

SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARKA MARCI



Agilent

Authorized
Distributor



Generálními sponzory Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci jsou firma ThermoFisher Scientific spolu s partnery PragoLab s.r.o. a Nicolet CZ s.r.o. a firma Agilent Technologies Inc. zastoupená autorizovaným distributorem HPST, s.r.o.

**BULLETIN
SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI
JANA MARKA MARCI**

182

únor 2019

<http://www.spektroskopie.cz>

e-mail sekretariátu: immss@spektroskopie.cz

telefonní číslo sekretariátu: 722 554 326

P.F. 2019

Redakční rada Bulletinu přeje všem členům Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci do nového roku hodně štěstí, zdraví a úspěchů v práci i v osobním životě. Předem děkujeme za Vaše příspěvky a upozornění na zajímavé akce u nás i v zahraničí.

105. schůze hlavního výboru Společnosti

Viktor Kanický

Dne 28. listopadu 2018 se konala 105. schůze hlavního výboru naší Společnosti. Tentokrát jsme se

sešli v Pardubicích, „na půli cesty“ mezi Prahou a Brnem. V moderně vybavené zasedací místnosti v historické budově Fakulty chemicko-technologické (dříve hlavní budova VŠChT Pardubice) na náměstí Čs. legií 565, kde dnes sídlí Fakulta elektrotechniky a informatiky Univerzity Pardubice, jednalo předsednictvo hlavního výboru a posléze hlavní výbor. Na programu schůze byla prezentace výsledků hospodaření Společnosti za 1. až 3. čtvrtletí 2018 a zhodnocení zprávy o hospodaření. Mírně přebytkový hospodářský výsledek byl přítomnými členy hlavního výboru jednomyslně schválen. Následovala zpráva o konferenci RadChem 2018 a informace o zářijové Škole hmotnostní spektrometrie, která se uskutečnila ve Špindlerově

Mlýně. Hlavní výbor byl seznámen s akcemi plánovanými na rok 2019 a jejich realizaci schválil. Po schůzi následovala Soutěž mladých spektroskopiků, jejímuž průběhu a výsledkům je věnován samostatný příspěvek v Bulletinu. Ocenili jsme pohodlné a příjemné prostředí moderní,

špičkově vybavené zasedací místnosti, která byla skvělým zázemím schůze i prezentací soutěžících studentů. Za zajištění tohoto skvělého místa děkuje Spektroskopická společnost doc. Anně Krejčové a prof. Petru Mikuláškoví z Ústavu environmentálního inženýrství FCHT Univerzity Pardubice.

Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie

Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie, ročník 2018

Tomáš Matoušek

I v letošním roce se úspěšně uskutečnila Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie. Jak je předepsáno pravidly, presentace prací proběhly na schůzi Hlavního výboru Spektroskopické společnosti pod dozorem čestného předsedy poroty **prof. Jiřího Dědiny**, v příjemných prostorách historické budovy Univerzity Pardubice.

Oproti předchozím dvěma velmi hojně obsazeným ročníkům jsme dostali nižší počet přihlášek, tři v kategorii diplomových prací a pět v kategorii publikovaných prací. Kvalita všech přihlášených příspěvků však je stále vynikající. Díky tomu a díky příznivým hospodářským výsledkům se Hlavní výbor Společnosti nakonec rozhodl ocenit všechny presentované práce.

Kategorie diplomových prací se nesla ve znamení vibrační spektroskopie. S první cenou odešel **Mgr. Antonín Knížek** s prací studující možný vznik biomolekul v podmínkách rané Země vypracovanou na Ústavu fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského AV ČR. Druhá cena patří **Ing. Dítě Spálovské**, která na Ústavu analytické chemie VŠCHT Praha analyzovala metodami vibrační spektroskopie nové syntetické drogy v roztoku. Třetí cenu získal **Ing. Martin Král** z Ústavu fyzikální chemie VŠCHT Praha za práci o interakcích aminokyselin a peptidů s povrchem plasmonických kovů.

V kategorii publikovaných prací a jejich souborů byly přihlášeny práce z molekulové a hmotnostní spektroskopie. Dvě první ceny si odnesli **RNDr. Jan Rejšek, Ph.D.** z Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR rozvíjející techniky ambientní hmotnostní spektrometrie a **Ing. Lucie Habartová, Ph.D.** z Ústavu analytické chemie VŠCHT Praha testující využití chiroptické spektroskopie biotekutin

pro klinickou diagnostiku. Druhou cenou byl odměněn **Dr. Tao Wu** z Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR za průkopnickou práci popisující měření cirkulárně polarizované luminiscence Eu(III), Sm(III) a Er(III). Dvě třetí ceny pak patří **Mgr. Dominice Luptákové, Ph.D.** z Mikrobiologického ústavu AV ČR zabývající se klinickou hmotnostní spektrometrií a **Ing. Kseniyi Popovich** z Katedry jaderné chemie fakulty jaderné a fyzikálně inženýrské ČVUT za rozvoj rentgenem buzené fotodynamické terapie.



Závěrem bych rád poblahopřál oceněným a poděkoval i autorům posudků soutěžních prací. Pevně doufám, že se můžeme těšit na podobně skvělé práce mladých spektroskopiků i v příštích ročnících soutěže. Souhrny oceněných prací přinášíme dále.

Kategorie diplomových prací

Experimentální studium chemické evoluce biomolekul v podmínkách rané Země

Mgr. Antonín Knížek

1. cena v kategorii diplomových prací

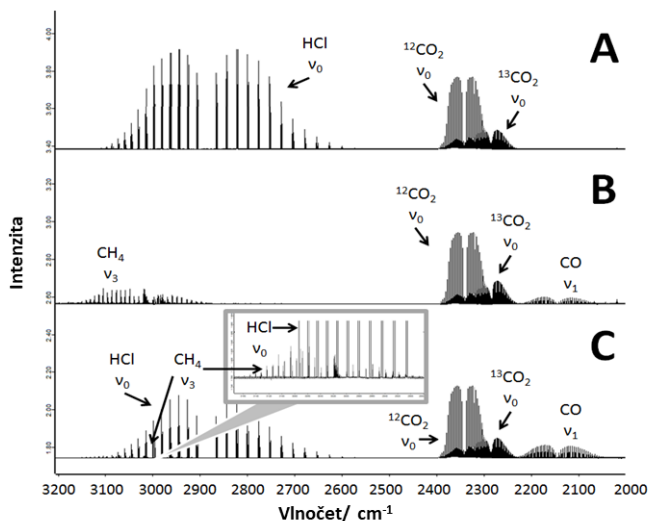
Ústav fyzikální chemie Jaroslava Heyrovského
AV ČR, v. v. i.

Oddělení spektroskopie

E-mail: antonin.knizek@jh-inst.cas.cz

Diplomová práce obhájena na Katedře fyzikální a makromolekulární chemie Přírodovědecké fakulty Univerzity Karlovy v Praze.

Předkládaná diplomová práce shrnuje současný stav poznání v oboru prebiotické chemie. Náš výzkum je zaměřen na aplikaci vysoce rozlišené spektroskopie v těch oblastech prebiotické chemie (chemické evoluce planet), kde tato metoda hraje podstatnou, často nenahraditelnou úlohu a kde lze ostatní techniky využít jen velmi obtížně nebo vůbec. Mnohdy je vysoce rozlišená spektroskopie vynikajícím partnerem dalším metodám, např. GC-MS a XPS.



Obr. 1: Vysoce rozlišená infračervená spektra vzorků při transformacích planetárních atmosfér. Panel A ukazuje plynnou směs před počátkem experimentu. Panely B a C zobrazují vzorky obsahující TiO_2 anatase a montmorillonit jako katalyzátory po 650 h ozářování. Na obou panelech je pozorovatelný vznik methanu a CO.

