

SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA V BRATISLAVE  
Fakulta chemickej a potravinárskej technológie

# Chémia a technológie pre život

27. celoslovenská študentská vedecká konferencia  
s medzinárodnou účasťou



Bratislava, 26. 11. 2025

ISBN 978-80-8208-162-9



Vydala:

© Fakulta chemickej a potravinárskej technológie  
v Slovenskej chemickej knižnici FCHPT STU  
Slovenská technická univerzita v Bratislave  
Radlinského 9, 812 37

Rok vydania: 2025

Vydanie: prvé, Slovenská chemická knižnica FCHPT STU v Bratislave

Forma: elektronický zborník recenzovaných príspevkov

Editori: doc. Ing. Milena Reháková, PhD., doc. Ing. Juraj Oravec, PhD.

Technická redakcia: Ing. Marián Hvolka

Grafická úprava: doc. Ing. Juraj Oravec, PhD.

Za jazykovú úpravu príspevkov zodpovedajú autori.

ISBN 978-80-8208-162-9

# Obsah

## Alternatívne procesy a materiály v chemickej technológii

### METALATED PCN-222: MESOPOROUS METAL-ORGANIC FRAMEWORKS AS HYDROGEN EVOLUTION REACTION PHOTOCATALYSTS

*Ebrahimi, A.* . . . . . 3

### POROVNANIE HLINÍKOVEJ A RECYKLOVANEJ HLINÍKOVEJ ZLIATINY NA ODLIATKY

*Petkanič, Z.* . . . . . 5

### NANOKATALYZÁTORY NA PRÍPRAVU ZELENÝCH ÉTEROV

*Kuzina, A., Soták, T., Silná, Z.* . . . . . 7

### ŠTÚDIUM APLIKOVATELNOSTI MRI NA ZOBRAZOVANIE 3D BIOAKTÍVNEJ KERAMIKY

*Hurik, P.* . . . . . 9

### PRÍPRAVA BIONAFETY Z ODPADNÝCH OLEJOV

*Vanko, A., Bérešová, M., Horňáček, M.* . . . . . 12

### CHEMICKÁ RECYKLACE POLYKARBONÁTU V PRŮTOČNÉM REAKTORU

*Chanyšev, A., Auersvald, M.* . . . . . 15

### HYDROKRAKOVÁNÍ PYROLÝZNÍHO OLEJE Z ODPADNÍHO PLASTU BOHATÉHO NA POLYOLEFINY

*Vyskočil, V., Auersvald, M.* . . . . . 17

### FYZIKÁLNO-CHEMICKÉ VLASTNOSTI ŠPECIFICKÝCH TYPOV KVAPALNÝCH HNOJÍV

*Almašiová, A.* . . . . . 19

### KRYŠTALIZÁCIA VSÚSTAVE KCL - MGSO<sub>4</sub> - H<sub>2</sub>O

*Čech, L., Jurišová, J.* . . . . . 21

## Analytické metódy pre analýzu biologicky aktívnych zlúčenín

### ELECTROCHEMICAL DETERMINATION OF CALCIUM CHANNEL BLOCKER AMLODIPINE USING 3D-PRINTED CARBON ELECTRODES

*Haivoronska, V.* . . . . . 25

### BÓROM DOPOVANÁ DIAMANTOVÁ ELEKTRÓDA AKO MODERNÝ SENZOR PRE STANOVENIE ANTIHISTAMINIKA CETIRIZÍNU

*Povchan, J., Švorc, L.* . . . . . 27

### STANOVENIE LI ATÓMOVOU ABSORPČNOU SPEKTROMETRIOU S ATOMIZÁCIOU V PLAMENI

*Kopásková, N., Frišták, V.* . . . . . 29

### ELEKTROCHEMICKÉ CHOVÁNÍ BOREM DOPOVANÝCH DIAMANTOVÝCH ELEKTROD TERMINOVANÝCH FLUOREM A DUSÍKEM PRO ELEKTROANALÝZU

*Hrudková, I., Taylor, A., Schwarzová-Pecková, K.* . . . . . 31

MONITORING PFAS VE VODNÍM PROSTŘEDÍ S VYUŽITÍM PASIVNÍCH VZORKOVAČŮ	
<i>Šimáčková, B., Svobodová, V., Dvořáková, D., Pulkrabová, J.</i> . . . . .	33
VÝVOJ EKOLOGICKY PRIJATELNEJ QUECHERS GC-MS/MS METÓDY PRE STANOVENIE PESTICÍDOV V POLNOHOSPODÁRSKYCH EKOSYSTÉMOCH	
<i>Raganová, J., Fehér, F. A., Hrouzek, J., Szarka, A., Krascenits, Z., Hrouzková, S.</i> . . . . .	35
STANOVENÍ LÁTEK S ALERGENNÍM POTENCIÁLEM V KOSMETICE	
<i>Kebortová, A., Filatova, M., Stupák, M.</i> . . . . .	37
VÝVOJ A CHARAKTERIZÁCIA POLYMÉRNÝCH SORBENTOV PRE SELEKTÍVNU EXTRAKCIU CYPERMETRÍNU	
<i>Barák, M., Hroboňová, K., Špačková, A.</i> . . . . .	39
MODIFIKACE POVRCHU BOREM DOPOVANÉ DIAMANTOVÉ ELEKTRODY S VYUŽITÍM REDUKTIVNÍHO GRAFTINGU ANTRACHINON-1-DIAZONIUM CHLORIDEM PRO VÝVOJ BIOSENSORŮ	
<i>Štěpánová, T., Čambal, P., Schwarzová-Pecková, K.</i> . . . . .	41
POROVNANIE ÚČINNOSTI HPLC ENANTIOSEPARÁCIE VYBRANÝCH LIEČIV POUŽITÍM MAKROCYKLICKÝCH A POLYSACHARIDOVÝCH TYPOV STACIONÁRNYCH FÁZ	
<i>Chlaňová, M., Hroboňová, K., Lazorová, P., Halačová, L.</i> . . . . .	43
<b>Analytické metódy pre analýzu zložitých vzoriek</b>	
VÝVOJ NOVEJ GC-FID METÓDY NA STANOVENIE LAKTÓZY V TEKUTÝCH MLIEČNYCH VÝROBKOCH	
<i>Smetanová, M., Fulín, M., Blaško, J., Kubinec, R.</i> . . . . .	47
STANOVENIE VITAMÍNU C V OVOCÍ A ZELENINE	
<i>Lieskovský, J., Čacho, F.</i> . . . . .	49
STANOVENIE ŤAŽKÝCH KOVOV (PB, CD) V KOMERČNÝCH E-LIQUIDOCH METÓDOU AAS	
<i>Madžunková, N., Čacho, F.</i> . . . . .	51
POLYMÉRNÝ ADSORBENT S ODTLAČKOM MOLEKULY NA BÁZE HLBOKO EUTEKTICKÝCH ROZPÚŠŤADIEL – PRÍPRAVA A TESTOVANIE PRE SELEKTÍVNE ZACHYTÁVANIE KUMARÍNOV	
<i>Vavreková, P., Lišková, P., Hroboňová, K.</i> . . . . .	53
ANALÝZA FENOLOVÝCH ZLÚČENÍN A KUMARÍNOV V LIKÉROCH POMOCOU VYSOKOÚČINNEJ KVAPALINOVEJ CHROMATOGRAFIE	
<i>Tarajová, L., Hroboňová, K.</i> . . . . .	55
SCREENING PSYCHOAKTIVNÝCH LÁTEK V POTRAVINÁCH NA ČESKÉM TRHU	
<i>Beranová, Z., Bínová, Z., Beneš, F.</i> . . . . .	57
MINIATURIZÁCIA QUECHERS POSTUPU PRE ANALÝZU REZIDUÍ PESTICÍDOV VO VČELOM ODPADE – MELIVE	
<i>Suran, R., Grigová, N., Hrouzek, J., Szarka, A., Hrouzková, S.</i> . . . . .	59

