



INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

FORUM VETERINARIUM

"Inovativní systém přípravy pracovníků ve výzkumu a vývoji"

pod záštitou prorektorky VFU Brno doc. MVDr. Miloslavy Lopatářové, CSc.

Abstrakta

25. listopadu 2011, VFU Brno

OBSAH

- 3 **Význam a stanovení vybraných flavonoidů v barevných pšenících a čaji**
P. Bartl
- 4 **Pšenice špalda. Kvalita výrobků z konvenční a bioprodukce**
V. Šottníková
- 5 **Studium vzájemného působení kadmiových a zinečnatých iontů u rostlin kukuřice**
A. Kleckarová
- 6 **Toxikologické hodnocení hřebíčkového oleje a 2-phenoxyethanolu pomocí metody FETAX**
D. Vršková
- 7 **Sledování vybraných mikrobiologických ukazatelů u Olomouckých tvarůžků skladovaných v různých teplotních režimech**
O. Cwiková
- 8 **Sledování obsahu kumarinu ve skořici**
J. Blahová
- 9 **Aplikace obrazové analýzy v hodnocení vybraných parametrů potravin**
P. Čáslavková
- 10 **Vplyv sádkovania kapra obecného na obsah di-n-butyl ftalátu a di-2-etylhexyl ftalátu z hospodářského chovu Južnej Moravy**
A. Jarošová
- 11 **Hodnocení vývoje obsahu rtuti v období 1974-2011 v nádrži Želivka**
K. Kružíková
- 12 **Obsah kovů ve tkáních ryb z nádrží Skalka a Želivka**
M. Ševčíková
- 13 **Možnosti využití biotestů na *Artemia franciscana* v radiobiologii**
P. Dvořák
- 14 **Současné možnosti analýzy ukazatelů oxidativního stresu a antioxidační kapacity**
M. Hostovský

- 15 Chemoenzymatická příprava enantiomerně obohacených forem
adrenomimetik a měření jejich optické čistoty**
J. Otevřel
- 16 Využití vícerozměrné analýzy dat ve výzkumu**
P. Doležel

Projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Význam a stanovení vybraných flavonoidů v barevných pšenících a čaji

Mgr. Pavel Bartl, Ing. Martina Ošťádalová, Mgr. Jana Pokorná, Ing. Alexandra Tauferová,
doc. MVDr. Bohuslava Tremlová, Ph.D.

Ústav vegetabilních potravin a rostlinné produkce, FVHE, VFU Brno

Flavonoidy jsou velkou skupinou fenolických látek, nacházejících se zejména v rostlinných produktech. K významným flavonoidním barvivům patří antokyany a dále také čajová barviva (thearubiginy a theaflaviny). Jedná se o látky, které jsou produkovány jako sekundární metabolity rostlin a působí jako významné antioxidanty. Flavonoidy hrají důležitou roli v prevenci mnoha závažných onemocnění, jako jsou kardiovaskulární a karcinogenní onemocnění.

V barevných pšenících jsou z flavonoidních barviv významně zastoupeny antokyany. Jedná se o početně velmi rozšířenou skupinu přírodních pigmentů, které propůjčují červené a modré odstíny barev květům, plodům a listům rostlin. Jejich výskyt byl prokázán i v barevných pšenících. Tyto varianty obilovin jsou nyní předmětem výzkumu možného využití v potravinářském průmyslu.

Čaj, zejména čaj fermentovaný, obsahuje velkou škálu barviv, které významně ovlivňují barevnost a tedy senzorickou hodnotu čajového nálevu. K významným a poslední dobou diskutovaným patří flavonoidní barviva - theaflaviny a thearubiginy. Diskuze o těchto barvivech jsou často spjaty nejen pro jejich prospěšné účinky na zdraví konzumenta, ale zejména pro jejich velký význam při hodnocení senzorické kvality a stáří vyrobeného čaje.

