

1P-01

APLIKACE MAGNETOSEPARAČNÍCH TECHNIK PRO IZOLACI POŠKOZENÉ DNA

MARTINA ZATLOUKALOVÁ^a, VERONIKA NEZHODOVÁ^a, JITKA ULRICOVÁ^a, VLADIMÍR KŘEN^b a JAN VACEK^{a*}

^a Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého, Hněvotínská 3, 775 15 Olomouc,

^b Mikrobiologický ústav AV ČR, Videňská 1083, 142 20 Praha
jan.vacek@upol.cz

Paramagnetické mikročástice jsou často využívaným separačním nástrojem při analýze biomakromolekul. Umožňují na svůj povrch specificky vázat molekuly DNA a po následné inkubaci s interagujícími látkami oddělit vzniklé reakční produkty, které jsou dále analyzovány.

Práce se zabývá využitím paramagnetických partikul při izolaci produktů oxidativního poškození DNA vyvolaném komplexem flavonoid-kov. Flavonoidy jsou přírodní látky, které vynikají svými antioxidačními účinky. Jejich antioxidační kapacita může být ovlivněna interakcí s ionty kovů, což může vést k tvorbě reaktivních komplexů. Tyto komplexy mohou přímo interagovat s DNA, popřípadě ji nepřímo poškozovat produkcí reaktivních forem kyslíku¹.

Ukotvení molekuly DNA na povrch mikročástic je založeno na hybridizaci oligo(T) sekvence kovalentně navázané na povrchu magnetického nosiče s oligo(A) sekvencí, která je součástí studované DNA. Po inkubaci DNA s komplexem flavonoid/kov, byly produkty oxidativního poškození DNA odděleny od interferujících látek a stanoveny pomocí *ex situ* cyklické voltametrie a voltametrie s vkládaným pravoúhlým napětím na povrchu pyrolytické grafitové elektrody. Výsledky elektrochemických analýz byly srovnány s elektroforetickou analýzou poškozené DNA.

Aplikace paramagnetických mikročástic v kombinaci s *ex situ* voltametrickými technikami se ukazuje jako jednoduchý nástroj pro analýzu nízkých koncentrací poškozené DNA v nadbytku interferujících látek.

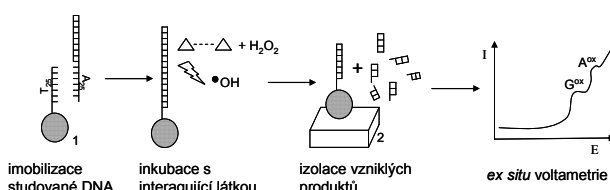


Schéma 1. Aplikace magnetoseparačních technik při studiu pro-oxidačních vlastností flavonoidů v komplexu s kovy. 1 – mikročástice, 2 – magnet

Práce byla financována GA ČR (303/09/HO48) a interním grantem UP (LF_2012_010).

LITERATURA

1. Zatloukalová M., Křen V., Gažák R., Kubala M., Trouillas P., Ulrichová J., Vacek J.: *Bioelectrochemistry* 82, 117 (2011).

1P-02

THERMODYNAMIC CONSIDERATION ON THE SPECIFIC SORPTION AND MOLECULAR RECOGNITION OF SOME PHENOLIC ACIDS

NATALIA DENDERZ^{a*}, JOZEF LEHOTAY^a, JOZEF ČIZMÁRIK^b, and JANA SÁDECKÁ^a

^a Institute of Analytical Chemistry Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, ^b Department of Pharmaceutical Chemistry, Faculty of Pharmacy, Comenius University in Bratislava, Odbojárov 10, 832 32 Bratislava, Slovak Republic

natalia.denderz@stuba.sk

Molecularly imprinted polymer-based columns (MIP-based columns) with defined molecular recognition properties can be successfully prepared by the well-known technique – molecular imprinting¹. This useful procedure is appropriate to the preparation of highly cross-linked MIPs capable of molecular recognition². The approach is based on complex formation between a template molecule, functional and cross-linked monomers. Subsequent removal of the template reveals specific three-dimensional binding sites complementary to the corresponding structure or group of structures^{3,4}.

This work presents thermodynamic interpretation of the specific sorption by the MIPs and the non-imprinted polymer (NIP). MIPs and the NIP on the base of acrylamide prepared by a bulk polymerization were used as stationary phases for the HPLC analysis. The thermodynamic processes were carried out to investigate the temperature effects during sorption processes of phenolic acids in methanol and acetonitrile (porogen) as mobile phases. Gallic, gentisic, vanillic, syringic, 4-hydroxybenzoic and protocatechuic acids were successively used as templates. Values of retention factors were measured over the temperature range of 20–60 °C. There were determined van't Hoff curves – dependences between logarithms of the retention factors (ln k) and the inverse value of the temperature (1/T).

Sorption selectivities (evaluated by the imprinting factors, IFs) of the MIPs and the NIP toward investigated analytes were evaluated chromatographically.

Contrary to expectations, the driving force for the affinity of the target molecules for the investigated polymers was the enthalpic term.

This work was supported by the VEGA grant No. 1/0164/11.

REFERENCES

1. Tamayo F. G., Titirici M. M., Martin-Esteban A., Sellergren B.: *Anal. Chim. Acta* 542, 38 (2005).
2. Matsui J., Kubo H., Takeuchi T.: *Anal. Chem.* 72, 3286 (2000).
3. Soleimani M., Ghaderi S., Afshar M. G., Soleimani S.: *Microchem. J.* 100, 1 (2012).
4. Gavrilovic I., Mitchell K., Brailsford A. D., Cowan D. A., Kicmana A. T., Ansell R. J.: *Steroids* 76, 478 (2011).

1P-03

DETERMINATION OF RESIDUAL CHLORIDE AND FORMATE IN HYALURONAN OLIGOMERS USING ELS DETECTION

DAGMAR ČOŽÍKOVÁ*, MARTINA HERMANNOVÁ, and VLADIMÍR VELEBNÝ

Contipro Pharma, 561 02 Dolní Dobrouč 401
dagmar.cozikova@contipro.com

Hyaluronan (HA) oligomers of defined size are prepared by ion-exchange chromatography¹. Since the separation is carried out in aqueous solution of formic acid, chloride and formate are the potential impurities present in HA oligomers. Commonly used spectrophotometric determination of residual ions in high-molecular weight HA was found out not to be suitable for the quantification of chloride in HA oligomers². For this reason, the aim of this work was to find out appropriate analytical method that should be used for quantification of small amounts (less than 0.1% w/w) of chloride and formate in pure HA oligomers of pharmaceutical quality.

High performance liquid chromatography (HPLC) with the addition of evaporative light scattering detector (ELSD) allows determination of analytes free of any chromophoric and fluorophoric groups that are undetectable by common HPLC detectors³. Furthermore, charged and neutral organic and inorganic analytes can be simultaneously analyzed within a single chromatographic run. Therefore, ELS detecting technique with the combination of PrimesepTM mixed-mode stationary phase was evaluated. These stationary phases provide multiple types of interactions with analytes. Ionizable compounds interact with the stationary phase by reverse-phase, ion-exchange or ion-exclusion mechanism. The specific properties of PrimesepTM mixed-mode columns offer separation of polar and non-polar compounds at both analytical and preparative scales in isocratic and gradient modes.

In conclusion, the new alternative method for the determination and quantification of chloride and formate in HA oligomers was accomplished. Total analysis time was less than 15 minutes. Additionally, all validation characteristic that are strictly required when HA oligomers can be used in pharmaceutical application were fulfilled.

