

19. jílová konference v České republice

Book of Abstracts

Ed. M. Šťastný

Hotel Skalský dvůr, 28.8. – 2.9. 2011

Kniha abstraktů, 19. jílová konference v České republice, Skalský dvůr u Bystřice nad Pernštejnem, srpen 2011,
ed. M. Šťastný, Praha, Česká republika

19. jílovou konferenci v České republice pořádají:

**Česká společnost pro výzkum
a využití jílu**

Česká společnost
pro výzkum
a využití jílu

Bystřicko a.s.



**Matematicko-fyzikální fakulta
Univerzity Karlovy v Praze**



ve spolupráci s DIAMO s.p.



Obsah

Bruthans J., Schweigstilllová J., Churáčková Z. and Jenč P. CLAY LAYER ABOVE THE SANDSTONE CAVE AS A SOURCE OF CaCO_3 IN SECONDARY CAVE CARBONATES: COMPOSITION AND ORIGIN (BOHEMIAN PARADISE, CZECH REPUBLIC)	6
Doušová B., Koloušek D., Filip J., Grygar T.M., Lhotka M., Machovič V., Krejčová S., Jakubíková B. VLIV STRUKTURNĚ A POVRCHOVĚ VÁZANÉHO ŽELEZA NA SORPČNÍ VLASTNOSTI NĚKTERÝCH JÍLŮ	7
Duchek P. POUŽITÍ MONTMORILLONITU V KOMPOZITNÍCH BIODEGRADABILNÍCH MATERIÁLECH	8
Hájek P., Šťastný M. MINERALOGICKÁ CHARAKTERISTIKA DISLOKAČNÍCH JÍLŮ HORNIN STARŠÍHO BARRANDIENU (ordovik – silur)	9
Koloušek D., Doušová B., Herzogová L., Kobera L., Benešová L., Hájek P. PŘÍPRAVA „NANOZEOLITŮ“ V GEOPOLYMERNÍCH POJIVECH	10
Komadel P., Petrák M., Madejová J. ČO VPLÝVA NA ROZPŮŠŤANIE ÍLOV V KYSELINÁCH, MOŽNOSTI POROVNÁVANIA LABORATÓRNYCH EXPERIMENTOV	11
Kovář P., Demel J., Kubát P., Jirka I., Pospíšil M. and Lang K. INORGANIC-ORGANIC HYBRID MATERIALS: LAYERED ZINC HYDROXIDE SALTS WITH INTERCALATED PORPHYRIN SENZITIZERS	12
Kraus. I SLOVENSKÉ VINOHRADNÍCTVO A JEHO TERROIN OČAMI GEOLÓGA	13
Krejčová S. *, Doušová B. VLIV OBSAHU JÍLOVÝCH MINERÁLŮ NA VLASTNOSTI PŮD	14
Kvapilová Š., Nosek J., Černík M., Polášek T. VÝZKUM TEPELNĚ A ELEKTRICKY VODIVÝCH MATERIÁLŮ NA BÁZI GEOPOLYMERŮ	16
Mockovčiaková A., Štyriaková I., Orolínová Z. BAKTERIÁLNA REGENERÁCIA BENTONITU POKRYTÉHO OXIDMI ŽELEZA PO SORPCII Cu(II)	17
Petrák M. INFRAČERVENÁ SPEKTROSKOPIA PRI VÝSKUME ÍLOVÝCH MINERÁLOV	18
Pospíšil M., Kovář P., Veteška M. MOLEKULÁRNÍ SIMULACE JÍLOVÝCH MINERÁLŮ	19
Praus P., Malachová K., Rybková Z. INTERKALACE MONTMORILLONITU IONTY STRÍBRA, MĚDI A ZINKU - ANTIBAKTERIÁLNÍ A ANTIFUNGÁLNÍ VLASTNOSTI TĚCHTO INTERKALÁTŮ	20
Šimánek M. VÝPOČTY STRUKTUR SUBSTITUOVANÝCH PORFYRINŮ S TĚŽKÝM KOVEM UVNITŘ JÁDRA AB-INICIO METODAMI	21
Štyriaková I., Štyriak I., Jablonovská K. BIOLOGICKO-CHEMICKÉ ODSTRAŇOVANIE JEMNOZRNNÝCH ŽELEZITÝCH A ÍLOVÝCH MINERÁLOV Z NERUDNÝCH SUROVÍN	22
Šťastný M., René M. VÝSKYT CORRENSITU V ALTEROVANÝCH TOPAZOVÝCH GRANITECH Sn- W RUDNÍHO LOŽISKA KRÁSNO-HORNÍ SLAVKOV	27
Šustek S., Svoboda L., Zelenka J., Zetková K., Kára J. MODIFIKACE HYDROGELU POMOCÍ KOLAGENU A NANOSTRUKTUROVANÉHO JÍLU	28
Veteška M., Pospíšil M., Praus P.	

Kniha abstraktů, 19. jílová konference v České republice, Skalský dvůr u Bystřice nad Pernštejnem, srpen 2011,
ed. M. Šťastný, Praha, Česká republika

SORPCE FENOLU A ANILINU NA POVRCHU MMT	29
Zapivovarski Votipka Z.* , Kovanda F.	
INTERCALATION OF TIMOPRAZOLE INTO HYDROTALCITE-LIKE HOST	30

CLAY LAYER ABOVE THE SANDSTONE CAVE AS A SOURCE OF CaCO_3 IN SECONDARY CAVE CARBONATES: COMPOSITION AND ORIGIN (BOHEMIAN PARADISE, CZECH REPUBLIC).

Bruthans J. ¹⁾, Schweigstilllová J. ²⁾, Churáčková Z. ¹⁾ and Jenč P. ³⁾

¹⁾ Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Albertov 6, 128 43 Praha 2, (bruthans@natur.cuni.cz)

²⁾ Ústav struktury a mechaniky hornin AV ČR, v. v. i., V Holešovičkách 41, 182 09 Praha 8

³⁾ Vlastivědné muzeum a galerie v České Lípě, Pracoviště archeologie, speleoantropologie a novodobých militárií, Náměstí Osvození 297, 470 34 Česká Lípa

The age of secondary carbonates (sinters) from several caves in the Bohemian Paradise was studied. Sinters cover part of the cave roof in thickness about 1 cm, or create cemented layer of carbonates in sediments in thickness up to 15 cm. The aim of this study is to discuss the origin of CaCO_3 in the sinter in Krtola Cave. Calcite sinters in studied caves were deposited 5-13 kyr BP based on ^{14}C and U/Th dating.

First half of the Krtola Cave, where sinters occur, is overlaid by fine sediments with grey clay layer up to 30 cm thick detected by soil probes up to 2 m below soil. Good agreement between accumulation of fine sediments above cave and the occurrence of calcite sinters in cave shows that source of carbonate is in this fine material.

This material is either Cretaceous marine clay and silt or deposit derived from late Quaternary loess. Cílek (2006) expects the latter possibility, but the fine material was not yet studied.

Mineralogy of fine fraction above the cave was compared with Cretaceous marine clay with bioturbation exposed in the cave wall. Unlike marine clay, the sediment above the cave contains chloride while kaolinite is absent

No CaCO_3 was detected in the fine material above the cave. Granular analysis shown that unlike loess, this material has bimodal distribution of grain sizes. Distinct from loess, the material contains mainly stable and ultra stable heavy mineral association, which is typical for marine clay.

CaCO_3 was probably released from fine material during Last Glacial (by mechanical weathering). In Holocene it was mobilized and transported into the cave. Over time all CaCO_3 was washed out from soil and cave overburden. At present time, salts containing aluminium precipitates in cave surroundings demonstrate complete change in pH and strong acidification.

Reference

Cílek V. (2006): Jeskyně Krtola v Českém ráji. – Pískovcový fenomén Českého ráje 2006.

VLIV STRUKTURNĚ A POVRCHOVĚ VÁZANÉHO ŽELEZA NA SORPČNÍ VLASTNOSTI NĚKTERÝCH JÍLŮ

Doušová B.¹⁾, Koloušek D.¹⁾, Filip J.²⁾, Grygar T.M.³⁾, Lhotka M.¹⁾, Machovi V.¹⁾, Krejčová S.¹⁾, Jakubíková B.¹⁾

¹⁾ Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR

(Barbora.Dousova@vscht.cz)

²⁾ Centrum pro výzkum nanomateriálů Univerzity Palackého, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, ČR

³⁾ Ústav anorganické chemie AVČR, 250 68 Řež, ČR

Jílové minerály patří k nejstarším, ale také nejrozšířenějším a velice účinným sorbentům v přírodních i technologických procesech. Díky nízkým hodnotám pH_{ZPC} jsou selektivními sorbenty kationtů, ale jednoduchou povrchovou modifikací jejich povrchu ionty kovů (Fe, Mn, Al) dojde ke změně povrchového náboje, a tím i adsorpční afinity materiálu vůči aniontům. Vzhledem k rozdílné kinetice adsorpce iontů kovů a anionických částic z roztoku, může probíhat modifikace povrchu jílu ve vodných systémech také „*in situ*“. Řada jílových minerálů obsahuje železo přirozeně vázané ve struktuře v různě stabilních formách. Cílem práce je popsat stabilitu a formy strukturně i povrchově vázaného železa v různých typech jílu a charakterizovat souvislost mezi chemismem železa a adsorpční (desorpční) afinitou jílu k toxickým kontaminantům.

Stabilita železa byla testována kinetickým loužením v 0,5M a 2M HCl, destil. H₂O, 0,1M KCl a 0,5M KHCO₃ pro simulaci kyselého, slabě alkalického a neutrálního prostředí o rozdílné iontové síle. Stabilita strukturně vázaného železa v kyselém prostředí klesá v pořadí:

Kaolinit > illit > kaolinitický jíl > smektitové „červené jíly“ > bentonit.