Pšenice špalda. Kvalita výrobků z konvenční a bioprodukce

Ing. Viera Šottníková, Ph.D.

Ústav technologie potravin, Mendelova univerzita v Brně, sotnik@mendelu.cz

Cílem bylo zjistit, zda je rozdíl mezi pekařskými vlastnostmi pšenice špaldy pěstované konvenčně a v bio produkci. Byla zjištěna pekařská jakost vzorků špaldové mouky (obsah popela číslo poklesu, Zelenyho test, obsah N-látek, obsah lepku a vaznost vody moukou) a následně proveden pekařský pokus. Vzorky pečiva byly senzoricky hodnoceny bodovou stupnicí. V hodnocených znacích pekařské jakosti nebyl zjištěn průkazný rozdíl mezi ekologicky a konvenčně vypěstovanou špaldou, ani mezi jednotlivými ročníky. Bylo zjištěno, že špalda vypěstovaná konvenčně a ekologicky nevykazuje výrazně velké rozdíly ani v senzorické kvalitě.

Klíčová slova: obiloviny, pšenice špalda, ekologické zemědělství, pekařský pokus

Studium vzájemného působení kadmnatých a zinečnatých iontů u rostlin kukuřice

Andrea Kleckerová, Pavlína Šobrová, Olga Kryštofová, Jiří Sochor, Ondřej Zítka, Petr Babula, Vojtěch Adam, Hana Dočekalová, René Kizek

Ústav chemie a biochemie, Agronomická fakulta, Mendelova univerzita v Brně

Těžké kovy jsou klasifikovány jako významné polutanty, jejichž obsah je v životním prostředí monitorován. Kadmium je důležitým znečišťujícím prvkem v životním prostředí, vyskytuje se jako součást zinkových rud. Vzhledem k mnoha průmyslovým aplikacím, zejména v elektrotechnologiích, představuje kadmium jeden z nejvíce rizikových prvků. Oproti kadmiu je zinek pro organismy základním biogenním prvkem. Kadmium má podobné chemické vlastnosti jako zinek. Bylo také prokázáno, že kadmnaté ionty mohou být v rostlinách transportovány stejnými mechanismy, které se podílejí na absorpci zinku. V enzymech tak může dojít k výměně zinečnatých iontů za ionty kadmia, což vede ke ztrátě jejich funkce. Vzhledem k této skutečnosti jsme se zaměřili na společný vliv iontů kadmia (II) a zinku (II) na rostliny kukuřice (*Zea mays L.*) CE 220. V průběhu kultivace byly sledovány nejen růstové parametry (délka nadzemní a kořenové části, jejich svěží hmotnost a sušina), ale i řada stresových markerů (oxidovaný/redukovaný glutathion, fytochelatiny, celkové thioly, antioxidační aktivita pomocí metod FRAP, ABTS, DPPH a aktivita enzymů GST, ALT, AST a ALP). Kromě toho byl také elektrochemicky stanoven celkový obsah zinku a kadmia jak v nadzemních částech rostlin, tak v kořenech, a to u všech použitých kombinací koncentrací. Nejvyšší koncentrace kadmia a zinku $100\ \mu\text{M Zn}^{2+} + 100\ \mu\text{M Cd}^{2+}$ vedly ke zvýšení antioxidační aktivity i aktivity enzymů. Nejvyšší obsah thiolových sloučenin (GSH, GSSG, PC2 a PC5) byl stanoven u vzorků rostlin vystavených kombinaci koncentrací $100\ \mu\text{M Zn}^{2+} + 100\ \mu\text{M Cd}^{2+}$.

Tato práce vznikla za podpory projektu MOBIMAERO IGA TP7/2011.

