



**ŠTUDENTSKÁ VEDECKÁ KONFERENCIA 2021
na Prírodovedeckej fakulte UPJŠ v Košiciach**



21.4.2021

Sekcia

ANORGANICKÁ CHÉMIA

Komisia

prof. RNDr. Vladimír Zeleňák, DrSc. - predseda

prof. RNDr. Juraj Černák, DrSc.

doc. RNDr. Ivan Potočňák, PhD.

RNDr. Miroslava Matiková Maľarová, PhD.

RNDr. Martin Vavra, PhD.

Súťažiaci

Lenka Auxtová, CHb, 3.r.

Komplexné zlúčeniny striebra a zinku s kyselinou 3-hydroxypikolínovou
ved. učiteľ: Mgr. Michaela Rendošová

Michaela Benediková, CHb, 3.r.

Príprava iónových paládnatých komplexných zlúčenín s derivátmi 8-hydroxychinolínu kationovou zámennou
ved. učiteľ: Mgr. Martin Russin

Bc. Martina Kepeňová, ACHm, 2.r.

Komplexy medi s vybranými derivátmi 8-hydroxychinolínu.
ved. učiteľ: doc. RNDr. Ivan Potočňák, PhD.

Natália Kuncová, CHb, 3.r.

Príprava komplexov Zn(II) s dinitroderivátom 8-hydroxychinolínu
ved. učiteľ: Mgr. Michaela Harošová

Bc. Gabriela Kuzderová, ACHm, 2.r.

Koordináčné zlúčeniny striebra a zinku s alaninato ligandom a ich biologická aktivita
ved. učiteľ: doc. RNDr. Zuzana Vargová, PhD.

Bc. Radka Sobotová, ACHm, 2.r.

Príprava a charakterizácia nanočastíc na báze zložitých oxidov typu "core-shell"
ved. učiteľ: RNDr. Martin Vavra, PhD.

Bc. Jana Tomičová, ACHm, 2.r.

Hydrotermálna syntéza komplexov železa s acetylacetonátom
ved. učiteľ: RNDr. Miroslava Matiková Maľarová, PhD.

Bc. Ľuboš Zauška, ACHm, 2.r.

Štúdium vlastností termosenzitívnej SBA-15 a kinetiky uvoľňovania liečiva vplyvom teploty a pH
ved. učiteľ: RNDr. Miroslav Almáši, PhD.

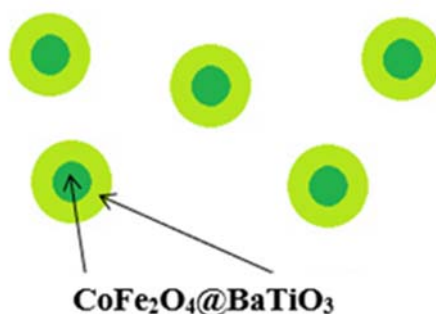
PRÍPRAVA A CHARAKTERIZÁCIA NANOČASTÍC NA BÁZE ZLOŽITÝCH OXIDOV TYPU „CORE-SHELL“

Bc. Radka Sobotová

Školiteľ: RNDr. Martin Vavra, PhD.

Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ,
Moyzesova 11, 041 54 Košice

Zložité oxidy prechodných kovov tvoria jednu z najuniverzálnejších tried nanomateriálov s mnohými unikátnymi fyzikálnymi vlastnosťami. Obrovskou výhodou nanomateriálov pozostávajúcich zo zložitých oxidov je ich rôznorodosť a vysoká tepelná stabilita. Takéto materiály majú obrovský potenciál pre aplikácie vo výrobe a skladovaní energie, v batériách, či medicíne. Preto hlavným cieľom tejto práce bola práve syntéza takýchto nanozlúčenín na báze kobaltu a železa. Príprava zahŕňala syntézu „core“ častíc CoFe_2O_4 ktoré boli pripravené hydrotermálnou syntézou – za hydrotermálnych podmienok. Následne boli pripravené „core“ častice obalované sol-gel metódou [1] „shell“ prekursorom. Rovnako ako „core“ častice, tak aj výsledné „core-shell“ častice boli podrobené charakterizácii niektorými fyzikálno-chemickými metódami – energiovo-disperznou spektroskopiou (EDS), skenovacou elektrónovou mikroskopiou (SEM) a fotónovou korelačnou spektroskopiou (PCS). Tie nám pomohli identifikovať o aké atómy ide, zistiť ich veľkosť a nasnímať povrch vzoriek. Častice „core“, ako aj „core-shell“ sa nám podarilo pripraviť v „nano“ škále, čo nám potvrdila analýza SEM a PCS. Čo sa týka aplikácie, tieto zlúčeniny s magnetickým jadrom a feroelektrickým obalom svojimi vlastnosťami a veľkosťou otvárajú nové možnosti využitia v oblasti medicíny pre cieleňý transport liečiv a hypertermiu.



