

thermo
scientific

Authorized Distributor



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

<http://www.spektroskopie.cz>

e-mail sekretariátu: immss@spektroskopie.cz

telefonní číslo sekretariátu: 722 554 326

Vzpomínka na Boba Dočekala



S tímto skvělým člověkem, vynikajícím odborníkem a báječným kamarádem jsme se společně s rodinou rozloučili 10. srpna v brněnském krematoriu za velké účasti kolegů, spolužáků a široké vědecké společnosti. Bob byl významným členem české Spektroskopické společnosti JMM (dříve Československé spektroskopické společnosti) a jejím dlouholetým

místopředsedou. Za jeho vědeckou činnost (viz Bulletin 157) mu byla v roce 2012 udělena medaile Jana Marka Marci z Kronlandu.

My všichni, co jsme ho znali, jsme si ho vážili nejen jako odborníka, který každému poradil a nezištně pomohl, ale především jako úžasného člověka. Bob měl neutuchající zájem nejen o spektroskopii, ale i veškeré dění kolem. Byl opravdový vizionář, stále se díval dopředu. Systematicky řešil jakýkoli zadaný úkol a nikdy nečekal na slova uznání. Nedopřál si odpočinku, pokud bylo nutné něco dokončit.

Vysokoškolské vzdělání v oboru chemie získal na Masarykově univerzitě (dříve UJEP) v Brně. Celý profesní život se věnoval stopové prvkové analýze

pro studium technologických postupů, léčiv, superčistých materiálů a environmentálnímu výzkumu. Během let získal v oboru spektroskopie a stopové analýzy renomé u nás i v zahraničí. Svě postavení si vydobyl nejen na pracovištích stopové analytiky v Lachemě Brno pod vedením Dr. Zdeňka Slováka, CSc., ale i na dlouhodobých stážích v zahraničí na akademických a univerzitních pracovištích, zejména v Německu. Nejdlejší část pracovního života věnoval výzkumu v Ústavu analytické chemie AV ČR v Brně. Navíc se specializovanými přednáškami na VŠCHT v Praze podílel na uvádění inovativních poznatků v AAS do analytických laboratoří, a vedl několik úspěšných doktorandských prací na VUT v Brně, kde se habilitoval. Výsledky své práce prezentoval na řadě významných mezinárodních konferencí, často vyzvanými přednáškami. Patřil do úzké skupiny odborníků, kteří přinášeli do svého oboru originální myšlenky i jejich praktické realizace. Svědčí o tom rozsáhlý soubor jeho publikovaných prací a bohaté mezinárodní citační ohlasy. Bob byl na všech odborných setkáních srdečně vítán nejen pro výsledky, které přijel prezentovat, ale i jako blízký kamarád většiny zúčastněných.

Na předčasný odchod Boba zareagovala řada zahraničních kolegů:

Regretfully, I only got to occasionally meet with Bob over the years at conferences but followed his active research work. He was such a gentleman and clearly always interested in his science. Such sad news for the whole community; my condolences to his family and close friends, he will be greatly missed.

Ralph Sturgeon, Canada

This is really very, very sad news. Bob was such a wonderful person. A gentleman in the best sense of meaning. A great scientist and still modest about his work, his research. It is shattering that he had to go so early! Thanks for informing the community!

Gerhard Schlemmer, Germany

Dear colleagues, I am very sorry and sad on the death of Bohumil. My deepest condolences to all his friends and family. Bohumil was really a very kind and debonair person. All good men loss one by one unfortunately. They ride on their White horses, fly and disappear without coming back. I respect to his memory.

Suleyman Akman, Turkey

It is with great sadness to learn from IMMSS colleagues that Bob has already passed away.

I always have him before my eyes as a wonderful person, our good friend and a great scientist. Certainly, Bob will remain in our memory.

Ewa Bulska, Poland

Dear colleagues, I admit that this is very sad news. Although I have not met Bob since 2008 when I retired, we have met often before at seminars, congresses and also privately, in the Czech Republic and abroad. Bob was not only an excellent scientist, but also a fine educator and a person full of gentleness and humour. His death is a great loss for everyone, mainly for his wife and children.

Michel Hoenig, Belgium

Sprava o Bohumilovom skonání ma nesmierne zarmutila. Bohumil bol v deväťdesiatych rokoch viackrát ako hosťujúci výskumník u nás v Ulme. On bol po mnohých stránkach jedinečný. V nasej vedeckej oblasti mal vynikajúci prehľad o všetkom čo je dôležité, bol úžasne teoreticky fundovaný a pritom výnimočným talentom, obdarovaný zručný experimentátor stále hľadajúci zlepšenia a nove riešenia. Počas jeho hosťujúcich pobytov vždy dosiahol vynikajúce výsledky, podstatne prispel k rozvoju priamej stopovej analýzy pevných materiálov v našej sekcii a blahodarne inspiroval diplomantov a doktorandov. Strávili sme veľa pekných chvíľ aj súkromné, bol častým hosťom u nás doma - vynikajúco sme kooperovali aj pri občasnom spoločnom varení bryndzových halušiek, ktoré aj on mal veľmi rad.

V Bobovi nám odišiel nielen vysokovažený kolega, vynikajúci vedec a výskumník, ale aj veľký človek. Jeho odchod vyvoláva u mňa veľký smútok. Ale na druhej strane aj pocit vďačnosti, že sa naše cesty križovali a že mi bolo dopriate s nim sa dostať do bližšieho pracovného a súkromného styku.

Viliam Krivan, Uni-Ulm, Germany

We are deeply sorry to hear about the death of Bohumil. He will be always in our thoughts and memories as a wonderful person and excellent scientist. Please, send our heartfelt condolences to his family.

Zofia Kowalewska and friends from Poland

I am very sorry for your loss. It is hard to lose someone very dear to you. Since many years I have been seeing Bohumil at conferences. We have always been together. Bohumil will always stay in my memory as handsome, humorous and well-wishing person.

Evelina Sedykh, Moscow, Russia

Za českou vědeckou komunitu se s Bobem rozloučil doc. Dr. Michal Roth, CSc., předseda Rady Ústavu analytické chemie AV ČR, který mimo jiné uvedl:

Docent Dočekal, nebo spíše Bob, jak jsme ho všeobecně znali, byl historicky vlastně prvním, kdo v našem ústavu rozvíjel a používal metody atomové spektroskopie, protože ústav se původně zabýval výhradně separačními metodami. Bobův odborný zájem se postupně přesouval od analýzy ultračistých materiálů přes využití difuzních gradientů v tenkých vrstvách až ke studiu biologických efektů vdechovaných anorganických nanočástic. Při nesnadné práci na těchto tématech se Bobovi podařilo vychovat řadu diplomantů a doktorandů. Vedle své vědecké činnosti si ale našel čas i na péči o oborovou komunitu, například v roli místopředsedy SSJMM.

Příznačným rysem Bobovy osobnosti byl opravdový a nelíčený zájem o práci druhých, ochota vždy nezištně poradit a podělit se o svoje rozsáhlé vědomosti a zkušenosti. Myslím si, že právě tento Bobův rys budeme v budoucnu postrádat nejvíce.

Děkujeme, Bobe, a odpočívej v pokoji.

Budeš moc chybět nejen Tvé rodině, ale i nám kolegům a kamarádům

Marcella Šucmanová



Smutná zpráva

Zarmoucení oznamujeme, že dne 5. srpna 2021 náhle zemřel uznávaný analytický chemik a odborník v oboru chromatografie **prof. Ing. Pavel Jandera, DrSc.** Zemřel ve věku 77 let.

Čest jeho památce!

Kurz laserové ablace 2021

Tomáš Vaculovič

Po dlouhých pěti letech jsme opět uspořádali Kurz laserové ablace. Tentokrát se konal ve dnech 7. – 10. června v prostorách Univerzitního kampusu Bohunice ve spolupráci s Přírodovědeckou fakultou MU. Přestože bylo krátce po uvolnění protikovidových opatření, zúčastnilo se tohoto kurzu rekordních 52 osob, 4 firmy (HPST, Pragolab, PE Systems a RMI) podpořily finančně pořádání tohoto kurzu.

Odborný program byl rozdělen do tří částí. Úterý bylo věnováno přednáškám zaměřeným zejména na techniku LIBS – od základních principů laserů a metody LIBS přes aplikace (analýza měkkých tkání a hloubkové profilování) po využití nanočástic v technice LIBS. Středeční den byl zaměřen na kombinaci laserové ablace s ICP-MS. Účastníci se dověděli informace nejen o základních principech ICP-MS, frakcionaci a problematice tvorby aerosolu při laserové ablaci, ale i aplikacích v geologii a biologických vědách. Ve čtvrtek dopoledne byla řada na přednáškách zabývajících se prací s daty – jednak zpracování dat pomocí programů Iolite a Ilaps a také využití statistických postupů v analýze jednorozměrných dat.

Účastníci tak mohli sledovat 27 přednášek, a to jak prezenčně, tak i formou videopřenosu přes aplikaci MS Teams. Tu jsme s výhodou využili i k tomu, aby se ke kurzu mohli připojit i 4 přednášející, kteří do Brna nemohli přijet a museli přednášet ze svých pracovišť v zahraničí (Austrálie a Slovensko).

Novinkou na kurzu byla i soutěž o nejlepší poster. Této soutěže se zúčastnilo 19 prezentujících, ze kterých odborná porota vybrala 3 nejlepší práce (1. místo Kamil Sobek, 2. místo Zuzana Husáková, 3. místo Markéta Vejvodová)

V rámci kurzu měli účastníci možnost prohlédnout si i vybavení laboratoří pracoviště Laboratoře atomové

spektrochemie na Ústavu chemie, kde byla k vidění lab-made instrumentace LIBS a double-pulse LIBS, spojení zařízení pro laserovou ablaci s kvadrupólovými i sektorovým ICP-MS.

Náročný odborný program bylo nutné kompenzovat i společenským vyžitím. V úterý bylo pro účastníky připraveno malé grilovací posezení s dobrým jídlem a pitím a ve středu jsme společně navštívili brněnskou hvězdárnu na Kraví hoře.

Další kurz laserové ablace je plánován na rok 2023 a doufáme, že se ho zúčastní přednášející a posluchači v podobně hojném počtu.

Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie, ročník 2020

Tomáš Matoušek

Tradiční Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie se vzhledem ke covidové epidemii konala v netradičním termínu i netradiční formou. Na podzim roku 2020 jsme se rozhodli soutěž odsunout z tradičního termínu prosincové schůze Hlavního výboru na další schůzi začátkem léta v naději, že budou možné prezentace prací osobně tak, jak jsme byli zvyklí. Leč nestalo se, a tak prezentace k soutěži nakonec proběhly elektronicky na platformě MS Teams. Ani to však nesnížilo zájem a počty kvalitních příspěvků přihlášených do obou kategorií. Elektronická forma prezentací umožnila rozdělit prezentace do dvou dnů. Soutěž diplomových prací tak proběhla v pátek 18.6. a soutěž publikovaných prací a souborů pak následující pondělí 21.6.

V kategorii diplomových prací bylo prezentováno 7 prací. Porotě se nejvíce líbila a první cenu získala diplomová práce **Ing. Karolíny Salvadori**, která připravovala a studovala receptory aniontů založené na močovinovém strukturním motivu na Ústavu fyzikální chemie Vysoké školy chemicko-technologické v Praze. Druhá cena jde na Fyzikální ústav Matematicko – fyzikální fakulty Univerzity Karlovy, kde **Mgr. Marián Betušiak** studoval laserovými pulsy ovlivněnou efektivitu sběru náboje

v detektorech záření. Třetí cena putuje na Katedru fyzikální a makromolekulární chemie Přírodovědecké fakulty Univerzity Karlovy, kde **Mgr. Jana Hrnčířová** detekovala bilirubin a jeho fotochemický rozklad metodou povrchem zesíleného Ramanova rozptylu.