MODIFIKÁCIA A OPTIMALIZÁCIA TECHNIKY QUECHERS PRI IZOLÁCII BOSKALIDU A PYRAKLOSTROBĪNU ZO VZORIEK MALĪN	
Šebestová, S., Hrouzek, J., Szarka, A., Hrouzková, S. . . . .	61
APLIKÁCIA HMOTNOSTNEJ SPEKTROMETRIE V ANALÝZE POVÝSTRELOVÝCH SPLODĪN	
Dovalová, J., Pulkrabová, J., Pařízek, O. . . . .	63
<b>Anorganická chémia</b>	
SYNTÉZA A APLIKÁCIE MOF MATERIÁLOV PRIPRAVENÝCH NA BÁZE AZO-KARBOXYLÁTOVÝCH LIGANDOV	
Obšatník, P., Király, N. . . . .	67
UIO-66-NH <sub>2</sub> AS AN ADSORBENT OF ANIONIC XENOBIOTICS FROM AQUEOUS ENVIRONMENTS	
Holéczyová, L. M., Zauška, L., Almáši, M. . . . .	69
SYNTÉZA JEDNOJADROVÝCH HEXAKOORDINOVANÝCH CO(II) KOMPLEXOV S POUŽITĪM ASYMETRICKÝCH ACETYLACETONÁTOV	
Rosík, J., Rajnák, C. . . . .	71
SCHIFFOVE LIGANDY AKO OVERENÉ PLATFORMY PRE NOVÉ FE(III) KOMPLEXY	
Šušuková, V., Rajnák, C. . . . .	73
FOTOKATALYTICKÝ ROZKLAD DIKLOFENAKU VO VODNOM PROSTREDĪ	
Dyrdina, M., Šípoš, R., Mackulák, T., Zalibera, M., Drdanová, A. P., Kooš, P., Markovič, M., Haššo, M. . . . .	75
PRĪPRAVA A CHARAKTERIZÁCIA KOMPLEXOV NIKLU SO SCHIFFOVÝMI ZÁSADAMI A ŠTĪDIUM ICH BIOLOGICKÝCH VLASTNOSTĪ.	
Kočková, S., Kuchtanin, V. . . . .	77
KATENA-[ZN(H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ( $\mu$ 2-TDCA)] <sub>n</sub> : NOVÝ ZINOČNATÝ KOMPLEX NA BÁZE KYSELINY TIOFĒN-2,5-DIKARBOXYLOVEJ - SYNTÉZA A FYZIKÁLNO-CHEMICKÁ CHARAKTERIZÁCIA	
Šimčák, M. . . . .	78
KOMPLEXY ŹELEZA(III) S LIGANDAMI NA BÁZE DERIVÁTOV 2-HYDROXYBENZOFENÓNU: PRĪPRAVA A CHARAKTERIZÁCIA ŠTRUKTÚRNYCH, SPEKTRÁLNYCH A MAGNETICKÝCH VLASTNOSTĪ	
Mykhailiuk, D. . . . .	79
<b>Aplikované biotechnológie</b>	
VPLYV KULTIVAČNÝCH PODMIENOK NA PRODUKCIU TROPÁNOVÝCH ALKALOIDOV V KOREŇOVÝCH KULTĪRACH DATURA STRAMONIUM L.	
Mikulášková, S., Kaňuková, Š. . . . .	83
PREPARATION OF FUNCTIONAL BEER WITH PROBIOTIC PROPERTIES	
Ferencz, L., Brunner, J., Vašítk, P. . . . .	85