REFERENCES

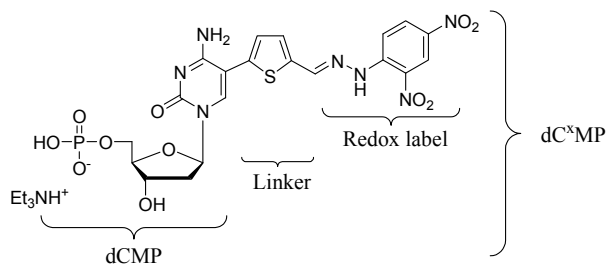
1. Kogan G., Šoltés L., Stern R., Schiller J., Mendichi R.: Stud. Nat. Prod. Chem. 34, 863 (2008).
2. Alcázar A., Fernández-Cáceres P. L., Martín M. J., Pablos F., González A. G.: Talanta 61, 95 (2003).
3. Mingjia W., Pacáková V., Štulík K., Sacchetto G. A.: J. Chromatogr., A 439, 363 (1988).

1P-04

ELECTROCHEMICAL BEHAVIOUR OF A NEW DNA-LABEL: 2,4-DINITROPHENYLHYDRAZINE, ITS DEOXYCYTIDINE MONOPHOSPHATE CONJUGATE AND LABELED DNA AT m-AgSAE

ALEŠ DAŇHEL^a, HANA PIVOŇKOVÁ^a, VERONIKA RAINDLOVÁ^b, MICHAL HOCEK^b, and MIROSLAV FOJTA^a^a Institute of Biophysics, Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., Kralovopolska 135, 612 65 Brno, ^b Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., Flemingovo nám. 2, 166 10 Prague 6 danhel@ibp.cz

Redox DNA-labeling significantly increases selectivity and sensitivity of sensors and it extends signal response diversity of observed bio-molecules, e.g. oligonucleotides (ONs), nucleic acids (DNAs)¹. Selected redox labels have been already used for synthesis of labeled nucleotides (e.g. labeled deoxycytidine monophosphate (dC^xMPs), Scheme 1.) and the dC^xMPs were sufficiently enzymatically incorporated into the required ONs or DNAs². Thus labeled biomolecules and modern voltammetric methods, using a mechanically stable and robust mercury meniscus modified silver solid amalgam electrode (m-AgSAE), represent a novel, sensitive and robust tool for development of bioassays applicable in toxicology, molecular biology and medicine³.

Scheme 1. Structure of the labeled nucleotide dC^xMP

The main aim of this work is a study of electrochemical behaviour of the DNA redox label 2,4-dinitrophenylhydrazine, corresponding dC^xMP and labeled DNA at m-AgSAE using cyclic voltammetry, adsorptive stripping voltammetry and transfer stripping voltammetry for its further application in biomedicine.

Financial support from The Czech Science Foundation GACR (project P206/12/G151) and GA ASCR (IAA400040901) is gratefully acknowledged.

REFERENCES

1. Fojta M., Havran L., Pivonkova H., Horakova P., Hock M.: Curr. Org. Chem. 15, 2936 (2011).
2. Raindlova V., Pohl R., Sanda M., Hock M.: Angew. Chem., Int. Ed. 49, 1064 (2010).
3. Hock M., Fojta M.: Chem. Soc. Rev. 40, 5802 (2011).

1P-05

OBTENTION OF TWO POLYPHENOLS – ENRICHED FRACTIONS FROM PLANT SOURCES

JOSÉ CHEEL^{a*}, EVA SALVETOVÁ^a, DAGMAR ČOŽÍKOVÁ^a, MARTINA HERMANNOVÁ^a, JIŘINA SPILKOVÁ^b, TOMÁŠ MUTHNÝ^a, and VLADIMÍR VELEBNÝ^a

^a Department of Research and Development, Contipro Biotech, Dolní Dobrouč 401, 561 02, Dolní Dobrouč,

^b Department of Pharmacognosy, Faculty of Pharmacy, Charles University, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové
Jose.Cheel-Horna@contipro.com

Epilobium angustifolium is utilized in folk medicine for improving skin sore¹ and green coffee extracts have been reported to *in vitro* contribute to the skin protection from UV irradiation². Oenothien B (OB) is the predominant ellagitannin in *Epilobium angustifolium* (EA) aerial parts, whereas chlorogenic acid (CGA) is the most abundant polyphenol occurring in green coffee beans (GCB) from *Coffea arabica*. The antioxidant³, anti-inflammatory⁴ and anti-photoaging effects^{1,2} of OB and CGA make these natural compounds suitable targets to be enriched and thereby optimizing the benefits of their parent fractions and extracts.

As a part of an ongoing research for obtaining natural cosmeceutical ingredients from plant origin, our study aimed to obtain two fractions from *Epilobium angustifolium* aerial parts and green coffee beans by applying selective fractionation. Samples of *Epilobium angustifolium* aerial parts and coffee green beans were botanically authenticated by microscopical methods and representative amounts of these samples were ground and further extracted with ethanol by maceration. The fractions were obtained by partitioning and adsorption operations. By using HPLC-DAD-MS, oenothien B and chlorogenic acid were identified as the major constituents of fractions from EA and GCB, respectively. The total content of polyphenols in the fractions was determined spectrophotometrically accounting for more than 50 %. These two fractions could be potential candidates to be used as active ingredients in dermatological and cosmetic formulations.

REFERENCES

1. Kiss A. K., Bazylko A., Filipek A., Granica S., Jaszewska E., Kiarszys U., Kosmider A., Piwowarski J.: *Phytomedicine* 18, 557 (2011).
2. Hsiu-Mei Ch., Tsen-Jung L., Chen-Yuan Ch., Chiung-Wen Ch., Kuo-Chiu H., Pei-Ching F., Kuo-Ching W.: *Food Chem. Toxicol.* 49, 309 (2011).
3. Somporn Ch., Kamtuo A., Theerakulpisut P., Siriamornpun S.: *J. Sci. Food Agr.*, doi: 10.1002/jsfa.5568.
4. Cichocki M., Blumczynska J., Baer-Dubowska W.: *Toxicology* 268, 118 (2010).

1P-06

ANALÝZA NEALKOHOLICKÝCH NÁPOJOV FLUORESCENČNOU SPEKTROMETRIOU

ĽUDOVÍT ŽIAK, ROMAN POLÁČEK, PAVEL MÁJEK, DIANA MARKECHOVÁ, FRANTIŠEK ČACHO a JANA SÁDECKÁ*

Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
jana.sadecka@stuba.sk

Konzumácia nealkoholických nápojov je celosvetovo veľmi rozšírená, pričom ich spotrebu v súčasnosti významne ovplyvňuje reklama. Tento trend sa prejavuje hlavne u detí a mládeže, kde prieskum ukázal, že 27 % žiakov základných škôl pije kolové nápoje v množstve viac ako 0,5 l denne. Kolové nápoje majú vysoký obsah cukru, čo vedie k príjmu 55 g cukru po konzumácii 0,5 l kolového nápoja. Dôsledkom môže byť znížený príjem potravy, narastajúca obezita, vznik zubného kazu a iné.

Kolové a energetické nápoje obsahujú 150 až 400 mg kofeínu v 1 litri, čo pri vyššej konzumácii môže viesť až k závislosti. Nealkoholické nápoje môžu obsahovať ďalšie zložky ako sú oxid uhličitý, kyseliny, umelé sladidlá v diétnych nápojoch, konzervačné látky a prírodné aj syntetické farbivá. Najčastejšie používaným prírodným farbivom v kolových, ale aj energetických nápojoch je karamel. Karamel je zložitá zmes zložiek, ktoré vznikajú karamelizáciou cukrov samotných, alebo s prídavkom iných látok. Podľa International Technical Caramel Association sa karamel delí na štyri skupiny (I, II, III, IV), pričom v kolových nápojoch sa používa karamel IV (E150d) a v energetických nápojoch karamel III (E150c). Na stanovenie kofeínu a karamelu sa obvykle používa HPLC a kapilárna elektroforéza. Kofeín a karamel I (E150a) vykazujú prirodzenú fluorescenciu, čo sa využilo pri stanovení kofeínu vo farmaceutických prípravkoch¹, alebo stanovení karamelu E150a v brandy².