V rovnovážném a slabě alkalickém prostředí je železo ve všech materiálech srovnatelně stabilní, se slabým trendem:

Kaolinit > illit > bentonit \geq kaolin modifikovaný Fe²⁺ > smektitové „červené jíly“ > kaolinitický jíl.

Krystalické fáze Fe^{III} jsou relativně stabilní i v kyselém prostředí, zatímco slabě krystalické a amorfni formy přecházejí ochotněji na iontově výměnné, aktivní pozice Fe^{III}, které mohou být z hlediska sorpčních vlastností významné. Zvýšení iontové síly prostředí (0,1M KCl) inhibuje loužení železa, což odpovídá přirozeným procesům probíhajícím ve vodném prostředí.

Poděkování

Práce byly podporovány projekty GAČR P210/10/0938 a výzkumným záměrem MŠMT ČR č. 6046137302.

Literatura:

Burleson D.J., Penn R.L. (2006): Two-Step Growth of Goethite from Ferrihydrite. *Langmuir*, **22**, 402-409.

Doušová B., Fuitová L., Grygar T., Machovi V., Koloušek D., Herzogová L., Lhotka M. (2009): Modified aluminosilicates as low-cost sorbents of As(III) from anoxic groundwater. *J. Hazardous Mater.*, **165**, 134-140.

Manceau A., Drits V.A., Lanson B., Chateigner J., Wu J., Huo D., Gates W.P., Stucki J.W. (2000): Oxidation-reduction mechanism of iron in dioctahedral smectites: 2. Crystal chemistry of reduced Garfield nontronite. *American Mineralogist*, **85**, 153-172.

POUŽITÍ MONTMORILLONITU V KOMPOZITNÍCH BIODEGRADABILNÍCH MATERIÁLECH

Duchek P.

Západočeská univerzita v Plzni, katedra materiálu, Univerzitní 8, 306 14 Plzeň duchekpe@kmm.zcu.cz

Mezi méně tradiční využití bentonitických jílu a montmorillonitu patří jejich aplikace v kompozitních materiálech s polymerními strukturami. Letos uplynulo již 18 let od legendární kompatibilizace jílu a polyamidu a výroby automobilové komponenty z tohoto nanokompozitu firmou TOYOTA. Není také náhodou, že právě od devadesátých let minulého století dochází k renesanci zájmu o jílové minerály s ohledem na explozivní (a často inflační) zájem o studium nanostruktur.

Velmi zajímavou oblastí jsou kompozitní materiálu typu jíl/přírodní polymer, které mají na rozdíl od syntetických makromolekulárních látek často vysokou až úplnou biologickou odbouratelnost. Příspěvek popisuje nejvýznamnější používané polymerní matrice (polyvinylalkohol, polylaktid (PLA), chitosan a zejména škrob) a používané typy montmorillonitu. Je diskutována problematika kompatibility obou složek, morfologie vzniklého kompozitu, jeho fyzikálně-chemické a mechanické vlastnosti. Jílová složka použitá v malém množství v kompozitním materiálu jako výztuž pozitivně ovlivňuje nejen mechanické vlastnosti, ale i jeho plynopropustnost a hořlavost. V práci jsou porovnány výsledky získané při aplikaci čistého montmorillonitu (CLOSITE Na®) a průmyslově vyráběných bentonitů (Keramost a.s., Most). Jako polymerní matrice byl použit jak bramborový škrob plastifikovaný glycerolem, tak i jeho komerčně vyráběné deriváty (různé známky kationizovaných a acetylovaných škrobů). Referát kriticky hodnotí stávající nedostatky kompozitního materiálu, tj. poměrně nízkou mechanickou pevnost a vysokou afinitu k vodě a ostatním polárním kapalinám, a ukazuje možnosti nápravy.

Poděkování

Autor vyjadřuje poděkování za grantovou podporu, která umožnila tuto práci (projekt č. IAAX08240901 GA AV ČR, a projekt MPO ČR č. FR-T1/566).

MINERALOGICKÁ CHARAKTERISTIKA DISLOKAČNÍCH JÍLŮ HORNIN STARŠÍHO BARRANDIENU (ordovik – silur)

Hájek P.¹⁾, Šťastný M.²⁾

¹⁾ Ústav struktury mechaniky hornin AV ČR, v.v.i., V Holešovických 41, 182 09 Praha 8

²⁾ Geologický ústav AV ČR, v.v.i., Rozvojová 269, 165 00 Praha 6

V předložené práci jsou shrnuty výsledky mineralogického studia dislokačních jílů jednoho z nejvýznamnějších zlomů na území Prahy, pražského zlomu. Vzorky byly odebrány na dvou lokalitách zlomu, a to Praha - Hloubětín a Praha - Motol. V Hloubětíně se na zlomu stýkají skalecké křemence a jílovité břidlice záhořanského souvrství. V nadloží jsou pak vyvinuty jílovité břidlice dobrotivského souvrství. V Motole se stýkají řevnické křemence s dobrotivskými břidlicemi. V nadloží pak jsou libeňské břidlice. Pro celkový pohled na studovanou oblast jsou připojeny vzorky z lokality Skalka v Motolském údolí – Košíře, reprezentované obdobnými horninami jako v Motole. Poslední vzorek reprezentuje silurský bazický vulkanismus vyskytující se v blízkosti pražského zlomu u Motolského krematoria.

Na zlomu jsou výplně tvořené tzv. kataklasity, mezi které patří i dislokační jíly, které jsou typickým produktem vznikající drcením. Dislokační jíly na pražském zlomu jsou tvořeny křemenem, jílovými minerály, živci a dále kalcitem, goethitem, jarositem a sádrovcem.

Pozornost byla přednostně věnována jílovým minerálům. Vzorky byly studovány rentgenograficky, a to jak na práškových preparátech, tak orientovaných preparátech. Z jílových minerálů byl identifikován illit, kaolinit, chlorit, popř. smíšené struktury I-S. Kaolinit poskytuje sice ostré rtg. difrakce, ale triplet linií k určení krystaličnosti není příliš zřetelný, z čehož plyne že je středně uspořádaný (tzv. kaolinit T-pM). Neorientované práškové preparáty potvrdily směs nejméně dvou různých polytypů illitu téměř ve všech vzorcích. Byl definován polytyp 2M₁ s typickými difrakčními liniemi 2,91, 3,20 a 3,50 Å a polytyp 1M_d charakteristický liniemi o hodnotách 3,07 a 3,63 Å (Moore, Reynolds, 1997). Krystalinita 2M₁ illitu charakterizovaná Kublerovým indexem byla stanovena na 0,7 2θ. Dále bylo zjištěno, že s klesající velikostí částic klesá obsah kaolinitu a polytypu 2M₁ zatímco obsah polytypu 1M_d mírně roste.

Ze vzorků byl separován 2M₁ illit, který byl datován K-Ar metodou a výsledky potvrzují uvažované pohyby na zlomu na rozhraní ordoviku a siluru.

Poděkování

Autoři děkují za finanční podporu výzkumnému záměru ÚSMH AV ČR, v.v.i. č. A VOZ 30460519.

PŘÍPRAVA „NANOZEOLITŮ“ V GEOPOLYMERNÍCH POJIVECH

Koloušek D.¹⁾, Doušová B.¹⁾, Herzogová L.¹⁾, Kobera L.²⁾, Benešová L.²⁾, Hájek P.³⁾

¹⁾ Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6

²⁾ Ústav makromolekulární chemie AVČR, v.v.i., Heyrovského náměstí 1888/2, 160 00 Praha 6

³⁾ Ústav struktury a mechaniky hornin AVČR, v.v.i., V Holešovičkách 41, 182 09 Praha 8

Zeolity je možno připravovat hydrotermální alkalickou aktivací metakaolinitu. Suspenze používané při syntéze obvykle obsahují mezi 90-95 hm. % vody. Slouží jako transportní médium při kondenzaci polymerních výstavbových jednotek, tvořených $\text{Si}(\text{Al})\text{O}_4$ tetraedry, na nukleárních jádrech zeolitů. Geopolymery představují z tohoto hlediska obdobný systém avšak pro lepší zpracovatelnost a jeho další použití musí obsahovat nižší podíl záměsové vody. Svým složením vyjádřeným poměry $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ a $\text{Na}_2\text{O}(\text{K}_2\text{O})/\text{Al}_2\text{O}_3$ jsou si „zeolitové“ a geopolymerní směsi podobné, přičemž druhé dosahují díky nižšímu obsahu vody vyšší alkality. Za určitých podmínek je možno dosáhnout v geopolymerních pojivech zeolitovou mineralizací. Polární molekuly vody v tomto případě hrají důležitou roli přenosu mineralizátorů (OH^- skupin) a kompenzačních kationů (Na^+ a K^+) k reaktivním polohám O-Al-O-Si-O skeletu. Dochází zde ke štěpení vazeb a vytváření nových s možnou reorientací AlO_4^- tetraedrů a kompenzací náboje hydratovanými alkalickými kationty nebo OH^- skupinami. V krátkých hydrotermálních experimentech není možno vzniklá zeolitová „nuklea“ detekovat pomocí ^{29}Si MAS NMR ani rentgenovou difrakcí. Při delších aktivacích (viz diagram) nuklea rostou a vnějším projevem je vznik vysokoteplotních endotermních maxim geopolymerního skeletu.

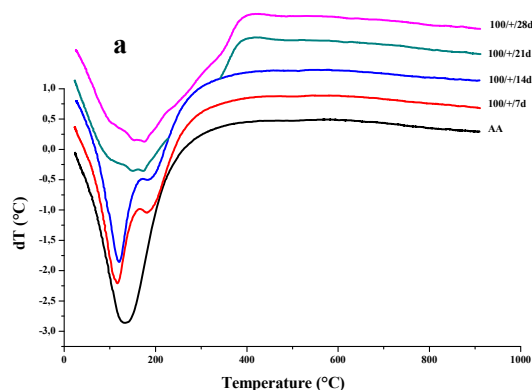


Diagram - DTA hydrotermálně exponovaných geopolymerních tělísek od 1 týdne do 4 týdnů při 100 °C (AA-stání při pokojové teplotě).