APLIKÁCIA NESACHAROMYCÉTNYCH DRUHOV KVASINIEK V PIVOVAR- NÍCTVE PRE VYLEPŠENIE AROMATICKÉHO PROFILU PIVA	
<i>Krupenia, M., Brunner, J., Vašítk, P.</i> . . . . .	87
PRODUKCIA BIOMASY KVASINIEK S VYSOKOU HUSTOTOU BUNIEK V BIOREAKTORE PRE VÝROBU MEDOVINY	
<i>Franček, Š., Drábová, B.</i> . . . . .	90
EXPRESSION OF LYSOPHOSPHATIDIC ACID ACYLTRANSFERASE FOR THE PRODUCTION OF ACETYLATED DIACYLGLYCEROLS IN YARROWIA LIPOLYTICA	
<i>Lopa, M., Hambalko, V., Gajdoš, P.</i> . . . . .	92
OPTIMALIZÁCIA PODMIENOK LABORATÓRNEJ A POLOPREVÁDZKOVEJ PRÍPRAVY CYKLODEXTRÍN GLYKOZYLTRANSFERÁZY	
<i>Major, L. I., Štefuca, V.</i> . . . . .	94
ENZÝMY DEGRADUJÚCE LIGNÍN-SACHARIDOVÉ KOMPLEXY	
<i>Poliačik, M., Kántorová, K.</i> . . . . .	96
BIOTECHNOLOGICAL PRODUCTION OF L-ASPARAGINASE FROM EN- DOPHYTIC BACTERIA OF ZINGIBER OFFICINALE	
<i>Saravanakumar Shanthi, H., Varkey, I. C.</i> . . . . .	98
EXTRACELULÁRNA PRODUKCIA CYKLODEXTRÍN GLUKANOTRANSFE- RÁZY VO VIBRIO NATRIEGENS	
<i>Pásztorová, O., Struhárňanská, E., Stuchlík, S.</i> . . . . .	100
ENZYMES FOR APPLICATIONS IN BIOREFINERIES	
<i>Awwad, J., Kočenda, M., Dobrovodský, P., Rebroš, M.</i> . . . . .	102
ŠTÚDIUM TRANSGLYKOZYLAČNEJ PRÍPRAVY ALKYL GALAKTOZIDOV POMOCOU IMOBILIZOVANEJ $\beta$ -GALAKTOZIDÁZY	
<i>Pidvysotska, N., Kaniaková, K., Štefuca, V.</i> . . . . .	104
<b>Biochémia, Mikrobiológia a Potraviny</b>	
OXIDAČNÝ STRES AKO SÚČASŤ ADAPTÍVNEJ ODPOVEDE <i>N. CRASSA</i> NA AZOLOVÉ ZLÚČENINY	
<i>Jurčeková, K., Taušová, M., Olejníková, P.</i> . . . . .	109
ANTIMIKROBIÁLNA AKTIVITA NOVOSYNTETIZOVANÝCH KOVOVÝCH KOMPLEXOV	
<i>Schlettová, D., Lištiak, M., Pagáč, T., Olejníková, P., Víglaš, J.</i> . . . . .	111
PREVENCIA A LIEČBA ZVÁPENATENIA VČELIEHO PLODU POMOCOU LÁTKO PRÍRODNÉHO PÔVODU OBSIAHNUTÝCH V ESENCIÁLNYCH OLE- JOCH	
<i>Kocian, M., Olejníková, P., Koljančíč, N.</i> . . . . .	112
ENTEROTOXIGÉNNY POTENCIÁL A REZISTENCIA STAFYLOKOKOV IZO- LOVANÝCH Z VEGÁNSKYCH VÝROBKOV	
<i>Mitura, M., Koreneková, J., Bírošová, L.</i> . . . . .	114
MIKROBIOLOGICKÁ KVALITA MÚK A RASTLINNÝCH PRÁŠKOV NA SLO- VENSKOM TRHU	
<i>Babková, U., Koreneková, J., Bírošová, L.</i> . . . . .	116

IZOLÁCIA MYROZINÁZY Z VESNOVKY OBYČAJNEJ <i>Ozániková, E.</i> . . . . .	118
<b>Chemické a biochemické inžinierstvo</b>	
INTEGROVANÝ MODEL TRANSPORTU IÓNOV A CHEMICKÝCH ROVNOVÁH V PROCESE ZÍSKAVANIA LÍTIA POMOCOU DONNANOVEJ DIALÝZY <i>Tomášik, M., Hlavatý, L., Červeňanský, I., Markoš, J.</i> . . . . .	121
TRIGENERATION USING A COMBUSTION ENGINE AND ABSORPTION COOLING - A CASE STUDY <i>Turinič, N. F., Buchan, V.</i> . . . . .	123
DYNAMIC MODELING OF AN AMMONIA TANK <i>Valiyeva, K., Vestenický, J.</i> . . . . .	125
DEMONŠTRÁCIA PRINCÍPOV CHEMICKÉHO INŽINIERSTVA PRI NÁVRHU REAKTORA S FLUIDNÝM LÔŽKOM NA PRODUKCIU PUKANCOV. <i>Vashchenchuk, M., Kurák, T.</i> . . . . .	127
MODELOVANIE A ANALÝZA LIMITNÝCH PARAMETROV DESTILAČNEJ KOLÓNY PRE C3 FRAKCIU <i>Hribík, D., Variny, M.</i> . . . . .	128
VÝVOJ MERACIEHO ZARIADENIA NA URČOVANIE SÁLAVÉHO A KONVEKČNÉHO PRENOSU TEPLA V PRIEMYSELNÝCH OBJEKTOCH <i>Pipíška, A.</i> . . . . .	130
<b>Chemické a environmentálne inžinierstvo</b>	
BEZPEČNOSŤ A RENTABILITA VYUŽITIA VODÍKA AKO NÍZKOEMISNÉHO PALIVA V RAFINÉRSKOM A METALURGICKOM PRIEMYSLE <i>Dúbravská, D., Variny, M., Labovská, Z.</i> . . . . .	135
VPLYV PYROLÝZNYCH MATERIÁLOV A DIGESTÁTU Z BIOPLYNOVEJ STANICE NA FYZIKÁLNO-CHEMICKÉ CHARAKTERISTIKY PÔDNEHO SUBSTRÁTU <i>Rychlý, M., Frišták, V.</i> . . . . .	137
VÝVOJ A TESTOVANIE DUTOVLÁKNOVÉHO MEMBRÁNOVÉHO MODULU NA ZACHYTÁVANIE HOREČNATÝCH IÓNOV <i>Rothová, A., Lang, M., Červeňanský, I.</i> . . . . .	139
NÁVRH REAKTÍVNEJ SPREJOVEJ ABSORPČNEJ KOLÓNY NA DEKARBONIZÁCIU SPALIN <i>Halabuk, L.</i> . . . . .	141
PREDÚPRAVA ODPADOVEJ VODY Z POTRAVINÁRSKEHO PRIEMYSLU <i>Krajčí, M., Jankovičová, B.</i> . . . . .	142
VPLYV VYBRANÝCH KONTAMINANTOV NA AKTIVOVANÝ KAL ČISTIARNE ODPADOVÝCH VÔD <i>Žgančíková, Z., Imreová, Z.</i> . . . . .	144

**Fermentačné a rekombinantné biotechnológie**EXTRACELULÁRNA EXPRESIA REKOMBINANTNÝCH PROTEÍNOV A  
MOŽNOSTI ICH IZOLÁCIE

Görögová, D., Petrovičová, T. . . . . 149

ČERVENÝ FLUORESCENČNÝ PROTEÍN AKO REPORTÉROVÝ PROTEÍN V  
EXPRESNOM SYSTÉME PICHIA PASTORIS

Mrázová, I., Marčeková, Z. . . . . 151

## INTERAKCIE METYLÉNOVEJ MODREJ S FORMAMI TAU PROTEÍNU

Ferková, K., Cehlár, O. . . . . 153

RASTLINNÉ TIOGLUKOZIDÁZY A ICH REKOMBINANTNÁ PRODUKCIA  
POMOCOU KVASINKOVÝCH EXPRESNÝCH SYSTÉMOV

Súkeník, A., Petrovičová, T. . . . . 155

## OPTIMALIZÁCIA PURIFIKÁCIE BAKTERIÁLNEJ LON PROTEÁZY

Fábryová, N., Struhárňanská, E., Karatkevich, I., Křížová, A., Levarski, Z., Stuchlík, S. 157