V první části své diplomové práce se zabývám monitorováním transformací neutrálních planetárních atmosfér obsahujících CO_2 a na methan a oxid uhelnatý pomocí vysoce rozlišené infračervené

spektroskopie. Představil jsem novou teorii, která vznik methanu na terestrických planetách, jako jsou raná Země či současný Mars, spojuje s jednoduchou fotochemickou reakcí probíhající na povrchu minerálů působením UV záření na adsorbovaný CO_2 . Výsledky byly shrnuty ve studii publikované v *Nature Astronomy* (Civiš, Knížek, a kol., *Nat. Astron.*, 10(1), 2017). Tento výsledek mimo jiné ukazuje, že přítomnost methanu na kamenné planetě, jejíž povrch je vystaven UV záření, včetně Marsu, může být vysvětlena fotochemicky a nikoliv jinými procesy (život, vulkanismus, Fischer-Tropschovy reakce atd). V případě rané Země souvisí syntéza methanu s existencí tzv. redukční atmosféry, která figuruje v řadě původních prací zabývajících se prebiotickou syntézou. Navíc chemicky „redukční“ atmosféra má významný potenciál pro vznik biomolekul, jak popsali již v roce 1953 Miller a Urey, když ze směsi CH_4 , NH_3 , H_2O a dalších plynů syntetizovali řadu aminokyselin. Během následujících desítek let se objevilo mnoho dalších experimentů s různými výsledky a dnes známe cesty, jak v prebioticky relevantních podmínkách vyrobit všechny čtyři skupiny biogenních látek, tj. sacharidy, báze nukleových kyselin, aminokyseliny a lipidy. Stav současného poznání v těchto oborech je shrnut v úvodu mé diplomové práce. S ohledem na používané reaktanty se vyskytly názory, že atmosféra, kterou použili Miller a Urey, byla příliš redukovaná a nerealistická na rané Zemi. V současné době lze nalézt názorové proudy zastávající jak představu redukované, tak neutrální atmosféry Země v jejích počátcích. Experimentální výzkum prezentovaný v této diplomové práci ukazuje, že pokud byla atmosféra neutrální a bohatá na oxid uhličitý, docházelo (alespoň dočasně a lokálně) k její částečné přeměně na atmosféru obsahující CH_4 a CO – základní redukční plyny. Působením dopadů asteroidů či bleskových výbojů a fotochemie mohou být tyto plyny přeměněny zpět na CO_2 . Uhlík na terestrických planetách tedy vstupuje do nového cyklu ovlivňujícího oxidační stav atmosféry a ukazuje, že otázka stavu původní atmosféry je do jisté míry relativní. Transformace těchto atmosfér byla v této práci studována pomocí vysoce rozlišené infračervené spektroskopie s Fourierovou transformací. To umožnilo sledovat fotochemickou transformaci CO_2 atmosféry v reálném čase a v jednoduchém systému složeného ze skleněné koule s natavenou trubičkou obsahující studovaný minerál ozařovaný UV lampou. Po ukončení experimentu byly vzorky komplementárně analyzovány pomocí GC-MS či XPS. Tyto metody umožňují citlivější analýzu odlišných molekul a doplňují infračervenou spektroskopii, ale jsou destruktivní a tedy neschopné elegantně odhalit průběh reakce.

Druhá část této diplomové práce se zabývá vznikem biomolekul ze směsi plynů obsahujících CH_4 , CO a N_2 . Tato směs představuje prototyp běžné redukční atmosféry terestrické planety, již je možno nalézt např. na Saturnově měsíci Titanu či pomocí infračervené spektroskopie na exoplanetách. V této části práce byla zmíněná směs plynů vystavena plazmatu o vysoké hustotě energie generovaném na laseru PALS patřícímu Ústavu fyziky plazmatu AV ČR, v.v.i. Laserová jiskra iniciovaná fokusací laserového světla se projevuje rázovou vlnou o teplotě 4500 K. Ta disociuje a excituje molekuly do vysoce vybuzených stavů v plazmatu. Při dohasínání a postupném vychládání vzorku dochází k rekombinaci, emisi tvrdého UV záření a k syntéze složitějších molekul. Tento experimentální systém je jedním z mála použitelných nástrojů k simulaci účinků dopadu asteroidu do planetární atmosféry. Je možné spekulovat o tom, že vznik života na Zemi v době Pozdního těžkého bombardování (před 4,1 – 3,8 mld. let) není pouhou časovou náhodou a přímo s touto epochou v chemické evoluci Země souvisí. Dalším experimentem byl elektrický výboj v analogické směsi plynů. Světově unikátní technika časově rozlišené spektroskopie s Fourierovou transformací s kontinuálním skenováním s vysokým rozlišením odhalila řadu meziproduktů syntézy, z nichž hlavními a všudypřítomnými jsou radikál $\cdot\text{CN}$, HCN a HNC . Časově rozlišená infračervená spektroskopie umožnila pozorovat dohasínání plazmatu a odhalit nejen přítomnost reaktivních specií, ale i další klíčové meziprodukty prebiotických syntéz. V obou směsích byla zjištěna pomocí GC-MS přítomnost bází nukleových kyselin, močoviny a glycinu. Jejich detekce byla publikována v časopise PNAS (Ferus, Knížek a kol., *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 17(114), 2017). Tento ucelený scénář vzniku bází nukleových kyselin z atmosféry obsahující CH_4 , CO a N_2 za použití UV záření a laserového plazmatu je v současné literatuře prezentován vůbec poprvé. Výsledky jsou pak porovnány se současnými pracemi v oboru prebiotické chemie zaměřenými na vznik bází nukleových kyselin. Kromě toho práce popisuje a shrnuje také působení katalyzátorů v prebiotické chemii, např. meteoritů (souhrnně v komentáři Ferus, Knížek, Civiš: *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 23(112), 2015).

Červenou linkou táhnoucí se celou diplomovou prací je použití infračervené spektroskopie, jež byla použita nejen k monitorování probíhajících transformací prototypů planetárních atmosfér a sledování meziproduktů při formování biomolekul, ale je také základní součástí přidruženého výzkumu. Většina dat o chemickém složení exoplanetárních atmosfér či atmosféry Marsu byla získána pomocí infračervené spektroskopie. Z toho hlediska je použití této techniky v představované práci zcela zásadní,

protože použitá metodika je tak přímo aplikovatelná na astronomická a astrochemická pozorování, což o metodách, jako např. GC-MS či XPS říci nelze. To je umožněno i díky samotné podstatě infračervené spektroskopie, která tkví v měření fyzikálních parametrů látek a je tak zcela neodvislá od použité instrumentální techniky, na rozdíl od plynové chromatografie, jež závisí na použitém přístroji a jeho kalibraci.

Studium struktury nových syntetických drog v roztoku metodami vibrační spektroskopie

Ing. Dita Spálovská

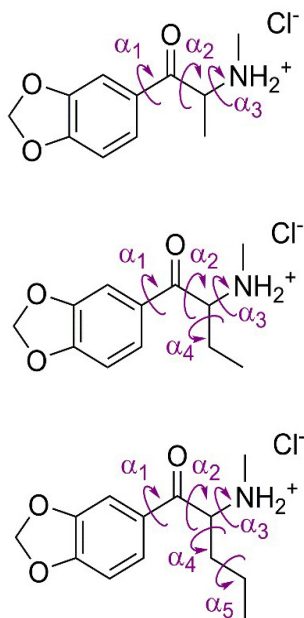
2. cena v kategorii diplomových prací

Ústav analytické chemie
Vysoká škola chemicko-technologická v Praze
E-mail: dita.spalovska@vscht.cz

V České republice, stejně jako na celém světě, každoročně vzrůstá celkový počet nových psychoaktivních látek (NPS – new psychoactive substances). Tyto látky jsou nejen strukturně, ale i svými účinky podobné nelegálním omamným a psychotropním látkám a momentálně jich Evropské monitorovací centrum pro drogy a drogovou závislost (EMCDDA) monitoruje přes 670 (cit.¹). Jedná se o širokou škálu drog, které často ještě nejsou na seznámech zakázaných látek daných států. Patří mezi ně zejména syntetické kanabinoidy, syntetické katinony a opioidy. Šíření těchto látek je usnadněno prodejem přes internetové obchody a množstvím osobních zkušeností, které uživatelé sdílí v různých internetových diskuzích. Účinky mnohých NPS na lidský organismus nejsou dostatečně popsány, a tak je jejich užívání spojeno se značným zdravotním rizikem. Je proto třeba rychlá a spolehlivá analýza, stejně jako vývoj metod pro detailní studium trojrozměrné struktury těchto látek a s tím souvisejících farmakologických účinků².