Ještě větší konkurence se tentokrát sešla v kategorii publikovaných prací a jejich souborů, celkem 10 příspěvků. Z nich porotě nejvíce imponoval rozsáhlý soubor **Ing. Pavlína Modlitbové, Ph.D.** ze Středoevropského technologického institutu a Vysokého učení technického v Brně aplikující spektroskopii laserem buzeného plazmatu na prvkové mapování rostlin a bioimaging s využitím nanočástic. Druhá cena putuje na stejné pracoviště a ve stejném oboru za metodický vývoj zpracování dat a jejím držitelem je **Ing. Erik Képeš**. Třetí ceny byly uděleny dvě: jedna zůstává také v Brně na Ústavu chemie Přírodovědecké fakulty Masarykovy Univerzity, pro **Mgr. Michaelu Kuchynka (Tvrdonovou), Ph.D.** za vývoj stanovení proteinů v biologických vzorcích pomocí LA-ICP-MS, druhá pak jde do Prahy **RNDr. Peteru Urbanovskému, Ph.D.** na Katedru anorganické chemie Přírodovědecké fakulty Univerzity Karlovy za soubor studující komplexy makrocyclických ligandů odvozených od cyklénu.

Vedle gratulace oceněným bych velmi rád poděkoval i autorům recenzí soutěžních prací za ochotu najít si čas na pečlivé posouzení jednotlivých příspěvků, které porotě pomáhá porovnat práce z velmi rozličných spektroskopických oborů.

Souhrny oceněných prací přinášíme dále. A už za půl roku se můžeme těšit na podobně skvělé práce nadějných diplomantů a mladých spektroskopiků v soutěži ročníku 2021, doufejme už zpátky v osvědčeném formátu s osobním představením soutěžních prací.

V letošním roce někteří naši členové slaví významná životní jubilea

Jubilantům upřímně blahopřejeme a přejeme pevné zdraví do dalších let

Spektroskopická společnost JMM

K 75. narozeninám Prof. Jiřího Dědiny

Jan Kratzer



Své významné životní jubileum oslavil Prof. RNDr. Jiří Dědina, DSc., dlouholetý vedoucí Oddělení stopové prvkové analýzy Ústavu analytické chemie AVČR. Milníky jeho pestré a úspěšné

profesní kariéry byly přehledně shrnuty již před lety v příspěvku ing. Miloslava Vobeckého v Bulletinu 152 (červenec 2011), proto se budu snažit být stručný a dovolím si být i osobní.

Jiří Dědina se narodil 18.7. 1946 v Praze. Vystudoval zde nejprve Střední průmyslovou školu chemickou (dnešní MSSCH v Křemencově ulici) a později Přírodovědeckou fakultu Univerzity Karlovy se specializací v oboru fyzikální chemie. Doktorské studium absolvoval v tehdejší Ústavu teoretických základů chemické techniky Československé akademie věd, předchůdci dnešního Ústavu chemických procesů AVČR, pod vedením prof. Jana Schramla. Málokdo možná ví, že jeho doktorská práce byla tematicky zaměřena na využití nukleárního Overhauserova efektu ve strukturní analýze organických sloučenin. V oboru atomové spektrometrie a stopové prvkové analýzy s využitím generování těkavých sloučenin, se kterým je jméno Jiřího Dědiny dnes neodmyslitelně spojeno, tak začal pracovat až po obhájení titulu CSc. v roce 1974. V areálu biologických pracovišť ČSAV v Praze-Krči pracoval krátce ve Fyziologickém ústavu ČSAV a později dlouhá léta působil ve stejném kampusu, ale v Ústavu nukleární biologie a radiochemie (ÚNBR ČSAV), kde byla právě zaváděna atomová absorpční spektrometrie jako relativně nová instrumentální metoda a dále využívána ke stanovení stopových prvků v biologických matricích pro účely výzkumu jejich metabolismu i toxických účinků (zejména Se, Hg a Cd). Vzhledem k odlišnému zaměření předchozího doktorského studia je pochopitelné, i když dnes těžko uvěřitelné, že před nástupním pohovorem na pracoviště v Krči nebyly jeho zkušenosti v oboru AAS nijak hluboké. Sám

jubilant dává k dobru historku o tom, jak si byl tehdy nechat od svých spolužáků z analytiky vysvětlit, co že to ta atomová absorpční spektrometrie vlastně je....

V roce 1993 je v rámci restrukturalizace pracovišť ČSAV krčská skupina ÚNBR věnující se stopové prvkové analýze organizačně začleněna pod Ústav analytické chemie AVČR (ÚIACH) sídlící v Brně jako jeho detašované pracoviště – Oddělení stopové prvkové analýzy, které prof. Dědina od roku 1993 vede až do roku 2019. Od roku 2007 až dosud je také členem Rady UIACH.

Oboru stopové prvkové analýzy a analytickému využití generování těkavých sloučenin zejména ve spojení s atomovou absorpcí a fluorescencí už zůstal věrný. Věnuje se mu více než 40 let a patří v něm k jedné z nejvýraznějších a vůdčích osobností. Podílel se na vývoji několika typů atomizátorů těkavých sloučenin na bázi miniaturních plamíneků pro AFS i vyhřívaných křemenných atomizátorů pro AAS. Formuloval také teorii radikálového mechanismu atomizace těkavých specií v těchto atomizátorech, jež je všeobecně akceptována. Jsem přesvědčen o tom, že zde velmi dobře zúročil svou vystudovanou specializaci, jež mu usnadnila nahlédnout fyzikálně-chemickou podstatu dějů. Koneckonců bude asi něco pravdy na tom, že analytická chemie je v podstatě aplikovaná chemie fyzikální...

Prof. Jiří Dědina je autorem více než stovky článků v impaktovaných časopisech (h-index 29), 11 patentů, řady přehledných článků a kapitol ve skriptech. Opomenout nelze ani monografii (J. Dědina, D.L.Tsalev, Hydride Generation Atomic Absorption Spectrometry, John Wiley&Sons, Inc., Chichester, 1995), jež je takovou „biblí“ v modrém přebalu pro všechny, kteří se hydridovou technikou a generováním těkavých sloučenin obecně zabývají. Citační ohlas jeho prací přesahuje hodnotu 3 000 a zvaných přednášek na mezinárodních konferencích přednesl více než tři desítky. Prof. Dědina byl hlavním řešitelem řady tuzemských (GAAV, GAČR) i mezinárodních grantových projektů. Opakovaně vyjížděl na dlouhodobé zahraniční pobyty, kde strávil celkově více než 3 roky. Z dlouhého výčtu jeho zahraničních spoluprací lze jmenovat ty s A. D'Ulivem (CNR, Itálie), W. Frechem (Umeå University, Švédsko), B. Welzem (Perkin Elmer, Německo a později UFSC, Brazílie), M. Arrudou (UNICAMP, Brazílie), E. Floresem (UFMS, Brazílie), R. Sturgeonem (NRC, Kanada), Y. Atamanem (METU, Turecko), H. Matusiewiczem (PUT, Polsko) a dalšími. Díky této rozsáhlé síti kontaktů po celém světě a dobrému renomé byla a je

laboratoř prof. Dědiny cílem mnoha zahraničních studentů a postdoků. Naopak tuzemští studenti a mladí vědečtí pracovníci pak mají díky tomu otevřené dveře do řady spolupracujících laboratoří v zahraničí. V roce 2008 získal prof. Dědina nejvyšší vědeckou hodnost DSc.

Kromě vědecké práce je Jiří Dědina činný i pedagogicky, vychoval řadu diplomantů a doktorandů, autora tohoto příspěvku nevyjímaje. Dlouhodobě se podílí na zajišťování výuky základních a hlavně specializovaných přednášek na PřF UK, v roce 2008 se zde habilitoval a v roce 2014 byl jmenován profesorem. Je členem oborové rady doktorského studijního programu analytické chemie na PřF UK i FCHI VŠCHT Praha. V naší Spektroskopické společnosti JMM je dlouholetým členem Hlavního výboru, pravidelným členem organizačního výboru česko-slovenských spektroskopických konferencí a také přednášejícím na společnostech pořádaných kurzech (základní a pokročilé kurzy AAS, přednášky v rámci Pražského analytického centra inovací – PACI). Je nositelem Medaile JMM (1998) i Medaile Mikuláše Konkoly-Thegeho (2016) udělované Slovenskou spektroskopickou společností.

V letech 2013-2017 byl členem Akademické rady AVČR a ve stejném období také působil jako člen hodnotícího panelu P206 (Analytická chemie) Grantové agentury ČR. Působí i v dalších pomocných orgánech Akademické rady AVČR, od roku 2017 je předsedou Komise pro obhajoby dizertací DSc. v oboru analytické chemie (AVČR) a od roku 2016 je členem Rady Programu na podporu mezinárodní spolupráce začínajících výzkumných pracovníků.

Moje první setkání s J. Dědinou proběhlo na jaře roku 2002, kdy jsem se do jeho laboratoře přišel představit jako diplomant. Za těch téměř 20 let jsem měl možnost ho poznat jako erudovaného člověka, vědce teoretika i zručného experimentátora, v řadě případů skoro až vizionáře. Nepotkáváme se však jen v laboratoři, proto ho znám i jako člověka společenského, díky němuž jsem osobně poznal spoustu zahraničních kolegů a inspirativních spolupracovníků, zábavného společníka na konferencích i post-konferenčních cestách. V neposlední řadě bych chtěl ocenit jeho dlouholeté úsilí, které věnoval a věnuje Oddělení stopové prvkové analýzy Ústavu analytické chemie AVČR, v.v.i. Po stránce instrumentální vždy dbal na to, aby přístrojové vybavení pracoviště bylo na špičkové úrovni, významně se zasloužil o to, že jen za poslední

desetiletí se přístrojový park rozrostl nejen o dva AAS spektrometry s kontinuálním zdrojem záření a vysokým rozlišením monochromátoru (HR-CS AAS), ale i ICP-MS s jednoduchým a později i trojitým kvadrupólem. Se stejnou péčí a starostlivostí jako k přístrojům pak Jirka Dědina přistupuje i ke svým spolupracovníkům, jimž se snaží zajistit komfortní podmínky na pracovišti, ať se jedná o studenta, postdoktoranda či vědeckého pracovníka.

Je mi ctí a potěšením, že můžu Jirkovi Dědinovi za sebe i ostatní kolegy, přátele a známé popřát hodně zdraví do dalších let, spokojenosti v osobním životě a neutuchajícího nadšení do další vědecké práce.

K 75. narozeninám Prof. Josefa Komárka

Utíká to...