MOŽNOSTI VYUŽITIA ČISTÝCH KULTÚR SACCHAROMYCES CEREVISIAE  
VO VINÁRSTVE

Dujčáková, K., Labovská, G., Furdíková, K. . . . . 159

## MOŽNOSTI VYUŽITIA SACCHAROMYCES BOULARDII VO VINIFIKÁCI

Frühwald, J., Labovská, G., Furdíková, K. . . . . 161

POSSIBLE APPLICATION OF YEASTS OF THE GENUS METSCHNIKOWIA  
IN WINEMAKING

Filipenko, A., Labovská, G., Furdíková, K. . . . . 163

## CHARAKTERIZÁCIA LUDSKÝCH ALDO-KETOREDUKTÁZ

Štifnerová, C., Hronská, H. . . . . 165

## IMOBILIZÁCIA G4-AMYLÁZY A JEJ VYUŽITIE PRI HYDROLÝZE ŠKROBU

Žák, I., Bílek, T., Hronská, H. . . . . 167

**Fyzikálna chémia a chemická fyzika**KINETICKÁ ANALÝZA TERMICKEJ DEGRADÁCIE KYSELINY POLYM-  
LIEČNEJ S BIODEGRADOVATELNÝMI PLNIVAMI

Hubert, M., Dubaj, T., Peidayesh, H. . . . . 171

STUPEŇ PREMENY PODLA CHEMICKEJ KINETIKY A TERMICKEJ ANA-  
LÝZY V IZOKONVERZNÝCH METÓDACH

Fülöp, T., Dubaj, T. . . . . 173

NOVÁ METÓDA PRE ODCÍTANIE REDOXNÉHO POTENCIÁLU Z CYCLIC-  
KEJ VOLTAMETRIE

Puffler, M., Májek, M. . . . . 175

TOWARDS THERMODYNAMIC JUSTIFICATION OF AGGREGATION PHE-  
NOMENA IN POLYMETHINE AND RHODAMINE DYES VIA RESPECTIVE  
MODELS USING THE ELECTRONIC STRUCTURE THEORY

Kharadzha, A., Vishnikin, A. . . . . 177

---

REDOXNÉ REAKCIE NOVO PRIPRAVENÉHO DIMERICKÉHO KOMPLEXU NI(II) S REDOXNÝM NONINNOCENT LIGANDOM, ŠTUDOVANÝMI IN-SITU SPEKTROELEKTROCHEMICKÝMI TECHNIKAMI	
<i>Borošová, M. M., Rapta, P.</i> . . . . .	179
TERMODYNAMIKA DISOCIÁCIE O-C VÄZBY METOXYLOVEJ SKUPINY DERIVÁTOV GUAJAKOLU	
<i>Leštinská, O., Kováčová, A., Uhliar, M.</i> . . . . .	181
<b>Organická chémia</b>	
BIS-INDOLOVÉ DERIVÁTY ODVODENÉ OD INDOLOVÝCH FYTOALEXÍNOV: SYNTÉZA A ANTIPROLIFERAČNÝ PROFIL	
<i>Chovanová, S.</i> . . . . .	185
SYNTHESIS AND PROPERTIES OF FRAGRANT ROMANDOLIDE ANALOGUES	
<i>Tóthová, M., Nikipelov, A., Szolcsányi, P.</i> . . . . .	187
MECHANOCHEMICAL APPROACH TO CHIRAL BRØNSTED ACID CATALYZED STEREOSELECTIVE INVERSE ELECTRON-DEMAND AZA-DIELS-ALDER REACTION	
<i>Doblejová, T., Kisszékelyi, P., Rakovský, E., Šebesta, R.</i> . . . . .	189
VYUŽITIE PD-KATALYZOVANEJ OXY-KARBONYLÁCIE PRI SYNTÉZE PRÍRODNÝCH TETRAHYDROPYRÁNOVÝCH DERIVÁTOV	
<i>Wollner, P., Juríková, I., Malatinský, T.</i> . . . . .	191
RADICAL NEWMAN-KWART REARRANGEMENT UNDER MECHANOCHEMICAL ACTIVATION ON O-ARYL THIOCARBAMATES	
<i>Žilková, E.</i> . . . . .	192
PRÍPRAVA 4-BRÓM-SUBSTITUOVANÝCH SPIROIZOXAZOLÍNOV	
<i>Sládková, P., Ďurina, L.</i> . . . . .	194
POLYSUBSTITUOVANÉ ARYLAZOPYRIDÍNY: PRÍPRAVA A ŠTÚDIUM FOTOCHEMICKÝCH VLASTNOSTÍ	
<i>Matuška, J., Fischer, R.</i> . . . . .	196
SYNTÉZA A CHARAKTERIZÁCIA NOVÝCH SOLUBILIZOVANÝCH N-HETEROCYKLOV S POTENCIÁLNYM VYUŽITÍM VO FOTODYNAMICKEJ TERAPII	
<i>Ondruška, A., Bortňák, D.</i> . . . . .	198
PRÍPRAVA KARBODIIMIDOVÉHO POLYMÉRU A JEHO VYUŽITIE AKO AKTIVÁTORA KARBOXYLOVÝCH KYSELÍN PRE NÁSLEDNÉ TRANSFORMÁCIE	
<i>Kormančík, F., Malatinský, T.</i> . . . . .	200
TOTÁLNA SYNTÉZA FORODEZÍNU S VYUŽITÍM STABILNÝCH CYKLICKÝCH NITRÓNOV	
<i>Könözsiová, E., Fischer, R.</i> . . . . .	202

**Pokročilé analytické metódy**

CHIRÁLNA GC SEPARÁCIA ENANTIOMÉROV  $\alpha$ -IONÓNU ZA ÚČELOM ZIS-  
TENIA AUTENTICITY MALINOVEJ ARÓMY

*Fulín, M., Smetanová, M., Blaško, J., Kubinec, R.* . . . . . 207

PYROLÝZNE PRODUKTY APLIKOVATELNÉ V ZELENEJ ANALYTICKEJ  
CHÉMII

*Beliančinová, K., Frišták, V.* . . . . . 209

LA-ICP-MS FOR THE ANALYSIS OF ESSENTIAL ELEMENT IN STRESS-  
INDUCED REMODELLED CARDIAC TISSUES

*Machalová, M., Vašinová Galiová, M., Stračina, T.* . . . . . 211

DETERMINATION OF MELAMINE IN INFANT FORMULA BY MICROCHIP  
ELECTROPHORESIS WITH CONDUCTIVITY DETECTION

*Clance, S.* . . . . . 213

NEW APPROACHES IN ENVIRONMENTAL ANALYSIS USING GRAPHITE  
FURNACE ATOMIC ABSORPTION SPECTROMETRY

*Šachrová, S., Jurnečka, R., Komendová, R.* . . . . . 215

ANALYSIS OF THE CHEMICAL COMPOSITION OF TAR PRODUCED BY  
GASIFICATION OF SPRUCE WOOD CHIPS

*Amrichová, A., Imrichová, A., Baláš, M., Zlámalová Gargošová, H.* . . . . . 217

FATE OF ENROFLOXACIN AND ITS METABOLITES IN CHICKEN FAECES  
AFTER ANTIBIOTIC TREATMENT

*Hamplová, M., Partovi Nasr, M., Čejková, D., Farková, V., Zlámalová Gargošová, H.* 219