Metody konvenční vibrační spektroskopie, například infračervená (IR) a Ramanova spektroskopie, představují efektivní nástroj pro identifikaci a analýzu NPS, kterou je možné provádět i v terénu za využití mobilních spektrometrů. Jelikož některé NPS patří mezi látky chirální, lze je taktéž studovat pomocí strukturně citlivých chiroptických metod. Radíme k nim zejména elektronový cirkulární dichroismus (ECD), vibrační cirkulární dichroismus (VCD) či Ramanovu optickou aktivitu (ROA).

Tato práce je zaměřena na detailní strukturní analýzu tří homologických NPS methylonu, butylonu a pentylonu (Obr. 1) v roztoku a na určení absolutní konfigurace jednotlivých enantiomerů. Tyto látky se liší pouze délkou alifatického řetězce a tím pádem počtem významných dihedrálních úhlů.



Obr. 1 Struktury hydrochloridu methylonu (nahore), butylonu (uprostřed) a pentylonu (dole) s vyznačenými dihedrálními úhly α_1 , α_2 , α_3 , a případně α_4 a α_5 .

Jedná se o první systematickou studii těchto látek za využití jak metod konvenční ultrafialové (UV), IR a Ramanovy spektroskopie, tak i pokročilejších chiroptických metod ECD a VCD v kombinaci s kvantově chemickými výpočty na úrovni B3LYP/6-311++G(d,p) nebo B3PW91/6-311++G(d,p) se zahrnutím vlivu rozpouštědla pomocí modelu polarizovatelného kontinua. Konformační analýza odhalila energeticky nejvýhodnější konformery jednotlivých látek: 5 konformerů pro methylon, 6 pro butylon a 9 pro pentylon. Všechny konformery jsou stabilizovány vodíkovou interakcí mezi atomem kyslíku karbonylové skupiny a atomem vodíku aminoskupiny. Na základě Boltzmannova rozdělení pak bylo pomocí volné Gibbsovy energie zjištěno jejich relativní rovnovážné zastoupení při laboratorní teplotě. Následovala simulace dílčích spekter ECD a výpočet spekter váženého průměru konformerů, díky kterým bylo možné spolehlivě určit absolutní konfiguraci jednotlivých enantiomerů získaných enantioseparací standardů látek ve formě hydrochloridů. Poté byla simulována také UV, IR, VCD a Ramanova spektra, dále vypočtena spektra váženého průměru konformerů a následovalo jejich porovnání se spektry experimentálními pomocí

programu CDSpecTech³ za výsledné velmi dobré shody. Ta dosahovala hodnot od 0,64 do 0,92 (ideální míra shody je 1,0).

Ukázalo se, že na průběh spekter jednotlivých konformerů má největší vliv orientace karbonylové skupiny vzhledem k aromatickému jádru a že rozdíly mezi dílčími spektry konformerů jsou výrazné zejména v případě ECD a VCD. Na základě toho lze potvrdit vyšší citlivost chiroptických metod ke 3D struktuře látek.

Spektroskopie VCD, zejména v kombinaci s *ab initio* výpočty, se ukazuje jako nejcitlivější z metod použitých v rámci této práce k rozlišení strukturně podobných látek na základě experimentálních spekter. Pomocí spektroskopie ECD a UV nebylo možno látky rozlišit a IR spektroskopii došlo k rozlišení pouze v úzkém spektrálním rozsahu (1420–1280 cm^{-1}). Zatímco ECD reflektuje elektronické přechody chromoforů (např. aromatické jádro), VCD je citlivý na lokální vibrační přechody (např. karbonylová skupina a aminoskupina, alifatický řetězec). Proto kombinace těchto dvou chiroptických metod umožnila nejen spolehlivé určení absolutní konfigurace, ale také mnohem detailnější strukturní informace i popis jednotlivých konformerů studovaných molekul. Detailní znalost 3D struktury může do budoucna pomoci nejen k podrobnému studiu vazebných vlastností, možností metabolismu či transportu těchto látek v organismu, ale také k vývoji antagonistických léčiv pro případy předávkování, závislosti či otravy.

Na základě výsledků předkládané diplomové práce týkajících se molekuly butylonu vznikla publikace v odborném časopise⁴.

Tato práce byla realizována s podporou Ministerstva vnitra ČR (MV0/VI20172020056) a částečně za účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 21-SVV/2018).

Literatura

1. European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction: *European Drug Report 2018: Trends and Developments*. Publications Office of the European Union, Luxembourg 2018.
2. Berova N., Polavarapu P. L., Nakanishi K., Woody R. W. (Eds): *Comprehensive Chiroptical Spectroscopy: Applications in Stereochemical Analysis of Synthetic Compounds, Natural Products, and Biomolecules*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken 2012.
3. Polavarapu P. L., Covington C. L.: Comparison of Experimental and Calculated Chiroptical

Spectra for Chiral Molecular Structure Determination, *Chirality*, 26, 539–552 (2014).

4. Spálovská D., Králík F., Kohout M., Jurásek B., Habartová L., Kuchař M., Setnička V.: Structure determination of butylone as a new psychoactive substance using chiroptical and vibrational spectroscopies, *Chirality*, 30, 548–559 (2018).

Studium interakce aminokyselin a peptidů s povrchem plasmonických kovů metodami vibrační mikrospektroskopie a nanoskopickými technikami

Ing. Martin Král

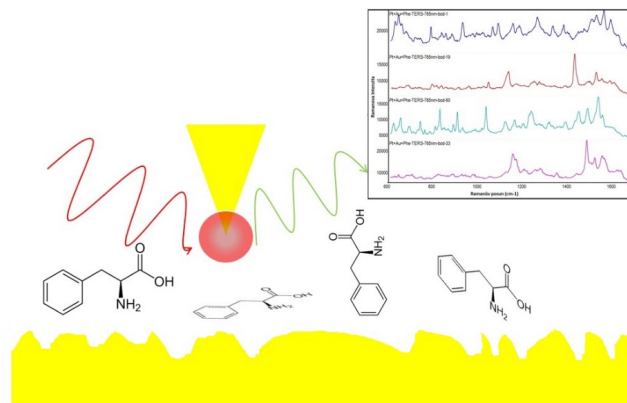
3. cena v kategorii diplomových prací

Ústav fyzikální chemie
Vysoká škola chemicko-technologická v Praze
Technická 5, 128 66, Praha
E-mail: kral2martin@gmail.com

Pro pochopení biologických systémů je nezbytné jejich detailní studium na úrovni jednotlivých molekul. Této citlivosti dosahují například techniky povrchem zesíleného Ramanova rozptylu (Surface-Enhanced Raman Scattering, SERS), hrotem zesíleného Ramanova rozptylu (Tip-Enhanced Raman Scattering, TERS) a skenovací infračervené mikroskopie blízkého pole (Scanning Near-field Infrared Microscopy, SNIM). Techniky TERS a SNIM navíc umožňují prostorové rozlišení v řádu několika nanometrů. K dosažení potřebné citlivosti využívají tyto techniky efektu zesílení signálu studovaných molekul v blízkosti povrchu plasmonického kovu (např. Au, Ag, Cu).

V mé práci byly výše uvedenými technikami zkoumány čtyři analyty: tryptofan, glutathion, pantothenan vápenatý a fenylalanin. Tyto látky byly adsorbovány na zlatý nanostrukturovaný povrch připravený galvanickým pokovením platinového plíšku. Bylo zjištěno, že aromatické aminokyseliny poskytují obvykle lepší signál než aminokyseliny bez aromatického kruhu. Ze SERS spekter aromatických aminokyselin je možné odhadnout jejich přibližnou prostorovou orientaci na povrchu substrátu. Byla pozorována závislost poměru signál/šum ve spektrech na drsnosti povrchu substrátu a vlnové délce excitačního záření. Technika SNIM umožnila pozorovat „contact area effect“ u vzorku tryptofanu. Mapování technikou TERS poskytlo u vzorku fenylalaninu spektra, která jsou závislá na poloze měřeného bodu. Pro odhalení trendů v těchto spektrech byla použita analýza hlavních komponent

(Principal Component Analysis, PCA). Výsledky PCA umožňují zjistit, jak se v průběhu mapování mění faktor zesílení signálu a orientace molekul analytu mezi různými body měření.



Obr. 1. Grafické znázornění TERS experimentu.