Toxikologické hodnocení hřebíčkového oleje a 2-phenoxyethanolu pomocí metody FETAX

Vršková D.¹, Modrá H.²

¹) Ústav farmakologie a farmacie, FVL, VFU Brno

²) Ústav veřejného veterinárního lékařství a toxikologie, FVHE, VFU Brno

Hřebíčkový olej a 2-phenoxyethanol patří mezi celková koupelová anestetika běžně používaná v České republice pro snížení manipulačního stresu při umělém výtěru generačních ryb. Model FETAX (Frog Embryo Teratogenesis Assay – *Xenopus*) je biologický test s časnými vývojovými stádii žáby drápatky vodní (*Xenopus laevis*), který slouží k odhadu embryotoxicity a teratogenity xenobiotik. Použití celkových koupelových anestetik u ryb se provádí během jarních měsíců, kdy při znehodnocování použitých anestetických lázní mohou být zasažena také embrya a larvy volně žijících obojživelníků. Výsledky naší studie prokázaly, že hřebíčkový olej i 2-phenoxyethanol v koncentracích používaných pro anestetické koupele ryb mohou způsobovat inhibici růstu, zvýšenou mortalitu a nárůst výskytu malformací u embryí a larev obojživelníků.

Sledování vybraných mikrobiologických ukazatelů u Olomouckých tvarůžků skladovaných v různých teplotních režimech

MVDr. Olga Cwiková, Ph.D.

Ústav technologie potravin, Mendelova univerzita v Brně

Teplota skladování potravin je jedním z nejdůležitějších faktorů, kterým můžeme ovlivnit růst a množení mikroorganismů. Cílem práce bylo zjistit, jak bude různými způsoby skladování ovlivněn počet mikroorganismů, které se účastní zrání, obsah NaCl a sušiny Tvarůžky (v plné zralosti) byly skladovány v chladničce, mrazničce a suchém ledu, a to po dobu 48 hod. Nejvyšší ($P < 0,05$) počet BMK byl zjištěn při skladování v mrazničce (průměrně $1,8 \cdot 10^9$ KTJ.g⁻¹), při skladování v suchém ledu byl průměrný počet BMK $7,3 \cdot 10^8$ KTJ.g⁻¹ a při skladování v chladničce $1,8 \cdot 10^8$ KTJ.g⁻¹. V počtech *Brevibacterium linens* při různých typech skladování statisticky průkazný rozdíl zaznamenán nebyl ($P > 0,05$). Při skladování v chladničce byl počet *Brevibacterium linens* $4,9 \cdot 10^8$ KTJ.g⁻¹, při skladování v suchém ledu $1,5 \cdot 10^9$ KTJ.g⁻¹ a při skladování v mrazničce $1,6 \cdot 10^9$ KTJ.g⁻¹ (průměry z 18 měření).

Průměrný obsah sušiny byl při skladování v chladničce: 36,83 %, při skladování v suchém ledu 37,28 % a při skladování v mrazničce 36,82 %. Vyšší obsah ($P < 0,05$) NaCl byl zaznamenán při skladování v chladničce než při skladování vzorků v mrazničce. Průměrný obsah NaCl byl při skladování v chladničce: 5,20 g ve 100 g, při skladování v suchém ledu: 5,18 g ve 100 g a při skladování v mrazničce: 4,94 g ve 100 g.

Sledování obsahu kumarinu ve skořici

Ing. Jana Blahová, Ph.D., Mgr. Michaela Šířoká, Ph.D., prof. MVDr. Zdeňka Svobodová, Dr.Sc.