Cieľom tejto práce bolo vypracovať metódu založenú na synchrónnej fluorescencii umožňujúcu priame simultánne stanovenie kofeínu a karamelu v kolových a energetických nápojoch. Namerali sa synchrónne fluorescenčné spektrá zmesí v intervale vlnových dĺžok 200 až 500 nm s rozdielom emisnej a excitujúcej vlnovej dĺžky 70 až 100 nm. Na vyhodnotenie sa využila metóda viacrozmernej kalibrácie – metóda parciálnych najmenších štvorcov (partial least-squares PLS1), pričom sa dosiahla dobrá zhoda týchto výsledkov s výsledkami získanými odporúčanými metódami.

Práca vznikla za podpory Vedeckej grantovej agentúry VEGA, projekt č. 1/0182/11.

LITERATÚRA

1. Alves J. C. L., Poppi R. J.: *Anal. Chim. Acta* 642, 212 (2009).
2. Sádecká J., Tóthová J.: *Eur. Food Res. Technol.* 230, 797 (2010).

1P-07

SROVNÁNÍ KONCENTRACÍ IONTŮ
V ATMOSFÉRICKÝCH AEROSOLECH PM1
VZORKOVANÝCH NA NITRÁTCELULÓZOVÉ
A TEFLONOVÉ FILTRYALENA KOŘÍNKOVÁ^{a,b}, PAVEL MIKUŠKA^b,
ZBYNĚK VEČEŘA^b a KAMIL KRŮMAL^b^a Fakulta Chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 118, 112 00 Brno; ^b Ústav analytické chemie AV ČR, v.v.i., Veveří 97, Brno
korinkova@iach.cz

Atmosférickým aerosolům je věnována zvýšená pozornost především kvůli jejich vlivu na zemské klima¹ a lidské zdraví. Pro zjištění zdrojů atmosférických aerosolů a míry jejich zdravotního rizika je nutné znát koncentraci a chemické složení aerosolů. Aerosoly jsou většinou vzorkovány na filtry, materiál a typ filtrů se volí dle analyzovaných sloučenin.

Příspěvek se zabývá porovnáním koncentrací iontů v částicích atmosférického aerosolu frakce PM1 vzorkovaných paralelně na nitrátcelulózové a teflonové filtry.

Atmosférické aerosoly frakce PM1 byly vzorkovány ve Šlapanicích na zahradě rodinného domu (prostředí malého města) a na dopravně zatížené ulici v centru Brna (zastoupení městské aglomerace). Vzorkování probíhalo po dobu jednoho týdne (expozice byla 24 h) v letním a zimním období v letech 2009 a 2010.

Aerosoly PM1 byly vzorkovány na nitrátcelulózové filtry (porozita 3 μm, průměr 150 mm, Satorius), pomocí vysokoobjemového vzorkovače (DHA-80, 30 m³ h⁻¹, Digitel). Polovina nitrátcelulózového filtru byla extrahována deionizovanou vodou v ultrazvukové lázni a následně bylo stanoveno 6 vybraných aniontů (fluoridy, chloridy, dusitany, dusičnany, sírany a šťavelany) a 5 kationtů (Na⁺, K⁺, NH₄⁺, Ca²⁺ a Mg²⁺) pomocí iontové chromatografie (ICS-2100, Dionex). Druhá část filtru byla analyzována s ICP-MS (Agilent) na celkový obsah 15 kovů.

K paralelnímu vzorkování PM1 na teflonové filtry (porozita 1 μm, průměr 47 mm, typ Zefluor, PALL) byl použit nízkoobjemový vzorkovač (průtok 1 m³ h⁻¹). Mezi cyklo-nový inlet (1 μm, URG) a teflonový filtr byl zařazen anulární difuzní denuder, kterým byly eliminovány interference plyných polutantů (NH₃, NO₂, HNO₃, HONO, SO₂, O₃, HCl, VOC, apod.). Exponované teflonové filtry byly extrahovány v deionizované vodě v ultrazvukové lázni a následně byly analyzovány stejné anionty a kationty jako u nitrátcelulózových filtrů.

Detailní výsledky a příčiny rozdílných koncentrací iontů na obou filtrech budou prezentovány.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR P503/11/2315; GAČR P503/12/G147 a výzkumného záměru AV ČR, v.v.i. číslo: RVO: 68081715.

LITERATURA

- Novakov T., Corrigan C. E.: Geophys. Res. Lett. 23, 2141 (1996).

1P-08

SPECTROSCOPIC STUDY OF HUMIC SUBSTANCES
PHOTODEGRADATIONFRANTIŠEK NOVÁK^a, ANDREA SÝKOROVÁ^b,
MIROSLAVA NOVOTNÁ^b, MARTINA
ŠESTAUBEROVÁ^a, and RICHARD HRABAL^b^a Biology Centre AS CR, 370 05 České Budějovice, ^b Institute of Chemical Technology, 166 28 Prague 6
novakf@upb.cas.cz

Photodegradation of natural organic matter from different sources was tested to reveal the relationships between stability and structure. Peat humic and fulvic acids (PHA, PFA) and fulvic acids from Rašelinik creek¹ (DOC), isolated with the respect to IHSS recommendations², were characterized by elemental analysis, ¹³C NMR³, FTIR and UV/VIS spectroscopy (Table I). The solutions containing 11 mg of sample in 1 ml of deionized water were irradiated by 20 W UV lamp (Omnilux 3U, color temperature of 6000 K) for 168 hours.

Table I

Characteristics of tested HS: content of C, H, N, aromaticity *f_a*, relative abundance of C_{COOH}, absorbances before (A) and after (Ar) UV irradiation

Characteristic	PHA	PFA	DOC
C / %	50.57 ± 0.00	46.34 ± 0.04	45.52 ± 0.02
H / %	4.56 ± 0.00	4.30 ± 0.01	4.25 ± 0.04
N / %	2.04 ± 0.00	1.26 ± 0.00	0.95 ± 0.00
<i>f_a</i> / %	44.8	22.4	42.2
C _{COOH} / %	15.4	18.3	13.6
A ₄₆₅ /A ₆₆₅	8.4	15.1	13.8
A ₄₆₅ (160 mg/l)	0.616	0.204	0.240
Ar ₄₆₅	0.103	0.086	0.124

Decrease of concentration and structural alterations of humic substances (HS) were observed as a result of degradation during exposure to soft UV irradiation. Absorbance at 465 nm, proportional to the HS concentration, decreased 2–6 times (Table I), indicating that PHA was the substance most sensitive to photochemical reactions. Changes in FTIR parameters suggest decarboxylation of HS (I₁₇₀₀/I₁₄₅₀) and relative increase of aromatic rings content (I₁₆₀₀/I₁₄₅₀). The greatest degree of decarboxylation was found at HS originating from DOC.

This work was supported by the project Ziel3/Cil3 Czech Republic – Saxony, No. 100018967.

REFERENCES

- Šestaubrová M., Novák F.: Acta Univ. Agricult. Silvicult. Mendel. Brun. 59, 337 (2011).
- Malcolm R. L., in: *Humic Substances in The Aquatic and Terrestrial Environment*. (Allard B., Borén H., Grimvall

- A., ed.) p. 9. Springer Verlag, New York 1991.
3. Novák F., Hrabal R.: Chem. Listy 105, 752 (2011).