Literatura

1. Aroca R.: *Surface-enhanced vibrational spectroscopy*. J. Wiley & Sons, Ltd, Hoboken 2006.
2. Kumar N., Mignuzzi S., Su W., Roy D.: *EPJ Tech. Instrum.* 2, 9 (2015).
3. Brundermann E., Havenith M.: *Annu. Rep. Prog. Chem., Sect. C: Phys. Chem.* 104, 235-255 (2008).

Kategorie publikovaných prací

Vývoj a aplikace technik ambientní hmotnostní spektrometrie

RNDr. Jan Rejšek, Ph.D.

1. cena v kategorii publikovaných prací

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v. v. i.
Skupina hmotnostní spektrometrie
E-mail: rejsek@gli.cas.cz

Seznam soutěžních prací:

1. Rejšek, J.; Vrkoslav, V.; Hanus, R.; Vaikkinen, A.; Haapala, M.; Kauppila, T. J.; Kostianen, R.; Cvačka, J. The detection and mapping of the spatial distribution of insect defense compounds by desorption atmospheric pressure photoionization Orbitrap mass spectrometry. *Anal. Chim. Acta* 2015, 886, 91-97.
2. Rejšek, J.; Vrkoslav, V.; Vaikkinen, A.; Haapala, M.; Kauppila, T. J.; Kostianen, R.; Cvačka, J. Thin-

layer chromatography/desorption atmospheric pressure photoionization Orbitrap mass spectrometry of lipids. *Anal. Chem.* **2016**, *88*, 12279-12286.

3. Rejšek, J.; Vrkoslav, V.; Pokorný, V.; Příbyl, V.; Cvačka, J. Ion source with laser triangulation for ambient mass spectrometry of non-planar samples. *Anal. Chem.* **2017**, *89*, 11452-11459.

4. Vaikkinen, A.; Rejšek, J.; Vrkoslav, V.; Kauppila, T. J.; Cvačka, J.; Kostianen, R. Feasibility of desorption atmospheric pressure photoionization and desorption electrospray ionization mass spectrometry to monitor urinary steroid metabolites during pregnancy. *Anal. Chim. Acta* **2015**, *880*, 84-92.

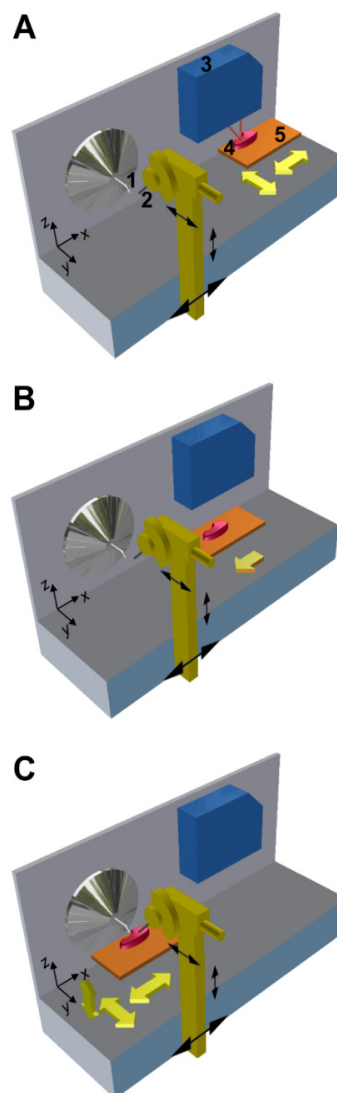
Desorpční fotoionizace za atmosférického tlaku (DAPPI) a desorpční ionizace elektrosprejem (DESI) patří mezi ionizační techniky ambientní hmotnostní spektrometrie. DAPPI využívá horký sprej par rozpouštědla a zmlžovacího plynu k desorpci analytu a UV lampy k jeho ionizaci. DESI je technika založená na extrakci analytu z povrchu a jeho ionizaci elektrosprejem.

Původní verze iontového zdroje vyrobeného v naší laboratoři umožňovala automatický posuv vzorku v osách x a y . V první práci byla studována distribuce obranných látek na povrchu hmyzu. DAPPI byla pro tuto úlohu vhodnou metodou, protože tyto obranné látky jsou převážně nepolární povahy. Tímto rychlým a jednoduchým způsobem bylo lokalizováno ústí obranných žláz na těle termita vojáka *Prorhinotermes simplex* a plošnice *Graphosoma lineatum*. Opakovatelnost DAPPI-MS a efekty spojené s neplanaritou a nepravidelností povrchu vzorků byly poté zkoumány na akrylátových deskách uniformně pokrytých vrstvou analytu.

Druhá práce se zabývala spojením DAPPI a tenkovrstvé chromatografie (TLC). Nejprve byla testována schopnost DAPPI-MS ionizovat a detekovat různé lipidy z TLC desek. Poté byly vyvinuté metody použity ke zjišťování chemického složení novorozeneckého mázku a rostlinných olejů. Separace lipidů do tříd byla provedena na normálních fázích, zatímco jednotlivé sloučeniny v rámci lipidových tříd byly rozděleny na reverzních fázích.

V naší laboratoři byla poté vyrobena nová verze iontového zdroje určená pro analýzu neplanárních vzorků (Obr. 1). Je vybavená automatickým posuvem v ose z a senzorem pro měření vzdálenosti pracujícím na principu optické triangulace. Ve třetí práci byla studována funkčnost iontového zdroje na pravidelných geometrických tělesech vytištěných na 3D tiskárně a pokrytých vrstvou kyseliny 2,5-

dimethoxybenzoové. Dále bylo studováno praktické použití tohoto zdroje při analýze potravinářských a farmaceutických vzorků.



Obr. 1. Schéma znázorňující postup měření s iontovým zdrojem pro analýzu neplanárních vzorků. (A) Poloha měření výšky. 1: Vstupní kapilára hmotnostního spektrometru. 2: Sonda (sprejer/mikročip). 3: Laserový sensor. 4: Vzorek. 5: Pohyblivý stolek. (B) Přesun vzorku do polohy chemické analýzy. (C) Poloha chemické analýzy.

Poslední práce se týkala screeningu steroidních metabolitů v moči těhotných žen pomocí ambientní hmotnostní spektrometrie. DAPPI ukázala nárůst množství C19 a C21 steroidů v průběhu těhotenství. S využitím DESI byl pozorován nárůst C18 a C21 glukuronátů steroidů.

Chiroptická spektroskopie biotekutin jako podpůrný nástroj klinické diagnostiky

Ing. Lucie Habartová, Ph.D.

1. cena v kategorii publikovaných prací

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze
Ústav analytické chemie
E-mail: lucie.habartova@vscht.cz

Seznam soutěžních prací:

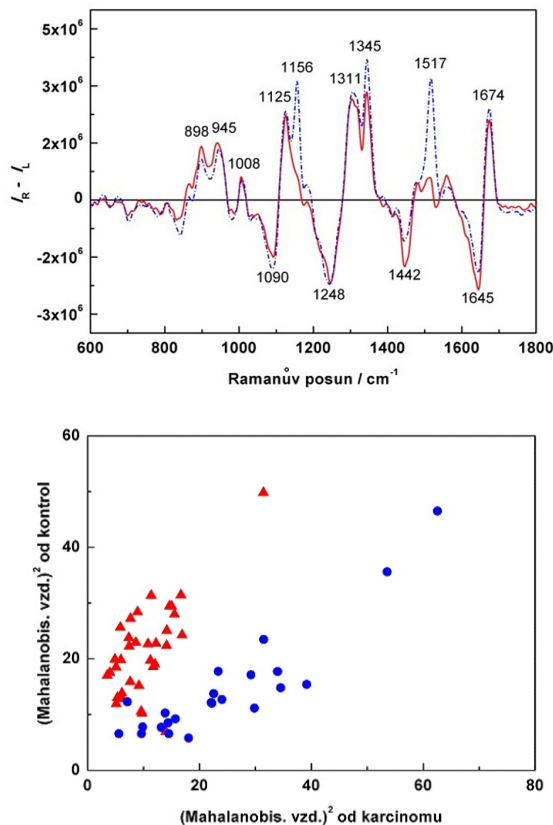
1. Habartová, L.; Bunganič, B.; Tatarkovič, M.; Zavoral, M.; Vondroušová, J.; Syslová, K.; Setnička, V. Chiroptical spectroscopy and metabolomics for blood-based sensing of pancreatic cancer. *Chirality* **2018**, *30*, 581-591.