**Pokroky v materiálovej chémii a technológiách spracovania**

HIGHLY EFFICIENT SINGLET OXYGEN GENERATING RE(I) COMPLEXES  
WITH ONE- AND TWO-PHOTON EXCITATION

*Mathradan, A.* . . . . . 223

PSEUDO-QUADRUPOLAR (V-SHAPED) FURAN AND THIOPHENE CORED  
DERIVATIVES WITH BORONATED BENZOTHIAZOLES AS PROMISING  
TWO-PHOTON ABSORBING DYES

*Thalekela, M. K.* . . . . . 224

FROM NATURAL CLAYS TO SMART HYBRIDS: TACKLING TOLUENE POL-  
LUTION SUSTAINABLY THROUGH DFT-D3 ANALYSIS

*Asbat, A.* . . . . . 225

VÝVOJ ZELENÝCH EXTRAKČNÝCH TECHNÍK NA IZOLÁCIU FENOLO-  
VÝCH ZLÚČENÍN Z KÔRY AKO VEDLAJŠIEHO PRODUKTU DREVOSPRA-  
CUJÚCEHO PRIEMYSLU

*Štosel, M., Ház, A., Stašová, M., Krokmalna, T.* . . . . . 226

INFLUENCE OF DOSAGE, TEMPERATURE, AND COMPETING IONS ON  
THE ADSORPTION OF  $^{133}\text{Ba}$  BY A PERLITE-ALGINATE-CHITOSAN AD-  
SORBENT

*Singh, V., Kusumkar, V. V., Viglašová, E., Galamboš, M.* . . . . . 228

BIOPOLYMER ENTERIC CAPSULES PREPARED VIA HME AND FDM 3D PRINTING	
<i>Pospíšilová, A.</i> . . . . .	230
3D PRINTABLE POLY(ETHYLENE GLYCOL) BASED HYDROGELS AS AUSPICIOUS MATERIALS FOR DRUG DELIVERY SYSTEMS	
<i>Sokolinsky, J., Kreuzerová, M., Sedláček, P., Michlovská, L.</i> . . . . .	232
STUDIES ON THE EFFECTS OF GREEN SYNTHESIZED SILVER NANOPARTICLES WITH SMOKE SATURATED WATER ON BIOCHEMICAL, PHYSIOLOGICAL AND GROWTH PARAMETERS OF SUNFLOWER (HELIANTHUS ANNUUS L.)	
<i>Anas, M.</i> . . . . .	234
ŘÍZENÁ IONOTROPNÍ GELACE ALGINÁTU JAKO NÁSTROJ PRO VÝVOJ FUNKČNÍCH A ADAPTABILNÍCH HYDROGELŮ	
<i>Kouřilová, L.</i> . . . . .	235
CYTOTOXICITY OF COPPER (II) PHOSPHATE CERAMICS	
<i>Sivčáková, T., Varchulová Nováková, Z., Čacho, F., Veteška, P., Vašková, I., Janek, M., Bača, L.</i> . . . . .	237
CYTOTOXICITA A MECHANICKÉ VLASTNOSTI KOMPOZITOV NA BÁZE HYDROXYAPATITU PRE BIOMEDICÍNSKE SKAFFOLDY	
<i>Fialka, R., Janek, M.</i> . . . . .	239
<b>Potravinárska a kozmetická chémia a technológia</b>	
ZMĚNY KVALITATIVNÍCH PARAMETRŮ ROSTLINNÝCH OLEJŮ BĚHEM DLOUHODOBÉHO SKLADOVÁNÍ	
<i>Kinnertová, M.</i> . . . . .	243
STANOVENIE OBSAHU $\beta$ -KAROTÉNU V PLODE RUŽE MOYESOVEJ (ROSA MOYESII)	
<i>Bystričanová, M.</i> . . . . .	245
SKRÍNINGOVÁ ANALÝZA VÝLISKOV VZNIKAJÚCICH PRI LISOVANÍ HROZNA	
<i>Polyáková, V.</i> . . . . .	247
TUKY V ČOKOLÁDE	
<i>Donets, D., Minarovičová, L.</i> . . . . .	249
FALŠOVANIE A METÓDY AUTENTIFIKÁCIE MEDU	
<i>Khvostenko, S., Minarovičová, L.</i> . . . . .	251
ANALÝZA BIOMARKERŮ EXPOZICE FTALÁTŮM A BISFENOLŮM V LIDSKÉ MOČI	
<i>Horejšová, L.</i> . . . . .	253
MOŽNOSTI VYUŽITIA PRODUKTOV VČELIEHO PÔVODU V ZUBNÝCH PASTÁCH	
<i>Ďurišová, L., Holkovičová, T.</i> . . . . .	255
VYUŽITIE CÍCERA BARANIEHO NA VÝROBU CESTOVÍN	
<i>Dvořákova, L.</i> . . . . .	257