1P-09

CHEMICKÉ SLOŽENÍ A TĚKAVOST
ESENCIÁLNÍCH OLEJŮ

**NELA KUBÁTKOVÁ^{a,b}, KAMIL KRŮMAL^a, ZBYNĚK
VEČERA^a a PAVEL MIKUŠKA^a**

^a Ústav analytické chemie AV ČR, v.v.i., Veveří 97, 602 00
Brno; ^b Fakulta chemická, VUT, Purkyňova 118, 612 00 Brno
kubatkova@iach.cz

Esenciální oleje jsou směsi těkavých látek olejovité konzistence a lipofilního charakteru¹. Jsou sekundárním produktem metabolismu vyšších rostlin, ze kterých se získávají zejména extrakcí, při které se využívá jejich rozpustnosti v organických rozpouštědlech. Jedna esence může obsahovat 50 i více komponent. Pro určení jejich chemického složení se používá zejména kapalinová² a plynová chromatografie³ (LC, GC). V kombinaci s hmotnostní spektrometrií byla technika GC (Agilent, 7890-A, 5975C) použita pro určení chemického složení šesti vybraných esenciálních olejů *Lavandula species*, *Cymbopogon nardus*, *Citrus aurantifolia*, *Juniperus communis*, *Myrtus communis* a *Cinnamomum zeylancium* i v rámci této studie.

Hlavními složkami *Lavandula species* jsou linalool (51,4 %) a linalyl acetát (26,6 %). Citronellal (40,4 %) a geraniol (17,1 %) byly identifikovány jako hlavní složky oleje *Cymbopogon nardus*. Limonen (52,9 %) a γ -terpinen (11,2 %) byly majoritně zastoupeny v oleji *Citrus aurantifolia*, zatímco α -pinen (54,1 %) a β -pinen (17,7 %) v oleji *Juniperus communis*. Eucalyptol (38,0 %) a α -pinen (36,5 %) byly určeny jako hlavní složky *Myrtus communis*. Cinnamaldehyd (62,0 %) a cinnamyl acetát (7,5 %) byly identifikovány jako hlavní složky *Cinnamomum zeylancium*.

Pro stanovení těkavosti jednotlivých složek byly esenciální oleje umístěny do difúzní cely temperované na konstantní teplotu 20 °C. Těkavé složky olejů byly z difúzní cely odváděny proudem dusíku o průtoku 15 ml min⁻¹, který byl poté smícháván s čistým vzduchem tak, aby finální objemový průtok směsi byl 500 ml min⁻¹. Při průchodu této směsi přes WEDD denuder⁴ (denuder se stékajícím filmem kapaliny) byly těkavé komponenty zachyceny ve filmu absorpční kapaliny (*n*-heptan). Takto získaný koncentrát byl odebíráán v pravidelných časových intervalech a analyzován. Koncentrace těkavých složek esencí budou prezentovány.

Tato práce vznikla za podpory grantu Ministerstva kultury, NAKI DF11P01OVV028 a výzkumného záměru AV ČR v.v.i., č. RVO: 68081715.

LITERATURA

1. Bakkali F., Averbeck S., Averbeck D., Idaomar M.: Food Chem. Toxicol. 46, 2 (2008).
2. Mandalari G., Bennett R., Bisignano G., Saija A., Dugo G., Curto R., Faulds C., Waldron K.: J. Agr. Food Chem. 54, 1 (2006).

3. Isidorov V., Krajewska U., Vinogorova V., Vetchinnikova L., Fuksman I., Bal K.: Biochem. Syst. Ecol. 32, 1 (2004).
4. Zdráhal Z., Mikuška P., Večeřa Z.: Anal. Chem. 67, 17 (1995).

1P-10

MIKROČIPOVÁ ELEKTROFORÉZA
KONZERVAČNÝCH A PRÍDAVNÝCH LÁTKOK
V LIEČIVÁCH

**PETER TROŠKA, MARIÁN MASÁR a RÓBERT
BODOR**

Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Mlynská Dolina CH-2, 842 15 Bratislava, Slovenská republika
troska@fns.uniba.sk

Rôzne farmaceutické a kozmetické preparáty a výrobky sú za účelom zvýšenia ich doby trvanlivosti a zlepšenia senzorických vlastností, ako sú chuť, vôňa alebo farba, obohacované rôznymi prídavnými látkami. Monitoring koncentračných úrovní prídavných látok v týchto výrobkoch je nevyhnutný z hľadiska ich potenciálnych toxických účinkov na ľudský organizmus.

Táto práca je zameraná na elektroforetickú separáciu konzervačných látok – metylparabén (MP), propylparabén (PP) a syntetického farbiva – erytrozín (ER). Doposiaľ publikované práce sa zaoberali elektroforetickou separáciou MP a PP s ostatnými parabénmi¹, resp. ER s inými syntetickými farbivami². V tejto práci boli analyzované všetky tri analyty metódou zónovej elektroforézy (ZE) na elektroforetickom mikročipe. Výhody, ktoré so sebou prináša kapilárna elektroforéza (CE) na miniaturizovaných zariadeniach oproti konvenčnej CE, sú dané napríklad kratšou transportnou dráhou (kratšie časy analýzy), prípadne zníženou spotrebou elektrolytov, vzoriek, ale aj produkcie odpadu. Zníženie spotreby činí diel vedie aj k zníženiu finančných nákladov na analýzu.

Za preferovaných pracovných podmienok (potlačený hydrodynamický a elektroosmotický tok) boli optimalizované základné separačné parametre pre rýchle rozlíšenie ER, MP a PP v modelových vzorkách. Analyty boli separované v elektrolytovom systéme o vysokom pH (pH 9,8). Po prídavku komplexotvorného aditíva – β -cyklohextrín³ boli analyty dostatočne rozlíšené za čas cca. 5 min. Pri dávkovanom objeme vzorky 0,9 μ l na elektroforetický mikročip boli vypočítané limity detekcie v rozsahu 0,3–6,3 μ mol l⁻¹ pre študované konzervačné a prídavné látky.

Vypracovaná ZE metóda na mikročipe bola aplikovaná na stanovenie daných analytov vo farmaceutických liečivách používaných pri liečbe gastrofageálnych ochorení.

Táto práca vznikla za podpory grantových agentúr MŠ SR (VEGA 1/1149/12), APVV (VVCE 0070/07) a ERDR OPVaV (SynAnPharm, ITMS: 26240220061).

LITERATÚRA

1. Uysal U. D., Güray T.: J. Anal. Chem. 63, 982 (2008).

2. Pérez-Ruiz T., Martínez-Lozano C., Sanz A., Bravo E.: *Chromatographia* 48, 263 (1998).
3. Zhang L.-Y., Sun M.-X.: *J. Chromatogr.* 887, 4051 (2009).