2. Habartová, L.; Logerová, H.; Tomaník, L.; Marešová, A.; Setnička, V. Electronic circular dichroism for the detection of microalbuminuria. *Chirality* **2018**, *30*, 576-580.

Přestože je analýza biotekutin základním pilířem klinické diagnostiky, zaměřuje se především na koncentrační změny signálních biomolekul (biomarkerů) a ve většině případů není schopna identifikovat variace v jejich struktuře či prostorovém uspořádání, ke kterým vlivem onemocnění dochází. Tyto strukturální variace je možné zaznamenat ještě před nástupem klinických příznaků, což může zásadně napomoci včasné diagnostice a tím přispět ke zlepšení prognózy pacientů. K tomuto účelu lze využít chiroptickou spektroskopii, jejíž unikátní vlastností je inherentní citlivost na strukturu molekul. Ačkoliv je analýza biomolekul v tělních tekutinách za účelem diagnostiky chorob předmětem mnoha spektroskopických studií, chiroptická spektroskopie je tímto způsobem využívána pouze v naší laboratoři. Jedná se tedy o ojedinělý přístup přinášející nové možnosti studia a diagnostiky chorob.

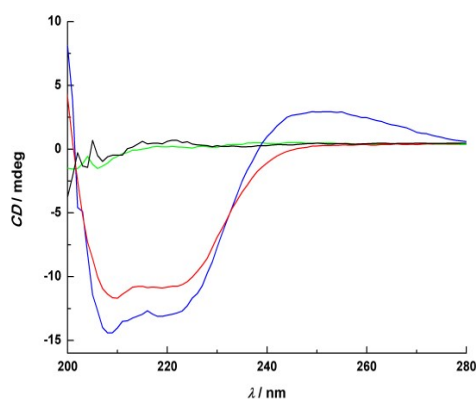
S cílem identifikovat specifickou odezvu karcinomu pankreatu (slinivky břišní) na molekulární úrovni byly analyzovány série vzorků krevní plazmy pacientů a zdravých kontrolních jedinců (Obr. 1). Doplněním využitých chiroptických metod (Ramanova optická aktivita; ROA, a elektronový cirkulární dichroismus; ECD) o konvenční vibračně-spektroskopické techniky (Ramanova a infračervená spektroskopie) byly získány podrobnější informace o struktuře plazmatických biomolekul. Ve spektrech obou studovaných skupin byly pozorovány pásy charakteristické pro základní složky krevní plazmy, tedy proteiny, sacharidy, lipidy apod. Odlišnosti zaznamenané v intenzitách a průběhu některých pásů

ve výsledných spektrech jsou s největší pravděpodobností odrazem molekulárních projevů karcinomu pankreatu. Současně provedená metabolická analýza krevní plazmy nejen že potvrdila pozorované spektrální změny a jejich korelaci s patofyziologií onemocnění, ale odhalila i molekuly, které nebyly dosud s karcinomem pankreatu spojovány. Následná statistická analýza získaných dat poskytla odlišení pacientů od zdravých kontrolních jedinců s vysokou správností (91 % po křížové validaci) vzhledem ke klinické diagnóze studovaných jedinců.



Obr. 1. Průměrná spektra ROA krevní plazmy (nahore) a výsledek statistického zpracování dat (dole) pro pacienty s karcinomem pankreatu (červená) a zdravé kontrolní jedince (modrá).

Výše zmíněná vysoká citlivost chiroptických metod ke strukturálním motivům biomolekul byla využita rovněž pro detekci tzv. mikroalbuminurie, tedy velmi malého množství lidského sérového albuminu v moči, což je signálem zhoršené funkce ledvin či kardiovaskulárních komplikací především u pacientů s diabetem. Pomocí elektronového cirkulárního dichroismu vzorků moči (Obr. 2) byl u diabetických pacientů s klinicky potvrzenou mikroalbuminurií pozorován signál typický pro lidský sérový albumin. Překvapivým výsledkem přitom bylo odhalení mikroalbuminurie u jedince, který byl standardními postupy označen za zdravého.



Obr. 2. Spektra ECD moči diabetika s klinicky potvrzenou mikroalbuminurií (červená), diabetiků bez mikroalbuminurie (černá, $n = 9$), zdravých kontrolních jedinců (zelená, $n = 3$) a jedince s rodinnou zátěží diabetu (modrá; mikroalbuminurie i diabetes klinicky vyloučeny).

Jelikož v současnosti využívané diagnostické metody nevykazují dostatečnou selektivitu a specifitu pro diagnostiku raných stádií karcinomu pankreatu či diabetu a s ním spojené mikroalbuminurie, jeví se využití chiroptické spektroskopie jako vhodný nástroj pro sledování specifické odezvy těchto onemocnění odehrávající se na úrovni strukturních změn tělních biomolekul. V některých případech se pomocí spektroskopických metod podařilo odhalit přítomnost onemocnění se značným předstihem oproti standardní klinické diagnostice. Výsledky dosažené ve zmíněných pilotních studiích naznačují vysoký potenciál chiroptické spektroskopie k tomu, aby se stala hodnotným podpůrným nástrojem v diagnostice některých závažných onemocnění.

Specific circularly polarized luminescence of Eu(III), Sm(III), and Er(III) induced by N-acetylneuraminic acid

Tao Wu, Ph.D.

2. cena v kategorii publikovaných prací

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v. v. i.
Oddělení Molekulární Spektroskopie
E-mail: wu@uochb.cas.cz

Seznam soutěžních prací:

1. Wu, T.; Bouř, P. Specific circularly polarized luminescence of Eu(III), Sm(III), and Er(III) induced by N-acetylneuraminic acid. *Chem. Commun.*, **2018**, 54, 1790-1792. DOI: 10.1039/c7cc09463a

Circularly polarized luminescence (CPL) spectroscopy was one of the most convenient chiroptical methods for lanthanide complexes investigations as bio-molecular probes. However, the excitation sources of traditional CPL instruments are rather weak, which somehow limits the resolution of this method. Recently, however, we have found that lanthanide CPL activity could be measured in the ROA (Raman optical activity) spectrometer, too (*Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 14933-14936). In this present study, we use ROA technique to study induced CPL of Eu(III), Sm(III), and Er(III) in sialic acid aqueous solution. The intensive CPL signals of europium and samarium marks a key step for the development of efficient probes in chemical imaging and medical diagnosis. The ROA/CPL spectroscopy thus seems quite versatile and very promising for future applications in biospectroscopy.

Klinická hmotnostní spektrometrie

Mgr. Dominika Luptáková, Ph.D.

3. cena v kategorii publikovaných prací

Mikrobiologický ústav AV ČR, v. v. i.
Laboratoř charakterizace molekulární struktury
E-mail: dominika.luptakova@biomed.cas.cz

Seznam soutěžních prací:

1. Luptakova, D.; Baciak, L.; Pluhacek, T.; Skriba, A.; Sediva, B.; Havlicek, V.; Juranek, I. Membrane depolarization and aberrant lipid distributions in the neonatal rat brain following hypoxic-ischaemic insult. *Scientific Reports*, **2018**, 8, 6952.

2. Luptáková, D.; Pluháček, T.; Petřík, M.; Novák, J.; Palyzová, A.; Sokolová, L.; Škríba, A.; Šedivá, B.; Lemr, K.; Havlíček, V. Non-invasive and invasive diagnoses of aspergillosis in a rat model by mass spectrometry. *Scientific Reports*, **2017**, 7, 16523.

3. Luptáková, D.; Pluháček, T.; Playzová, A.; Přichystal, J.; Balog, J.; Lemr, K.; Juránek, I.; Havlíček, V. Meet interesting abbreviations in clinical mass spectrometry: from compound classification by REIMS to multimodal and mass spectrometry imaging (MSI). *Acta Virologica*, **2017**, 61, 353 - 360.