Obr. 1. Schematické znázornenie „core-shell“ nanočastíc $\text{CoFe}_2\text{O}_4@BaTiO_3$

Literatúra:

1. Chaudhuri, A., Mandal, K.: Journal of Magnetism and Magnetic Materials (2015) 377, 441–445. doi:10.1016/j.jmmm.2014.10.142

**PRÍPRAVA KOMPLEXOV ZN(II) S DINITRODERIVÁTOM
8-HYDROXYCHINOLÍNU**

Natália Kuncová

*Školiteľ: Mgr. Michaela Harošová
Konzultant: doc. RNDr. Ivan Potočný, PhD.*

Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied PF UPJŠ

Moyzesova 11, 041 54 Košice

Predmetom tejto bakalárskej práce je štúdium a príprava biologicky aktívnych komplexov Zn(II) s nitroderivátmi 8-hydroxychninolínu s potenciálnou biologickou aktivitou. V teoretickej časti sa venujeme zinku a jeho účinkom na ľudský organizmus. Taktiež diskutujeme biologickú aktivitu zinočnatých komplexov, komplexov s nitroderivátmi 8-hydroxychninolínu voči rôznym bunkovým líniam. V experimentálnej časti sme sa zamerali na prípravu zinočnatých komplexov s dinitroderivátom 8-hydroxychninolínu (HdNQ), kde sme študovali vplyv rôznych zinočnatých solí, rozpúšťadiel a prítomnosť, respektíve neprítomnosť bázy KOH na priebeh syntéz. Podarilo sa nám pripraviť dva nové komplexy $[\text{Zn}(\text{dNQ})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 1,4\text{-dioxán}$ a $[\text{Zn}(\text{dNQ})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$. Následne sme tieto produkty charakterizovali pomocou infračervenej spektroskopie, CHN elementárnej analýzy a v prípade $[\text{Zn}(\text{dNQ})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 1,4\text{-dioxán}$ aj monokryštálovej RTG štruktúrnej analýzy.

**PRÍPRAVA IÓNOVÝCH PALÁDNYCH KOMPLEXNÝCH ZLÚČENÍN
S DERIVÁTMÍ 8-HYDROXYCHINOLÍNU KATIÓNOVOU ZÁMENOU**

Michaela Benediková

Školiteľ: Mgr. Martin Russin

Konzultant: doc. RNDr. Ivan Potočný PhD.

*Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied,
Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, 041 54 Košice
Slovenská republika*

Prezentovaná práca je zameraná na prípravu iónových paládných komplexných zlúčenín s derivátmi 8-hydroxychinolínu katiónovou zámenou. V teoretickej časti sú opísané vlastnosti paládia ako prvku a taktiež biologická aktivita už opublikovaných paládných komplexov. Experimentálna časť je zameraná na prípravu komplexných zlúčenín všeobecného zloženia $\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2[\text{PdCl}_2(\text{XQ})]$, kde $\text{XQ} =$ 5-chlór-8-hydroxychinolín (HClQ), 7-bróm-8-hydroxychinolín (HBrQ), 5,7-dijodo-8-hydroxychinolín (HdIQ), 5-nitro-8-hydroxychinolín (HNQ), 5,7-dinitro-8-hydroxychinolín (HdNQ) a 5-chlór-7-nitro-8-hydroxychinolín (HCINQ). V ďalšej časti práce sú uvedené syntézy, ktorých cieľom bola zmena dimetylamónneho katiónu vo vybranej látke zloženia $\text{NH}_2(\text{CH}_3)_2[\text{PdCl}_2(\text{ClQ})]$ za draselný, cézny alebo sodný katión. Pripravené komplexné zlúčeniny boli charakterizované infračervenou spektroskopiou a elementárnou analýzou.