Ivan Novotný

Prof. Josef Komárek pětasedmdesátníkem. Josef je už úctyhodnou řadu let pravidelným hostem této galerie pracovitých a úspěšných členů naší společnosti a akademické vědecké komunity. Pro nás dříve narozené to není zas tak dávno, jen před deseti lety, co prof. Otruba napsal do Bulletinu SS JMM č. 152 obsáhlé laudatio k jeho pětadesátinám a já pak k nedávným sedmdesátinám. Jeho životní a vědecká dráha je tam podrobně popsána, a protože už jsme, pevně doufám, v postcovidové době, můžeme si to stále snadno dostupně „přečíst“ online. A díky reverznímu pravidlu – zdravý duch dělá zdravé tělo mu stále můžeme gratulovat k dalšímu jubileu. Přesto všechno nemohu nezmínit jeho neutuchající věrnost atomové spektrometrii a dominujícímu tématu vlivu organických látek na proces atomizace, které ho provází celou odbornou kariérou. V oblasti speciace rtuti atomovou fluorescenční spektrometrií stále vychovává doktorandy a diplomanty. Je milé a záslužné, že svoji energii věnuje také intenzivní práci pro SS JMM, přednáší na kurzech AAS organizovaných SS JMM a v tomtéž rámci má vlastní workshop speciální analýzy. Není to jen „úplatek“ dnešní módní explozi ekologie, ale je tu jeho záslužný koníček a to jsou „včeličky“. Už Albert Einstein konstatoval zásadní důležitost těchto pracovitých tvorečků pro přežití lidstva. A právě v dnešní době nějak se vytrácející pracovitost, je základním rysem našeho kolegy Komárka. Takže, Josefe, jen tak dál.

Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie 2020

1. cena v kategorii diplomových prací

- **Ing. Karolína Salvadori**, Ústav fyzikální chemie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze
název práce: **Příprava, spektroskopické a elektrochemické studium nových potencionálních receptorů aniontů založených na močovinovém strukturním motivu**

2. cena v kategorii diplomových prací

- **Mgr. Marián Betušiaĸ**, Fyzikální ústav UK, Matematicko- fyzikální fakulta Univerzity Karlovy
název práce: **Ovlivnění efektivity sběru náboje v detektorech záření laserovými pulsy**

3. cena v kategorii diplomových prací

- **Mgr. Jana Hrnčířová**, Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy
název práce: **Optimalizace aktivních systémů tvořených Ag nanočásticemi pro detekci bilirubinu a monitorování jeho fotochemického rozkladu metodou povrchem zesíleného Ramanova rozptylu**

1. cena v kategorii publikovaných prací

- **Ing. Pavlína Modlitbová, Ph.D.**, Středoevropský technologický institut, Vysoké učení technické v Brně
název souboru prací: **Inovativní aplikace spektroskopie laserem buzeného plazmatu: od prvkového mapování rostlin po bioimaging s využitím nanočástic**

2. cena v kategorii publikovaných prací

- **Ing. Erik Képeš**, Středoevropský technologický institut, Vysoké učení technické v Brně
název souboru prací: **Development of Methodology for Laser-Induced Breakdown Spectroscopy**

3. ceny v kategorii publikovaných prací

- **RNDr. Peter Urbanovský, Ph.D.**, Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy
název souboru prací: **Komplexy makrocyclických ligandov odvozených od cyklénu majúce fosfinátovú pendantnú skupinu**
- **Mgr. Michaela Kuchynka (Tvrdoňová), Ph.D.**, Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity
název souboru prací: **Vývoj metod pro stanovení proteinů v biologických vzorcích se zaměřením na nádorová onemocnění pomocí LA-ICP-MS**

Příprava, spektroskopické a elektrochemické studium nových potencionálních receptorů aniontů založených na močovinovém strukturním motivu

Ing. Karolína Salvadori

Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i.,
Oddělení analytické chemie; e-mail: *salvadori@icpf.cas.cz*

Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i.,
Oddělení molekulární elektrochemie a katalýzy; e-mail: *karolina.salvadori@jh-inst.cas.cz*

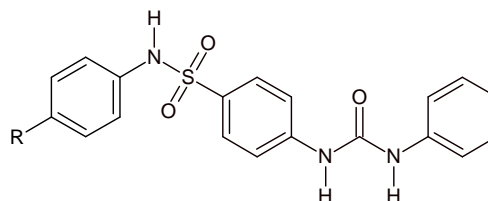
Vysoká škola chemicko-technologická v Praze
Ústav fyzikální chemie; e-mail: *Karolina.Salvadori@vscht.cz*

Tato diplomová práce vznikla ve spolupráci výše uvedených pracovišť, jež diplomantka v průběhu svého studia navštěvovala. Diplomová práce byla obhájena na Ústavu analytické chemie Vysoké školy chemicko-technologické v Praze.

Supramolekulární chemie představuje prudce se rozvíjející interdisciplinární obor propojující znalosti napříč chemickými disciplínami, díky čemuž se nachází v popředí zájmu vědecké komunity. Využívá znalostí z organické syntézy, analytické a fyzikální chemie. Mimo to se inspiruje biochemickými procesy a strukturami, které jsou nedílnou součástí živé přírody.^[1] Ze získaných poznatků pak čerpá inspiraci kupříkladu pro návrh vazebného místa receptorů malých molekul, kationtů a aniontů, přičemž vázání aniontů je předmětem mého výzkumu.

Anionty se v přírodě vyskytují přirozeně, avšak jejich rovnováha do značné míry závisí na činnosti člověka. Řada aniontů přirozeně se vyskytujících v přírodě tak zároveň patří k závažným environmentálním polutantům a látkám negativně ovlivňujícím organismy.^[2] Jedním z těchto příkladů jsou i fosforečnany, které jsou hojně používány v zemědělství, jelikož podporují růst rostlin. Z půdy se však tyto ionty mohou dostávat do povrchových vod, kde způsobují nárůst mikrobiální aktivity. Ta se projevuje zarůstáním vodních povrchů sinicemi - tvorbou vodního květu.^[3] Studium vázání aniontů však hraje roli rovněž v nepřeberné řadě biologických procesů. Přestože jsme si vědomi zcela zásadní a nezastupitelné funkce fosforečnanů v těle, jejich nadbytek může způsobit závažné zdravotní komplikace. Omezená odstranitelnost fosfátů z tělních tekutin u pacientů podstupujících hemodialýzu může vést kupříkladu ke kalcifikaci koronárních cév, chronické uremii, nebo jiným zdravotním potížím.^[4,5]

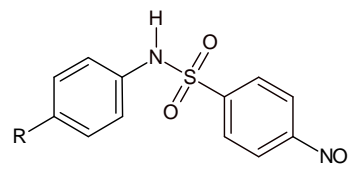
Z výše uvedených důvodů vyplývá, že snímání, rozpoznávání a odstraňování fosforečnanů by našlo uplatnění v řadě odvětví jako je medicína, či chemie životního prostředí. V rámci mé diplomové práce byla připravena série jednoduchých acyklických receptorů (obr. 1). Tyto molekuly disponují ve své struktuře močovinovým vazebným místem a jejich skelet je založený na modifikovaném nosylovém motivu. Připravené látky byly svojí strukturou inspirovány v nedávné studii calix[4]arenových derivátů^[6]. Ukázalo se, že tyto látky vykazují pozoruhodné vazebné vlastnosti a s řadou oxo-aniontů (jako jsou H_2PO_4^- či karboxylátové ionty) vytváří stabilní



Obr. 1: Obecná struktura připravených receptorů (-R = -COOEt, -CF₃, -H, -F a -OCH₃).

supramolekulární komplexy. Z logických důvodů tak vyvstala otázka, zda by i „volné“ receptory byly schopny tvorby podobně stabilních supramolekulárních komplexů.

Calixarenové receptory obsahují ve svých strukturách motiv esteru sulfonové kyseliny, tudíž jediným vazebným místem v těchto molekulách je močovinový motiv. V mém případě však připravené receptory **1** disponují vedle močovinového motivu i sulfonamidickou funkcí, která sama o sobě může sloužit jako donor vodíkové vazby, nebo může podléhat deprotonaci. Z důvodu hlubšího pochopení mnou studované problematiky se tak ukázalo jako vhodné zabývat se rovněž studiem vlastností různě substituovaných sulfonamidických meziproductů (obr. 2). K tomuto účelu bylo využito řady metod. Ke studiu vazebných a acidobazických vlastností jsem primárně použila spektroskopické techniky (NMR a UV-vis spektroskopii), vedle nichž jsem však využila i elektrochemické techniky (cyklická voltametrie a polarografie).



Obr. 2: Obecná struktura připravených meziproductů (-R = -COOEt, -CF₃, -H, -F, -OCH₃)

Po prozkoumání chování molekul prekurzorů **2**, jsem se ve své práci dále zaměřila na stanovení vazebných vlastností finálních receptorů **1**. Tyto hostitelské molekuly byly vybaveny rozličnými elektron-akceptorními a elektron-donorními substituenty -R, ovlivňujícími komplexační schopnosti receptorů. Ukázalo se, že na základě substituce lze ovlivnit rovnováhu deprotonace/komplexace, přičemž receptory disponující donorními substituenty vykazovaly vyšší asociační konstanty, zatímco receptory obsahující akceptorní skupiny inklinovaly přednostně k deprotonaci sulfonamidového vodíku. Na základě těchto zjištění jsem se dále zabývala stanovením asociačních vlastností receptoru na bázi *p*-anisidinu (**1-OCH₃**). Výsledky měření poukazují na příznivou selektivitu tohoto receptoru k fosforečnanům v porovnání s jinými biogenními anionty (jako Cl⁻, NO₃⁻, či HSO₄⁻) a to i v prostředí kompetitivního rozpouštědla (DMSO).

$$K_{As}(\mathbf{1-OCH_3}) = 6200 \pm 5 \% \quad \text{pro H}_2\text{PO}_4^-$$

$$K_{As}(\mathbf{1-OCH_3}) = 5 \pm 3 \% \quad \text{pro NO}_3^-$$

V rámci této práce bylo rovněž prokázáno, že problém deprotonace lze i zcela překonat, a to alkyací sulfonamidového vodíku v počátečním stupni syntézy. Ukázalo se, že substituce kyselého vodíku methylovou skupinou vede k receptorům s vynikajícími komplexačními vlastnostmi. Rovněž se však ukázalo, že deprotonaci lze i prakticky využít při čištění finálních produktů **1**, nebo ji lze využít při připojení receptoru k vhodným kotvicím skupinám, které by umožnily navázání těchto receptorů na povrchy, nebo jiné substráty.

Literatura

- [1] Lhoták, P.; Stibor, I.: *Molekulární design*, VŠCHT Praha: Praha, 1997.
- [2] Sessler, J. L.; Gale, P. A.; Cho, W. *Anion receptor chemistry*; The Royal Society of Chemistry: UK, 2006.
- [3] **a)** Ansari A. A., Gill S. S.: *Eutrophication: causes, consequences and control*, Springer, Dordrecht, New York, 2011.; **b)** Khan, F. A.; Ansari, A. A. Eutrophication: an ecological vision. *The Botanical Review* **2005**, *71*, 449–482
- [4] **a)** Cozzolino, M.; Ciceri, P.; Galassi, A.; et al. *Toxins* **2019**, *11*, 213. **b)** Mareš, J. Cévní kalcifikace a kostní demineralizace u pacientů s chronickým selháním ledvin. Disertační práce, Univerzita Karlova, Lékařská fakulta v Plzni, 2009.
- [5] Sarkozi, L.; Szabo, A. *Clin. Physiol. Biochem.* **7**, **1989**, 184 – 188.
- [6] Klejch, T.; Slavíček, J.; Hudeček, O.; Eigner, V.; Gutierrez, N. A.; Cuřínová, P.; Lhoták, P. *New J. Chem.* **2016**, *40*, 7935–7942.

Ovlivnění efektivity sběru náboje v detektorech záření laserovými pulsy.