V rámci souboru prací přihlašuji svoje tři prvoautorské práce, které vyšly v průběhu posledního roku. Název souboru prací je „Klinická hmotnostní spektrometrie“, problematika, která tyto původní

práce vzájemně provazuje. Ve všech třech případech se jedná o biomedicínální aplikace, respektive vývoj nových metod pro přípravu klinických vzorků. Vyvíjela jsem metody pro úpravu cerebrospinálních tekutin (CSF), sérových vzorků, vzorků moče, ale i tkáňových vzorků. Dále jsem vyvíjela metodiku stanovení biomarkerů onemocnění se zřetelem na dynamický rozsah analýzy. Vzorky tkání, séra a CSF byly většinou čištěny SPE extrakcí, bílkoviny sráženy metanolem a dynamický rozsah analýzy byl zajištěn kombinací kapalinové chromatografie, kvadrupólu a iontové cyklotronové rezonance. V první práci jsem použila techniku REIMS pro klasifikaci lipidů v potkaních mozcích poškozených hypoxicko – ischemickým atakem a nastínila jsem možnosti multimodálního zobrazování v pracích s infekčními zvířecími modely. V druhé práci jsem popsala nové a specifické biomolekulární značky infekčního onemocnění, tzv. invazivní aspergilózy. Hladiny feriforem TAFC a FC dosahovaly v séru infikovaných zvířat řádu ng/ml. V moči byly koncentrace diverzifikovanější a oscilovaly v řádech ng - μg/ml. Koncentrace těchto látek v moči a purifikační schopnost ledvin povede k následné práci s lidskými vzorky. Do neinvazivní diagnostiky povede i druhá práce, která si ve svém konečném cíli klade objevit neinvazivní neonatální značky pro diagnostiku hypoxicko – ischemické encefalopatie (HIE). Začala jsem s potkaním modelem a popsala delokalizaci membrán mozkových buněk bezprostředně po HIE ataku. Zachytila jsem méně zajímavé látky popisující apoptózu buněk (GM2, GM3), respektive reparaci mozkového tkaniva. Zajímavým objevem bylo popsání lipidů typu N-acylfosfatidyletanolaminy (NAPE), jejichž syntézou se mozek snaží kompenzovat poškození. Tyto látky, které mohou být i základem pro příští terapeutickou intervenci budu hledat v pořadí CSF, sérum, moč. Cílem je najít tyto resp. podobné bioznačky v moči novorozeneckých dětí, u kterých došlo k hypoxicko-ischemickému poškození mozku.

**Nanohybridní systémy na bázi
LuAG:Pr³⁺ - porfyrin pro produkci singletního
kyslíku: cesta k novým lékům pro PDTX**

Ing. Kseniya Popovich

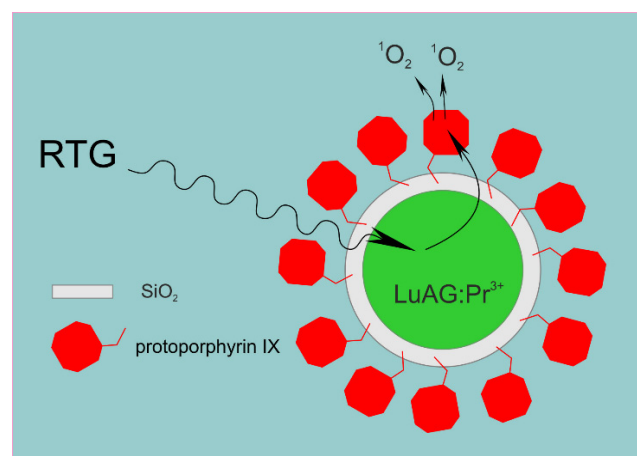
3. cena v kategorii publikovaných prací

České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská
Katedra jaderné chemie
E-mail: kkeniya.popovich@fffi.cvut.cz

Seznam soutěžních prací:

1. Popovich, K.; Tomanová, K.; Čuba, V.; Procházková, L.; Pelikánová, I. T.; Jakubec, I.; Mihóková, E.; Nikl, M. LuAG:Pr³⁺ - porphyrin based nanohybrid system for singlet oxygen production: Toward the next generation of PDTX drugs. *J. Photoch. Photobio. B* **2018**, *179*, 149-155.

Rentgenem buzená fotodynamická terapie (PDTX) je moderní metodou léčby nádorových onemocnění, na níž probíhá intenzivní výzkum. Nový koncept využívá kombinace radioterapie a klasické fotodynamické terapie (PDT). Princip PDTX spočívá v aplikaci nanokompozitního luminiscenčního materiálu, který se skládá ze scintilující nanočástice a konjugované molekuly fotosenzibilizátoru (PS). Po excitaci nanočástice rentgenovým zářením dochází k přenosu energie na PS, který deexcituje tvorbou cytotoxického singletního kyslíku. Příprava kompozitních luminiscenčních materiálů pro PDTX by měla velký význam pro klinickou praxi, neboť aplikace PDTX by vedla ke zvýšení efektivity anebo snížení radiačních dávek v průběhu radioterapie.



Obr. 1: Princip generace ¹O₂ v PDTX

Nanokompozitní materiál LuAG:Pr³⁺@SiO₂-PpIX pro PDTX aplikace byl připraven ve třech krocích: fotochemická syntéza jádra LuAG:Pr³⁺, vytvoření

povrchové vrstvy amorfního SiO₂ metodou sol-gel a následná biofunkcionalizace navázáním molekul protoporfyrinu IX (PpIX). Výsledky z optické spektroskopie připraveného nanomateriálu (radioluminiscenční a fotoluminiscenční spektra měřená za pokojové teploty, časově rozlišená spektra) potvrzují neradiační přenos energie (ET) mezi nanočásticí a povrchovou vrstvou fotosenzibilizátoru: excitace center Pr³⁺ má za následek intenzivní luminiscenci PpIX v červené spektrální oblasti a současně dochází ke zkrácení dosvitu Pr³⁺, svědčící o procesu ET v systému.

Produkce singletního kyslíku byla potvrzena pomocí chemické sondy APF (3'-(p-aminofenyl)fluorescein)) citlivé na přítomnost ¹O₂. Ve fotoluminiscenčních spektrech rentgenem ozářeného nanokompozitu s přítomností APF byl pozorován nárůst intenzity emise při 530 nm potvrzující reakci sondy s ¹O₂ a jeho přítomnost v systému. Zhášecími testy s NaN₃ byly vyvráceny parazitické reakce APF s OH radikály.

Závěrem lze říci, že nanokompozitní materiál LuAG:Pr³⁺@SiO₂-PpIX lze považovat za velmi slibný pro aplikace v PDTX.

V letošním roce někteří naši členové slaví významná životní jubilea

Gratulujeme a přejeme pevné zdraví do dalších let

Spektroskopická společnost JMM

Prof. RNDr. Lumír Sommer, DrSc., devadesátníkem

Jubilant, přední světový odborník v oblasti molekulové a atomové spektroskopie a organických činidel, emeritní profesor analytické chemie na dvou brněnských vysokých školách (PřF MU a FCH VUT v Brně), se narodil 19.1.1929 v Opavě. Po absolvování reálného gymnázia studoval chemii a fyziku, později odbornou chemii (specializace analytická chemie) v letech 1948-1952 na PřF MU v Brně, kde po absolutoriu působil nejprve jako odborný asistent (1952-1958), posléze jako docent (1958-1964), profesor (1964-1995) a emeritní profesor (od r. 2000). Od roku 1995 působil jako profesor na Chemické fakultě VUT Brno. Hodnost kandidáta chemických věd (CSc.) získal v roce 1956 a hodnost doktora chemických věd (DrSc.) v r. 1964 (obě na VŠCHT v Praze). Profesor Sommer byl také v letech 1962-1965 a 1989-1991 děkanem PřF MU a v letech 1989-1994 vykonával funkci vedoucího dnes již neexistující Katedry analytické chemie. Lumír Sommer se také věnoval od roku 1952 intenzivní pedagogické práci ve všech oborech studia (základní, speciální i postgraduální),



přičemž dbal neustále na modernizaci a aktualizaci výuky analytické chemie. Vychoval mnoho studentů dosahujících vynikajících výsledků doma i v zahraničí, byl členem komise pro obhajoby disertačních prací v analytické chemii na MU v Brně a UP v Olomouci a členem celostátní česko-slovenské komise pro obhajoby doktorských disertačních prací (DSc.) v analytické chemii, dále členem Rady pro postgraduální studium analytické chemie na MU v Brně, na VŠCHT v Praze a na UP v Olomouci. V letech 1990-1997 a 1999-2000 byl členem pracovní skupiny chemie Akreditační komise vlády ČR.