V závislosti na druhu žíhaného kaolinu, druhu přítomných kationtů a podmínek hydrotermálního zpracování (čas, teplota) je možno připravit v geopolymerní matici fáze: analcim, chabazit, zeolit P, zeolit A, zeolit L a foid hydroxysodalit.

Poděkování

Práce vznikla díky podpoře VZ MSM 604 613 7302

ČO VPLÝVA NA ROZPÚŠŤANIE ÍLOV V KYSELINÁCH, MOŽNOSTI POROVNÁVANIA LABORATÓRNYCH EXPERIMENTOV

Komadel P., Petrák M., Madejová J.

Ústav anorganickej chémie SAV, Dúbravská cesta 9, SK-845 36 Bratislava, Slovensko

Bentonity aktivované kyselinami, známe aj ako bieliace hlinky, sa dlhodobo využívajú pre odfarbovanie a čistenie látok, aj ako kyslé katalyzátory a ich nosiče. Iné íly sa kyselinami aktivujú menej často, aj keď o tomto sa objavili viaceré publikácie. Pri kyselinovej aktivácii bentonitov sa odstraňujú ľahko rozpustné zložky, ako sú uhličitaný a oxidy-oxohydroxidy železa. Mení sa aj hlavný minerál, montmorillonit, výmenou vymeniteľných katiónov hydratovanými protónmi a rozpúšťaním oktaedrických sietí aj tetraedrického Al. Stupeň rozkladu štruktúry smektitu výrazne ovplyvňuje vlastnosti získaného produktu.

Mnohé laboratórne štúdie rozpúšťania v kyselinách za rôznych podmienok poskytli cenné informácie o reaktivite rôznych minerálov s kyselinami a o kinetike a mechanizme týchto reakcií. Dôležitá je skutočnosť, že priame porovnanie výsledkov dosiahnutých v rôznych laboratóriách je zložitá, pretože rôzne premenné v experimentoch, ktoré podstatne ovplyvňujú reakčný proces a dosiahnuté výsledky, sú zriedkavo dostatočne presne popísané. Rozsah rozpustenia ílového minerálu ovplyvňuje viac premenných, ktoré možno rozdeliť do niekoľkých skupín: 1) Reakčné podmienky: teplota, čas, typ a koncentrácia použitej kyseliny, pomer íl/kyselina a intenzita miešania reakčnej zmesi; 2) typ ílu a jeho hlavný minerál; 3) substitúcie v jeho štruktúre; 4) veľkosť častíc a napučíavanie medzivrství.

Premenné z prvej skupiny môžu byť dobre definované, jedinou výnimkou je intenzita miešania reakčnej zmesi, od ktorej však môže podstatne závisieť rýchlosť reakcie a teda aj dosiahnutý stupeň rozkladu minerálu za inak rovnakých podmienok. Toto spôsobuje komplikácie pri porovnávaní výsledkov rozpúšťania smektitov v kyselinách získaných v rôznych laboratóriách a niekedy ich až znemožňuje.

Vplyv zloženia vrstiev na rozpúšťanie dobre vidno na smektitoch, trioktaedrické minerály sa rozpúšťajú v kyselinách oveľa rýchlejšie ako dioktaedrické. Porovnateľné reakčné rýchlosti sa zistili pre hectorit v 0.25 M HCl pri 20 °C a pre Al- montmorillonit v 6 M HCl pri 95 °C. Rýchlosť rozpúšťania podstatne rastie s rastúcou substitúciou Fe(III) a/alebo Mg(II) za Al(III) v oktaedrických sieťach, vplyv Mg(II) je väčší ako vplyv Fe(III). Protóny atakujú vrstvy nielen z okrajov častíc, ale aj z medzivrstvových priestorov. Zmiešanovrstevnaté ílové minerály, najčastejšie illity/smektity, sa často vyskytujú v bentonitoch. Vyšší počet nenapučiavajúcich vrstiev znižuje rýchlosť ich rozpúšťania v HCl. Zloženie vrstiev je dominantným faktorom ovplyvňujúcim rozpúšťanie ílových minerálov v kyselinách. Spektrá v blízkej IČ oblasti poskytujú veľmi užitočné informácie o zmenách v štruktúre.

Literatúra:

Madejová J., Petrák M., Pálková H., Komadel P. (2009): Near-infrared spectroscopy: a powerful tool in studies of acid treated clay minerals. *Vibrational Spectroscopy* **49**, 211-218.

Petrák M., Madejová J., Komadel P. (2010): Effect of chemical composition and swelling on acid dissolution of 2:1 clay minerals. *Philosophical Magazine* **90**, 2387-2397.

INORGANIC-ORGANIC HYBRID MATERIALS: LAYERED ZINC HYDROXIDE SALTS WITH INTERCALATED PORPHYRIN SENSITIZERS

Kovář P.¹⁾, Demel J.²⁾, Kubát P.³⁾, Jirka I.³⁾, Pospíšil M.¹⁾ and Lang K.²⁾

¹⁾ Charles University in Prague, Faculty of Mathematics and Physics, Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2, Czech Republic

²⁾ Institute of Inorganic Chemistry of the ASCR, v.v.i., Husinec-Řež 1001, 250 68, Řež, Czech Republic

³⁾ J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry of the ASCR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Czech Republic

Layered materials provide a two-dimensional interlayer space suitable for accommodating molecules with a designed functionality. We studied new inorganic-organic hybrids prepared by intercalation of anionic porphyrin sensitizers (PdTPPS, ZnTPPS, PdTPPC) into the host structure of layered zinc hydroxide salts (LZH). The inorganic host offers stabilization and protection, whereas the guest species provide the photofunction. The arrangement and properties of porphyrin molecules in the interlayer space were studied by a combination of molecular simulations and experimental techniques. Intercalation of porphyrins led to a gallery height (about 1.8 nm) that is comparable with the size of porphyrin molecules. LZH-ZnTPPS sample exhibited the best crystallinity and its structure was studied in detail. Molecular simulations of LZH-ZnTPPS give the gallery filled with the porphyrin guests and with the following characteristics: (i) interlayer space is filled with disordered porphyrin units, the guests are horizontally shifted and the shift equals to about a half of a porphyrin unit size; (ii) the porphyrin planes are inclined with respect to the hydroxide layer normal by about 22°; (iii) the angle between the porphyrin planes varies between 0 (parallel arrangement) and 20°; (iv) the porphyrin units are closely packed – the average distance between the porphyrin planes is 0.4 nm; (v) the sulfonated porphyrins interact with the brucite-like layers of LZH similarly to LDH as also follows from FTIR results and (vi) the interactions in the system (electrostatic, van der Waals and hydrogen bonding contributions) and the stability of LZH-ZnTPPS are very similar to layered double hydroxides. The hybrids appear to be good singlet oxygen $O_2(^1\Delta_g)$ producers with the large effective lifetimes of $O_2(^1\Delta_g)$ suggesting that the LZH host is a good carrier of porphyrin sensitizers [1].

Acknowledgment:

This work was supported by the Czech Science Foundation (P207/10/1447), the Research plan of the Academy of Sciences of the Czech Republic (AV0Z40320502, AV0Z40400503), and the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (MSM 0021620835).

Reference

Demel J. et al. (2010) : *J. Phys. Chem. C*, **114**, 16321–16328

SLOVENSKÉ VINOHRADNÍCTVO A JEHO TERROIN OČAMI GEOLÓGA

Kraus I.

Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského Bratislava, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava

Tak ako vinič hroznorodý je schopný zakoreniť sa do materskej horniny veľmi hlboko, aj samotné jeho pestovanie zasahuje veľmi hlboko do našej minulosti. Posledné archeologické výskumy ho posúvajú až do obdobia predkeltskej kolonizácie, kedy nám ho indoeurópske kmene, približne pred tromi tisícami rokov priniesli povodím Dunaja na dnešné územie Malokarpatskej vinohradníckej oblasti.

Najväčší priestor na získavanie nových poznatkov v slovenskom vinohradníctve je potrebné poskytnúť dvom prírodovedným zložkám terroiru – pôde a materskej hornine. Slovenský vinohradnícky región umožňuje študovať vzájomnú interakciu medzi nimi na veľmi pestrom súbore hornín rôzneho zloženia a pôvodu. Jedná sa o horniny vyvreté (žula), výlevné (ryolit a andezit), usadené (štrk, piesok, spraš a íl) a nakoniec premenené – metamorfované (bridlica). Prvoradou úlohou takto zameraného výskumu by malo byť stanovenie dostupnosti prírodných biogénnych prvkov z materskej horniny pre koreňový systém viniča a následne ich stanovenie v mušte a víne. Takéto zadanie môže riešiť jedine výskumný tím zložený z geológov, pedológov, enológov, biológov a chemikov.

Nový pohľad na vinohradníctvo prostredníctvom prírodovedných zložiek terroiru umožňuje omnoho lepšie ako doteraz pochopiť jedinečnosť našich vinohradníckych oblastí, rajónov a obcí. Je najvyšší čas zakotviť celú problematiku Slovenského vinohradníckeho regiónu a jeho ochranu legislatívne. V opačnom prípade sa budeme bezmocne pozerať na jeho postupnú likvidáciu, čo je obzvlášť aktuálne v najstaršej a vo viacerých smeroch výnimočnej Malokarpatskej vinohradníckej oblasti.

VLIV OBSAHU JÍLOVÝCH MINERÁLŮ NA VLASTNOSTI PŮD

Krejčová S., Doušová B.