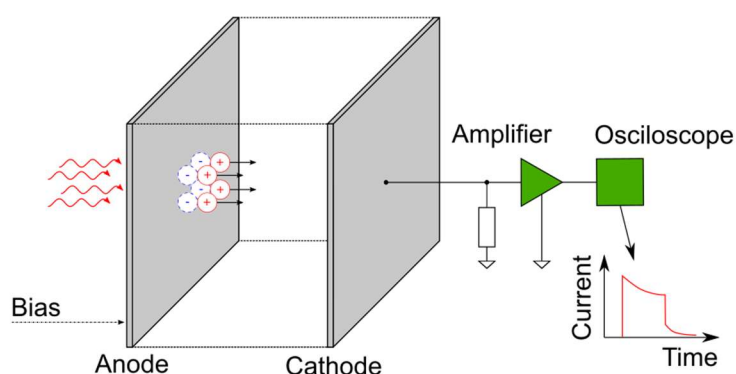
Mgr. Marián Betušiak

Fyzikální ústav Univerzity Karlovy
Oddělení optoelektroniky a magnetooptiky
E-mail: *majo.betusiak@gmail.com*

Keď boli polovodičové detektory v 60-tych rokoch predstavené, ich hlavné použitie bolo v energetickej spektroskopii. Vďaka ich dramaticky zlepšujúcemu sa energetickému rozlíšeniu spôsobili revolúciu v gama spektroskopii a spektroskopii nabitých častíc. Po rozšírení polovodičových detektorov do ostatných odvetví sa dôraz tiež začal klásť na funkčnosť detektoru pri izbovej teplote a tiež na ďalšie zvyšovanie pomeru signál-šum. Napriek veľkému pokroku v raste polovodičových kryštálov a príprave kontaktov, je formovanie priestorového náboja jeden z problémov, ktoré výrazne ovplyvňujú efektívnosť zberu náboja a časovú stabilitu polovodičových detektorov a výrazným spôsobom limitujú rozšírenie polovodičových aplikácií v priemysle.

Táto diplomová práca vznikla na oddelení Optoelektroniky a magnetooptiky Fyzikálneho ústavu UK. Jej cieľom bolo skúmať vplyv formovania priestorového náboja (polarizácia detektoru) a dodatočného osvetlenia na efektívnosť zberu generovaných nosičov náboja. Pre vyhodnocovanie transportných vlastností detektoru sme použili metódu laserom-indukovaných transienných prúdov (Laser-induced current technique L-TCT) v kombinácii so simuláciou Monte-Carlo pre samotné určenie transportných parametrov. L-TCT (pri použití fotónov s energiou väčšou ako šírka zakázaného pásu polovodiča) nám narozdiel od štandardne použíwanej alfa a gama spektroskopie poskytuje aj bohaté informácie o profile vnútorného elektrického poľa a dobe života nosičov náboja.

Metóda L-TCT je založená na generácii nosičov náboja sondovacím laserovým pulzom. Tieto nosiče následne v priloženom elektrickom poli driftujú k príslušným elektródam čím indukujú meraný prúdový pulz (schématicky zobrazené na Obr. 1). Vďaka použitiu pulzného napätia a presnej korelácii napäťového a laserového pulzu je táto metóda vhodná ku skúmaniu dynamiky tvorby priestorového náboja s veľkým časovým rozlíšením.

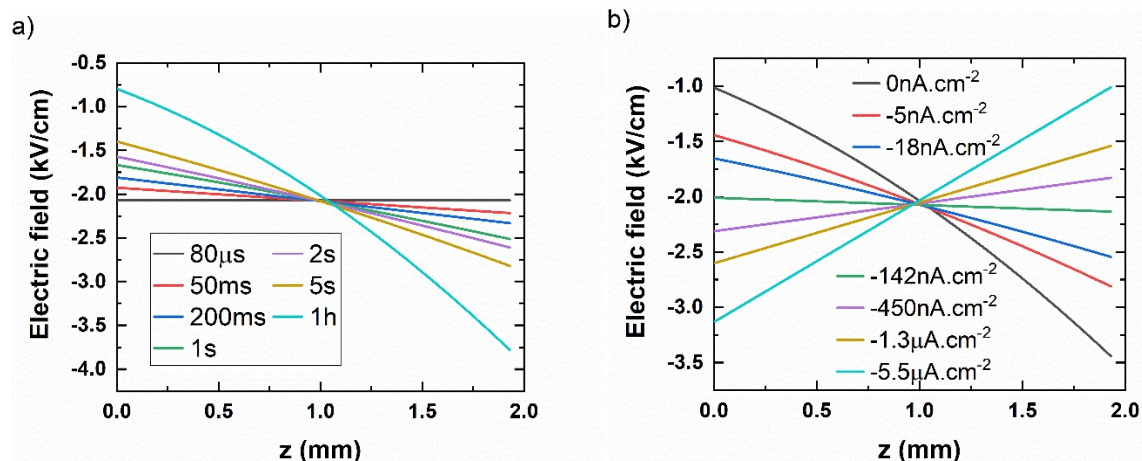


Obr. 1: Princíp fungovania metódy L-TCT

V samotnej práci sme skúmali detektor vyrobený zo semi-izolačného p-typového CdZnTe (Redlen Technologies) určeného do vysokých röntgenových tokov (použitie v CT). Vzhľadom na to, že doba života nosičov (a teda aj efektívnosť zberu náboja) môže byť ovplyvnená prítomnosťou priestorového náboja, charakterizácia detektoru prebiehala v troch fázach – v nepolarizovanom stave, v čiastočne polarizovanom stave (časový vývoj polarizácie

detektoru) a charakterizácie vplyvu dodatočného osvetlenia. V druhej fáze sme zistili, že sa v dôsledku usmerňujúcich kontaktov (depleičná anóda) v detektore formuje záporný priestorový náboj (Obr. 2a), ktorý výrazne znižuje dobu života dier. Tiež sme zistili, že sformovaný priestorový náboj je pre napätia do 200V dostatočne veľký pre odtienenie priloženého elektrického poľa a sformovanie neaktívnej vrstvy (deadlayer). V poslednej fáze anódu (katódu) detektoru osvetľovali nadgapovým svetlom rôznych intenzít. Osvetľovanie katódy však nevedlo k zásadnej zmene profilu elektrického poľa. Osvetľovanie anódy, na druhú stranu, zase viedlo k prudkým zmenám profilu vnútorného elektrického poľa (Obr. 2b) aj doby života elektrónov a dier. Najvyššie intenzity osvetlenia dokonca viedli k zmene znamienka priestorového náboja, čo prisudzujeme prítomnosti rekombinačnej hladiny. Najdôležitejším výsledkom bol fakt, že pre každé napätie sa nám podarilo nájsť takú intenzitu osvetlenia, kedy sa predtým spolarizovaný detektor (aj po sformovaní deadlayer) depolarizoval a pri danom osvetlení bol tento stav stabilný v čase a súčasne tiež nedošlo k výraznému nárastu (foto) prúdu detektorom.

Ukazuje sa teda, že dodatočné osvetlenie detektoru je vhodný spôsob, akým potlačiť polarizáciu detektoru (vzhľadom na stochastickosť alfa a gama žiarenia) a že v kombinácii s L-TCT vytvára vynikajúcu techniku pre skúmanie rôznych režimov kontaktu.



Obr. 2: a) Časový vývoj profilu vnútorného elektrického poľa v neosvetlenom detektore. b) Závislosť vnútorného elektrického poľa po osvetlení anódy na hustote fotoprúdu.

Práca je významná predovšetkým svojím komplexným prístupom k určaniu fyzikálnych faktorov ovplyvňujúcich výsledné vlastnosti vyrobeného detektoru i s konkrétnou štruktúrou kovových elektród. Výsledky práce boli prezentované na medzinárodnej konferencii 26th International Symposium on Room-Temperature Semiconductor X-Ray and Gamma-Ray Detectors 2019 v Manchesteru. Výsledky tejto práce boli tiež zaslané firme Redlen Technologies a sú ďalej dopĺňované a pripravované k spoločnej publikácii.

Optimalizace aktivních systémů tvořených Ag nanočásticemi pro detekci bilirubinu a monitorování jeho fotochemického rozkladu metodou povrchem zesíleného Ramanova rozptylu

Mgr. Jana Hrnčířová

Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta
Katedra fyzikální a makromolekulární chemie
E-mail: hrncirovaj@natur.cuni.cz

Jednou ze současných oblastí výzkumu ve fotochemii je využití solární energie pro iniciaci fotochemických transformací. Velmi známý příklad denním světlem vyvolané fotochemické reakce je fotodekompozice bilirubinu (BR), který patří mezi důležité žlučové pigmenty v lidském těle [1]. Hlavní motivací studia této biologicky významné molekuly je efektivní léčba mnoha nemocí vyvolaných poruchami metabolismu BR, například novorozenecké žloutenky, a rovněž objasnění průběhu a výsledku jeho fotochemických transformací, t.j. fotoizomerace, fotooxidace na biliverdin (BV) a fotodegradace. Jedním z parametrů ovlivňující daný mechanismus fotochemické transformace BR je polarita rozpouštědla. Pro BR v alkalickém vodném prostředí jsou nejpravděpodobnějšími reakcemi fotoizomerace a fotodegradace, zatímco v dichlorometanu (CH_2Cl_2) lze očekávat spíše fotooxidaci BR na BV.

Spektroskopie povrchem-zesíleného Ramanova rozptylu (Surface-enhanced Raman scattering, SERS [2]) BR v systémech s plasmonickými (např. Ag) nanostrukturami se v předkládané diplomové práci ukázala být vhodnou metodou selektivní a citlivé detekce BR bez iniciace jeho fotochemického rozkladu. Díky zesílení Ramanova rozptylu BR elektromagnetickým mechanismem SERSu je totiž možno zvolit pro detekci BR takovou excitační vlnovou délku, která splňuje podmínku plasmonové rezonance dané Ag nanostrukturou, avšak nespadá do oblasti pásu v elektronovém absorpčním spektru BR (s maximem 460 nm), a tudíž nemůže iniciovat fotochemickou transformaci BR. Obdobným způsobem byla pak SERS spektroskopie v práci dále využita i pro *ex-situ* detekci produktu fotochemické transformace BR, konkrétně BV.

Ag nanohoubovité agregáty [3] vytvořené 3-dimenzionálním uspořádáním fúzovaných fraktálních agregátů Ag nanočástic (NČ) s molekulami BR začleněných do jejich vnitřní struktury s pomocí HCl nebo NaCl jako pre-agregačního činidla se ukázaly být vhodnými systémy pro SERS spektrální detekci amfifilních molekul BR inkorporovaných z jejich roztoků v různých rozpouštědlech, konkrétně z alkalického vodného roztoku a z roztoků v dimethylsulfoxidu (DMSO) a CH_2Cl_2 . Možnost přípravy Ag nanohoubovitých agregátů s amfifilním adsorbátem inkorporovaným do jejich vnitřní struktury z roztoků v DMSO byla nově prokázána v této diplomové práci.

Protonovaná (neutrální) i deprotonovaná (dianiontová) forma BR byly identifikovány na základě jejich charakteristických pásů v SERS spektrech měřených při excitačních vlnových délkách v rozmezí 532-780 nm. Dále byly určeny velmi nízké koncentrační hodnoty mezi SERS spektrální detekce (SERS LODs) protonizované formy BR inkorporovaného do Ag nanohoubovitého agregátu s využitím HCl jako pre-agregačního činidla. Konkrétně, hodnota SERS LOD BR inkorporovaného z jeho alkalického vodného roztoku je $1 \cdot 10^{-8}$ M při excitační vlnové délce 532 nm, což představuje dosud nejnižší dosaženou hodnotu SERS LOD BR. Stejných hodnot SERS LODs bylo dosaženo pro BR včleněný do Ag nanohoubovitého agregátu z roztoku v DMSO při excitacích 532 nm a 633 nm. Při inkorporaci BR z jeho

roztoku v CH_2Cl_2 bylo dosaženo hodnoty SERS LOD $1 \cdot 10^{-6}$ M při excitaci 532 nm a hodnoty $1 \cdot 10^{-7}$ M při excitaci 780 nm.