REZIDUA PESTICIDŮ V ČESKÝCH MEDECH	
<i>Lovus, A.</i> . . . . .	259
BENEFITY PROPOLISU V KOZMETIKE A VÝVOJ KOZMETICKÉHO VÝ- ROBKU S PROPOLISOM	
<i>Litviaková, V.</i> . . . . .	261
VYUŽITIE VČELEJ KAŠIČKY PRI OCHRANE KOŽE	
<i>Kováčová, N.</i> . . . . .	263
<b>Potravinárska technológia, Biochémia a Biotechnológia - doktorandi</b>	
VPLYV ROZDIELNEHO PRÍDAVKU TUKU A SOLI NA TEXTÚRNE VLAST- NOSTI PAŠTÉTY Z RODINNEJ FARMY	
<i>Ďurka, E., Kohajdová, Z., Lauková, M., Staruch, L.</i> . . . . .	267
AMARANTH AS A RAW MATERIAL FOR THE PRODUCTION OF BEVERA- GES	
<i>Píri, V., Kohajdová, Z.</i> . . . . .	269
RASTLINNÉ KMEŇOVÉ BUNKY ODVODENÉ Z KALUSOVÝCH BUNIEK HYBRIDNEJ LEVANDULE (LAVANDULA X INTERMEDIA)	
<i>Veničáková, L., Gubišová, M., Kraic, J., Kaňuková, Š.</i> . . . . .	271
MECHANIZMY FOTODYNAMICKEJ INAKTIVÁCIE A ICH ODRAZ V PRO- TEOMICKÝCH ZMENÁCH PRI INFEKЦИИ RICKETTSIA CONORII	
<i>Peresh, Y. Y., Zúñiga Navarette, F., Kováčová, M., Špitálsky, Z., Škultéty, E., Špi- talská, E.</i> . . . . .	273
ŠTÚDIUM EFEKTOROVÝCH PROTEÍNOV RICKETTSIA SPP. POMOCOU VYBRANÝCH OMÍK METÓD	
<i>Kaliukanov, S., Quevedo Diaz, M., Csicsay, F., Škultéty, L.</i> . . . . .	276
VYUŽITIE ZMESNÝCH MÚK S OBSAHOM OVSA SIATEHO (AVENA SATIVA L.) NA ZLEPŠENIE NUTRIČNÝCH A SENZORICKÝCH VLASTNOSTÍ TRA- DIČNÝCH PŠENIČNÝCH VÝROBKOV	
<i>Jánoška, D., Havrlentová, M.</i> . . . . .	278
KVANTIFIKÁCIA SPRÁVANIA SA RASTU PROBIOTICKÉHO KMEŇA LAC- TICASEIBACILLUS RHAMNOSUS GG V RYŽOVOM NÁPOJI	
<i>Brhelová Čmiková, T.</i> . . . . .	280
ÚLOHA ŽELEZA V ŽIVOTNOM CYKLE COXIELLA BURNETII	
<i>Janik, M., Hopková, D., Peresh, Y., Škultéty, L.</i> . . . . .	282
FUNKCIONALIZOVANÉ NANOČASTICE NESTECHIOMETRICKÉHO OXIDU MOLYBDÉNU AKO SLUBNÝ NÁSTROJ VO FOTOTERMÁLNEJ TERAPII PANKREATICKÝCH NÁDOROV	
<i>Talač, T., Labudová, M., Škvarková, L., Hvizdošová Annušová, A., Švastová, E., Csáderová, L.</i> . . . . .	284
POROVNANIE VPLYVU MUTÁCIÍ NA ROZPUSTNOSŤ REVERZNEJ TRANS- KRIPTÁZY	
<i>Karatkevich, I., Šutovský, A., Bellová, B., Křížová, A., Struhárňanská, E., Levar- ski, Z., Stuchlík, S.</i> . . . . .	286

VLIV DLOUHODOBÉHO SKLADOVÁNÍ NA JAKOSTNÍ ZNAKY LYOFILIZOVANÉHO MARINOVANÉHO HOVĚZÍHO MASA	
<i>Trenzová, K.</i> . . . . .	288
<b>Riadenie procesov</b>	
KINETIC MODELING OF LDPE PYROLYSIS	
<i>Fedor, A.</i> . . . . .	293
DATA-DRIVEN PROCESS MODELING FOR INDUSTRIAL SYSTEMS	
<i>Arbetová, P., Fáber, R.</i> . . . . .	295
DATA RECONCILIATION FOR INVENTORY MONITORING IN A PETROL REFINERY	
<i>Gaborčík, J., Paulen, R., Lubušký, K.</i> . . . . .	297
AUTOMATIC EXTRACTION OF SCIENTIFIC KNOWLEDGE FOR MATHEMATICAL MODELS CREATION	
<i>Suslov, S.</i> . . . . .	298
AUTOMATIZOVANÝ PRÍSTUP K MONITOROVANIU PRODUKCIE BIOPLYNU POČAS FERMENTAČNÝCH PROCESOV	
<i>Molitoris, J., Habara, M., Jankovičová, B.</i> . . . . .	299
FROM TEXT TO OPTIMIZATION: AN AGENT-BASED SYSTEM FOR AUTOMATED OPTIMIZATION	
<i>Bartková, A., Wadinger, M., Kvasnica, M.</i> . . . . .	301
MODERNIZATION OF THE STUDENT SCIENCE CONFERENCE MANAGEMENT SYSTEM USING THE LARAVEL FRAMEWORK	
<i>Melicherová, H.</i> . . . . .	303
<b>Technológie spracovania a ochrany prírodných a syntetických materiálov</b>	
3D TLAČENÉ UHLÍKOVÉ ELEKTROCHEMICKÉ SENZORY MODIFIKOVANÉ 2D MATERIÁLMI	
<i>Parshin, A., Gregová, K., Gemeiner, P.</i> . . . . .	307
VÝVOJ BIOPOLYMÉRNÝCH ZMESÍ PRE APLIKÁCIE V TKANIVOVOM INŽINIERSTVE	
<i>Košútová, Z., Vašková, I.</i> . . . . .	309
ANALÝZA A OPTIMALIZÁCIA SYSTÉMU REGULÁCIE KONZISTENCIE V PROCESE VÝROBY PAPIERA	
<i>Holubová, A.</i> . . . . .	311
STANOVENÍ LIMITUJÍCÍCH FAKTORŮ APLIKACE PAPIROVÝCH MATERIÁLŮ MODIFIKOVANÝCH TENKOVRSŤVÝMI NÁNOSY POLYMERŮ PŘI BALENÍ POTRAVIN	
<i>Kotrbaček, M.</i> . . . . .	312
EXTRAKCIA BIOAKTÍVNYCH LÁTOK Z JEDLOVEJ KÔRY POMOCOU ZELENÝCH ROZPŮŠŤADIEL	
<i>Štašová, M.</i> . . . . .	314