Ústav veřejného veterinárního lékařství a toxikologie, FVHE VFU Brno

Skořice patří mezi poměrně oblíbené a vyhledávané koření v různých odvětvích potravinářského průmyslu. V obchodní síti a následně i v potravinách se nejčastěji setkáváme především se skořicí čínskou (*Cinnamomum cassia*) a v menším množství také se skořicí cejlonskou (*Cinnamomum zeylanicum*). Skořice čínská pochází ze skořicovníku čínského, který se nejvíce pěstuje v jihovýchodní Asii. Tento druh skořice má velmi výrazné aroma, červenější zbarvení a díky nízké ceně se hojně využívá v potravinářském průmyslu. Skořice cejlonská, která pochází ze skořicovníku cejlonského pěstovaného především na Srí Lance, je považována za kvalitnější a tím i cennější koření. Skořice má i rozšířené využití ve farmaceutickém průmyslu. Jako součást parfému, mýdel a další kosmetiky se využívá skořicová silice a pro své léčivé účinky se mletá skořice používá do nálevů a tinktur. Ve skořici se ovšem přirozeně vyskytuje kumarin, který při zvýšené koncentraci a dlouhodobé expozici může vykazovat negativní účinky na lidský organismus. Ve vyšší koncentraci, průměrně okolo 4000 mg/kg se vyskytuje především ve skořici čínské. Cejlonská skořice obsahuje minimální podíl kumarinu většinou pod mezí detekce.

Cílem práce bylo stanovení obsahu kumarinu ve vzorcích mleté skořice (*Cinnamomum cassia*, *Cinnamomum zeylanicum*). Analýza vzorků mleté skořice byla prováděna s využitím vysokoúčinné kapalinové chromatografie s UV detekcí. Celkem bylo analyzováno 13 různých druhů vzorků mleté skořice, které byly většinou zakoupeny v obchodní síti v České republice (supermarkety, kořenářství), jeden vzorek byl dovezen přímo ze Srí Lanky. U vzorků zakoupených v obchodní síti nebyl uváděn botanický původ skořicovníku, pouze v některých případech byla uvedena země původu. Ze získaných výsledků je zřejmé, že všechny vzorky zakoupené v obchodní síti byly získány ze skořicovníku čínského, protože byl u nich potvrzen pozitivní nálezn kumarinu. Obsah kumarinu v těchto vzorcích se pohyboval v rozmezí 2649–7017 mg kumarinu/kg skořice. Pouze u vzorku dovezeného ze Srí Lanky nebyl detekován kumarin, proto lze tvrdit, že byl vyroben ze skořicovníku cejlonského.

Práce byla financována v rámci projektu MŠMT 6215712402.

Analýza obrazu

Mgr. Petra Čáslavková

Ústav vegetabilních potravin a rostlinné produkce FVHE VFU Brno

Zvýšená poptávka po objektivitě, konsistenci a efektivitě v hodnocení kvality potravin si vyžádala uvedení technologií počítačového zpracování obrazu i do této oblasti. Systémy zpracovávající obrazy získávají stále důležitější roli v hodnocení kvality potravin tím, že jsou přesné a konzistentní, na rozdíl od subjektivní manuální kontroly. Metody analýzy obrazu jsou flexibilní a mohou být rozumnou náhradou za proces rozhodování na základě lidského zraku.

Obrazová analýza umožňuje převést komplexní obrazovou informaci na soubor předem definovaných kvalitativních a kvantitativních údajů o obrazu, či o zaznamenaných objektech (spektrální vlastnosti, počet a geometrie objektů).

Základním krokem obrazové analýzy jsou různé úpravy, které vedou ke značné redukci obrazové informace. Následně je uživatel již schopen vyčlenit z obrazu a analyzovat (měřit, počítat, srovnávat) jen ty údaje, které jsou pro něj právě důležité.

Na našem pracovišti Vegetabilních potravin a rostlinné produkce používáme tuto metodu pro stanovení tukových kuliček v sýrech, škrobu, kostních úlomků, rostlinných alergenů a kolagenního vaziva v mikrosnímčích. V současné době se věnujeme analýze makrosnímků a vyvíjíme metody pro hodnocení textury mozaiky masných výrobků. V mozaice se soustředujeme na tukovou část, kterou měříme na základě barvy, jasu a saturace.