Dianiontová (deprotonovaná) forma adsorbovaného BR byla detegována v Ag nanohoubovitých agregátech, do kterých byl BR inkorporován z alkalického vodného roztoku s použitím NaCl jako pre-agregačního činidla a její SERS LOD je $1 \cdot 10^{-6}$ M při excitaci 532 nm. Pro detekci této formy BR bez nutnosti použití pre-agregačního činidla byla rovněž vyvinuta metoda přípravy Ag nanočásticového filmu s včleněnými molekulami BR. Výhodou této metody je snadnější začleňování dianiontových molekul do Ag nanočásticového systému, neboť nedochází k repulzi mezi dianiontovým analytem a adsorbovanými chloridovými ionty z pre-agregačního činidla.

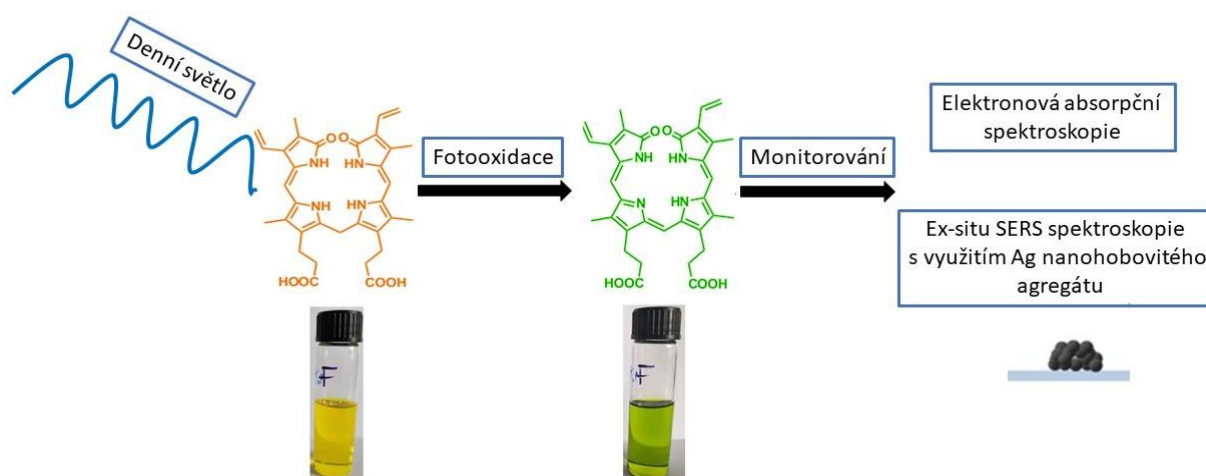
Další část diplomové práce se zabývá *ex-situ* SERS spektrálním monitorováním denním světlem indukovaných fotochemických transformací BR. Za tímto účelem byla vyvinuta nová metodika pro inkorporaci BR a vzorků reakční směsi o velmi malých objemech (5 μl) odebíraných z roztoků v CH_2Cl_2 a alkalických vodných roztoků v průběhu fotochemických transformací BR. Pro sledování vývoje a výsledku fotochemické transformace BR v CH_2Cl_2 a v alkalickém vodném roztoku bylo *ex-situ* SERS spektrální monitorování časově synchronizováno s monitorováním metodou elektronové absorpční spektroskopie. Na základě časového vývoje *ex-situ* SERS spekter a elektronových absorpčních spekter byl detegován BV jako finální produkt denním světlem vyvolané fotochemické transformace BR v CH_2Cl_2 a jako meziprodukt složitějších fotochemických transformací BR v alkalickém vodném roztoku. Zatímco z časového vývoje elektronových absorpčních spekter bylo možné určit jen některé indicie vzniku BV jako meziproduktu při fotochemii BR v alkalickém vodném roztoku, SERS spektrální monitorování tuto skutečnost potvrdilo na základě detekce charakteristických spektrálních pásů BV. SERS spektroskopie se zde tedy ukázala jako vhodný nástroj pro detekci jak nízkých koncentrací BR, tak produktů nebo intermediátů jeho fotochemických transformací.

Diplomová práce byla vypracována s finanční podporou grantem GAUK, projekt (1100120).

[1] Matouš, B. *Základy Lékařské Chemie a Biochemie*; Galén: Praha, 2010.

[2] Procházka, M. *Surface-Enhanced Raman Spectroscopy-Bioanalytical, Biomolecular and Medical Applications*; Springer International Publishing: Switzerland, 2016.

[3] Sutrová, V.; Šloufová, I.; Nevalová, M.; Vlčková, B. *J. Raman Spectrosc.* **2015**, *46* (6), 559–565.



Obr. 1: Grafické znázornění denním světlem vyvolané fotooxidace bilirubinu na biliverdin monitorované metodami elektronové absorpční a SERS spektroskopie

Inovativní aplikace spektroskopie laserem buzeného plazmatu: od prvkového mapování rostlin po bioimaging s využitím nanočástic

Ing. Pavlína Modlitbová, Ph.D.

Vysoké učení technické v Brně, Středoevropský technologický institut

E-mail: pavlina.modlitbova@ceitec.vutbr.cz

Seznam soutěžních prací:

1. **Modlitbová, P.;** Pořízka P.; Kaiser, J.

Laser-induced breakdown spectroscopy as a promising tool in the elemental bioimaging of plant tissues.

Trends Anal. Chem., **2020**, 2, 60-69.

2. **Modlitbová, P.;** Pořízka P.; Střítežská, S.; Zezulka, Š.; Kummerová, M.; Novotný, K.; Kaiser, J.

Detail investigation of toxicity, bioaccumulation, and translocation of Cd-based quantum dots and Cd salt in white mustard.

Chemosphere, **2020**, 251, 126174.

3. **Modlitbová, P.;** Hlaváček, A.; Švestková, T.; Pořízka P.; Šimoníková, L.; Novotný, K.; Kaiser, J.

The effects of photon-upconversion nanoparticles on the growth of radish and duckweed: Bioaccumulation, imaging, and spectroscopic studies.

Chemosphere, **2019**, 225, 723-734.

4. **Modlitbová, P.;** Farka, Z.; Pastucha, M.; Pořízka P.; Novotný, K.; Skládal., P.; Kaiser, J.
Laser-Induced Breakdown Spectroscopy as a Novel Readout Method for Nanoparticle-Based Immunoassays.

Microchim. Acta, **2019**, 629, 186-196.

5. **Modlitbová, P.;** Novotný, K.; Pořízka, P.; Klus, J.; Lubal, P.; Zlámalová-Gargošová, H.; Kaiser, J.

Comparative investigation of toxicity and bioaccumulation of Cd-based quantum dots and Cd salt in freshwater plant *Lemna minor* L.

Ecotoxicol. Environ. Saf., **2018**, 147, 334-341.

6. **Škarková, P.;** Novotný, K.; Lubal, P.; Jebavá, A.; Pořízka, P.; Klus, J.; Farka, Z.; Hrdlička, A.; Kaiser, J.

2d distribution mapping of quantum dots injected onto filtration paper by laser-induced breakdown spectroscopy.

Spectrochim. Acta. B., **2017**, 131, 107-114.

Předložený soubor prací demonstruje nové možnosti využití metody Spektroskopie laserem buzeného plazmatu (LIBS; z angl. Laser Induced Breakdown Spectroscopy) k prostorové lokalizaci vybraných prvků (Au, Ag, Cd, Y, Yb a Er) přítomných ve formě nanočástic nebo iontů a to v/na rozmanitých pevných matricích (filtrační papír, polystyrenová mikrotitrační destička, různé druhy rostlinných vzorků).

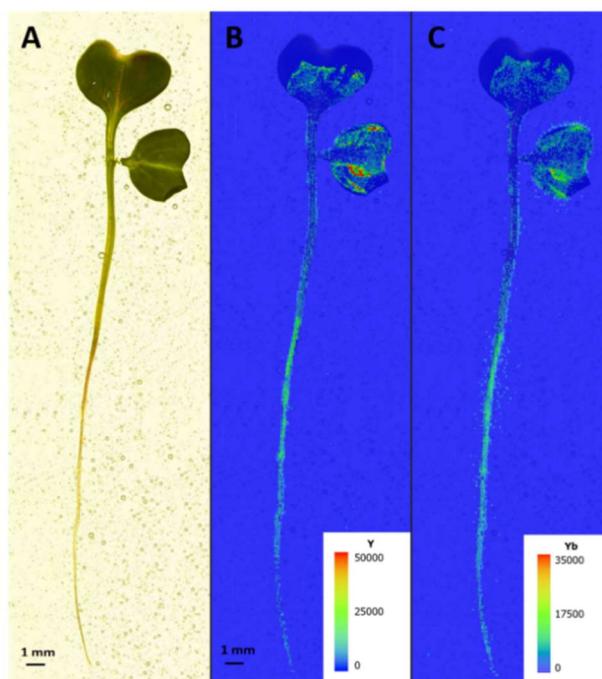
Ve třech předložených studiích [2,3,5] byly vhodné modelové rostliny (*Lemna minor*, *Raphanus sativus* a *Sinapis alba*) exponovány vybranými kontaminanty (CdTe kvantové tečky, NaYF_4 foton upkonverzní nanočástic, CdCl_2 , YCl_3 , YbCl_3 a ErCl_3) v přesně definovaných testech toxicity. Na konci těchto expozičních cyklů byly kromě běžných makroskopických a biochemických end-pointů detailně sledovány místa bioakumulace testovaných kontaminantů a také fyzikálně chemické vlastnosti testovaných disperzí nanočástic. Všechny tyto informace společně pak podaly souhrnný a tolik potřebný obraz o působení vybraných látek na modelové organismy. V rámci prezentovaných prací je vidět významný pokrok v LIBS experimentech, kterého bylo dosaženo v krátkém časovém úseku tří let, a to jak v oblasti rozlišení, posun z 200 μm [5] na 25 μm [2], v počtu pixelů obsažených v jedné mapě z 400 [5] na 66 000 [2] (např. na Obr. 1 jsou zobrazeny cca 50 000 pixelové mapy [3]) a v množství sledovaných analytů od jednoprvkové analýzy (Cd) [5] k více prvkovému zobrazování (Y, Yb, Er) [3].

Praktické zkušenosti s analýzou rostlin, doplněné obsáhlou literární rešerší byly následně sumarizovány v přehledovém článku [1], kde kromě zobrazení rozličných prvků v rostlinách, byla nezanedbatelná část práce věnována přípravě vzorků před samotnou analýzou. Tento krok je totiž nutné optimalizovat jak pro každý rostlinný druh, tak pro sledovaný typ analytu. Práce byla dále doplněna kritickým porovnáním metody LIBS s ostatními zobrazovacími prvkovými technikami.

Do soutěžního souboru prací jsem zahrнула i tzv. Tag-LIBS [4], který byl úspěšně použit v imunologickém stanovení lidského séra albuminu, na základě detekce streptavidinem potažených stříbrných nanočástic, které byly právě použity ke značení v sendvičovém uspořádání testu ELISA. Přičemž detekce Ag ze dna mikrotitračních destiček (hloubka 12 mm) byla náročná na sestavení fokusační a sběrné optiky, tak aby nedocházelo k ovlivnění detekovaného signálu u okraje jamky. Další výzvou zde bylo konkurovat

rutině používaným fluorescenčním metodám jak v citlivosti, tak i v šířce dynamického rozsahu metody, v obou specifikacích LIBS metoda prokázala konkurenční schopnost a zajímavou alternativu pro detekci nefluorescenčních značek v ELISA testech.