POROVNANIE EXTRAKCIE BIOAKTÍVNYCH LÁTOK Z DUBOVEJ KÔRY ZELEŇMI ROZPÚŠŤADLAMI A KONVENČNOU METÓDOU ASE	
<i>Krokhmalna, T.</i> . . . . .	316
VPLYV PRÍRODNÉHO POLYMÉRU ŽELATÍNY NA MECHANICKÉ A ELASTICKÉ VLASTNOSTI PAPIERA	
<i>Nižnanský, B.</i> . . . . .	319
KOMPLEXNÉ REŠTAUROVANIE RUKOPISU KNIHA LEKÁRSKYCH RÁD	
<i>Galdíková, S.</i> . . . . .	321
SIEŤOTLAČENÉ BIOCHAROVÉ BIOSENZORY, ICH AKTIVÁCIA A VYUŽITIE NA DETEKCIU SARKOZÍNU	
<i>Čolláková, K., Kováč, M., Gemeiner, P.</i> . . . . .	323
MATERIÁLOVÝ PRIESKUM A IDENTIFIKÁCIA MIKROVRSTIEV V UMELECKÝCH DIELACH SLOVENSKEJ NÁRODNEJ GALÉRIE/SLOVENSKEHO NÁRODNÉHO MÚZEA	
<i>Subbotin-Pavlotskyi, G., Malečková, S.</i> . . . . .	325
<b>Trendy vo fyzikálnej, organickej a environmentálnej chémii</b>	
FLUORESCENČNÁ SPEKTROELEKTROCHÉMIA S VYUŽITÍM 3D TLAČENÝCH ELEKTRÓD	
<i>Hurajtová, M.</i> . . . . .	329
COMPARISON OF IODIDE AND IODATE ACCUMULATION AND DRY WEIGHT BY SOIL-DWELLING MICROSCOPIC FILAMENTOUS FUNGI	
<i>Zamani, Z., Duborská, E.</i> . . . . .	331
SYNTHESIS OF 6,13-BIS(10-BROMOANTHRACEN-9-YL)-6,13-DIHYDRODIBENZO[B,I]BORANTHRENE A KEY PRECURSOR FOR THE PREPARATION OF BORON DOPED NANOGRAPHENES	
<i>Patra, S., Sykora, M., Tisovsky, P.</i> . . . . .	332
EFFECT OF SLUDGE AND BIOCHAR ON SOIL DEHYDROGENASE ACTIVITY AND GROWTH OF AVENA SATIVA	
<i>Marcinko, J., Zlámalová Gargošová, H.</i> . . . . .	334
PULZNÉ ELEKTRICKÉ POLE	
<i>Mydla, G., Sebechlebská, T., Kolivoška, V.</i> . . . . .	336
PRÍPRAVA HEXAFLUÓRIZOPROPOXYBENZÉNOV	
<i>Krotká, S., Májek, M.</i> . . . . .	338
VYUŽITIE STAVEBNÉHO ODPADU AKO FILTRAČNÝ MATERIÁL V TECHNOLÓGII KOREŇOVÝCH ČISTIARNÍ	
<i>Lukáč, T.</i> . . . . .	340
MODULÁCIA KINETICKÝCH A SPEKTROSKOPICKÝCH VLASTNOSTÍ IMINOTHIOINDOXYLOVÝCH FOTOPREPÍNAČOV METÓDAMI POČÍTAČOVEJ CHÉMIE	
<i>Ošľadnický, M.</i> . . . . .	342
ŠTÚDIUM BIOLOGICKÉHO ROZKLADU ODPADOVÝCH PRÚDOV Z VÝROBY METYLOLALKÁNOVÝCH KYSELÍN	
<i>Wolfová, P., Jankovičová, B., Hutňan, M.</i> . . . . .	344

**Posterová sekcia - stredoškolskí účastníci**

OPTIMIZATION OF CULTURE MEDIUM COMPOSITION FOR PRIMARY ROOT CULTURES OF DATURA STRAMONIUM L. USING RESPONSE SURFACE METHODOLOGY <i>Némethy, S.</i> . . . . .	349
VYUŽITIE EKOLOGICKÝCH EXTRAČNÝCH ROZPÚŠŤADIEL A POSTUPOV PRE IZOLÁCIU ÚČINNÝCH LÁTOK Z RASTLINNÝCH MATERIÁLOV <i>Kurucová, E.</i> . . . . .	351
STANOVENIE SACHARIDOV V POTRAVINÁCH A VÝZNAM PRE VÝŽIVU VČIEL <i>Lukačovičová, N.</i> . . . . .	353
TRANSFORMÁCIA BIOETANOLU NA UŽITOČNÉ CHEMIKÁLIE <i>Šuška, M., Goralka, T.</i> . . . . .	355
STANOVENIE KYSELINY MLIEČNEJ V POTRAVINÁCH A DÔKAZ BAKTÉRIÍ MLIEČNEHO KVASENIA <i>Duchovič, T.</i> . . . . .	357
ANALÝZA INTERAKCIE VITAMÍNU C A KOFEÍNU PRI VOLTAMPÉROMETRI: SYNERGICKÝ EFEKT ALEBO ANALÓGIA <i>Polrecká, P.</i> . . . . .	359
HODNOTENIE ÚROVNE KONTAMINÁCIE MLIEK S AFLATOXÍNOM M1 <i>Vavro, M., Kolarič, L., Hodalová, R.</i> . . . . .	361
MUTAGÉNNY POTENCIÁL $\alpha$ -ŽIARENIA URÁNOVÉHO SKLA NA IN VITRO KULTÚRU KVASINIEK SACCHAROMYCES CEREVISIAE <i>Liener, J. J.</i> . . . . .	363
MIKROEXTRAČNÁ TECHNIKA MEPS PRE IZOLÁCIU PESTICÍDOV ZO VZORIEK VÔD S NÁSLEDNOU GC-ECD ANALÝZOU <i>Mazan, Š.</i> . . . . .	366
3D TLAČ NIKLOVÝCH ELEKTRÓD PRE VÝROBU VODÍKA V ZERO-GAP ALKALICKEJ ELEKTROLÝZE <i>Šimeková, T.</i> . . . . .	368
PRÍPRAVA ADAMANTYLSUBSTITUOVANÝCH ENAMÍNOV A ŠTÚDIUM ICH BIOLOGICKEJ AKTIVITY <i>Pisárová, E.</i> . . . . .	370
RYŽOVÉ ŠUPKY AKO ZÁKLAD NOVÝCH EKOLOGICKÝCH MATERIÁLOV <i>Matkovičová, N.</i> . . . . .	372
MODERNÉ ELEKTROCHEMICKÉ METÓDY V PRAXI: ANALÝZA LIEČIVA NA HYPERTENZIU V JEDNEJ KVAPKE <i>Koláriková, K., Švorc, L.</i> . . . . .	374

---

# Modulácia kinetických a spektroskopických vlastností iminothioindoxylových fotoprepínačov metódami počítačovej chémie

Martin Ošťadnický<sup>a</sup>, Melody E. Boëtius,<sup>b,c,d</sup> Mark W. H. Hoorens,<sup>b,c</sup> Adèle D. Laurent,<sup>e</sup> Miroslav Medved',<sup>\*f,g</sup> Wiktor Szymanski<sup>\*b,c,d</sup>