KOMPLEXY MEDI S VYBRANÝMI DERIVÁTMI 8-HYDROXYCHINOLÍNU

Bc. Martina Kepeňová¹

Školiteľ¹: doc. RNDr. Ivan Potočný, PhD.

*¹Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ,
Moyzesova 11, 04154 Košice*

Táto práca je zameraná na štúdium prípravy komplexov medi s derivátmi 8-hydroxychinolínu. V teoretickej časti je popísané využitie medi v medicíne, zamerané hlavne na komplexy medi s biologickou aktivitou, ktoré sú súčasťou klinických testov, za účelom ich využitia predovšetkým v protirakovinovej liečbe. Súčasťou tejto časti sú aj komplexy medi s derivátmi 8-hydroxychinolínu, ktorých biologická aktivita bola už študovaná. V experimentálnej časti sú popísané syntézy pripravených látok, v ktorých sme použili deriváty: 5-chlór-8-hydroxychinolín (HClQ), 7-bróm-8-hydroxychinolín (7-HBrQ), 5-chlór-7-nitro-8-hydroxychinolín (HCINQ) a 5,7-dinitro-8-hydroxychinolín (HdNQ). Pripravené zlúčeniny boli charakterizované infračervenou spektroskopiou, elementárnou analýzou a v prípade monokryštálov aj RTG štruktúrnou analýzou. Štruktúrna analýza ukázala štvorcovo planárnu koordináciu atómov medi v látke $[\text{Cu}(\text{ClBrQ})_2]$ a $[\text{Cu}(7\text{-BrQ})_2]$, a tetragonálne bipyramidálnu v $[\text{Cu}(\text{dNQ})_2] \cdot 2\text{DMF}$. Vo všetkých troch prípadoch je pozorovaná bidentátna chelátová koordinácia ligandov XQ.

Literatúra:

1. S. Tardito, et al.: Journal of Medical Chemistry. 55 (2012), 10448-10459.
2. H. Jiang, et al. Cancer Letters. 312 (2011) 11-17.

ŠTÚDIUM VLASTNOSTÍ TERMOSENZITÍVNEJ SBA-15 A KINETIKY UVOĽŇOVANIA LIEČIVA VPLYVOM TEPLoty A pH

BC. EUBOŠ ZAUŠKA

Školiteľ¹: RNDr. Miroslav Almáši, PhD.

¹Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied PF UPJŠ, Moyzesova 11, 041 54 Košice

Aktívny a pasívny transport liečiv[1] sa stal veľkým fenoménom v oblasti medicíny a farmaceutiky. V súčasnom období sa skúmajú rôzne variácie nanomateriálov, štruktúr a matric, ktoré sú schopné spomínaného mechanizmu, a teda transportovať molekuly liečiva na cieľné miesto v organizme. Široká škála typov nanomateriálov (organická, anorganická, bioorganická ale aj bioanorganická) pokrýva takmer všetky možnosti aplikácie transportu liečiva. Jedným z perspektívnych a intenzívne študovaných materiálov pre cieľný transport liečiv je mezopórovitý oxid kremičitý (silika), ktorej veľká výhoda je variabilita morfológických štruktúr, ako napríklad SBA-15, MCM-41, SBA-16, MCM-48 a MCM-50. Výsledný tvar pórovitého materiálu závisí od pH prostredia, surfaktantu, teploty a koncentrácií vstupných reaktantov.

Cieľom tejto práce bola štúdia a charakterizácia už pripravených materiálov SBA-15-PEI, ktoré vykazujú termosenzitívne vlastnosti. Primárny cieľ bol preštudovať funkciu polyméru naviazaného na povrchu, akým mechanizmom otvára a uzatvára mezopóry SBA-15. Sekundárny cieľ bol preštudovať kinetiku uvoľňovania liečiva a podľa akého matematického modelu sa liečivo uvoľňovalo z pórov.