V nejstarší práci z uvedeného souboru [6] bylo detekováno kadmium, a to jak ve formě iontů, tak ve formě nanočástic, po jejich aplikaci na filtrační papír za různých experimentálních podmínek (pH, přítomnost měďnatých iontů). Obě tyto skutečnosti měly zásadní vliv na distribuci analytu na povrchu filtračního papíru a následně i na velikost detekovaného signálu, tyto skutečnosti tak mohou být využity v oblastech papírové chromatografie, jak je v předložené práci diskutováno.



Obr. 1. (A) Fotografie *R. sativus* po expozici NaYF_4 nanočástic ($c = 10 \mu\text{g/mL}$) před LIBS měřením. LIBS mapy zkonstruované pro Y (B) a pro Yb (C) [3].

Development of Methodology for Laser-Induced Breakdown Spectroscopy

Ing. Erik Képeš

Brno University of Technology
Central European Institute of Technology
E-mail: *kepes@vutbr.cz*

List of the contributed works:

1. Képeš, E.; Pořízka, P.; Klus, J.; Modlitbová, P.; Kaiser, J.
Influence of baseline subtraction on laser-induced breakdown spectroscopic data.
J. Anal. At. Spectrom. **2018**, *33*, 2107-2115.
2. Képeš, E.; Pořízka, P.; Kaiser, J.
On the application of bootstrapping to laser-induced breakdown spectroscopy data.
J. Anal. At. Spectrom. **2019**, *34*, 2411-2419.
3. Képeš, E.; Vrábek, J.; Střítežská, S.; Pořízka, P.; Kaiser, J.
Benchmark classification dataset for laser-induced breakdown spectroscopy.
Sci. Data **2020**, *7*, 53.
4. Vrábek, J.; Képeš, E.; Duponchel, L.; Motto-Ros, V.; Fabre, C.; Connemann, S.; Schreckenber, F.; Riebe, D.; Junjuri, R.; Gundawar, M.K.; Tan, X.; Pořízka, P.; Kaiser, J.
Classification of challenging LIBS soil sample data - EMSLIBS contest.
Spectrochim. Acta B **2020**, *169*, 105872.
5. Képeš, E.; Gornushkin, I.; Pořízka, P.; Kaiser, J.
Tomography of double-pulse laser-induced plasmas in the orthogonal geometry.
Anal. Chim. Acta **2020**, *1135*, 1-11.
6. Képeš, E.; Gornushkin, I.; Pořízka, P.; Kaiser, J.
Spatiotemporal spectroscopic characterization of plasmas induced by non-orthogonal laser ablation.
Analyst **2020** *146*, 920-929.

This collection of works aims at developing a robust methodology for processing laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) datasets via elucidating the statistical behavior of LIBS spectra. LIBS is one of the most prominent atomic emission spectroscopic methods for *in-situ* applications owing to its unique properties: LIBS does not require extensive sample preparation, it is capable of remote analysis (up to several tens of meters), and it offers real-time results. In addition, LIBS is often the preferred choice for hyperspectral imaging applications, as LIBS excels in sampling speed (reaching up to 1 kHz). Moreover, *state-of-the-art* laboratory LIBS instrumentation are capable of mapping with a lateral resolution in the range of tens of μm . Lastly, LIBS instrumentation is generally robust.

Nevertheless, LIBS has several limitations. Namely, **LIBS signal is generally non-linear**; a linear change in the sample composition can result in a non-linear change in the signal. This is attributed to various matrix effects and signal saturation. Moreover, LIBS signal is often characterized by **pronounced shot-to-shot variation** resulting from the complex laser-material and laser-plasma interactions. Lastly, **LIBS spectra are high-dimensional** (they consist of thousands of variables, i.e., resolved wavelengths), **sparse** (spectral ranges with no emission lines carry no valuable information), and often carry **redundant** information (some features are highly correlated). Thus, the processing of datasets produced by modern LIBS applications requires the handling of **large quantities of high-dimensional non-linear sparse data that exhibit considerable variance**.

For these reasons, current analysis is done exclusively in a multivariate manner. Nevertheless, no universal approach has emerged. Instead, similarly to the measurement parameters, the processing of LIBS data also became application specific. Hence, this collection of works tries to develop a generalized methodology for processing LIBS data. A major step towards this is the complete understanding of the multivariate statistical behavior of LIBS spectra in various settings and the impact of different processing steps.

The first work investigates the influence of various baseline correction approaches on the limit of detection of LIBS. Baseline correction aims to remove the contribution of continuous radiation from the spectra, which carries no material-specific information. We showed that baseline correction combined with appropriate gating of the detection can lead to enhanced limits of detection.

The second work translates the central limit theorem from statistics to LIBS and shows its implications to LIBS spectral processing. Most importantly, we showed that applying bootstrapping (randomized resampling with replacement) to LIBS data can correct the distribution of the data, yielding normally distributed intensity values. Consequently, this leads to the more truthful determination of error values in linear multivariate models, which commonly assume that the analyzed data is normally distributed (i.e., follows the Gaussian distribution).

The third work is a data descriptor of a dataset consisting of 138 soil samples. The dataset was created with the aim of unifying LIBS data processing pipelines for classification applications (i.e., for qualitative analysis). Novel classification approaches are frequently reported in the LIBS literature. However, they are seldom compared to existing methods. Thus, we created an openly available benchmark dataset that enables the comparison of different approaches.

The dataset was subject to an international classification contest whose results are summarized in **the fourth work**. The work showed that spectroscopic expertise coupled with linear models can outperform modern *state-of-the-art* machine learning models. In addition, the application of some of the most recently developed machine learning approaches to LIBS data was also demonstrated.

The last two works employ time-resolved optical emission tomography to characterize asymmetric laser-induced plasmas (LIPs) both spatially and temporally. The emission of optically thin plasmas observed from a wide range of angles can be used to reconstruct the three-dimensional distribution of various properties of LIPs

(e.g., emissivity of species, temperature, electron number density). **The fifth work** studied double-pulsed LIPs. Double-pulse LIBS is often employed as it offers improved detection limits. We found that pre-ablation in the orthogonal geometry (i.e., when a laser pulse parallel to the sample surface is used to create an air plasma above the sample surface prior to the ablation pulse) yields more stable and larger plasmas.

The sixth work in the collection reports the characterization of LIPs induced using non-orthogonal ablation angles. This measurement setting is commonly encountered in *in-situ* applications, where orthogonal ablation cannot be ensured. We found that while non-orthogonal ablation has little impact on the distribution of atomic species in the plasma, it significantly affects the distribution of ionic species (Figure 1).

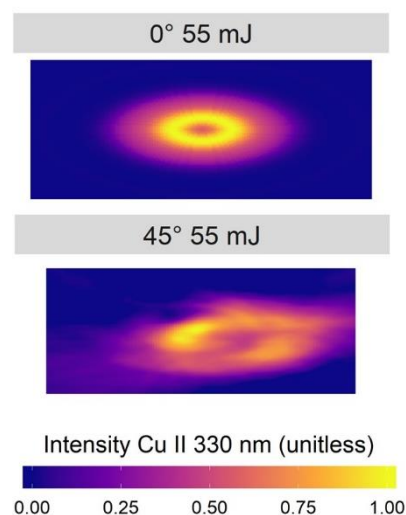


Figure 1 Distribution of a Cu II emission line's intensity scaled to the 0-1 intensity range 0.2 mm above the sample surface with orthogonal (top) and non-orthogonal (bottom) ablation angles.

Komplexy makrocyclických ligandov odvodených od cyklénu majúce fosfinátovú pendantnú skupinu

RNDr. Peter Urbanovský, Ph.D.

Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Praha.

E-mail: *peter.urbanovsky@centrum.sk*

Zoznam súťažných prác:

Urbanovský, P. Complexes of cyclen-based macrocyclic ligands with a phosphinate pendant arm. *Doctoral Thesis*, Faculty of Sciences, Charles University, Prague, **2020**.

Doteraz publikované práce vychádzajúce z tejto dizertačnej práce:

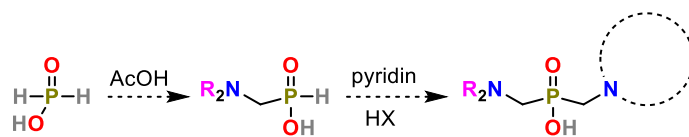
1. Urbanovsky, P.; Kotek, J.; Cisarova, I.; Hermann, P. Selective and clean synthesis of aminoalkyl-*H*-phosphinic acids from hypophosphorous acid by phospho-Mannich reaction. *RSC Adv.* **2020**, *10*, 21329–21349.

2. Urbanovsky, P.; Kotek, J.; Carniato, F.; Botta, M.; Hermann, P. Lanthanide complexes of DO3AP–(dibenzylamino)methylphosphinate: effect of protonation of the dibenzylamino group on the water exchange rate and the binding of human serum albumin. *Inorg. Chem.* **2019**, *58*, 5196–5210.

3. Urbanovsky, P.; Kotek, J.; Cisarova, I.; Hermann, P. The solid-state structures and ligand cavity evaluation of lanthanide(III) complexes of a DOTA analogue with a (dibenzylamino)methyl-phosphinate pendant arm. *Dalton Trans.* **2020**, *49*, 1555–1569.

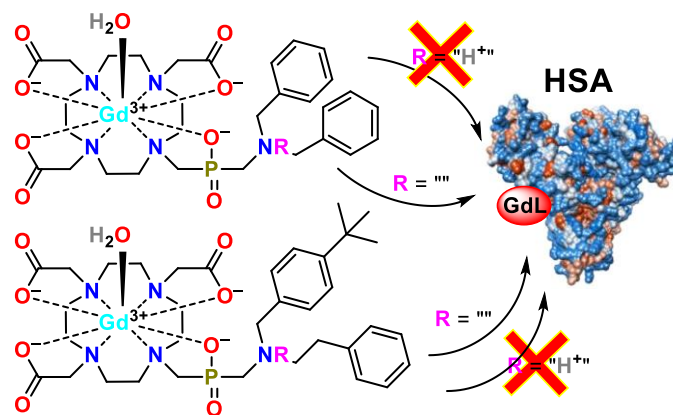
Súhrn prác vychádza z dizertačného projektu, ktorý bol venovaný ligandom, ktorých komplexy by mali mať v roztoku vysokú „relaxivitu“, a tá by mala byť „ladená“ pomocou spomalenia molekulárneho pohybu týchto komplexov: (i) väzbou na ľudský sérový albumín (HSA) alebo (ii) zväčšením molekulárneho objemu týchto komplexov. „Relaxivita“ je merateľný kvantitatívny parameter, ktorý vyjadruje účinnosť (tj. mieru urýchlenia relaxácie protónov vody) komplexov používaných ako kontrastné látky v tomografii magnetickej rezonancii (MRI). Čím je vyššia, tým viac je urýchlená relaxácia protónov vody a tým lepšie bude daný komplex slúžiť ako kontrastná látka v MRI.