Jeho odborné zaměření pokrývá širokou oblast anorganické analytické chemie, zejména optické analytické metody (molekulová spektrofotometrie ve VIS a UV oblasti, atomová absorpční/emisní spektroskopie). Jako žák a pokračovatel brněnské školy studia koordinačních sloučenin reprezentované jmény Josefa Václava Dubského a Arnošta Okáče se stal zakladatelem směru spektrofotometrického studia interakcí iontů kovů s analyticky významnými organickými činidly v roztocích. Významným úspěchem byl výzkum azosloučenin (např. PAR, PANS, aj.), které se svými spolupracovníky syntetizoval mezi prvními ve světě a poté zkoumal jejich reakce s prakticky veškerými ionty kovů nacházejícími se v periodické tabulce. Dále se ve svých vědeckých pracích zaměřoval také na studium

komplexních rovnováh a teorii analytických reakcí v roztocích, na analytickou chemii technicky významných vzácných prvků, stopovou prvkovou analýzu a analytickou chemii životního prostředí. Je autorem a spoluautorem více než 250 vědeckých prací, 4 monografií (mimo jiné Sommer L.: *Analytical Absorption Spectrophotometry in the Visible and Ultraviolet*. Elsevier Science, Amsterdam 1989; Sommer L. a kol.: *Optická emisní spektrometrie v indukčně vázaném plazmatu*, Academia, Praha 1992) a 14 učebních textů. Na pozvání zahraničních pracovišť absolvoval řadu přednáškových pobytů na evropských univerzitách i jinde v zahraničí (Kanada, USA, Indie, Japonsko). V letech 1969/1970 působil jako hostující profesor na Dalhousie University v Kanadě. V letech 1969-1974 a 1977-1989 pracoval v komisi pro analytickou chemii (V1) Mezinárodní unie pro čistou a aplikovanou chemii (IUPAC) a byl také členem redakční rady mezinárodního časopisu pro analytickou chemii TALANTA v letech 1988-1998. Profesor Sommer je dlouholetým členem České společnosti spektroskopické a chemické, přičemž v r. 1998 byl oceněn Hanušovou medailí za zásluhy o chemii. Jeho vědecká činnost byla oceněna v minulosti i v současné době řadou uznání, např. Zlatá medaile Masarykovy univerzity v Brně v r. 2001 a 2004, Cena Gregora Mendela za vědu (1968), Pamětní medailí VUT (1998), Univerzity Palackého (1979), VŠB-TU (1975), aj. V roce 2002 mu byla udělena Cena města Brna za přírodní vědy.

V roce 2012 mu tehdejší prezident Václav Klaus udělil Medaili za zásluhy o stát v oblasti vědy, výchovy a školství.



Milý Lumíre, při příležitosti Tvého významného životního jubilea jménem všech Tvých spolupracovníků a kolegů Ti přejeme hodně zdraví, štěstí a spokojenosti do dalších let

Viktor Kanický, Přemysl Lubal

Smuteční oznámení

Zarmoucení oznamujeme, že dne 18. 1. 2019 zemřel náš kolega RNDr. Zdeněk Slovák, CSc., dlouholetý člen Československé spektroskopické společnosti,

resp. Spektroskopické společnosti J. M. Marci.
Zemřel ve věku 81 let.

Čest jeho památce!



HPST, s.r.o.
Na Jetelce 69/2
190 00 Praha 9
Česká republika

Tel.: +420 244 001 231
Fax: +420 244 001 235
E-mail: info@hpst.cz
Web: www.hpst.cz

Autorizovaný
distributor
Agilent
Technologies



Agilent

Authorized
Distributor



Znásobte Vaše možnosti v oblasti UV-Vis analýzy

Nový UV-Vis spektrofotometr **Agilent Cary 3500** změní Vaši laboratoř. Díky svým jedinečným vlastnostem Vám usnadní práci a zpřesní Vaše výsledky.

Cary 3500 změní způsob, jakým

- monitorujete enzymatické reakce při dané teplotě,
- kalibrujete a stanovujete koncentraci,
- provádíte experimenty s teplotními rampami,
- kvantifikujete nukleotidy a proteiny.

Zjistěte více: www.hpst.cz/analyticka-chemie/uv-vis-spektrofotometry/agilent-cary-3500



Kontaktujte nás | Mgr. Martina Háková | produktový specialista | martina.hakova@hpst.cz | + 420 730 572 998



plynová chromatografie ICP-OES příprava vzorku
elementární ANALÝZA elektrochemie SEA
analýza povrchů separační techniky
DVS REOLOGIE ATOMOVÁ spektroskopie
GC temperace kapalinová chromatografie
UV-VIS spektrometrie GC-MS lyofilizátory
konfokál B.E.T. LIMS MIKROSKOPIE koncentrátory
CHNSO analýza AAS analýza částic HPLC
hmotnostní SPEKTROMETRIE centrifugy EXTRUZE
ICP-MS **SERVIS** termická analýza AIR monitoring
XPS widefield TEXTURA spotřební materiál NMR
DLS automatické dávkování iGC TOC analýza RVC

www.pragolab.cz



PODÍVEJTE SE NA SVĚT NAŠÍ OPTIKOU

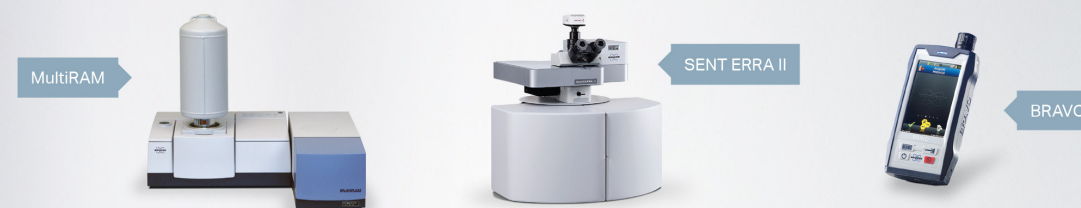


DLOUHÁ ŽIVOTNOST | ŠPIČKOVÝ VÝKON | ŠIROKÁ NABÍDKA PŘÍSLUŠENSTVÍ | JEDNODUCHÉ OVLÁDÁNÍ

FT-IR spektrometry a mikroskopy pro nejrůznější aplikace od R&D až po rutinní práci



Kompletní sortiment Ramanových přístrojů od handheldu až po pokročilý R&D mikroskop



Aplikace v nanovědách

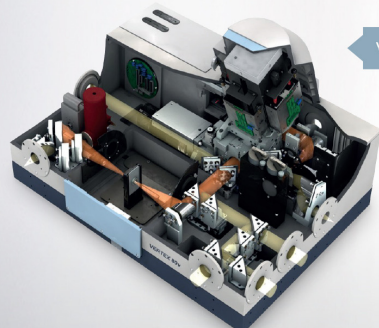
- Analýza ultratenkých vrstev pomocí dedikovaného reflexního příslušenství, grazing-angle objektivu, wafer-ATR příslušenství, PM-IRRAS aj.
- Analýza meta-materiálů
- Chemické mapování nanoobjektů s prostorovým rozlišením až 500 nm.
- UV/VIS až THz spektroskopie
- Spektroskopie s časovým rozlišením (110 spekter/s)
- IČ spektroskopie ve vakuu (pod 0.2 hPa)

PM-IRRAS analýza tenkých vrstev

PMA modul ve spojení s IČ spektrometrem VERTEX umožňuje dodatečnou polarizaci IČ svazku. Tím je ve výsledku dosaženo vyšší intenzity při měření ultra-tenkých vrstev na kovovém substrátu. PM-IRRAS je vhodnou technikou pro detekci, identifikaci a pokročilý výzkum tenkých vrstev.

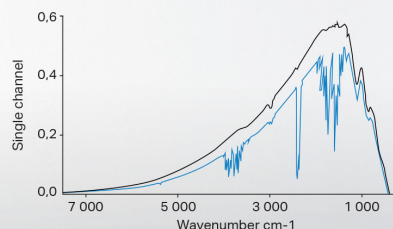
Unikátní vakuový IČ spektrometr VERTEX

Výzkumný FTIR spektrometr VERTEX dosahuje té nejvyšší citlivosti. Díky unikátní vakuové optice a silné ocelové konstrukci umožňuje dosažení vakua pod 0,2 hPa, a tím jsou potlačeny příspěvky atmosférických plynů jako je CO₂ a vodní pára na minimum.