1P-11**STANOVENÍ ALERGENNÍCH VONNÝCH LÁTEK
METODOU MIKROEXTRAKCE TUHOU FÁZÍ
VE SPOJENÍ S PLYNOVOU CHROMATOGRAPHIÍ****RADKA DIVIŠOVÁ, JANA ZEMANOVÁ,
EVA VÍTOVÁ a KATEŘINA SKLENÁŘOVÁ***Fakulta chemická, Vysoké učení technické v Brně, Purkyňova 118, 612 00 Brno
xmokanova@fch.vutbr.cz*

Vůně se nacházejí v široké škále pravidelně užívaných produktů zahrnující parfém, prací a čisticí prostředky, mýdla, deodoranty, tělové krémy, zubní pasty, aj. Tyto kosmetické přípravky se v současnosti staly masovou záležitostí. Potenciál expozice těmto látkám je proto velmi vysoký, zvláště u těch výrobků, které přicházejí do přímého kontaktu s pokožkou. Kosmetický přípravek může obsahovat až stovky vonných sloučenin. Kromě užítu však mohou tyto substance vyvolat alergické reakce, a to nejen u citlivých jedinců. Prvním ukazatelem iritace je obvykle kožní vyrážka, ale reakce mohou mít i jinou formu, např. nevolnost, závrať, bolest hlavy, aj. Na základě vzrůstající četnosti výskytu alergických reakcí související s aplikací kosmetických přípravků bylo evropskou kosmetickou direktivou taxativně určeno 26 alergizujících vonných látek¹. Na základě této direktivy jsou výrobci povinni deklarovat přítomnost těchto alergenních substancí na štítku produktu, jestliže je překročena hranice 0,01 % pro výrobky typu *rinse-off* a 0,001 % pro výrobky typu *leave-on*. Jiné chemikálie, které není třeba jednotlivě uvádět, jsou seskupeny pod názvem „*perfume*“ či „*aroma*“.

Pro stanovení zmíněných alergenních vonných látek byla použita analytická metoda založená na extrakci analytů pomocí mikroextrakce tuhou fází v headspace prostoru ve spojení s plynovou chromatografií a plamenově ionizačním detektorem. V rámci optimalizace podmínek byl sledován vliv vybraných parametrů na extrakční účinnost, které zahrnovaly typ extrakční vrstvy vlákna SPME, dobu dosažení rovnováhy, dobu extrakce a dobu desorpce.

Optimalizované podmínky byly použity pro validaci SPME-GC metody. Kvantifikace sloučenin byla provedena pomocí externí kalibrace. Validovaná a optimalizovaná metoda SPME-GC byla následně aplikována na vybrané reálné vzorky.

Cílem této práce byl monitoring alergenních vonných látek v kosmetických prostředcích zahrnující krémy, dekorativní kosmetiku, přípravky pro osobní hygienu, dětskou kosmetiku, prostředky bytové chemie a také vzorky potravin se zaměřením na čajové směsi a nápoje.

Tato práce vznikla za podpory projektů FCH-S-11-7, FRVŠ MŠMT ČR projekt č. 1823/G4/2011 a MŠMT ČR, grant č. MSM 0021630501.

LITERATURA

1. SCCNFP/0690/03, Notes of Guidance for Testing of Cosmetic Ingredients and Their Safety Evaluation, 6th revision, SCCP 10th Plenary Meeting, 19 December 2006.

1P-12**VOLTAMMETRIC DETERMINATION
OF FOMESAFEN IN DRINKING WATER AND RIVER
WATER****VÍT NOVOTNÝ, JAN MAŠKA, and JIŘÍ BAREK***UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry,
Department of Analytical Chemistry, Charles University,
Albertov 2030, 128 43 Prague 2*

The herbicide fomesafen has been developed for the preemergence protection of beans and soybeans against weeds¹. Compounds with similar structure exhibit toxicity toward aquatic organisms are endocrine disruptors and interfere with blood formation². This work is a continuation of many previous successful efforts at monitoring electroactive pollutants^{3,4}.

The differential pulse voltammetric behavior of fomesafen a AgSAE has been studied in the pH range 2–12, and methanol to BR buffer ratio 1:9 to 1:1. The optimum conditions found were a mixture of BR buffer pH 8 – methanol 8:2. The DPV behavior of fomesafen has been investigated in the concentration range $1 \cdot 10^{-5}$ – $1 \cdot 10^{-7}$ mol L⁻¹. The calibration dependencies were linear. The detection limit reached for DPV of fomesafen in a solution of 2 mL methanol and 8 mL BR buffer pH 8 was $3 \cdot 10^{-7}$ mol dm⁻³. Adsorption stripping voltammetry was also studied, but no significant enhancement of the signal was achieved. The results of the determination of fomesafen in drinking water and river water will be presented.

REFERENCES

1. Santos J. B., Jakelaitis A., Silva A. A., Costa M. D., Manabe A., Silva M. C. S.: *Weed Res.* 2006, 46.
2. Teshima R., Nakamura R., Nakajima O., Hachisuka A., Sawada J.-I.: *Toxicol. Lett.* 150, 277 (2004).
3. Yosypchuk B., Barek J.: *Crit. Rev. Anal. Chem.* 39, 189 (2009).
4. Novotný V., Barek J.: *Chem. Listy* 103, 217 (2009).

IP-13

DNA MODIFIKOVANÁ 7-DEAZAPURINY: ZHÁŠENÍ FLUORESCENCE BARVIVA SYBR GREEN II A ELEKTROCHEMICKÉ VLASTNOSTI**MIROSLAVA FOJTOVÁ, ZDENKA VYCHODILOVÁ, PETRA HORÁKOVÁ, PETR ORSÁG, HANA PIVOŇKOVÁ, LUDEK HAVRAN a MIROSLAV FOJTA***Biofyzikální ústav AVČR, v.v.i., Královopolská 135, 612 65 Brno
fojtova@ibp.cz*

7-Deazapuriny jsou analogy purinových nukleobází, ve kterých je dusíkový atom v poloze 7 nahrazen skupinou CH. V důsledku toho tyto báze nejsou schopny Hoogsteenova párování, zatímco schopnost vytvářet Watsonovy a Crickovy páry u nich zůstává zachována. Neschopnost víceřetězcové struktury DNA prostřednictvím Hoogsteenova párování je využívána v některých aplikacích polymerázové řetězové reakce (PCR) při amplifikaci fragmentů DNA, u nichž by tendence k tvorbě triplexů či kvadruplexů negativně ovlivňovala průběh PCR. DNA modifikované 7-deazapuriny mají některé specifické fyzikálně chemické vlastnosti, které ovlivňují výběr analytické metody vhodné k jejich stanovení. Přítomnost 7-deazaguaninu (G*) v DNA se projevuje silným zhasením fluorescence barviva SYBR Green II v komplexu s dvouřetězcovou (ds) DNA, na niž je založena rozšířená metoda monitorování amplifikace DNA při kvantitativní „real time“ PCR. Pro tento zhasací efekt je nutná interakce SYBR Green II s dsDNA obsahující G* a projevuje se již při relativně malých stupních záměny G za G* (10–20 %), zatímco přítomnost denaturované DNA obsahující G* ve směsi s nemodifikovanou DNA nemá na fluorescenci významný vliv. V případě 7-deazaadeninu (A*) nebyl analogický zhasací efekt pozorován. Oba 7-deazapuriny vykazují ve srovnání s jejich přirozenými protějšky specifické elektrochemické vlastnosti, jmenovitě nižší potenciál oxidace na uhlíkových elektrodách. Jelikož G* je oxidován při potenciálu o více než 100 mM méně pozitivním než guanin (či jakákoli jiná přirozená složka DNA), lze jej využít jako nezávisle detekovatelnou elektroaktivní značku vhodnou pro analýzu DNA fragmentů amplifikovaných PCR či pro sledování jiných enzymových reakcí vedoucích k inkorporaci modifikovaných nukleotidů, např. prodlužování DNA pomocí terminální deoxynukleotidyl transferasy. Kombinací elektrochemických (měření oxidace G*) a optických (zhasení fluorescence SYBR Green II) metod lze získat podrobné informace o vlastnostech modifikované DNA.

Tato práce vznikla za podpory grantu GA AVČR č. IAA400040901.