Aby bolo možné tieto ligandy pripraviť, bolo najprv nutné nájsť spôsob prípravy východiskových látok obsahujúcich potrebné substituenty a následne nájsť spôsob, ako ich pripojiť na makrocyclický skelet za vzniku žiadaných ligandov. Navrhnutá nová metóda prípravy východiskových fosfinových aminokyselín (*Obr. 1*) podstatne zlepšuje všeobecnú dostupnosť týchto prekursorov. Na základe otestovania veľkého množstva substrátov a reakčných podmienok boli nájsené také podmienky, ktoré umožnili získať tieto látky vo veľmi vysokých výťažkoch a v excelentnej čistote. Táto metodika viedla k príprave niekoľko unikátnych štruktúrnych motívov a pomocou NMR bol sledovaný a navrhnutý mechanizmus tejto reakcie (viď rozsiahla publikácia *RSC Adv.* **2020**, *10*, 21329–21349). Pre zavedenie fosfinových skupín do makrocyclov boli navrhnuté (a pre mnoho kombinácií rozdielnych makrocyclov a fosfinových kyselín i otestované) vylepšené reakčné postupy, ktoré viedli k takmer kvantitatívnym výťažkom reakcií a sú univerzálne pre prípravu aminofosforových kyselín (*Obr. 1*). Reakcia bola skúmaná pomocou NMR a bol navrhnutý jej mechanizmus. Vďaka tomuto postupu sa výrazne zlepšuje dostupnosť makrocyclov modifikovaných fosforovými pendantnými ramenami. Tento postup taktiež umožnil syntézu unikátneho ditopického ligandu (tj. ligand, ktorý má dve miesta pre väzbu kovového iónu, viď nižšie).



Obr. 1 – Schéma prípravy aminofosfinovej kyseliny a jej naviazanie na makrocyclický skelet

Tieto syntetické postupy umožnili syntézu ligandov a ich lanthanoidových komplexov, v ktorých je väzba na HSA určovaná protonizáciou aminoskupiny (tj. vznikom kladného náboja) na periférii komplexu (*Obr. 2*). Ideou bolo, že komplex ligandu deprotonizovaného na aminoskupine sa bude viazať na HSA dobre, čo povedie k jeho zvýšenej účinnosti ako kontrastnej látky pre MRI. Protonizovaný komplex s kladným nábojom na postrannej aminoskupine sa bude viazať na HSA podstatne horšie, a toto povedie k zmene (zhoršeniu) kontrastu v MRI. Táto hypotéza bola úspešne otestovaná pomocou mnohých metód (predovšetkým multinukleárna NMR a optické metódy) na modelovom systéme (viď prvá publikácia *Inorg. Chem.* **2019**, *58*, 5196–5210). Na základe získaných dát bol navrhnutý a syntetizovaný ligand s *t*-butylovou skupinou, ktorého komplexy sa viažu v deprotonizovanom stave na HSA podstatne lepšie a súčasne k zmene náboja dochádza v oblasti blízkej fyziologickému pH. Navrhnutá modifikácia afinity zlúčenín ku HSA na základe zmeny náboja neseného touto zlúčeninou pomocou pH okolitého roztoku je nový koncept, ktorý môže umožniť transport kontrastných látok (či liečiva) do tkanív s nižším pH

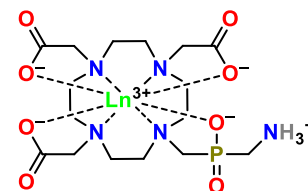


Obr. 2 – Interakcia protonizovaných ($R = \text{H}^+$) a deprotonizovaných ($R = \text{''}$) komplexov s HSA

v deprotonizovanom stave na HSA podstatne lepšie a súčasne k zmene náboja dochádza v oblasti blízkej fyziologickému pH. Navrhnutá modifikácia afinity zlúčenín ku HSA na základe zmeny náboja neseného touto zlúčeninou pomocou pH okolitého roztoku je nový koncept, ktorý môže umožniť transport kontrastných látok (či liečiva) do tkanív s nižším pH

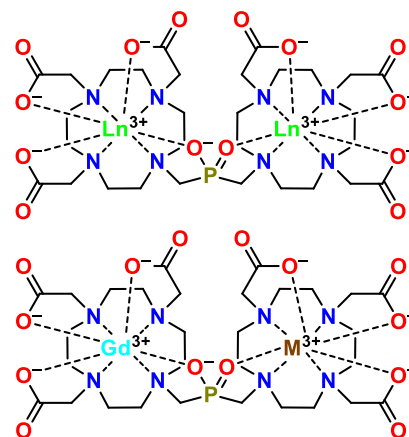
(napr. do nádorových tkanív), kde sa kontrastné látky (či liečiva) budú uvoľňovať z krvi na základe poklesu pH tkaniva.

Protonizácia vzdialenej aminoskupiny v komplexoch vyššie uvedených ligandov menila i NMR vlastnosti atómových jadier celého komplexu. Tento dej nastáva v oblasti blízko fyziologického pH, a preto bolo otestované použitie lanthanoidových komplexov obdobných aminofosfinových makrocyclických ligandov ako kontrastných látok pre zobrazovanie pH tkaniva pomocou fosforovej (^{31}P) magnetickej spektroskopie (P-MRS). Bola pripravená najjednoduchšia látka tejto triedy ligandov (Obr. 3) a jej komplexy boli skúmané spektroskopicky v roztoku a RTG difrakčne v pevnej fáze. V týchto komplexoch bolo využité značné „zosilnenie“ zmiern v P-MRS vďaka prítomnosti paramagnetických iónov lanthanoidov. Tieto ióny navyše spôsobujú posun rezonancii ^{31}P mimo fyziologickú oblasť a taktiež urýchľujú pomalú relaxáciu tohto jadra, tj. zlepšujú parametre P-MRS. Žiaľ sa ukázalo, že k protonizácii komplexov dochádzalo pri mierne vyššom pH než fyziologickom, ale predpokladaná použiteľnosť komplexov k sledovaniu pH pomocou magnetických metód bola potvrdená. Zmenou štruktúry ligandov sa dá posunúť protonizácia aminoskupiny do oblasti fyziologického pH a teda budúce komplexy môžu byť využité k sledovaniu pH pomocou P-MRS *in vivo*.



Obr. 3 – Ln^{3+} komplex, na ktorom boli skúmané P-MRS vlastnosti

V poslednej časti projektu boli skúmané komplexy ditopického ligandu (ligand bol pripravený vďaka novej syntetickej metodike, vid' vyššie), ktorý umožňuje neobvyklú väzbu dvoch kovových iónov (napr. Ln^{3+}) takým spôsobom, že vzájomný molekulárny pohyb oboch iónov je úplne simultánny (fosfinová skupina slúži ako intramolekulárny mostík, Obr. 4). Bola navrhnutá metodika pre prípravu komplexov obsahujúcich, ako rovnaké, tak rozdielne kovové ióny. Tieto komplexy (obsahujúce rovnaké alebo rozdielne) ióny kovov boli skúmané z hľadiska ich použitia ako kontrastné látky v MRI alebo ako fluorescenčných komplexov. Pomocou spektroskopických metód v roztoku i RTG difrakcií v pevnom stave bola potvrdená komplikovaná izoméria zapríčinená dynamikou obidvoch prepojených častí. Vďaka simultánnemu pohybu oboch iónov je relaxivita komplexov výrazne zvýšená. Keďže komplexy sú v roztoku inertné, bolo možné prvýkrát sledovať zmenu relaxivity, pokiaľ sa menila iba molekulová hmotnosť celého komplexu (použitie jedného trojmocného kovu o rôznej atómovej hmotnosti a Gd^{3+}). Pri sledovaní fluorescencie komplexov sa ukázalo, že dané systémy umožňujú účinný prenos excitačnej energie medzi oboma iónmi dvoch rôznych lanthanoidov, čo nie je veľmi bežná vlastnosť.



Obr. 4 – Komplexy s dvoma rovnakými (hore) a rozdielnymi (dolu) koordinovanými iónmi

Okrem vyššie uvedeného bolo pripravené nemalé množstvo monokryštálov komplexov makrocyclických, u ktorých bola stanovená kryštalová štruktúra. Toto umožnilo vyhodnocovanie štruktúrnych parametrov komplexov na rozsiahlej sade štruktúr v pevnej fáze a prvá časť týchto porovnávacích dát bola publikovaná v *Dalton Trans.* **2020**, 49, 1555–1569.

Tento súhrn prác priniesol niekoľko zaujímavých prístupov. Jedná sa (i) o syntetické postupy, (ii) o doposiaľ nepoužitý prístup k prenášaniam liečiv pomocou sérového albumínu a modifikovaným pomocou pH, (iii) o návrh kontrastných látok pre sledovanie pH pomocou P-MRS s významne zvýšenou citlivosťou magnetických parametrov na pH, (iv) o skúmanie dvojjaderných komplexov s úplne simultánnym pohybom z hľadiska ich použitia v MRI a (v) o sledovanie zložitej dynamiky týchto komplexov v roztoku.

Vývoj metod pro stanovení proteinů v biologických vzorcích se zaměřením na nádorová onemocnění pomocí LA-ICP-MS

Mgr. Michaela Kuchynka (Tvrdoňová), Ph.D.

Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ústav chemie, Oddělení analytické chemie
E-mail: 358018@mail.muni.cz

Seznam soutěžních prací:

1. **Tvrdonova, M.**; Vlcnovska, M.; Vanickova, L. P.; Kanicky, V.; Adam, V.; Ascher, L.; Jakubowski, N.; Vaculovicova, M.; Vaculovic, T.

Gold nanoparticles as labels for immunochemical analysis using laser ablation inductively coupled plasma mass spectrometry.

Analytical and Bioanalytical Chemistry **2019**, 411 (3), 559-564, (IF 3.6 – Q1)

2. Vaneckova, T.; Vanickova, L.; **Tvrdonova, M.**; Pomorski, A.; Krezel, A.; Vaculovic, T.; Kanicky, V.; Vaculovicova, M.; Adam, V.

Molecularly imprinted polymers coupled to mass spectrometric detection for metallothionein sensing.

Talanta **2019**, 198, 224-229 (IF 5.3 – Q1)

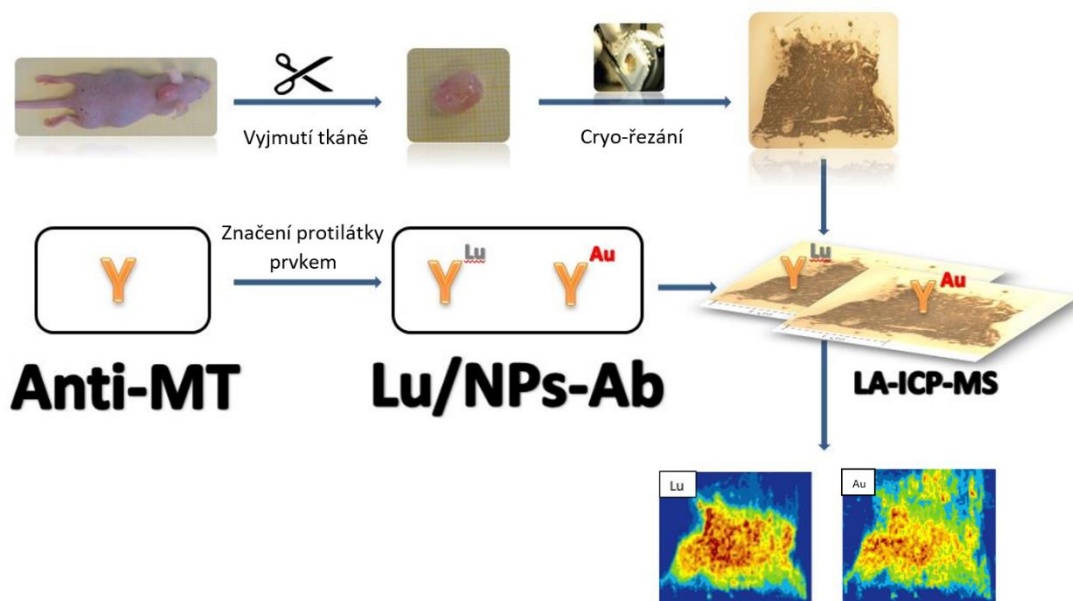
3. Vaneckova, T.; Bezdekova, J.; **Tvrdonova, M.**; Vlcnovska, M.; Novotna, V.; Neuman, J.; Stossova, A.; Kanicky, V.; Adam, V.; Vaculovicova, M.; Vaculovic, T.