Na charakterizáciu funkcie PEI bola použitá DSC a TGA analýza, ktorá charakterizovala správanie sa polyméru vplyvom teploty. Mechanizmus otvárania/zatvárania pórov bol taktiež študovaný sledovaním kinetiky a množstva uvoľneného liečiva vplyvom rozdielnych teplôt a pH. Štúdium kinetiky bolo realizované pomocou dát získaných riadeným uvoľňovaním liečiva vo fyziologických roztokoch vplyvom teploty pri 37 °C (fyziologická teplota organizmu) a 42 °C (fyziologická teplota zápalu). Do týchto podmienok bol zahrnutý aj faktor pH = 2 (simulované prostredie žalúdka) a pH = 7,4 (simulované fyziologické prostredie). Taktiež bol realizovaný experiment dynamického uvoľňovania liečiva, ktorý simuloval uvoľňovanie liečiva perorálnym podaním, kedy systém prechádza gastrointestinálnym traktom.

Literatúra:

[1] SWABRICK, J. et. al. 1991. Novel drug delivery systems. New York. CRC Press, 1991. 138-197 s. ISBN 13: 978-1-84184-967-6.

**KOMPLEXNÉ ZLÚČENINY STRIEBRA A ZINKU S KYSELINOU
3-HYDROXYPIKOLÍNOVOU**

Lenka Auxtová

Školiteľ: Mgr. Michaela Rendošová

Konzultant: doc. RNDr. Zuzana Vargová, Ph.D.

Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied PF UPJŠ,

Moyzesova 11, 041 54 Košice

Cieľom práce bolo pripraviť a charakterizovať stabilné koordinačné zlúčeniny striebra a zinku s kyselinou 3-hydroxypikolínovou. Zámerom prípravy zlúčenín je pripraviť zlúčeniny s potenciálnymi antimikrobiálnymi a protirakovinovými účinkami. Práca je rozdelená na dve časti. Prvou z týchto častí je teoretická časť, ktorá je zameraná na všeobecné informácie o striebre a jeho využití v lekárstve, taktiež sa venujeme aj všeobecným informáciám o zinku a jeho vplyve na ľudské telo. Zahŕňa aj kapitolu o kyseline pikolínovej a jej deriváte, kyseline 3-hydroxypikolínovej, kde opisujeme jej možné spôsoby koordinácie. Druhou časťou práce je experimentálna práca, v ktorej sa venujeme opisu postupu prípravy komplexu striebra a zinku s kyselinou 3-hydroxypikolínovou. Zahŕňa aj fyzikálno – chemickú charakterizáciu pripravených komplexov rôznymi metódami. V tuhej fáze to boli metódy ako elementárna analýza, infračervená spektroskopia a RTG difrakcia. V roztoku bola overovaná stabilita komplexov pomocou NMR spektroskopie po dobu 96 hodín. Taktiež v tejto časti je zahrnuté aj štúdium disociácie kyseliny 3-hydroxypikolínovej metódou potenciometrických titrácií.

HYDROTERMÁLNA SYNTÉZA KOMPLEXOV ŽELEZA S ACETYLACETONÁTOM

BC. JANA TOMIČOVÁ

Školiteľ¹: RNDr. Miroslava Matikova-Maľarová, PhD.

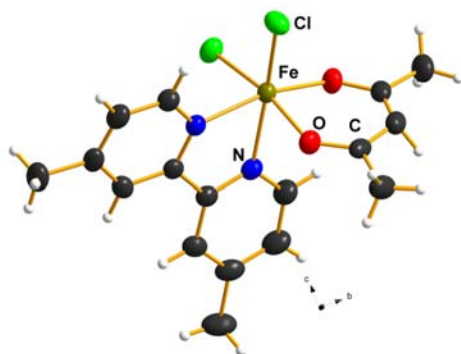
Adresa¹ Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, Ústav chemických vied, Katedra anorganickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice

Medzi kovy, ktoré sú predmetom všeobecného štúdia patrí aj železo so svojou bohatou koordinačnou schopnosťou. V komplexoch sa môže vyskytovať vo viacerých oxidačných stavoch, pričom najtypickejšie sú II a III. Najčastejšími koordinačnými polyédrami sú tetraéder a oktaéder. Komplexy s 2,2'-bipyridínom a jeho derivátmi sú prevažne oktaedrické a vo väčšej miere nízkospinové. V tejto práci sme sa sústredili na prípravu komplexov železa v oxidačnom stave II s *N*-donorovými ligandami odvodenými od 2,2'-bipyridínu a 1,10-fenantrolínu. Oba ligandy sú aromatické heterocyklické zlúčeniny, ktoré sa používajú ako chelátové ligandy. Tieto ligandy vytvárajú komplexy s viacerými prechodnými kovmi a používajú sa v analytickej, organokovovej a koordinačnej chémii.