LITERATURA

1. Pivonkova H., Horakova P., Fojtova M., Fojta M.: Anal. Chem. 82, 6807 (2010).

IP-14

CHEMOMETRICKÉ HODNOTENIE RIZIKA HYPERTENZIE U DETÍ**VIERA MRÁZOVÁ^a, MIROSLAVA MAKOHUSOVÁ^a, LÁSZLÓ KOVÁCS^b a KATARÍNA BABINSKÁ^b**

^a Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita sv. Cyrila a Metoda, Nám. J. Herdu 2, 917 01 Trnava, ^b 2. detská klinika Lekárskej fakulty Univerzity Komenského a Detská fakultná nemocnica s poliklinikou, Limbová 1, 833 40 Bratislava
viera.mrazova@ucm.sk

Chemometrické spracovanie medicínskych dát môže účinne podporovať diagnostiku a umožňuje sledovanie progresie ochorenia. Na rozdiel od posudzovania výsledkov laboratórných testov jednotlivu, kombináciou týchto parametrov získame komplexnejšiu informáciu, ktorá môže usmerniť lekára v dagnostike¹.

Detská hypertenzia je oblasťou rastúceho záujmu a významu. Včasná identifikácia detí s rizikom hyperetenzie je dôležitá z dôvodu zabránenia vážnym, dlhodobým komplikáciám spojeným s nezistením choroby². Hypertenzia je choroba, ktorá „nebolí“, prebieha často nepozorovane dlhé roky. Preto je ju potrebné včas diagnostikovať a adekvátne liečiť. Diagnostické kritériá pre zvýšenie krvného tlaku u detí sú založené na predpoklade, že krvný tlak u detí sa zvyšuje s vekom a telesnou hmotnosťou, takže nie je možné využiť úroveň krvného tlaku na definovanie hypertenzie ako u dospelých³. Prevalencia detskej obezity sa vo vyspelých krajinách zvyšuje alarmujúcim tempom⁴. U obeznych detí je približne trojnásobne vyššie riziko vzniku hypertenzie ako u neobeznych detí⁵.

Hypertenzia u detí prináša so sebou veľa otázok, ktoré si vyžadujú pozornosť. Mnohorozmerná analýza dát umožňuje objasniť rizikové faktory u detí, ktoré môžu prispievať do určitej miery k rozvoju hypertenzie. Cieľom tejto práce je výber faktorov, ktoré významne ovplyvňujú hypertenziu u detí použitím výsledkov laboratórných testov, ako aj údajov zo zdravotnej dokumentácie.

Táto práca vznikla s podporou grantu VEGA 1/0233/12.

LITERATÚRA

1. Mrázová V., Mocák J., Varmusová E., Kavková D., Bednárová A.: J. Pharm. Biomed. Anal. 50, 210 (2009).
2. Harrabi I., Belarbia A., Gaha R., Essoussi A. S., Ghanem H.: Can. J. Cardiol. 22, 212 (2006).
3. Lurbe E., Cifkova R., Cruickshank J. K., Dillon M. J., Ferreira I., Invitti C., Kuznetsova T., Laurent S., Mancina G., Morales-Olivas F., Rascher W., Redon J., Schaefer F., Seeman T., Stergiou G., Wühl E., Zanchetti A.: J. Hypertens. 27, 1719 (2009).
4. Salvadori M., Sontrop J. M., Garg A. X., Truong J., Suri R. S., Mahmud F. H., Macnab J. J., Clark W. F.: Pediatrics 122, 821 (2008).
5. Sorof J., Daniels S.: Hypertension 40, 441 (2002).

1P-15

SYNTHESIS OF TRIAZENE COMPOUNDS AND THEIR APPLICATION IN SPECTROPHOTOMETRIC DETERMINATION OF CADMIUM

PETER HORVÁTH

High school of Ján Chalupka, Štúrova 13, 977 18 Brezno
horvath.chemist@gmail.com

There are many methods for determination of cadmium in liquid matrices. The simplest and cheapest methods are based on spectrophotometry using organic reagents, especially triazenes, which make strongly coloured complex compounds with cadmium^{1–3}. This work deals with synthesis of aromatic triazene compounds, which were not described for the purpose of cadmium determination. 20 derivatives of 1,3-diphenyltriazene were synthesized by N-azo coupling of primary aromatic amines with aromatic diazonium salts. Products were characterized by melting points, UV/VIS absorption spectra, ¹H NMR and IR spectra, where available and necessary. Coordination compounds of synthesized compounds with Cd²⁺, Ca²⁺, Mg²⁺, Cu²⁺, Ni²⁺ and Co²⁺ were prepared by reaction of triazenes with metal cations in alkaline solutions. Micellar solutions of these complexes were made by dissolving in a solution of non-ionic surfactant Triton X-100 and UV/VIS absorption spectra of these solutions were recorded. As we expected, some of their complexes with cadmium have absorption spectra significantly different from spectra of blank reagents or their complexes with other ions. Thus the novel, simple, cheap and sensitive method for cadmium determination using the most suitable reagent, 1,3-bis(4-nitrophenyl)triazene, was developed. The optimal conditions of the method have been found. The solution for spectrophotometry is prepared mixing the sample with 300 µl of 2% solution of Triton X-100; 300 µl of 1 mmol dm⁻³ acetic solution of 1,3-bis(4-nitrophenyl)triazene; 250 µl of 1 mol dm⁻³ solution of NaOH and the solution is diluted to 10 ml. Absorbance is measured at 450 nm against reagent blank. Limit of detection of cadmium is 21 µg dm⁻³ and molar absorption coefficient of its complex is 1,31·10⁵ dm³ mol⁻¹ cm⁻¹. The results of this work can be applied in simple quantitative determination of cadmium in environment by spectrophotometry.

This work is supported by the grant program Šanca pre talenty of Orange Foundation and the grant program AXA Fond.

REFERENCES

1. Watanabe H., Ohmori H.: *Talanta* 10, 959 (1979).
2. Chung-Gin H., Chao-Sheng H., Ji-Hong J.: *Talanta* 8, 676 (1980).
3. Amelin V. G., Treťakov A. V.: *J. Anal. Chem.* 58, 740 (2003).

1P-16

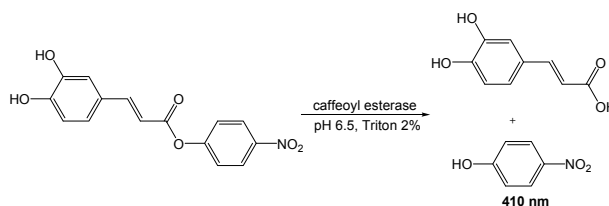
NEW SPECTROPHOTOMETRIC ASSAY OF CAFFEYOYL ESTERASE

ANDREJ CHYBA, MÁRIA MASTIHUBOVÁ, and VLADIMÍR MASTIHUBA

Institute of Chemistry, Slovak Academy of Science, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava
chemachy@savba.sk

Caffeoyl esterase, a specific type of hydroxycinnamic esterase, is an enzyme with high synthetic potential in biocatalytic preparation of substances with biological activity¹. To find appropriate biocatalyst for such syntheses, effective assay of caffeoyl esterase is therefore necessary to screen its activity among commercial lipases and esterases.

We have developed a spectrophotometric assay for the quantitative determination of caffeoyl esterase activity based on release of 4-nitrophenol from our novel synthetic substrate 4-nitrophenyl caffeate in an emulsion of Triton X-100 in aqueous buffer solution. The release of 4-nitrophenol was linear with reaction time at an early stage of the reaction with various esterase and lipase preparations. The method proposed here is accurate, rapid, and easy to perform.



This work was supported by a grant from the Slovak Grant Agency for Science VEGA under the Project No. 2/0138/12 and it is also the result of the project implementation "Centre of Excellence on Green Chemistry Methods and Processes (CEGreenI)" supported by the Research & Development Operational Programme funded by the ERDF.