**Vplyv sádkovania kapra obecného (*Cyprinus carpio*) na obsah di-n-butyl
ftalátu a di-2-etylhexyl ftalátu z hospodárskeho chovu Južnej Moravy**
THE IMPACT OF WINTER STORAGE OF LIVING CARPS ON CONTENT OF DI-N-
BUTYL PHTHALATE AND DI-2-ETHYHEXYL PHTHALATE FROM FARMED SOUTH
MORAVIA

A. Jarošová, L. Puškarová, J. Mareš
Mendelova univerzita v Brně

Naším cieľom bolo zistiť obsah DBP a DEHP v tkanivách kaprov. Vybrané boli kapre z chovov Južnej Moravy. Vzorky boli odobrané pri jesenném výlove a po sákaní. Analyzované boli vzorky svaloviny, hepatopankreasu a tuku. Vzorky boli zlyofilizované a extrahované zmesou rozpúšťadiel (aceton:hexan, 1:1), od koextraktov boli separované gélovou permeačnou chromatografiou (GPC) s kolonou Bio Beads S-X3 PAE. PAE boli stanovené metódou HPLC s UV detekciou kolónou Zorbax Eclipse C8. Priemerné hodnoty DBP v svalovine rýb určených pre spotrebiteľa (po sákaní) boli 0,161–0,175 mg.kg⁻¹ pôv. hm., DEHP 0,143–0,161 mg.kg⁻¹ pôv. hm., v hepatopanrease boli hodnoty DBP 0,041–0,115 mg.kg⁻¹ pôv. hm. a DEHP 0,06 to 0,124 mg.kg⁻¹ pôv. hm., vo vzorkách tuku boli hodnoty DBP 2,831–6,745 mg.kg⁻¹ pôv. hm. a DEHP 2,897–5,930 mg.kg⁻¹ pôv. hm. Vo vzorkách hepatopankreasu a tuku došlo počas doby sádkovania k predpokadanému zníženiu obsahu ftalátou. Vo vzorkách svaloviny k nepatrnému zvýšeniu, čo mohlo byť dôsledkom metabolizmu ryby v dobe neprijímania potravy.

Hodnocení vývoje obsahu rtuti v období 1974-2011 v nádrži Želivka

Kamila Kružíková, Zdeňka Svobodová

*Ústav veřejného veterinárního lékařství a toxikologie, Fakulta veterinární hygieny a ekologie,
Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, novotnak@vfu.cz*

Nádrž Želivka je typická, uměle vytvořená nádrž, u které bylo po zatopení zjištěno, že ryby z této nádrže obsahují neobvykle vysoké hodnoty rtuti a to i přesto, že zde nebyl žádný známý zdroj rtuti. To byl důvod pro dlouhodobý monitoring obsahu rtuti u různých druhů ryb, který začal roku 1974. Bylo zjištěno, že po vybudování nádrže a zatopení vodou byly v nádrži velmi vhodné podmínky (anoxické prostředí a vysoké množství organické hmoty z lesního porostu) pro mikrobiální přeměnu anorganické rtuti na organickou formu, která se lehce akumuluje v potravním řetězci. Z výsledků je patrný vysoký obsah rtuti, který postupně klesá až na hodnoty, které nalézáme u nekontaminovaných řek a rybníků. V posledních letech se obsah rtuti stabilizoval a nepřekračoval hygienické limity dané Evropskou Unií.

Obsah kovů ve tkáních ryb z nádrží Skalka a Želivka

Ševčíková M., Kružíková K., Modrá H., Svobodová Z.

Ústav veřejného veterinárního lékařství a toxikologie FVHE VFU Brno

Kovy jsou významnými kontaminanty vodního prostředí. Vlastností, která umožňuje kovům zapojit se do potravního řetězce, je jejich schopnost akumulace a nízká biodegradabilita. Protože ryby tvoří významný podíl v přísunu některých toxických kovů do potravy člověka, jsou pro obsah olova, kadmia a rtuti stanoveny Nařízením ES č. 1881/2006 maximální limity, které nesmí být ve svalovině ryb překročeny.