Vysoká škola chemicko-technologická, FCHT, Ústav Chemie pevných látek, Technická 5, 166 28 Praha 6, (Stanislava.Krejцова@vscht.cz)

Půda je nejsvrchnější vrstvou zemské kůry, je to třífázový systém pevného, kapalného a plynného skupenství obsahující organické i anorganické složky. V životním prostředí má půda filtrační, akumulaci, stabilizační a transportní funkci. Důležitou složkou pevného podílu půd jsou primární a sekundární minerály. Sekundárními minerály jsou myšleny zejména jílové minerály, oxidy-hydroxidy Fe, Al, Mn a sekundární sulfáty, fosfáty a další soli.

Cílem této práce je charakterizace půd z hlediska jejich pH a pH_{ZPC} , obsahu jílových minerálů, obsahu Fe, Al a C a z hlediska ostatních půdních charakteristik (CEC, A_{sp}). Dalším cílem je porovnání adsorpčních vlastností půd při sorpci oxoaniontů As/Se v závislosti na sledovaných charakteristikách, zejména na obsahu jílových minerálů a železa.

V práci byly použity vzorky půdy kontaminované arsenem z oblasti Polabí, vzorky půdy kontaminované selenem odebrané v CHKO Český Kras a komerční referenční půdy (LUFA).

Vzorky půd byly vysušeny při laboratorní teplotě, mlety, síťovány a mineralizovány v mikrovlnném mineralizačním zařízení. Obsah As, Se a Fe byl stanoven metodou AAS, fázové a prvkové složení metodami XRD a XRF. Zbytkové koncentrace As/Se po modelových sorpcích byly měřeny metodami AAS a AFS.

Tabulka 1: Obsah As/Se v jednotlivých vzorcích a některé půdní charakteristiky

	$\frac{c(As)}{[mg\ kg^{-1}]}$	$\frac{c(Se)}{[mg\ kg^{-1}]}$	$\frac{c(Fe)}{[mg\ g^{-1}]}$	C_{org} w%	jíl %	CEC $\frac{mmol}{100g}$
P1	11.98	-	5.94	2.91	5	32.9
P2	15.74	-	11.89	0.58	5	24.0
C1	-	5.39	33.11	3.17	10	30.4
C2	-	1.23	16.42	0.45	3	38.9
K1	-	-	2.90	0.68	3	4.0
K2	-	-	4.30	1.93	6	10.0

P1, P2 - půdy Polabí C1, C2- půdy Český kras K1, K2 - komerční půdy

Bylo zjištěno, že sorpční kapacity sledovaných půd jsou nízké. Na sorpční schopnosti zmiňovaných půd má vliv především přítomnost železa, vliv obsahu jílových minerálů nebyl prokázán.

Poděkování

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT (Rozhodnutí č. 21/2011)

Literatura:

Bower, C. A. et. al. (1952):. Exchange cation analysis of saline and alkali soil. *Soils Sci.*, **73**, 251-261.

Doušová B. et al. (2008): Stability of Arsenic Species in Soils Contaminated Naturally and in an anthropogenic Manner. *Water Air Soil Pollut.* **187**, 233-241.

Thunjai, T.; Boyd, C.; Dube, K. (2001): Ponds Soil pH Measurement. *Journal of the world aquaculture ociety*, **32**, 142-152.

VÝZKUM TEPELNĚ A ELEKTRICKY VODIVÝCH MATERIÁLŮ NA BÁZI GEOPOLYMERŮ

Kvapilová Š., Nosek J., Černík M., Polášek T.

Technická univerzita v Liberci, Ústav pro nanomateriály, pokročilé technologie a inovace

Geopolymery jsou nazývány anorganické polymerní materiály, které vznikají polykondenzační reakcí základních hlinito-křemičitanových oxidů v zásaditém prostředí. Výchozí surovinou může být buď přírodní materiál – kaolinitické jíly, anebo materiál vzniklý druhotně jako odpad v průmyslové výrobě – popílky, vysokopeční strusky, odpadní kaly. Díky svým dobrým mechanickým vlastnostem, jako vysoké pevnosti a odolnosti vůči vysokým teplotám může geopolymerní matrice sloužit jako základní materiál pro mnohé další aplikace např. ve stavebnictví, pro imobilizaci toxických prvků a stabilizaci odpadů, jako protipožární nátěry atd. Náš výzkum je zaměřen na vývoj elektricky a tepelně vodivých materiálů, kdy k základní matici průmyslově vyráběné kaolinické směsi Baucis o různých hmotnostních poměrech aktivátoru a cementové směsi byl přidáván grafit (od 16 do 46%) ve třech různých zrnitostech (50 μ m, 0,025 mm a 0,160 mm). Pro každý z připravených vzorků byla pro teploty v intervalu (20–400°C) změřena jejich elektrická vodivost. Tepelná vodivost vzorků byla stanovena dynamickým měřením teploty podobajícím se 1D úloze vedení tepla. Jedna podstava kvádrů vzorku geopolymery byla zahřívána konstantní teplotou, na druhé podstavě pak byl měřen průběh teploty, přičemž ostatní strany kvádrů byly izolovány z důvodů zamezení úniku tepla konvekcí do okolí. V příspěvku budou prezentovány dosažené výsledky pro různé poměry grafitu a geopolymery.

BAKTERIÁLNA REGENERÁCIA BENTONITU POKRYTÉHO OXIDMI ŽELEZA PO SORPCII Cu(II)

Mockovčiaková A., Štyriaková I., Orolínová Z.

Ústav geotechniky SAV, Watsonova 45, 043 53 Košice, Slovensko

Kontaminácia životného prostredia, týkajúca sa konkrétne znečistenia vôd organickými i anorganickými látkami z priemyslu je problém, ktorému sa venuje veľká pozornosť. Efektívnou metódou odstraňovania iónov ťažkých kovov z vodných roztokov je adsorpcia na bentonite, ktorého vlastnosti vyplývajú z kryštálovej štruktúry minerálov zo skupiny smektitov, obsiahnutých v bentonite. Okrem prírodného bentonitu sa používajú aj rôzne formy modifikácie bentonitu, ktorými sa zvyšujú niektoré jeho vlastnosti. Povrchovou modifikáciou frakcie prírodného bentonitu (obsahujúcej viac než 80 % montmorilonitu) magnetickými časticami je možné vylepšiť aj jeho sorpčné vlastnosti. Z predchádzajúceho výskumu vyplynulo, že v prípade nízkych koncentrácií modelových vodných roztokov (do 10 mg/l) dosiahla sorpcia Cd(II) na modifikovanom bentonite účinnosť 98 %.

Z hľadiska opätovného použitia sorbenta, je aktuálna otázka jeho regenerácie. Sorbované ióny kovov môžu byť odstránené konvenčnými metódami, ale tiež ekonomickejšími procesmi biolúhovania. Prísunom živín môže dôjsť k stimulácii bakteriálneho filmu na povrchu sorbenta, čo vedie k mobilizácii bakteriálnych buniek a tým k potrebnej regenerácii sorbenta, dôkazom čoho by mali byť vysoké hodnoty účinnosti desorpcie ťažkých kovov. Predmetom výskumu bol magneticky modifikovaný bentonit, pripravený v hmotnostnom pomere 1:1 (bentonit:oxidy železa) pri izbovej teplote, označený ako referenčná vzorka, ktorý bol použitý na sorpciu medi. Referenčná vzorka a vzorka použitá na sorpciu Cu(II), boli očkované zmesnými kultúrami baktérií, izolovanými zo sedimentu Ružín a z pôdy kontaminovanej hutníckym podnikom na výrobu medi Kovohuty Krompachy. V priebehu 12 dňového biolúhovania vzoriek bolo pozorované zvyšovanie kinetiky extrakcie Fe(III) u referenčného bentonitu. Pri bakteriálnej regenerácii vzorky modifikovaného bentonitu použitej na sorpciu Cu(II) došlo už po 2 dňoch k 60 % extrakcii Cu(II), ktorá postupne v priebehu nasledujúcich 10 dní narástla na 75%, pričom nedošlo k disolúcii Fe(III). Ďalšia desorpcia Cu(II) bola závislá aj od extrakcie Fe(III) z povrchu kompozitu z dôvodu narušenia vzájomnej väzby, kde boli pri regenerácii sorbentu čiastočne aktívnejšie baktérie izolované z pôdy Krompachy.

Prvotné pokusy bioregenerácie sorbentov boli realizované z dôvodu vývoja ekologických spôsobov spracovania kationov kovov umožňujúcich vyvíjať ekonomické technológie bez zložitých operačných úkonov.

Pod'akovanie:

Táto práca bola podporovaná projektmi VEGA č. 2/0119/09 a č. 2/0109/11 a taktiež vznikla v rámci Operačného programu Výskum a vývoj pre projekt: Centrum excelentnosti pre integrovaný výskum geosféry Zeme (ITMS: 26220120064), ktorý je spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

INFRAČERVENÁ SPEKTROSKOPIA PRI VÝSKUME ÍLOVÝCH MINERÁLOV

Petrák M.