Pri syntézach oktaedrických komplexov železa s oxidačným číslom II sa nám podarilo pripraviť komplexy s acetylacetonátovou skupinou koordinovanou na centrálny atóm. Samotné syntézy prípravy tohto druhu komplexov prebiehali pri hydrotermálnych podmienkach s použitím hydrátu halogenidu železnateho, *N*-donorového ligandu (2,2'-bipyridín a 4,4'-dimetyl-2,2'-bipyridín) v prostredí rozpúšťadla acetylacetónu.

Je známe, že acetylaceton je možné koordinovať na centrálny atóm ako ligand. Toto dobre známe rozpúšťadlo sa využíva ako stavebný prvok pre syntézy heterocyklických zlúčenín. Anión tejto zlúčeniny (*acac*⁻) vytvára komplexy s mnohými prechodnými kovmi, pričom sa oba atómy kyslíka viažu na kov a vytvárajú šesťčlenný chelátový kruh.

Nami pripravené komplexy predstavujú veľmi málo početnú skupinu oktaedrických zlúčenín a v Cambridgskej kryštalografickej databáze sa nachádza iba 6 podobných zlúčenín pričom iba jedna s atómom železa. [1,2]



Obr. 1. Štruktúra komplexu [FeCl₂(dmbipy)(acac)]

Literatúra:

C.R. Groom, I.J. Bruno, M.P. Lightfoot, S.C. Warda, CSD, Struct. Sc. Cryst. Eng. Mat 72 (2) (2016) 171-179.

KOORDINAČNÉ ZLÚČENINY STRIEBRA A ZINKU S ALANINATO LIGANDOM A ICH BIOLOGICKÁ AKTIVITA

Bc. Gabriela Kuzderová¹

Školiteľ: doc. RNDr. Zuzana Vargová, PhD.¹

Konzultant: Mgr. Michaela Rendošová¹

¹*Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P.J. Šafárika, Moyzesova
11, 041 54 Košice, Slovenská republika*

Infekcie bakteriálneho a vírusového pôvodu sú celosvetovo považované za závažné ochorenia, ktoré je potrebné liečiť. V dôsledku toho sa začali intenzívne vyvíjať účinnejšie antimikrobiálne látky, a mnohé aj na báze kovov, akými sú napríklad striebro alebo zinok [1,2]. Cieľom našej experimentálnej práce bolo pripraviť a charakterizovať stabilné komplexy striebra a zinku na báze *L*-alanínu (*L*-Ala) ako ligandu. Pre nastavenie vhodných podmienok kryštalizácie, sme pomocou potenciometrických titrácií študovali acidobázické vlastnosti ligandu *L*-Ala a tvorbu komplexných častíc vo vodnom roztoku v závislosti na pH. Na potvrdenie spôsobu koordinácie ligandu na ión kovu sme použili ¹H NMR titrácie.

Podarilo sa nám pripraviť komplex $\{[Ag_4(HAla)_4(NO_3)_3]\}_n(NO_3)_n$ a prostredníctvom infračervenej spektroskopie, monokryštálovej štruktúrnej analýzy, elementárnej a termickej analýzy sme potvrdili zloženie komplexu v tuhej fáze. Naša experimentálna práca bola tiež zameraná na štúdium stability komplexných strieborných častíc pomocou nukleárnej magnetickej rezonancie [3].

Pripravený strieborný komplex bol podrobený aj testom biologickej aktivity, ktorá sa študovala a porovnávala s komerčne používanými liekmi sulfadiazinom a dusičnanom strieborným. Okrem toho sa hodnotila aj cytotoxická aktivita pripraveného komplexu proti rôznym bunkovým rakovinovým líniam [3].

Literatúra:

1. S. Medici, et.al.: J.Med. Chem. 62 (2019), ISSN 0022-2623.
2. K.S. Siddiqi, et. al.: Nano.Res.Lett. 13 (2018), ISSN 1931-7573.
3. G. Kuzderová, et. al.: J.Inorg. Biochem. 210 (2020), ISSN 0162-0134.

#