Cílem této studie bylo stanovit obsah kovů, zejména rtuti, v játrech a svalovině ryb z nádrží Skalka a Želivka. Z nádrže Skalka bylo odloveno 11 druhů ryb, celkem 53 kusů, a z nádrže Želivka 8 druhů ryb, celkem 50 kusů. Nádrž Skalka byla vybrána z důvodu dlouhodobé kontaminace rtutí. Nádrž Želivka je také dlouhodobě sledována z hlediska obsahu rtuti a slouží v projektu jako kontrolní lokalita. V játrech a svalovině ryb byl stanoven obsah kadmia, mědi, niklu, olova, zinku, arsenu, celkové rtuti a methylrtuti. Maximální limity pro obsah olova, kadmia a rtuti nebyly překročeny v žádném vzorku svaloviny ryb z nádrže Želivka. Ve většině vzorků svaloviny ryb z nádrže Skalka byl překročen maximální limit pro obsah celkové rtuti. Porovnáním obou nádrží byl zjištěn signifikantní rozdíl v obsahu celkové rtuti jak ve svalovině, tak i v játrech ryb. Methylrtuť představovala většinový podíl celkové rtuti ve svalovině ryb z obou nádrží.

Výsledky ukazují, že přetrvává vysoká kontaminace rtutí nádrže Skalka a s tím spojené zdravotní riziko pro člověka z konzumace ryb z této lokality, zejména pro vysoký podíl nejtoxickejší formy rtuti, methylrtuti.

Možnosti využití biotestu na *Artemia franciscana* v radiobiologii

Prof. MVDr. Petr Dvořák, CSc., Mgr. Michal Žďárský

*Pracoviště radioizotopů Ústav biochemie, chemie a biofyziky, FVHE VFU Brno,
dvorakp@vfu.cz*

Směrnice Rady Evropy požadují snížení počtu laboratorních obratlovců v biologických pokusech. Jednou z možností je použití biotestů II. generace, mezi které patří i testy na korýších rodu *Artemia*. V projektu Biostack byl na palubě Apolla 16 zkoumán vliv kosmického záření na klidová stádia, u nichž vlivem kosmického záření byla snížena líhnivost z 90 % na pouhých 10 %. U naupliových larev pak byla pozorována zvýšená mortalita a různé somatické odchylky jako krácení končetin a abnormální utváření torakální a abdominální části.

Dosud publikované testy hodnotily zejména letalitu v závislosti na dávce, expozici a době přežívání. Tato práce dokladuje možnost kvantifikovat výrazné morfologické změny, které spočívají v retardaci vývoje naupliových stádií v závislosti na dávce záření gama ^{60}Co .

Naupliová stádia planktonního organismu *Artemia franciscana* byla za 40 hodin od hydratace klidových stádií ozářena dávkami 0,25; 0,5; 1,0 a 2,5 kGy. Za 48 h po ozáření byly stanoveny rozměry délky těla, šířky těla, šířky střeva, šířky střevního epitelu a šířky lumen střeva. Morfologické změny, změny rozměrů a změny vzájemných poměrů těla pozorujeme již u jedinců, kteří obdrželi dávku 0,25 kGy. Pro sledování závislosti morfologických změn na dávce záření má největší význam vzájemný poměr mezi délkou a šířkou těla (ANOVA $\alpha = 0.01$) a poměr šířky střevního epitelu vůči šířce lumen střeva. Tyto výsledky korespondují s projevy gastrointestinálního syndromu nemoci z ozáření u savců. Buňky střevního epitelu obratlovců patří vzhledem k vysoké mitotické aktivitě mezi buňky s velmi vysokou radiosenzitivitou. Z tohoto pohledu by mohl biotest částečně nahradit konvenční testy na obratlovcích.

Problematika byla řešena za podpory Interní Grantové Agentury VFU Brno IG 2021/2.

