industrial laundry. It is necessary to consider how the concentrate is subsequently handled in membrane processes. The concentrate may be concentrated to the point that it no longer meets the legal limits. The following limitations were monitored: Decree No 428/2001, which defines the sewer regulations and Decree No 8/2021, which defines hazardous waste. This work aims to determine if it is possible to discharge reverse osmosis concentrate into the sewerage system and whether it is hazardous waste or not.

The results of this work show that the monitored parameters present in the reverse osmosis concentrate osmosis are above the limit for discharge to the sewer. Still, at the same time, they are below the limit to be classified as hazardous waste.

## Acknowledgement

I want to thank ASIO TECH spol. s r.o. for the possible cooperation on the membrane unit.

# Modelling the Controlled Release of Substances through a Polymer Membrane in a Biological Environment

*Darya Zhurauliova\*, Miloslav Pekař*

*Faculty of Chemistry, Brno University of Technology, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Czech Republic, \*Corresponding author: xczhurauliova@utbr.cz*

Hydrogels are becoming the focus of increasing interest in research due to their unique properties, especially in transport and release of substances. These three-dimensional hydrophilic systems have the ability to retain large amounts of water and biological fluids, which increases their biocompatibility and widens the spectrum of applications. The research of these materials makes it possible to investigate and model the transport and release of substances into the biological environment]. Understanding the basic parameters controlling the release of substances through the polymer membrane is crucial for accurate simulation and prediction of the overall release profile. A common mechanism used in modeling is diffusion governed by Fick's law with constant or variable diffusion coefficients.

The aim of this work was to develop and evaluate a two-dimensional axisymmetric model with defined materials, for which different values of porosity and diffusion coefficients were included. The diffusion coefficient is a less interesting variable in the field of transport properties,

as it is influenced by the size of the molecules and the characteristics of the polymer network. By changing such a variable, the course of release of the model substance can be influenced, which makes it possible to change the properties of the designed hydrogel systems according to the required applications.

The creation of the model was carried out in the COMSOL Multiphysics software environment. Transport of Diluted Species physics was used, in which the Porous Medium condition was included, and Laminar Flow physics were also presented in the model. Although the flow rate was zero, the gravity condition was introduced. The obtained graphs of the dependence of concentration on time and the model describe the course of transport, respectively. releasing the substance through the polymer membrane into the biological environment. The designed model should correspond

to a real sample of fertilizer or gel balls containing a medicinal or bioactive substance. Model dye

(e.g. methylene blue) was used to determine the release properties using the appropriate experimental methods.

Using COMSOL Multiphysics, we were able to quantitatively evaluate the release process of a model substance through a polymer membrane into the biological environment and investigate the influence of various factors, including changes in the values of the diffusion coefficient and porosity

of the polymer membrane. In the study devoted to time dependence, all the

obtained data indicate that by changing the diffusion coefficient or porosity, the course of release of the model substance can be influenced, which makes it possible to change the transport or release properties of hydrogel systems according to the desired applications.

#### Acknowledgement

This research project was supported by Faculty of Chemistry, Brno University of Technology (BUT), Czech Republic, the project BUT – internal BUT projects, No. FCH-S-23-8303.