VERTEX 80 vacuum

Porovnání jednokanálového IČ spektra za atmosférického tlaku (modrá) a ve vakuu



Optik Instruments
www.brukeroptics.cz



Anton Paar



VYTRVÁME TAM KDE OSTATNÍ SELHÁVAJÍ

VÝZVY JSOU NAŠÍ MOTIVACÍ.

INSPIRUJÍ NÁS POSOUVAT HRANICE

MOŽNÉHO. KAŽDÝ DEN.

Great people | Great instruments

Kontaktujte nás www.anton-paar.com

SPECTRO CS s.r.o.

Certifikace dle ISO 9001: 2009, Certifikát TUV SÚD Czech číslo: 05.094.716-1
 Rudná 1361/51, 700 30 Ostrava – Záběh, Tel: +420 596 762 840, Fax: +420 596 762 849, info@spectro.cz, www.spectro.cz



specialisté v oboru spektrometrie nabízejí přístroje firem:



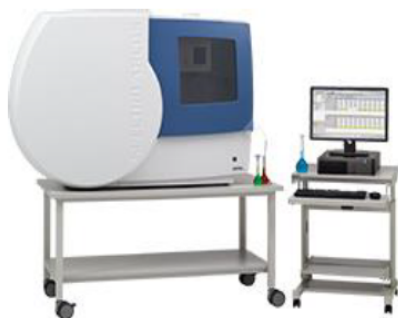
Ruční a mobilní spektrometry	Jiskrové spektrometry	ED - RTG spektrometry	ICP-OES spektrometry	ICP-MS spektrometry	Příprava materiálu pro RTG
Analyza v terénu, RTG a jiskrové/obloukové přístroje	Analyza kovových materiálů	Analyza pevných, kapalných a práškových materiálů	Analyza roztoků pro ultra nízké limity detekce	Plně simultánní MS spektrometr	Tavičky, lisy, mlynky, spotřební a referenční materiály pro XRF
Referenční materiály	Automatické systémy	GD spektrometry	Analyzátory ořezových kovů	Ruční IČ spektrometry	Analyzátory částic
Referenční materiály všeho druhu od firmy MBH	Kontejnerová laboratoř na klíč od firmy FLSmidth	Hloubková analýza materiálu Distribuce prvků dle hloubky	Přístroje pro prediktivní údržbu pomocí analýzy olejů a maziv - kompletní zařízení pro tribotechnickou analýzu – na požádání zašleme podrobné informace		

Zastoupení na Slovensku: SPECTRO APS spol. s r.o., Izabely Textorisovej 13, 036 01 Martin, www.spectroaps.sk

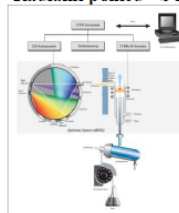
ICP spektrometr SPECTRO ARCOS Vlajková loď firmy SPECTRO

Jedná se o nový model (2015) ICP spektrometru, který je nástupcem velice úspěšného původního ICP spektrometru **SPECTRO ARCOS**, jenž se osvědčil zejména při analýze těžkých a komplikovaných matic (podle sloganu „tam kde ostatní končí, my začínáme...“).

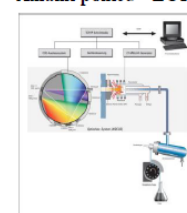
Přístroj se vyrábí jak s axiálním, tak s radiálním snímáním plasmy:



Radiální pohled - SOP



Axiální pohled - EOP

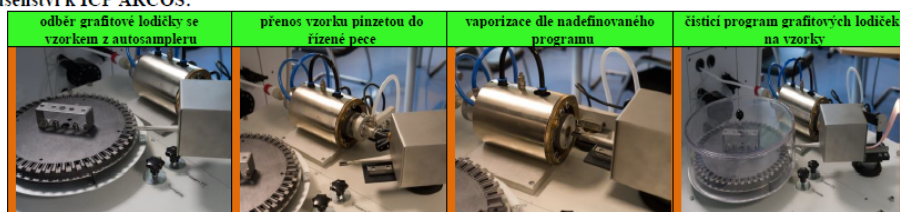


a nově i v provedení MULTI VIEW.

MULTI VIEW je systém s kombinací axiálního a radiálního pohledu, který na rozdíl od systému DUAL VIEW nabízí oba pohledy v plnohodnotné kvalitě. Přístroj s DUAL VIEW je v podstatě vždy zařízení s axiálním pozorováním doplněné o radiální pohled, který však nemá nejlepší parametry. Naproti tomu náš systém MULTI VIEW vám skutečně nabízí dva plnohodnotné přístroje v jednom. Tím si zajistíte neomezené možnosti jeho použití v široké škále aplikací, od pitných vod přes matrice půd, kalů až po složité analýzy kovových vzorků, zasolených roztoků, skla, drahých kovů atd. Přístroj je ovládán příjemným analytickým SW, analýza je rychlá (sken za 3 sekundy) a nezávislá na počtu zvolených čar a prvků při velmi dobrém stabilním rozlišení. Provoz spektrometru je velmi ekonomický bez nároku na další spotřebu argonu, klimatizaci laboratoře, externí chlazení vodou apod.

Díky tomu, že spektrometr umožňuje simultánní měření a zpracování tranzientního signálu (závislost intenzity na čase) pro libovolný počet čar a prvků, je vhodný pro spojení se vstupním vnašecím zařízením pro rychlé děje jako je laserová ablace, elektrotermická vaporizace (ETV) apod., a tím poskytuje možnost analyzovat mikromnožství pevných vzorků bez nutnosti převážení do roztoku!

ETV jako příslušenství k ICP ARCOS:



NABÍDKA PUBLIKACÍ SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI JMM

2. Podzimní škola rentgenové mikroanalýzy 2012 - sborník přednášek na CD	199,- Kč
Škola luminiscenční spektrometrie 2011 - sborník přednášek na CD	199,- Kč
Podzimní škola rentgenové mikroanalýzy 2010, sborník přednášek na CD	199,- Kč
Inorganic Environmental Analysis	161,- Kč
Referenční materiály (přednášky)	93,- Kč
Názvosloví IUPAC (Part XII: Terms related to electrothermal atomization; Part XIII: Terms related to chemical vapour generation)	35,- Kč
Kurz ICP pro pokročilé	245,- Kč
5. kurz ICP spektrometrie 2009	350,- Kč
6. kurz ICP spektrometrie 2011	350,- Kč
Kurz AAS pro pokročilé (1996)	120,- Kč
Metodická příručka pro uživatele FTIR	149,- Kč
Skripta Kurz HPLC/MS (2001)	100,- Kč
12. Spektroskopická konference	190,- Kč
13. Spektroskopická konference (2007 Lednice)	130,- Kč
Sborník přednášek ze semináře Radioanalytické metody IAA '03	62,- Kč
Sborník přednášek ze semináře Radioanalytické metody IAA '04	78,- Kč
AAS II – kurz pro pokročilé (2006)	435,- Kč
Sborník přednášek ze semináře Radioanalytické metody IAA '05	126,- Kč

Spektroskopická společnost Jana Marka Marci

se sídlem: Ke Karlovu 2027/3, 120 00 Praha 2 – Nové Město e-mail: immss@spektroskopie.cz
<http://www.spektroskopie.cz>

Adresa pro zasílání korespondence: Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Kotlářská 2,
611 37 Brno

Adresa sekretariátu pro osobní kontakt: Univerzitní kampus Bohunice, pavilon A14

Úřední hodiny: úterý 10 – 12 h, čtvrtek 10 – 12 h

Telefon: 549 49 1436, fax: 549 49 2494, mobil: 722 554 326, tajemník Tomáš Vašina

redakční rada:

prof. RNDr. Josef Komárek, DrSc. (předseda)
prof. Ing. Josef Čáslavský, CSc., prof. RNDr. Viktor Kanický, DrSc.
tech. redakce: Mgr. Rostislav Červenka, Ph.D.

redakční uzávěrka: 7. 1. 2019

uzávěrka příštího čísla: 8. 4. 2019