Současné možnosti analýzy ukazatelů oxidativního stresu a antioxidační kapacity

Hostovský M., Kopřiva V., Nekvapil T.

Ústav biochemie, chemie a biofyziky FVHE, VFU Brno

Biochemická problematika oxidativního stresu je významným a stále aktuálním tématem současné klinické biochemie, ale rovněž biochemie potravin z hlediska ochrany veřejného zdraví.

Oxidativní stres je výsledkem nerovnováhy produkce a eliminace volných radikálů ve prospěch jejich produkce. Volné radikály (ROS – reaktivní formy kyslíku a RNS – reaktivní formy dusíku) jsou do jisté míry v organismu užitečné, ale rovněž mají význam v řadě degenerativních procesů. Možnostmi, jak sledovat a hodnotit oxidativní stres, jsou stanovení biomarkerů působení volných radikálů a celkové antioxidační kapacity sledovaného systému.

Mezi přímé biomarkery oxidativního stresu patří produkty peroxidace lipidů, např. – malondialdehyd (MDA), který je sekundárním lipidickým oxidačním produktem vznikajícím reakcí ROS s nenasycenými mastnými kyselinami. Metoda stanovení MDA - lipidní peroxidace využívá TBARS test (Thiobarbituric Acid Reactive Substances = látky reaktivní s kyselinou thiobarbiturovou – TBA). Metoda je založená na stanovení barevných adduktů, vznikající reakcí produktů lipidní peroxidace s kyselinou thiobarbiturovou, které jsou měřeny spektrofotometricky při 532 nm.

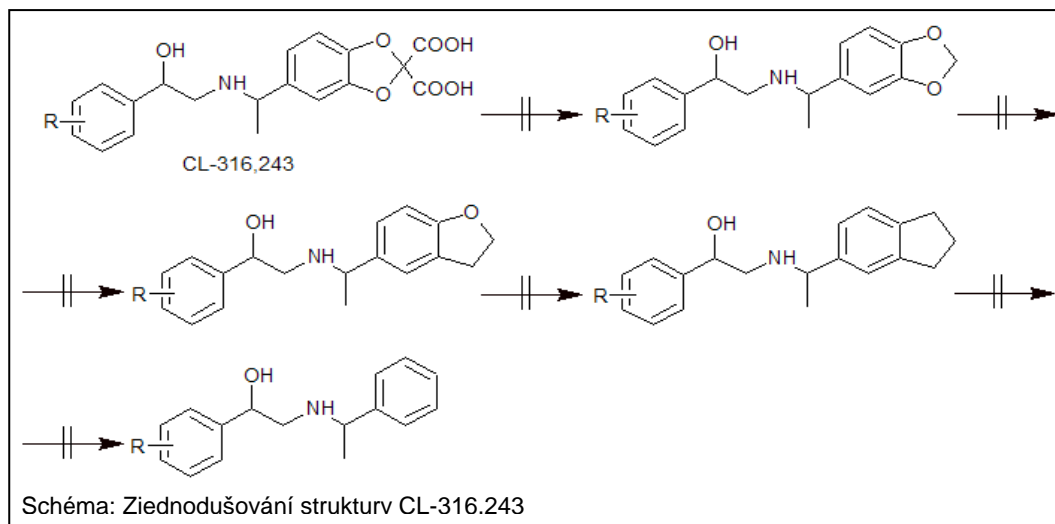
Celková antioxidační kapacita (TAC) je integrální charakteristikou oxidačně - redukční aktivity a potenciálu potravin, při definovaných fyzikálně- chemických podmínkách, které jsou blízké fyziologickým. Ke stanovení antioxidační kapacity (AOK) biologického materiálu využíváme instrumentální metodu chemiluminiscence pomocí analyzátoru Photochem, kde lze vyjádřit výstup analýzy jako ekvivalent Troloxu (sety ACL pro antioxidanty rozpustné v tucích) a kyseliny askorbové (sety ACW pro antioxidanty rozpustné ve vodě). Praktickým výstupem je vyhodnocení v softwarovém systému PCLsoft v aktuální verzi

Stanovení jednotlivých biomarkerů oxidativního stresu a antioxidační kapacity v organismu nebo potravinách poskytuje informace, jak volné radikály působí z hlediska antioxidačních a pro-oxidačních mechanismů. Tyto mechanismy je nutné využitím vhodných metod charakterizovat.