Ústav anorganickej chémie, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, SK-845 36 Bratislava, Slovenská republika

Infračervená (IČ) spektroskopie sa v súčasnosti často využíva pri výskume ílov a ílových minerálov. Pokročilý vývoj transmisných a reflexných meracích techník umožňuje získať cenné informácie o minerálnom zložení ílu a o štruktúre a chemickom zložení ílových minerálov. Výber vhodnej metódy závisí od požadovanej informácie a od fyzikálneho stavu vzorky. Pomocou IČ spektroskopie sa dajú analyzovať ílové vzorky v tuhom (prášky, pasty) aj kvapalnom (suspenzie) skupenstve. Na meranie práškových vzoriek v strednej IČ oblasti ($4000\text{--}400\text{ cm}^{-1}$), kde sa nachádzajú absorpčné pásy valenčných a deformačných vibrácií SiO, OH skupín a molekúl vody, sa najčastejšie využíva technika lisovania KBr tabletiiek. Ide najmä o rutinnú charakterizáciu ílových minerálov a identifikáciu neílových prímiesí (rôzne formy SiO₂, Al₂O₃, Fe₂O₃ a pod.). Táto metóda je vhodná aj na štúdium štruktúrnych zmien počas chemických modifikácií ílových minerálov v kyslých a alkalických roztokoch. Meranie IČ spektier reflexnými technikami sa využíva pri vzorkách nevhodných na lisovanie KBr tabletiiek, napríklad prchavých, nestálych prípadne tmavých. Pri odrazových technikách sa merané vzorky nemiešajú s inými látkami a môžu sa použiť na ďalšie merania. Diamond Smart Orbit ATR technika má vďaka diamantovému kryštálu, ktorý odoláva aj tvrdším materiálom, uplatnenie aj pri štúdiu veľmi tvrdých materiálov. Odrazová technika Smart DRIFT sa využíva na merania v strednej ale najmä v blízkej IČ oblasti ($12000\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$), kde sa nachádzajú overtóny a kombinačné vibrácie OH, NH a CH skupín. Dobre rozlíšené OH vibrácie molekúl vody od štruktúrnych OH skupín umožňujú sledovanie štruktúrnych zmien ílových minerálov počas ich rozpúšťania v HCl. Pomocou spektier v blízkej IČ oblasti je možné identifikovať vznik Si-OH skupín (7316 cm^{-1}) aj v tom prípade, keď ich obsah je veľmi nízky a spektrá v strednej IČ oblasti ešte neukazujú žiadne známky narušenia vrstevnatej štruktúry. Technika Smart NIR UpDRIFT je určená pre meranie látok nestabilných na vzduchu, napr. hygroskopických. Využíva sa pri štúdiu sorpčných vlastností vzoriek ílových minerálov chemicky modifikovaných v HCl.

MOLEKULÁRNÍ SIMULACE JÍLOVÝCH MINERÁLŮ

Pospíšil M., Kovář P., Veteška M.

Univerzita Karlova v Praze, Matematicko fyzikální fakulta, Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2

Molekulární simulace jílových minerálů spolu s experimentálními metodami jako je rtg. difrakce, infračervená spektroskopie, termogravimetrie, chemická analýza a další umožňuje detailní pohled do struktury přírodních i modifikovaných jílových materiálů. Znalosti o struktuře lze využít pro pochopení vzájemných interakcí a připravit nové cílené materiály s požadovanými vlastnostmi.

Molekulární modelování je založeno na porovnávání známých struktur a vlastností s novou dosud neurčenou strukturou s cílem nalézt konformaci s minimální energií. Výpočty jsou založeny na parametrech popisujících známé materiály a tyto parametry jsou soustředěny do silových polí. Silová pole jsou buďto obecná popisující všechny prvky periodické soustavy prvků nebo speciálně odvozena pro určité materiály, např. skla. Vzhledem k velké variabilitě prvků v jílových materiálech jsou pro ně vyvíjena specializovaná silová pole.

Na MFF UK byly řešeny následující jílové materiály: montmorillonity, beidelity, vermiculity modifikované organickými kationty nebo polárními neutrálními molekulami. Sorpce organických polutantů na povrchu montmorillonitu. Úspěšně byly rovněž řešeny jílové minerály interkalované barvivy. V současné době se řeší struktury aniontových jíků – hydrotalcitů interkalovaných různými variantami porfyrinových aniontů.

INTERKALACE MONTMORILLONITU IONTY STŘÍBRA, MĚDI A ZINKU - ANTIBAKTERIÁLNÍ A ANTIFUNGÁLNÍ VLASTNOSTI TĚCHTO INTERKALÁTŮ

Praus P.¹⁾, Malachová K.²⁾, Rybková Z.²⁾

¹⁾ Katedra analytické chemie a zkoušení materiálu, VŠB-Technická univerzita Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33, (petr.praus@vsb.cz)

²⁾ Katedra biologie a ekologie, Ostravská univerzita v Ostravě, Chittusiho 10, 700 10 Ostrava

Montmorillonit (MMT) typu Wyoming byl interkalován ionty stříbra, mědi a zinku, které jsou známy svými antibakteriálními a antifungálními vlastnostmi. Interkalace probíhala ve vodných roztocích těchto iontů. Adsorpce byla hodnocena pomocí běžně používaných adsorpčních izoterem: Langmuirova izoterma nejlépe popisovala adsorpci Ag^+ (Praus et al., 2008) a generalizovaná Langmuirova-Freundlichova (Sipsova) izoterma nejlépe charakterizovala adsorpci Cu^{2+} a Zn^{2+} (Kozák, Praus, 2010). Adsorbovaná množství klesala v pořadí: $\text{Zn}^{2+} > \text{Cu}^{2+} > \text{Ag}^+$. Jejich interkalace byla potvrzena postupným nárůstem koncentrací uvolněných mezivrstevných kationtů a zvětšením hodnot $d(001)$ montmorillonitu.

Interkaláty (M-MMT) byly testovány na bakteriích *Escherichia coli* a houbách *Pycnoporus cinnabarinus* a *Pleurotus ostreatus* (Malachová et al., 2011). Pro srovnání byl použit původní MMT. Antibakteriální účinnost byla vyjádřena jako míra inhibice růstu *E. coli* v masopeptonovém bujónu, k němuž byly interkaláty přidány. Inhibiční účinek byl odečítán v intervalech 2, 3 a 24 hodin při kultivační teplotě 25 °C. Účinnost interkalátů klesala v pořadí $\text{Ag-MMT} > \text{Cu-MMT} \approx \text{Zn-MMT}$ podobně jako účinnost roztoků samotných iontů kovů. Antifungální vlastnosti byly testovány na kulturách hub rostoucích na živném agaru s obsahem interkalátů. Inhibiční efekt byl odečítán po sedmi denní inkubaci při teplotě 28 °C. Antifungální účinnost byla posuzována na základě vypočtených hodnot efektivních koncentrací pro 50% inhibici růstu (EC_{50}). Pro druh *Pycnoporus cinnabarinus* účinnost klesala v pořadí $\text{Zn-MMT} \geq \text{Cu-MMT} > \text{Ag-MMT}$ a pro *Pleurotus ostreatus* v pořadí $\text{Cu-MMT} > \text{Zn-MMT} > \text{Ag-MMT}$. Účinky interkalátů byly vysvětleny uvolňováním iontů kovů do živných médií, které obsahují vysoké koncentrace NaCl. To bylo ověřeno jejich desorpcí v modelových roztocích NaCl, která klesala v pořadí: $\text{Ag}^+ > \text{Cu}^{2+} > \text{Zn}^{2+}$. MMT sloužil jako inertní nosič aktivních látek.

Literatura

- Kozák O. & Praus P. (2010): Adsorption of zinc and copper ions on natural and ethylenediamine modified montmorillonite. *Ceramics-Silikáty*, **54**, 78-84.
- Malachová K., Praus P., Rybková Z., Kozák O. (2011): Antibacterial and antifungal activities of silver, copper and zinc montmorillonites. *Applied Clay Science*, doi: 10.1016/j.clay.2011.05.016.
- Praus P., Turicová M., Valášková M. (2008): Study of silver adsorption on montmorillonite. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, **19**, 549-556.

VÝPOČTY STRUKTUR SUBSTITUOVANÝCH PORFYRINŮ S TĚŽKÝM KOVEM UVNITŘ JÁDRA AB-INCIO METODAMI

Šimánek M.

Univerzita Karlova v Praze, Matematicko fyzikální fakulta, Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2

Byly počítány geometrické struktury substituovaného porfyriu s atomem Palladia uvnitř jádra. Výpočty byly provedeny metodou DFT pro dvě varianty: Pd-porfyriu substituovaný karboxy skupinami a Pd-porfyriu substituovaný sírou. V obou případech byly obdrženy geometrie, které obsahují velmi stabilní část porfyriuového jádra s atomem Pd a část obsahující substituenty vázané přes chlohexanový kruh. Vazba přes cyklohexanový kruh umožňuje určitou prostorovou flexibilitu substituentu v okolí minima. Optimalizované geometrie byly porovnány z hlediska prostorového uspořádání a délek vazeb. Porfyriuové jádro s atomem Pd v centru je velmi stabilní struktura kterou neovlivňují substituenty vázané přes cyklohexanové kruhy. Struktura je přesně planární se střední délkou vazby Pd 2,04 Å. Tyto optimalizované geometrie byly použity jako vstupní struktury pro modelování interkalátů aniontových jílu - hydrotalcitů pomocí metod molekulové mechaniky. Při optimalizaci modelu interkalátu byla geometrie jádra těchto struktur fixována.

BIOLOGICKO-CHEMICKÉ ODSTRAŇOVANIE JEMNOZRNNÝCH ŽELEZITÝCH A ÍLOVÝCH MINERÁLOV Z NERUDNÝCH SUROVÍN

Štyriaková I., Štyriak I., Jablonovská K.

Ústav geotechniky SAV, Watsonová 45, 043 53 Košice, Email: bacil@saske.sk

K nekonvenčným technológiám úpravy nerudných surovín patrí proces biologického lúhovania surovín, ktorý je možné využiť buď ako predúpravu suroviny pred elektromagnetickou separáciou na zvýšenie výťažnosti Fe povrchovo viazaného ílmi, alebo ako samostatnú 1-3 mesačnú úpravu nerudných surovín v procesoch diskontinuálneho statického lúhovania suroviny vo vodnom prostredí. Tieto procesy boli odskúšané v laboratórnych merítkach na kremenných pieskoch ložiska Vyšný Petrovec, Šaštín a Plachtince, na živcových surovinách lokalít Liešťany, Vydrovo, Rudník, Turčianské Teplice, na kaolíne z ložiska Horná Prievrana, Vyšný Petrovec, Rudník. Poloprevádzkovo boli biolúhovacie procesy overené na kremenných pieskoch ložiska Šaštín. Množstvo odstráneného Fe záviselo od spôsobu, podmienok biolúhovania, od mineralogického zloženia surovín a väzby Fe s ílmi, ako aj od prídavkov chelatujúcich látok. Heterotrófne baktérie rástli v prítomnosti všetkých nerudných surovín a boli schopné extrahovať Fe. Rýchle formovanie anaeróbných podmienok pre redukciu a disolúciu Fe umožňovalo jednoduchú manipuláciu v biolúhovacom systéme. Tieto na pohľad jednoduché porovnávacie laboratórne biolúhovacie experimenty pre zníženie Fe z nerudných surovín heterotrófnymi baktériami boli uskutočnené s cieľom využívania najekonomickejšieho spôsobu úpravy nerudných surovín s elimináciou mnohých konvenčných operačných úkonov v priemyselných merítkach.