REFERENCE

1. Fu G., Pang H., Wong Y. H.: *Curr. Med. Chem.* 15, 2592 (2008).

1P-17

MOŽNOSTI ANALÝZY KMENOVÝCH BUNĚK
POMOCÍ KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZYPAVLÍNA SVOBODOVÁ^a, KATEŘINA VÍTKOVÁ^b,
VÁCLAV PROCHÁZKA^b a JAN PETR^{a*}^a Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů –
Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita
Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc,^b Fakultní nemocnice Ostrava, 17. listopadu 1790, 708 52

Ostrava – Poruba

secjpetr@gmail.com

Buňka je základní stavební a funkční jednotka těl organismů a procesy, které v buňce probíhají, mají vliv na celý živý organismus. Jedním ze zajímavých úkolů dnešní vědy je studium buněk a jejich chování ve vitálním stavu, kdy není primárním úkolem „rozbití“ buněk. Takto získané informace pak slouží jak k obecné charakterizaci buněk, tak k popisu jejich chování např. v prostředí s narušenou acidobazickou rovnováhou nebo v prostředí obsahujícím látky užívané k terapii chorob. V případě obecné charakterizace buněk a jejich množství se nejčastěji využívá mikroskopických technik a průtokové cytometrie. Nicméně, pro detailnější studium se jako výhodné jeví použití i techniky kapilární elektroforézy, která může poskytnout další informace o chování buněk z pohledu koloidní chemie.

Cílem této práce bylo pilotní studium elektroforetického chování kmenových buněk tukové tkáně. Kmenové buňky jsou specifickým typem buněk, jedná se o nespecializované buňky, které mají schopnost dělit se a přeměnit se na jiný buněčný typ. Z medicínského pohledu tato schopnost umožňuje tělu vytvořit nové buňky a tím „opravit“ poškozené části organismu. V naší práci jsme se zaměřili na testování následujících podmínek^{1,2}: 1) elektrolyt obsahující MES/NaOH pH 6,0 s dynamickým pokrytím vnitřní stěny kapiláry pomocí DDAB (pro tvorbu stabilní disperze buněk), 2) elektrolyt obsahující MES/NaOH pH 6,0 s iontovou silou 10 mM (pro tvorbu stabilní disperze buněk) a 3) elektrolyt obsahující citrát/Tris pH 8,0 s iontovou silou 10 mM a přísadkou 1 mg ml⁻¹ CTAB (pro tvorbu klastrů buněk). Uvedené podmínky byly srovnány a byly diskutovány možnosti analýzy suspenze kmenových buněk v těchto prostředích.

Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy za finanční podporu výzkumu (projekty OP VaVpl CZ.1.05/2.1.00/03.0058 a OP VK CZ.1.07/2.3.00/20.0018).

LITERATURA

1. Petr J., Maier V.: TrAC, Trends Anal. Chem. 31, 9 (2012).
2. Svobodová P., Vítková K., Procházka V., Petr J.: Chem. Listy, v tisku.

1P-18

IZOLACE RŮZNÝCH TYPŮ ANALYTŮ Z PEVNÝCH
A KAPALNÝCH MATRIC POMOCÍ MODERNÍCH
EXTRAKČNÍCH TECHNIKKAREL VENTURA, PETRA BAJEROVÁ, MARTIN
ADAM a ALEŠ EISNERUniverzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ka-
tedra analytické chemie, Studentská 573, 532 10 Pardubice
karel.ventura@upce.cz

Za klíčový krok při přípravě tuhých a kapalných vzorků je považována extrakce. Mezi klasické techniky přípravy vzorků patří extrakce kapalina-kapalina (LLE), extrakce tuhou fází (SPE), ultrazvukem nebo extrakce v Soxhletově extraktoru. Tyto tradiční metody jsou obvykle časově náročné a vyžadují velké množství organických rozpouštědel často nešetrných k životnímu prostředí.

V posledních letech dochází k pokroku v extrakčních technologiích a jsou vyvíjeny nové a jednodušší metody přípravy vzorků, jako jsou extrakce nadkritickou tekutinou (SFE), mikrovlnná extrakce (MAE), vysokotlaká extrakce rozpouštědlem (PFE) a vysokotlaká extrakce stlačenou kapalnou horkou vodou (PHWE)¹. V poslední době jsou vyvíjeny různé mikroextrakční techniky, jako např. mikroextrakce tuhou fází (SPME) a mikroextrakce kapalnou fází (LPME), a to obě v různých modifikacích, jako dobré alternativy k výše uvedeným technikám.

V dřívějších projektech jsme se zaměřili na extrakci různých typů analytů (steroidy, nitrosloučeniny, antioxidanty, esenciální oleje, atd.) z různých matric (půdy, rostlinné materiály, nealkoholické nápoje, voda, pohonné hmoty, výživové doplňky, atd.)²⁻⁶.

V současné době se naše práce zaměřuje na využití metody PHWE extrakce pro výše uvedené aplikace.

LITERATURA

1. Teo C. C., Tan S. N., Yong J. W. H., Hew C. S., Ong E. S.: J. Chromatogr., A 1217, 2484 (2010).
2. Mlejova V., Pavlikova P., Dobias P., Adam M., Ventura K.: Chem. Listy 104, 166 (2010).
3. Dobias P., Pavlikova P., Adam M., Eisner A., Benova B., Ventura K.: Cent. Eur. J. Chem. 8, 87 (2010).
4. Adam M., Dobias P., Pavlikova P., Ventura K.: Cent. Eur. J. Chem. 7, 303 (2009).
5. Adam M., Dobias P., Eisner A., Ventura K.: J. Sep. Sci. 32, 288 (2009).
6. Adam M., Dobias P., Eisner A., Ventura K.: J. Sep. Sci. 31, 356 (2008).

1P-19

USING OF MULTIVARIATE DATA ANALYSIS FOR CHARACTERIZATION OF SEVERAL VARIETIES OF SLOVENIAN RED WINES

ADRIÁNA BEDNÁROVÁ^a, ERNEST BEINROHR^a, ROMAN KRANVOGL^b, and DARINKA BRODNJAK VONČINA^b

^a Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences, University of SS. Cyril and Methodius in Trnava, Nám. J. Herdu 2, SK-917 01, Trnava, Slovakia, ^b Faculty of Chemistry and Chemical Engineering, University of Maribor, Smetanova 17, SI-2000 Maribor, Slovenia
adriana.bednarova@ucm.sk

Authenticity of wine has been extensively investigated since wine due to its chemical composition and availability throughout the world is an easily adulterated product. Seeing that the production area has a considerable impact on the product quality reflecting in its price, the determination of the product origin is one of the primary requirements in certification of the wine authenticity. Many researches described the possibilities of prediction of wine origin using efficient methods of wine components analysis connected with multivariate data analysis^{1–3}.

The objective of this study is to investigate the interrelations among simple enological descriptors commonly analysed in wine controlling institutions or wineries (relative density, content of total, non-volatile and volatile acids, ash, reducing sugar, free sugar, SO₂, ethanol and pH) as well as to examine their discrimination ability for authentication purposes. Altogether 324 samples belonging to four varieties of Slovenian red wines and originating from four regions of Primorska area in southwest part of Slovenia were analysed. An important additionally available variable is sensorial quality of wine. This sensory variable positively correlates with the contents of ethanol and volatile acids and negatively with the non-volatile acids content. Moreover, the effects of variety and geographic origin were examined and determined by ANOVA and non-parametric Kruskal-Wallis test. Several techniques of multidimensional data analysis have been applied for description and classification of the investigated wine samples by the target factors – variety and geographic origin of wine. The applied methods of linear discriminant analysis (LDA), quadratic discriminant analysis (QDA), classification and regression trees (CART) and artificial neural networks (ANN) demonstrated their power for authentication purposes.