<sup>a)</sup> Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Ilkovičova 6, SK-842 15 Bratislava, Slovak Republic

b) Department of Radiology, Medical Imaging Center, University Medical Center Groningen, Hanzeplein 1, 9713GZ Groningen, The Netherlands.

c) Center for Systems Chemistry, Stratingh Institute for Chemistry, University of Groningen, Nijenborgh 7, Groningen, The Netherlands

d) Department of Medicinal Chemistry, Photopharmacology and Imaging, Groningen Research Institute of Pharmacy, University of Groningen, A. Deusinglaan 1, 9713 AV, Groningen, The Netherlands

e) Nantes Université, CNRS CEISAM, UMR 6230, F-44000 Nantes, France

f) Faculty of Natural Sciences, Department of Chemistry, Matej Bel University, Tajovského 40, SK-97400 Banská Bystrica, Slovak Republic

g) Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Czech Advanced Technology and Research Institute (CATRIN), Palacky University Olomouc, Krížkovského 51 1/8, 77900 Olomouc, Czech Republic

*ostadnickyl@uniba.sk*

## Úvod

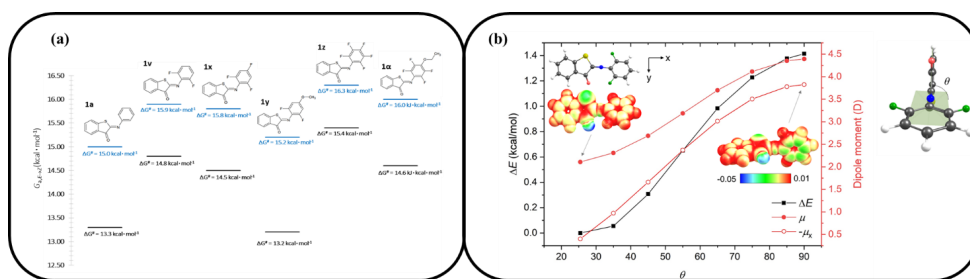
Molekulové fotoprepínače tvoria zaujímavú skupinu chemických látok, ktoré dokážu po interakcii so svetlom podstúpiť reverzibilnú transformáciu medzi dvomi, prípadne viacerými izomérnymi stavmi. Výskum posledných rokov smeruje k rozšíreniu ich aplikácie do oblastí ako medicína, svetlom modulovaná farmakológia a biotechnológia. Spomedzi dôkladne preskúmaných prepínačov disponuje len malá časť vlastnosťami vhodné pre *in vivo* použitie. V tomto aspekte vykazujú iminothioindoxylové prepínače (ITI) sľubné vlastnosti, medzi ktoré patrí viac ako 100 nm separácia absorpčných pásov [1,2], vysoké absorpčné koeficienty v oblasti 400-500 nm a fotoizomerizačný krok v rozsahu femtosekúnd [3]. Ich významným nedostatkom ostáva nízky, milisekundový polčas premeny, ktorý nezodpovedá optimálnemu intervalu 0.2 – 2 s [3]. Hlavným cieľom predloženej práce bola výpočtová optimalizácia kinetických a fotofyzikálnych parametrov iminothioindoxylových štruktúr pomocou substitúcie rôznymi funkčnými skupinami.

## Metodológia

Všetky výpočty v predloženej práci boli vykonané na DFT úrovni, za použitia M06-2X funkcionálu [4]. Vplyv prostredia bol zahrnutý pomocou implicitného modelu rozpúšťadla založeného na hustote (SMD), ako samotné rozpúšťadlo bol zvolený metanol. Optimalizácie, frekvenčné analýzy rovnovážnych geometrií a tranzitných stavov prebiehali na úrovni M06-2X/6-31+G(d)/SMD(MeOH)/M06-2X/6-311++G(2df,2p)/SMD(MeOH). Vertikálne excitačné energie a prechodové dipólové momenty boli získané na úrovni TD-DFT/M06-2X/6-311++G(2df,2p)/SMD(MeOH), pomocou formalizmu korigovanej lineárnej odozvy [5]. Všetky výpočty prebehli pomocou programových balíkov Gaussian09 a Gaussian16.

## Výsledky a diskusia

Spolahlivou stratégiou pre návrh ITI prepínačov s vyššou kinetickou stabilitou je fluorácia azobenzénovej časti ITI (**Obrázok 1a**). Takáto substitúcia vedie k akumulácii negatívneho náboja na benzénovom jadre a k následnej planarizácii (**Obrázok 1b**), čoho dôsledkom je zvýšená repulzia medzi fluórmi a karbonylovým kyslíkom. Červený posun absorpčných spektier a zvýšenie absorbancie vo viditeľnej oblasti je možné dosiahnuť zavedením silných elektrón-donorových skupín, ktoré planarizujú základný skelet a umožňujú efektívnejšiu konjugáciu  $\pi$ -elektrónov a vyšší prekrýv molekulových orbitálov.



**Obrázok 1** (a) Porovnanie teoretických a experimentálne stanovených aktivačných bariér ( $\Delta G^\ddagger$ , kcal·mol<sup>-1</sup>) pre iminoindoxylové štruktúry s rôznymi stupňami fluorácie (b) Závislosť relatívnej elektrónovej energie ( $\Delta E$ , kcal·mol<sup>-1</sup>), celkového dipólového momentu ( $\mu$ , v Debye) a dipólového momentu v smere x ( $-\mu_x$ , v Debye) od uhla  $\theta$  (definovaný na obrázku).<sup>2</sup>

## Záver

Predložená práca bola zameraná na optimalizáciu kinetických parametrov iminoindoxylov substituíciov vhodnými funkčnými skupinami. Optimálnu kinetickú stabilitu je možné dosiahnuť fluoráciou benzénového cyklu, zatiaľ čo červený posun absorpčných pásov je dosiahnuteľný substituíciov silnými elektrón-donorovými skupinami v para polohe azobenzénového zvyšku.

## Pod'akovanie

Táto práca bola podporená Agentúrou na podporu výskumu a vývoja (číslo projektu APVV-20-0098)

## Literatúra

- [1] Hoorens. M. W. H, Medved'. M.; et al. Nat. Commun. **2019**, 10, 2390.
- [2] Boëtius. M. E, Hoorens. M. W. H.; et al. Chem. Sci. **2024**, 15, 14379–14389.
- [3] Medved'. M, Hoorens. M. W. H.; et al. Chem. Sci., **2021**, 12, 4588.
- [4] Zhao, Y., Truhlar, D.G. Theor Chem Account **2008**, 120, 215–241.
- [5] Guido. C.A, Chrayteh. A.; et al. J. Chem. Theor. Comput. **2021**, 17(8), 5155-5164.