Súčasný stav úpravy surovín

V súčasnosti sa pri skvalitňovaní nerudných surovín využívajú fyzikálne (plavenie a magnetická separácia), fyzikálnochemické (flotácia) a chemické (lúhovanie anorganickými kyselinami) procesy. Žiadny z týchto procesov nebol celkom úspešný pre univerzálnu aplikáciu, nakoľko tieto procesy sú často drahé a hlavne vedú k vzniku nežiadúcich komponentov, ktoré sú typicky spracovávané neutralizáciou, precipitáciou a recykláciou vody.

Vysoko-intenzívna magnetická separácia je štandardná metóda využívaná na odstránenie samostatných minerálnych častíc Fe-Ti minerálov z nerudných surovín.

Chemické metódy pozostávajúce z lúhovania surovín s anorganickými kyselinami a redukčnými činidlami ako sú sodium dithionit a aluminium sulfát, oxid siričitý a práškový hliník alebo oxid siričitý a práškový zinok sú často vhodné pre získanie vysokého stupňa odstránenia železa, ktoré často obaluje minerálne častice surovín, ale sú veľmi drahé a environmentálne nebezpečné (Mesquita et al., 1996).

Biotechnologické spracovanie silikátových surovín predstavuje novú alternatívnu cestu účinného skvalitnenia nerudných surovín. Biotechnologické spracovanie je založené na bakteriálnom lúhovaní suroviny a disolúcií Fe-oxidov, ktoré tvoria jemnozrnné častice alebo povlaky na priemyselných mineráloch. Tieto procesy bakteriálnej disolúcie železa sú pozorované *in situ* pri zvetrávaní silikátových minerálov v pôde. Rýchlosť extrakcie Fe závisí

od mnohých faktorov ako je teplota, rýchlosť cirkulácie vody, kyslosť roztokov, oxidačno-redukčný potenciál, biologická aktivita a prítomnosť organického materiálu.

Berthelin et al. (1979) opísali zaujímavú úlohu baktérií v redukcii železa. V tejto reakcii mal by byť zahrnutý enzymatický mechanizmus podobný disimilačnej nitrát redukcii. Fe^{3+} je mobilné len vo veľmi nízkych hodnotách pH ($pH < 3$). Redukcia umožní formovanie Fe^{2+} , ktoré je mobilné v normálnom rozsahu pôdneho pH. Preto mikroorganizmi a rastliny sú schopné redukovať Fe^{3+} a môžu mať výhodu v kompetencii pre prístupnosť železa. V prípade silikátov, zvyšovanie rozpustnosti železa sa uskutočňuje produkciou kyslých a komplexotvorných metabolitov, kde môžu byť deštruované živce, slúdy a smektity.

Nekonvenčný spôsob úpravy rôznych druhov surovín

Biologickým lúhovaním bolo možné odstrániť hlavnú nežiadúcu prímes - železo a to prítomné jednak vo forme oxidov a hydroxidov železa, ale aj viazané v jemnozrnných slúdoch a ílových mineráloch z mnohých druhov nerudných surovín a tým zvýšiť kvalitatívne vlastnosti surovín, ktoré môžu byť po takejto úprave využívané v sklárskom alebo keramickom priemysle.

Experimentálne biolúhovacie experimenty publikované v mnohých prácach sú zamerané na zistenie maximálnej extrakcie Fe z jednotlivých typov surovín a na skrátenie biolúhovacieho procesu určením mineralogického zloženia surovín, selekciou aktívnych bakteriálnych druhov, vytváraním vhodných podmienok biolúhovania a prídavku stimulačných látok pre urýchlenie bakteriálnej disolúcie Fe.

A. Kremenné piesky

Nerudné nerastné suroviny Slovenska sú charakterizované zvýšenými obsahmi železa dané geologickým vývojom. Typickým príkladom sú viate kremenné piesky záhorskej nížiny, predovšetkým ložiská Šaštín-Stráže a Šajdíkové Humence. Začiatkom 60-tich rokov a neskôr v 90-tich rokoch 20.storočia sa vykonali mnohé skúšky (aj prevádzkové) na zníženie obsahu železa pre použitie pieskov v sklárskom priemysle. Uvedený zámer sa dosiahol v 90-tich rokoch 20.storočia (Zuberec a kol., 2003) na laboratórnych vzorkách avšak za cenu použitia náročných technologických postupov (flotácia, lúhovanie v kyseline chlorovodíkovej).

Biologickým lúhovaním suroviny kremenné piesky Šaštín sa odstránili jemné povlaky ílov a Fe minerálov, ktoré vyplňovali nerovnosti povrchu kremenných zŕn, čím sa znížil obsah Fe_2O_3 o 60 % a po chemickom dolúhovaní sa celkovo odstránilo 70,5 % Fe_2O_3 . Následnými opakovanými elektromagnetickými separáciami po biologicko-chemickom lúhovaní sa zvýšilo celkové množstvo odstráneného Fe_2O_3 až na 92% Fe, čím sa získala surovina, ktorá obsahuje 0,02 % Fe_2O_3 a 0,038 % TiO_2 . Výsledok laboratórnej tavby upraveného piesku umožnil odborne posúdiť možnosti využitia upravenej suroviny pri výrobe bezfarebného obalového a tabuľového skla (Štyriaková et al., 2006a). Bakteriálna disolúcia Fe a uvoľňovanie ílov z kremenných pieskov boli zintenzívnené prídavkom AQDS pričom sa skrátil biolúhovací čas zo 4 mesiacov na 2 mesiace, kde sa dosiahol zníženie koncentrácie Fe_2O_3 z 0,32 % na 0,13 % a následnou magnetickou separáciou na 0.02 % Fe_2O_3 (Štyriaková et al., 2007a).

Poloprevádzkovo bol tento proces mikrobiálnej úpravy pieskov pomocou baktérií overený na surovine ložiska Šaštín. Cieľom bolo zistiť vplyv nesterilných a poveternosných podmienok na účinnosť biolúhovacích procesov v odstránení ílových a železitých minerálov. Biologickou úpravou 26 ton kremenných pieskov bolo odstránených 44 kg železitých a ílových minerálov za 83 dní, ktoré tvorili jemné povlaky a vtŕuseniny v kremenných zrnách.

V poloprevádzkových podmienkach bola znížená koncentrácia Fe_2O_3 z 0,258 % na 0,127 % a následnou magnetickou separáciou na 0,076% Fe_2O_3 v kremenných pieskoch (Štyriaková et al., 2010). Bakteriálna disolúcia železa uvoľňuje ílové minerály z povrchových nerovností kremenných zrn, čo urýchľuje čistenie povrchu minerálov kremenných pieskov.

B. Živcové suroviny

Podobný je aj stav v úprave živcových surovín (na Slovensku sa zatiaľ neťažia), keď na dosiahnutie kvalitatívne lepších produktov (pod 0,5 % Fe_2O_3) je potrebné použiť flotáciu. Biolúhovacie procesy boli odskúšané na troch typoch živcových surovín (Štyriaková et al., 2006b):

Pri prvom type granitoidnej horniny (1.typ G, ložisko Liešťany) s obsahom živcov sa dosiahlo biologickým lúhovaním 35%-né zníženie obsahu Fe a 11%-né zníženie obsahu Ti, čo sa prejavilo viditeľnou zmenou belosti suroviny po tavení vzorky. Chemickým dolúhovaním vzorky s 0,1M kyselinou oxálovou sa odstránilo ešte 5 % Fe. Následnou elektromagnetickou separáciou uvoľnených častíc Fe minerálov a hlavne slúd po biologicko-chemickom lúhovaní sa dosiahlo 69%-né až 74%-né zníženie obsahu Fe a 33%-né až 42%-né zníženie Ti v surovine 1.typ G, čím sa získala vysoko kvalitná surovina pre keramický priemysel s obsahom 0,046 % Fe_2O_3 a 0,012 % TiO_2 s bielym výtavkom.

Pri druhom type granitoidnej horniny (2.typ G, ložisko Vydrovo) sa biologicko-chemickým lúhovaním dosiahlo 25%-né zníženie obsahu Fe a 4%-né zníženie Ti, pričom elektromagnetická separácia nebola zrealizovaná, nakoľko vzorka neobsahovala elektromagnetické minerálne častice. Celkove surovina po biologicko-chemickom lúhovaní obsahuje 0,1474 % Fe_2O_3 a 0,0513 % TiO_2 .

Pri treťom type granitoidnej horniny (3.typ G, ložisko Rudník) sa biologické lúhovanie prejavilo 60% znížením obsahu Fe v surovine. Organochemickým lúhovaním suroviny sa ešte odstránili 4 % Fe. Následnou elektromagnetickou separáciou po biologicko-chemickom lúhovaní sa dosiahlo 79%-né zníženie obsahu Fe a 15%-né zníženie obsahu Ti, čím sa opäť získala surovina s obsahom 0,061 % Fe_2O_3 a 0,076 % TiO_2 a taktiež výtavky bielej farby, ktoré svedčia o vysokej kvalite suroviny po využití konvenčných a nekonvenčných spôsobov úpravy.

Biolúhovacie procesy boli doprevádzané formovaním novej jemnozrnej minerálnej fázy wedelitu ($\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) z dôvodu hlavného metabolického produktu kyseliny oxálovej (Štyriaková et al., 2007b).