Chemoenzymatická příprava enantiomerně obohacených forem adrenomimetik a měření jejich optické čistoty

Otevřel Jan, Golianová Jana, Bobál Pavel, Csöllei Josef

Ústav chemických léčiv, Farmaceutická fakulta, Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, Palackého 1/3, 612 42 Brno, vfu@vfu.cz.



V rámci studia látek ovlivňujících adrenoreceptory byla připravena série sloučenin potenciálně vykazujících β_3 -adrenergní aktivitu, která je odvozena od známého, účinného a selektivního β_3 -agonisty CL-316,243.¹

Vysoce hydrofilní 1,3-benzodioxol-2,2-dikarboxylová oblast na pravé straně molekuly CL-316,243 se v prvním řadě látek nahradila benzodioxolovým fragmentem, následně pak dihydrobenzofuranem a indanem jako kruhovými analogy a v poslední skupině pak samotným benzenem. Tyto strukturní obměny pravděpodobně povedou k poklesu β_3 -selektivity, ale měly by dramaticky zvýšit lipofilitu, a tím i perorální vstřebatelnost.²

Získané látky jsou enantiomerně obohacené, k přípravě se využila **konvergentní metoda**. **Levá část molekul** byla získána ze substituovaných benzaldehydů kyanhydrinovou syntézou katalyzovanou enzymem (*R*)-mandelonitril lyázou (*EC 4.1.2.10*) a produkt se zredukoval tetrahydridohlinitanem lithným na odpovídající β -aminoalkohol. Jeden ze způsobů syntézy **pravé strany sloučenin** vycházel z halogenace odpovídajícího hetero- nebo karbocyklického fragmentu a jeho převedení na Grignardův a Gilmanův reagent. V dalším stupni se daným diarylkuprátem substituoval propylenoxid a takto získaný sekundární alkohol se esterifikoval anhydridem trifluormethansulfonové kyseliny. **Posledním krokem** pak byla nukleofilní substituce triflátu příslušným β -aminoalkoholem.

Optická čistota kyanhydrinů se ověřovala pomocí polarimetrie, chirální HPLC separace, popř. po převedení na diastereomerní estery na reverzní fázi, biologická aktivita bude předmětem budoucího studia.

Tato práce byla financována grantem IGA č. 63/2011/FaF

¹ Nisoli, E.; Tonello, C.; Carruba, M. O.: β_3 -Adrenergic Receptors: Really Relevant Targets for Anti-Obesity Drugs? *Curr. Med. Chem.* 2003, 3, 257-273.

² Sawa, M.; Harada, H.: Recent Developments in the Design of Orally Bioavailable β_3 -Adrenergic Receptor Agonists. *Curr. Med. Chem.* 2006, 13, 25-37.

Využití vícerozměrné analýzy dat ve výzkumu

PharmDr. Petr Doležel

Ústav technologie léků, Farmaceutická fakulta, VFU Brno

Ve výzkumu se často setkáme s problémem jak účinně analyzovat velké soubory vícerozměrných dat. Takovéto soubory obsahují více proměnných a mohou tudíž obsahovat skryté závislosti, které je těžké na první pohled odhalit. Díky rychlému vývoji počítačové techniky a příslušného softwaru je možno aktivně využít metod vícerozměrné analýzy dat. V příspěvku budou představeny aplikace některých metod vícerozměrné analýzy s využitím ve farmacii, medicíně, nebo potravinářství.

Klíčová slova: vícerozměrná analýza dat - skryté závislosti - proměnné