Support of grant VEGA 1/0233/12 is highly acknowledged.

REFERENCES

- Rodrigues S. M., Otero M., Alves A. A., Coimbra J., Coimbra M. A., Pereira E., Duarte A. C.: J. Food Compos. Anal. 24, 548 (2011).
- Kruzlicova D., Mocak J., Balla B., Petka J., Farkova M., Havel J.: Food Chem. 112, 1046 (2009).
- Pérez-Margarino S., Ortega-Heras M., Gonzáles-San José M. L., Boger Z.: Talanta 62, 983 (2004).

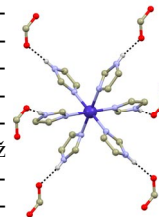
1P-20

CENTROSYMETRICKÉ KOMPLEXY Co(II) A KOMPLEMENTARITA FAR-IR A RAMANOVÝCH SPEKTIER

MICHAELA RÁBEKOVÁ^{a*}, ROMAN BOČA^{a,b} a JÁN PAVLÍK^b

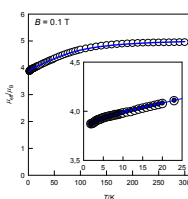
^a Univerzita sv. Cyrila a Metoda v Trnave, Prírodovedecká fakulta, 917 01 Trnava, ^b Slovenská technická univerzita, Ústav anorganickej chémie, 812 37 Bratislava
miskasebova@gmail.com

Pre centrosymetrické jednojadrové komplexy [Co(Lz)₆](HCOO)₂ a [Co(ac)₂(H₂O)₂(MeLz)₂] boli študované elektrónové spektrá, FAR-IR spektrá, magnetická susceptibilita a magnetizácia. Študované komplexy vykazujú veľmi veľkú magnetickú anizotropiu vyjadrenú asymetriou g-faktora a veľkou hodnotou axiálneho parametra štiepenia v nulovom poli D – až 100 cm⁻¹. Parameter D bol určený aj pomocou teplotne závislej infračervenej spektroskopie.

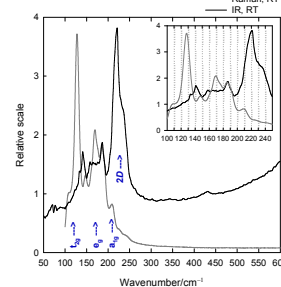
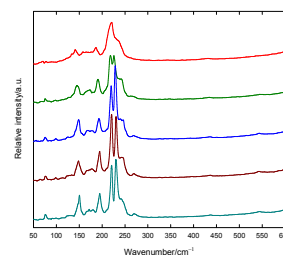


Elektrónové vlastnosti hexakoordinovaných komplexov Co^{II} sú podmienené základným termom kryštálového poľa

⁴T_{1g}. Pri tetragonálnej distorzii v dôsledku efektu Jahna Tellera alebo pri znížení symetrie chromofóru v komplexe sa tento term štiepi na termy ⁴A_{1g} a ⁴E_g. V geometrii stlačenej bipyramídy je základným termom ⁴A_{1g} a spinovo-orbitálna interakcia poskytuje dva Kramersove dublety separované o obnos 2D. Od excitovaného termu ⁴E_g sa odvídzajú ďalšie štyri dvojnásobne degenerované multiplety. Medzi týmito hladinami je možných 15 elektrónových prechodov, ktoré spadajú do oblasti FAR-IR žiarenia. Potom prechod s najväčšou zmenou intenzity pri chladení odpovedá práve hodnote 2D.



Pri identifikácii vibračných prechodov je nápomocné aj Ramanovo spektrum, v ktorom sa neuplatňujú elektrónové prechody dipólovej povahy a existujú symetrické vibračné módy.



Táto práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0233/12.

LITERATÚRA

1. Šebová M., Boca R., Dlhan L., Nemec I., Papankova B., Pavlik J., Fuess H.: *Inorg. Chim. Acta* 383, 143 (2012).

1P-21

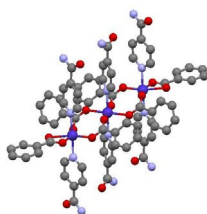
ŠTRUKTÚRA, MAGNETIZMUS A REDOXNÉ VLASTNOSTI TROJJADROVÉHO KOMPLEXU KOBALTU S IZONIKOTÍNAMIDOM

JURAJ HUDÁK^{a,*}, ROMAN BOČA^{a,b}, JÁN MONCOL^b, TOMÁŠ MIKYSEK^c a KAREL VYTRÁS^c

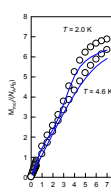
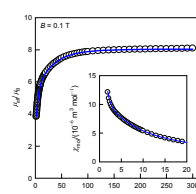
^a Univerzita Sv. Cyrila a Metoda v Trnave, FPV, Katedra chémie, Nám. J. Herdu 2, 917 01 Trnava, ^b Slovenská technická univerzita, FCHPT, Ústav anorganickej chémie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, SR, ^c Univerzita Pardubice, FCHT, Katedra analytické chémie, Studentská 375, 532 10 Pardubice, ČR
juraj.hudak@ucm.sk

Zo série pripravených komplexov bol vybraný trojjadrový kobaltnatý komplex s izonikotínamidom $[\text{Co}_3(\text{bz})_6(\text{inca})_6]$.

Molekulová štruktúra ukázala, že dva periférne atómy kobaltu sú pripojené k dvom atómom kyslíka z dvoch benzoátových ligandov v syn-anti usporiadaní a dvomi kyslíkmi tých istých benzoátov chelátovo. Izonikotínové ligandy sú na periférnych kobaltoch viazané monodentátne.



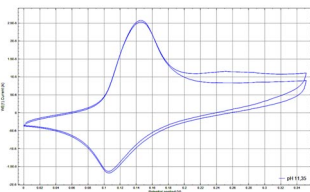
Magnetické merania ukázali, že efektívny magnetický moment klesá od izbovej teploty a saturuje sa na hodnote $\mu_{\text{eff}} = 8,1 \mu_B$. Od $T = 100$ K rýchlo klesá na hodnotu $\mu_{\text{eff}} = 3,8 \mu_B$ pri $T = 2$ K. Magnetické dáta boli fitované na model



výmennej interakcie obohatenej o jednoiónovú anizotropiu¹, $J(\text{Co-Co})/hc = -1,51 \text{ cm}^{-1}$, $g_x = 2,58$, $g_z = 2,0$, $D(\text{Co})/hc = 54,7 \text{ cm}^{-1}$. Zistená magnetická anizotropia vyjadrená parametrom štiepenia v nulovom

poli D je veľmi veľká, ale typická pre hexakoordinované vysokospinové komplexy Co(II).

Elektrochemické merania komplexu ukázali že v kyslom prostredí dochádza k ireverzibilnej redukcii ligandu, izonikotínamidu v oblasti od -800 mV do -950 mV, čo bolo pozorované skoršie². V silne alkalických roztokoch dochádza k reverzibilnej oxidácii Co(II) na Co(III). V našom prípade, na uhlíkovej pastovej elektróde je potenciál oxidácie pri $+125$ mV a rozdiel potenciálov katodického a anodického píku je 39 mV, čo ukazuje skorejšie na viacelektrónový proces. Tento fakt je predmetom ďalšieho skúmania.



Tato práca vznikla za podpory grantu VEGA 1/0233/12.

LITERATÚRA

1. Boča R.: *Coord. Chem. Rev.* 248, 757 (2004).
2. Dion D., Meunier-Prest R., Laviron E.: *Acta Chem. Scand.* 51, 411 (1997).