C. Kaolíny

Ílové suroviny (keramické íly, kaolín) z ložísk Slovenskej republiky sa bežnými technologickými postupmi neupravujú vzhľadom na ekonomickú náročnosť úpravy.

Biologickým lúhovaním je možné znížiť obsah Fe_2O_3 o 17 % v kaolíne ložiska Rudník a pri kombinácii bakteriálneho lúhovania a elektromagnetickej separácii pri 1,3 Tesla je možné znížiť obsah Fe_2O_3 o 36 %, pričom sa vplyvom aktivity baktérií obohatila jemnozrnná frakcia a tým zvýšil index plasticity z 18 % na 20 %.

Štruktúrna usporiadanosť kaolinitu má vplyv na účinnosť odstránenia Fe, ak je kaolinit neusporiadaný so substitúciou Fe, bude mať biologické lúhovanie rýchlejšiu a vyššiu výťažnosť v odstránení železa z kaolínovej suroviny ako pri usporiadanom kaolinite (Mockovčiaková et al., 2009).

V prácach autorov Groudev a Groudeva (1988) sa uvádza, že po relatívne krátkom čase kontaminácie (24 - 42 hod.) niektorých kaolínov druhmi *Bacillus circulans* a *Bacillus*

mucilaginosus bolo zistené zvýšenie pevnosti z 5,9 - 13,1 na 8,4 - 18,5 kg/cm³ a ich plasticity z 30,7 - 34,1 na 33,4 - 38,7 %. Pôsobenie uvedených baktérií na silikáty a alumosilikáty si vysvetľujú autori aj v spojitosti s formovaním slizovitých puzdier obsahujúcich exopolysacharidy ako aj s produkciou rozličných metabolitov, najmä organických kyselín.

Po mikrobiálnej úprave vzoriek keramického kaolínu ložiska Jimlíkov (Česká republika) sa znížil okrem obsahu kaolinitu aj obsah všetkých dioktaedrických slúd a zároveň došlo k zmene zrnitostného zloženia, ktoré sa prejavilo obohatením najjemnejšej zrnitostnej frakcie. Tieto zmeny sa prejavili zlepšením niektorých technologických parametrov (vážnosť, plasticita, nasiakavosť) až na úroveň najkvalitnejšej suroviny, vhodnej pre výrobu porcelánu typu „Extra“ (Borovec, 1990).

Pri dvojetapovom bakteriálnom lúhovaní kaolínov z Českej republiky sa vo vybraných vzorkách preukázal účinok odstránenia železa od 20,6 do 23,8 % vo všetkých vzorkách s flokulantom, alebo bez flokulantu, ktorý nemá inhibičný vplyv a taktiež nebola potrebná dezinfekcia priemyselnej vody. Obsah Fe₂O₃, ktorý bol 0,63 % pred lúhovaním, sa znížil na 0,48-0,50 % Fe₂O₃ po 2 mesiacoch biolúhovania. Ďalšie výsledky optických vlastností s ohľadom na použitie v papierenskom priemysle ako sú 73 % belosť pred biolúhovaním sa zmenila na 78%, reflexný faktor z 81 % sa zvýšil na 84 %, žltosť sa znížila zo 14 % na 8 % a taktiež farebnosť (L, a, b) preukazovala pozitívne zmeny.

Borovec (1990) prezentoval aj stručné údaje o tom, že biologickou úpravou je možné pri nižšej vlhkosti suroviny zvýšiť vážnosť západočeských bentonitov na takú mieru, aby vyhovovala požiadavkám pre zlievarenské bentonity prvej akosti.

Záver

Mnohé silikátové suroviny, ktoré sa tradične priemyselne využívajú, vykazujú nevhodnosť pre prípravu špeciálnych produktov v určitých oblastiach výrobnjej sféry, obsahujú mnohé nežiadúce prímеси, ktoré znižujú ich kvalitatívne vlastnosti. Využitie biotechnológií pri úprave silikátových surovín predstavuje novú alternatívnu cestu efektívneho spracovania nerastných zdrojov.

Jednoduché laboratórne biolúhovacie experimenty pre zníženie Fe z nerudných surovín heterotrófnymi baktériami boli uskutočnené pre naznačenie spôsobu potenciálneho použitia v priemyselných merítkach. Množstvo rozpusteného a odstráneného Fe záviselo od spôsobu biolúhovania, pričom pozitívny priamy kontakt minerálnej fázy, baktérií a nutričných látok v médiu je zabezpečený pri lúhovaní surovín vo vodnom prostredí.

Slovenská republika má vhodné podmienky pre úspešný rozvoj biotechnológií v úprave nerudných surovín. Rozsiahle zásoby nekvalitných nerúd a sedimentov predstavujú z hľadiska biotechnológie rozsiahly surovinový zdroj priemyselných minerálov.

Pod'akovanie:

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu vedy a techniky na základe Zmluvy č. APVV-0472-07 a VEGA č. 2/0109/11 a čiastočne v rámci Operačného programu Výskum a vývoj pre projekt: Centrum excelentnosti pre integrovaný výskum geosféry Zeme (ITMS: 26220120064), ktorý je spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

Literatúra

Berthelin J., Belgly G. (1979): Microbial degradation of phyllosilicates during simulated podzolization. *Geoderma*, 21, 297-310.

- Borovec Z., Doležal J., Fediuk F., Kratochvíl P. (1990): *Úvod do Biotechnologie nerastných hmot*, pp. 67–77. Fakulta Přírodovědecká Universita Karlova, Praha.
- Groudev S.N., Groudeva V.I. (1988): Improvement of the quality of kaolins by means of microbial treatment in *Internationale Seminar zur Erkundungsforschung „Biostrategien für das Bauen“*, Dessau.
- Mesquita, L.M.S, Rodrigues, T., Gomes, S.S., *Bleaching of Brazilian kaolins using organic acids and fermented medium*, Miner. Engin. 9 (1996) 965-971.
- Štyriaková I., Štyriak I., Malachovský P., Hredzák S. (2006a) Glass sand processing by biochemical leaching and magnetic separation. Pp. 933-938 in *Proceedings of XXIII International Mineral Processing Congress* (G. Onal, N. Acarkan, M.S. Celik, F. Arslan, G. Atesok, A. Guney, A.A. Sirkeci, A.E. Yuce, K.T. Perek, editors), Volume 2, Turkey Istanbul.
- Štyriaková I., Štyriak I., Malachovský P., Lovás M. (2006b): Biological, chemical and electromagnetic treatment of three types of feldspar raw materials, *Mineral Engineering*, 19, 348-354.
- Štyriaková I., Štyriak I., Malachovský P., Večera Z., Koloušek D. (2007a): Bacterial clay release and iron dissolution during the quality improvement of quartz sands. *Hydrometallurgy*, 89, 99-103.
- Štyriaková I., Štyriak I., Malachovský P. (2007b): Nutrients enhancing the bacterial iron dissolution in the processing of feldspar raw materials. *Ceramics – Silikáty*, 51, 202-209.
- Mockovčiaková A., Štyriaková I., Škvarla J., Kozáková I. (2008): Characterization of changes low and high defect kaolinite after bioleaching. *Applied Clay Science*, 39, 202-207.
- Štyriaková I., Jablonovská K., Mockovčiaková A., Bekényiová A., Štyriak I., Kraus I., Osacký M., Lovás M. (2010): Dissolution of iron from quartz sands by basin bioleaching under static in-situ condition. *Hydrometallurgy*, 104, 443-447.

VÝSKYT CORRENSITU V ALTEROVANÝCH TOPAZOVÝCH GRANITECH Sn-W RUDNÍHO LOŽISKA KRÁSNO-HORNÍ SLAVKOV

Šťastný M.¹⁾, René M.²⁾

¹⁾ Geologický ústav AV ČR, v.v.i., Rozvojová 269, 165 00 Praha 6

²⁾ Ústav struktury mechaniky hornin AV ČR, v.v.i., V Holešovičkách 41, 182 09 Praha 8

Rudní ložisko Krásno-Horní Slavkov reprezentuje spolu ložisky Cínovec, Altenberg a Ehrenfriedersdorf významnou akumulaci cíno-wolfranových rud vázanou na greisenizované topaz-albitové granity saxothuringika. Akumulace greisenizovaných granitů v oblasti Krásno-Horní Slavkov jsou vázány na granitové elevace, které vystupují na jv. okraji eibenstocko-karlovarského plutonu. Nejvýznamnější elevací v této oblasti je Hubský peň, který poskytl v období od 13. století do roku 1991 největší množství cínových rud. Svrchní část granitů tohoto pně byla postižena různě intenzivní greisenizací a následnou argilitizací. Greisenizace se projevuje přibíváním křemene, topazu a lithných slíd (zinnwalditu a protolithionitu) na úkor draselného živce a albitu původních alkalicko-živcových granitů. Ve vrcholové části Hubského pně byly greiseny a greisenizované granity postiženy výraznou argilitizací. Argilitizaci podlely jednak živce a topaz původních topaz-albitových granitů, jednak novotvořený topaz a lithné slídy.

Ve vzorcích intenzivně argilitizovaných granitů byly identifikovány tyto jílové minerály: smektit, illit, kaolinit, dickit, chlorit a **corrensit**. Corrensit byl v argilitizovaných granitech Hubského pně identifikován poprvé. Minerál corrensit je 1:1 trioktaedrická varieta pravidelně smíšené struktury (R=1) chloritu a smektitu, popř. vermikulitu. Poprvé ji popsal Lippmann (1954) v illitických jílech v oblasti Neuperu poblíž Stuttgartu (jižní Německo). V roce 1982 byl corrensit uznán nomenklatorickou komisí jako samostatný druh (Bailey, 1982). Corrensit představuje dominantní typ smíšené struktury chloritu vyskytující se v přírodním systému (Reynolds, 1988). Přírodní forma na vzduchu sušeného vzorku s uspořádáním R=1 má typické rentgenové spektrum, kde $d(001)^*$ superstruktury činí $14,2 + 15 = 29,2$ Å. Pro vzorek sycený ethylenglykolem je pak $d(001)^*$: $14,2 + 16,9 = 31,1$ Å. Nejvýznamnějším diagnostickým kritériem pro ethylenglykolem sycený corrensit je výskyt $(004)^*$ difrakce při 7,8 Å. Dalším potvrzujícím kritériem je zborcení smektitové komponenty na ~9,8 Å po zahřátí vzorku, což vede ke vzniku nové superstruktury s $d(001)^*$: $9,8 + 14,2 = 24$ Å.

Corrensit vzniká obvykle v průběhu hydrotermálních přeměn bazických a intermediárních vulkanitů, když dochází k postupné přeměně plagioklasu na illit, popř. chlorit (Kübler 1973). Corrensit je jednou z přechodných fází této přeměny vznikající při teplotě v rozmezí 100 až 200° C. Tato přeměna je provázána postupnou chloritizací biotitu, rozpouštěním a vysrážením některých Fe-fylosilikátů (např. corrensit, Fe-smektit, Fe-chlorit).

Poděkování

Práce vznikla za podpory projektu GAČR (205/09/0540).

MODIFIKACE HYDROGELU POMOCÍ KOLAGENU A NANOSTRUKTUROVANÉHO JÍLU

Šustek S.¹⁾, Svoboda L.¹⁾, Zelenka J.²⁾, Zetková K.²⁾, Kára J.¹⁾

¹⁾ Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko - technologická, Univerzita Pardubice, Technologický pavilon, Doubravice 41, 532 10 Pardubice, ČR

²⁾ Synpo akciová společnost, S.K. Neumanna 1316, 532 07 Pardubice, ČR

Při použití pro agrochemické aplikace plní hydrogely úlohu regulátoru půdní vláhly a vzhledem ke schopnosti absorbovat i vodné roztoky hnojiv mohou také pozitivně ovlivňovat hladinu živin v půdním roztoku a zabránovat jejich ztrátám průsakem do spodních vod. Nejvíce rozšířené jsou hydrogely na bázi syntetických polymerů, zejména akrylátů. V poslední době jsou snahy o získání materiálů, které jsou více přátelské k životnímu prostředí a mají nižší výrobní náklady. V současnosti existují tři přístupy k dané problematice. V prvním případě se jedná o syntézu hydrogelů na zcela přírodní bázi, druhou možností jsou takzvané hybridní hydrogely, jejichž struktura je tvořena jak syntetickou, tak přírodní složkou. Třetí alternativou je obalení hydrogelu pomocí přírodních látek s absorpčními vlastnostmi.

Prezentovaná práce je zaměřena na modifikaci komerčně dostupného polyakrylátového hydrogelu Agrisorb (Stockhausen GmbH & Co.KG, Německo) pomocí směsi kolagenu a nanostrukturovaného jílu s cílem dosáhnout srovnatelné nebo vyšší kapacity bobtnání. V případě kolagenu je snahou využít jeho absorpční schopnosti a nahradit jím část polyakrylátového hydrogelu. Ve snaze o dosažení synergického účinku a zlepšení pevnosti a tuhosti kolagenového obalu bylo využito jílu jako levného anorganického materiálu s vhodnými vlastnostmi. Jíl zde byl použit ve třech formách, a to jako prášek, vodná suspenze a v pastovité konzistenci. Po homogenizaci jeho směsi s kolagenem byl k vzniklé vodné suspenzi přidán hydrogel a ponechal se v ní za stálého míchání bobtnat. Poté byla pevná fáze odfiltrována, vysušena a podrobena testování. U připravených vzorků byla zkoumána jejich schopnost absorbovat nasycený vodný roztok síranu amonného jako představitele solí používaných pro výživu rostlin. a výsledky byly porovnány s hodnotami, kterých dosahoval původní nemodifikovaný hydrogel. Nejvyšší bobtnavost v případě modifikovaného gelu činila 24,7g roztoku $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4/\text{g}$ původního gelu, což je vyšší hodnota nežli v případě neobaleného gelu (17,57g/g). Dále byla sledována schopnost uvolňování vody v závislosti na čase při nabobtnání v uvedeném roztoku a rychlost uvolňování $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ z modifikovaného gelu.

Cílem této práce bylo ověřit možnosti využití modifikovaného hydrogelu pro agrochemické aplikace. Úprava komerčně dostupného hydrogelu byla provedena pomocí směsi obsahující kolagen a nanostrukturovaný jíl. Dosažené výsledky naznačují, že uvedeným způsobem modifikované gely mohou dosahovat srovnatelných, případně lepších hodnot bobtnavosti a pozvolnějšího uvolňování živin nežli čistý polymerní hydrogel.

Poděkování

Práce vznikla za finanční podpory IGA Univerzity Pardubice v rámci projektu SG FCHT04.

SORPCE FENOLU A ANILINU NA POVRCHU MMT

Veteška M., Pospíšil M., Praus P.

Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy, Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2

Montmorillonity mohou najít své uplatnění také jako adsorbanty pro čištění odpadních vod. Experimentálně byla měřena adsorpce anilinu a fenolu na čistý montmorillonit typu Wyoming (MMT) a MMT interkalovaný tetrametylamoniiovými kationty (TMA-MMT). Adsorpční isotermy ukazují, že anilin se silně adsorbuje na MMT a mnohem méně na TMA-MMT. Naopak fenol se na MMT i TMA-MMT adsorbuje v podobné míře, mírně více na TMA-MMT než na MMT. Pro lepší pochopení tohoto chování se užilo technik molekulárního modelování. Modely povrchu MMT byly popsány molekulární mechanikou založenou na empirických silových polích.

Výsledky modelování ukazují zejména zajímavé uspořádání vody: voda vytváří tenkou zhuštěnou vrstvu přímo nad povrchem MMT. Tato vrstva pravděpodobně hraje klíčovou roli v případě adsorpce anilinu, protože voda je považována za zprostředkovatele vazeb mezi anilinem a MMT. Menší množství molekul vody nad povrchem MMT v případě, kdy je nad povrchem zároveň přítomen TMA, způsobuje pokles adsorpce anilinu. V případě fenolu voda nemá tuto zprostředkující roli; zhuštěná vrstva vody nad povrchem čistého MMT má spíš tendenci fenol odpuzovat.

INTERCALATION OF TIMOPRAZOLE INTO HYDROTALCITE-LIKE HOST

Zapivovarski Votipka Z., Kovanda F.

Department of Solid State Chemistry, Institute of Chemical Technology, Prague, Technická 5, 166 28 Prague 6, Czech Republic, (Zorica.Zapivovarski.Votipka@vscht.cz)

Hydrotalcite-like compounds, known also as layered double hydroxides (LDHs) or anionic clays, represent a class of synthetic layered materials with chemical composition expressed by the general formula $[M^{II}_{1-x}M^{III}_x(OH)_2]^{x+}[A^{n-}_{x/n}\cdot yH_2O]^{x-}$ where M^{II} and M^{III} are divalent and trivalent metal cations, A^{n-} is an n-valent anion and x ranges usually between 0.20 and 0.33. A weak bonding between the interlayer anions and hydroxide sheets is characteristic for these materials. Therefore, they are often used as host structures for intercalation of various anionic species. Hydrotalcite-like hosts are nontoxic and biocompatible. From that reason, the hydrotalcite-like compounds intercalated with pharmaceuticals or bioactive molecules can be very promising in various medical applications. (Del Hoyo, 2007).

Timoprazole (2-[(2-Pyridylmethyl)sulfinyl]-1H-benzimidazole), belongs to the group of pharmaceuticals called proton pump inhibitors. It is used to treat symptoms of gastroesophageal reflux disease and other problems caused by excess of the stomach acid. Timoprazole is poorly soluble in water and after dissolution it does not form anions.

The Mg-Al-NO₃ hydrotalcite-like host with Mg/Al molar ratio of 2 was prepared by coprecipitation of Mg and Al nitrates by NaOH solution under nitrogen. The anion exchange in aqueous timoprazole solution was used for intercalation; pH value of the solution was increased to pH = 9 by adding the NaOH solution. Alternatively, the rehydration/reconstruction procedure was used. The Mg-Al mixed oxide obtained by heating the Mg-Al-NO₃ hydrotalcite-like precursor at 500 °C was rehydrated in aqueous timoprazole solution; the rehydration in water/ethanol solution was tested as well. The products were characterized by powder X-ray diffraction and infrared spectroscopy. Partial immobilization of timoprazole in the hydrotalcite-like host was confirmed.

Acknowledgements: "

This work was supported by the Specific University Research (MSMT No. 21/2011) and by the Czech Science Foundation (P207/10/1447).

References:

Del Hoyo C. (2007): Layered double hydroxides and human health: An overview. *Appl. Clay Sci.* **36**, 103-121.

Kniha abstraktů, 19. jílová konference v České republice, Skalský dvůr u Bystřice nad Pernštejnem, srpen 2011,
ed. M. Šťastný, Praha, Česká republika

Vydává:

Česká společnost pro výzkum a využití jílu

Registrační číslo: MK ČR E 17129

Editor:

RNDr. Martin Šťastný, CSc.

Geologický ústav AV ČR, v.v.i.

Rozvojová 269

165 00 Praha 6

tel.: 233 087 233

e-mail: stastny@gli.cas.cz

Členové redakční rady:

Prof. RNDr. Jiří Konta, DrSc.

RNDr. Karel Melka, CSc.

RNDr. Miroslav Pospíšil, Ph.D.

Mgr. Jana Schweigstilllová, Ph.D.

Technický redaktor:

Jana Šreinová

Vychází 23.8. 2011

Tištěná verze: ISSN 1802-2480

Internetová .pdf verze: ISSN: 1802-2499