CdS quantum dots-based immunoassay combined with particle imprinted polymer technology and laser ablation ICP-MS as a versatile tool for protein detection.

Scientific Reports **2019**, 9, 9 (IF 4.0 - Q1)

Simultánní stanovení distribuce jak prvků, tak proteinů v biologických tkáních udává ucelenou metaloproteomickou informaci, která může být hojně využívána a to zejména v biomedicínské oblasti s aplikací na konkrétní problém/onemocnění, jako je např. onemocnění nádorové¹. V posledních letech tedy zájem o stanovení proteinů pomocí LA-ICP-MS roste (přes to, že je tato instrumentace schopna detekovat pouze izotopy prvků), a to díky nové kombinaci s imunohistochemií (IHC), která dodala LA-ICP-MS nový rozměr. Pro zobrazení určitého proteinu v biologickém vzorku, je potřeba protilátka, jež se specificky váže na protein. Takováto protilátka je označena prvkem (v našem případě nanočásticemi (NPs) zlata, stříbra atd.) který je LA-ICP-MS schopna zobrazit (obr. č. 1). Toto spojení navíc nabízí unikátní možnost zobrazit distribuci prvků i proteinů v jednom vzorku, během jedné analýzy, na jednom přístrojovém vybavení a ve stejný čas.

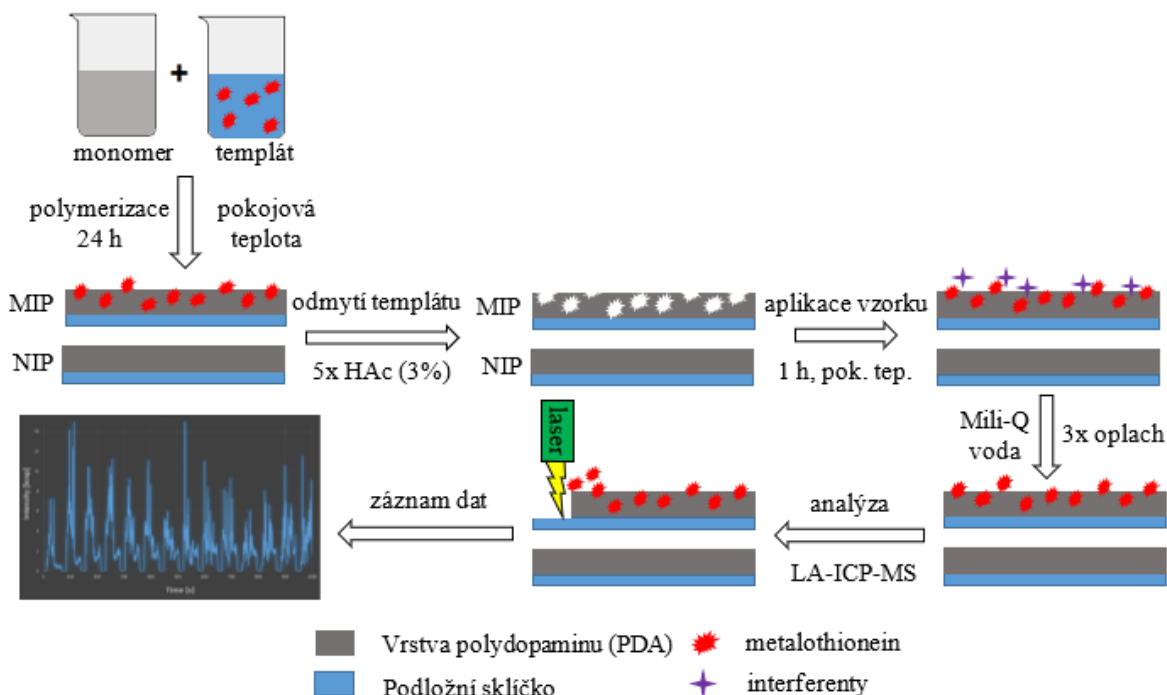
V tomto souboru prací je představeno **nové značení protilátek pomocí zlatý nanočástic** (Au-NPs-antiIgG). Právě vazbou protilátek na nanočástice je možné docílit především lepších detekčních limitů imunochemických metod ve spojení s hmotnostní spektrometrií².



Obr. č. 1: Značení protilátky prvkem, její specifické navázání na protein v tkáni a zobrazení proteinu (prvku označující protilátku) pomocí LA-ICP-MS.

Náš model Au-NPs-antiIgG má o řád lepší LOD antigenu (dle 3σ) v řádech pikogramů, a to 11 pg pro 60 nm AuNPs, 51 pg pro 10 nm AuNPs, než je současná metoda pomocí MeCAT (metal coded affinity tags) 260 pg pro Ho-MeCAT.

Na základě této studie budou porovnány další kovové nanočástice (Au, Ag, Eu a Cd) s využitím modelového proteinu p53 (**nádorový marker**), které při kombinaci vybraných aspektů (pozadí,



Obr. č. 2: Příprava molekulově imprintovaného polymeru (MIP), neimprintovaného polymeru (NIP) jako kontrolního vzorku a jejich analýza pomocí LA-ICP-MS.

nespecifická sorpce, stérické efekty) poskytnou optimální výsledky pro stanovení daného proteinu.

Tato metoda má možnost budoucího využití tzv. multiplexové analýzy (simultánní stanovení více prvků a proteinů) právě v biologických tkáních (nádory, mozek, ledviny apod.).

Ne vždy ale tato metoda s využitím značených protilátek musí být vhodná pro všechny analyty (např. pro malé proteiny typu metalothionein, 6-10 kDa). Právě pro tyto případy (protilátky nejsou komerčně či finančně dostupné), byla vyvinuta **kombinace metod tzv. molekulově imprintovaných polymerů (MIP) s využitím LA-ICP-MS** (obr. č.2). Molekulární imprinting je obecně definován jako „ligandově selektivní rozpoznávací místo v syntetických polymerech, kde se pro vytvoření takového místa využívá templát (atom, ion, molekula, komplex, makromolekulární sestava včetně mikroorganismů). Formování rozpoznávacího místa probíhá polykondenzačním či polymeračním procesem s následným odstraněním některých, nebo všech templátů“³. Otisklá místa obsahují trojrozměrnou síť prezentující geometrii a polohu funkčních skupin komplementární k molekulám z templátu. MIP technika zde byla poprvé použita jako selektivní purifikační krok pro metalothionein s využitím MALDI-TOF-MS a kvantifikace MT či stanovení jeho izoforem pomocí LA-ICP-MS. MIP kombinovaná s těmito dvěma technikami umožňuje přesnou identifikaci a kvantifikaci s vysokou hmotnostní přesností, vynikající selektivitou a relativně rychlou analýzou ukazující potenciál **klinického testování krve onkologických pacientů**.

(1) Giesen, C.; Mairinger, T.; Khoury, L.; Waentig, L.; Jakubowski, N.; Panne, U. Multiplexed Immunohistochemical Detection of Tumor Markers in Breast Cancer Tissue Using Laser Ablation Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry. *Analytical Chemistry* **2011**, *83* (21), 8177-8183, DOI: 10.1021/ac2016823.

(2) Tvrdonova, M.; Vlcnovska, M.; Vanickova, L. P.; Kanicky, V.; Adam, V.; Ascher, L.; Jakubowski, N.; Vaculovicova, M.; Vaculovic, T. Gold nanoparticles as labels for immunochemical analysis using laser ablation inductively coupled plasma mass spectrometry. *Analytical and Bioanalytical Chemistry* **2019**, *411* (3), 559-564, DOI: 10.1007/s00216-018-1300-7.

(3) Whitcombe, M. J.; Kirsch, N.; Nicholls, I. A. Molecular imprinting science and technology: a survey of the literature for the years 2004-2011. *Journal of Molecular Recognition* **2014**, *27* (6), 297-401, DOI: 10.1002/jmr.2347.

Thermo Scientific Neoma MC-ICP-MS

Technology that transforms your science



Life beyond Neptune:
The new MC-ICP-MS Neoma





Jednodušší, rychlejší a bezpečnější mikrovlnný rozklad s PreeKem M6

Společnost PreeKem v uplynulém desetiletí úspěšně uvedla na trh řadu velmi oblíbených instrumentů pro mikrovlnný rozklad (Topex+, Coolpex, WX-6000, PREPS). Letos přichází se zbrusu novým modelem PreeKem M6, který je prvním modelem ze zcela nové rodiny PreeKem 'M'.



Nové technologie a nové funkce (např. bezkontaktní mid-IR snímače teploty, vertikální rotorový dopravník, individuální regulace teploty v nádobce – vše pro spolehlivý rozkladný výkon) zařazují model M6 do kategorie špičkových mikrovlnných rozkladných systémů nové generace. Navíc M6 přináší i nový neotřelý vnější design, který jen umocňuje charakter moderního instrumentu a snadno zapadá do konceptu moderních laboratoří. Integrovaná knihovna metod šetří Váš čas při vytváření a optimalizaci metod. Technologie „plovoucích bezpečnostních dvířek“ a řada zakomponovaných bezpečnostních prvků eliminují riziko újmy na zdraví v případě výbuchu nádobky. M6 rovněž nevyžaduje prakticky žádný spotřební materiál, takže provoz tohoto zařízení přináší i podstatné provozní úspory.



PreeKem M6 přináší:

- garantovaný rozkladný výkon
- snadnou obsluhu a bezpečnost
- přednastavené metody
- garantovanou návratnost investice
- antikorozi zůruku 5 let
- patentovanou fokusaci mikrovln
- Twin Air technologii rychlého vychlazení

PODÍVEJTE SE NA SVĚT NAŠÍ OPTIKOU



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

FTIR a Ramanovy spektrometry a mikroskopy



Aplikace z nanosvěta

FTIR Analýzy tenkých vrstev a monovrstev

- Dedikované příslušenství pro transmisní i reflexní měření
- Spektrální rozsah od FIR přes MIR, NIR až po UV-VIS oblast
- Vakuové FTIR spektrometry pro maximální citlivost
- Nejmodernější instrumentace a techniky – PM-IRRAS, GA-FTIR

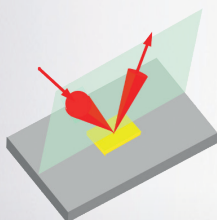
Mikroskopy s nejvyšším prostorovým rozlišením

- Unikátní FTIR instrumentace s rozlišením pod difrakčním limitem (až 500nm)
- Ramanovy mikroskopy s rozlišením blížícím se 300 nm
- Příslušenství dedikované pro studium tenkých vrstev (GIR objektiv)

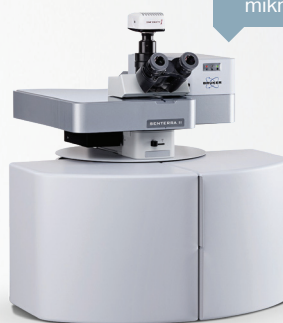
FTIR spektrometr INVENIO s univerzálním reflexním modulem 13-83°



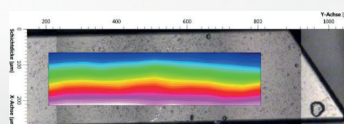
Vakuový FTIR spektrometr VERTEX 80v



SENTERRA II mikroskop



FTIR mikroskop HYPERION



Sledování tloušťky DLC vrstvy pomocí FTIR

Laboratorní
analytické
přístroje

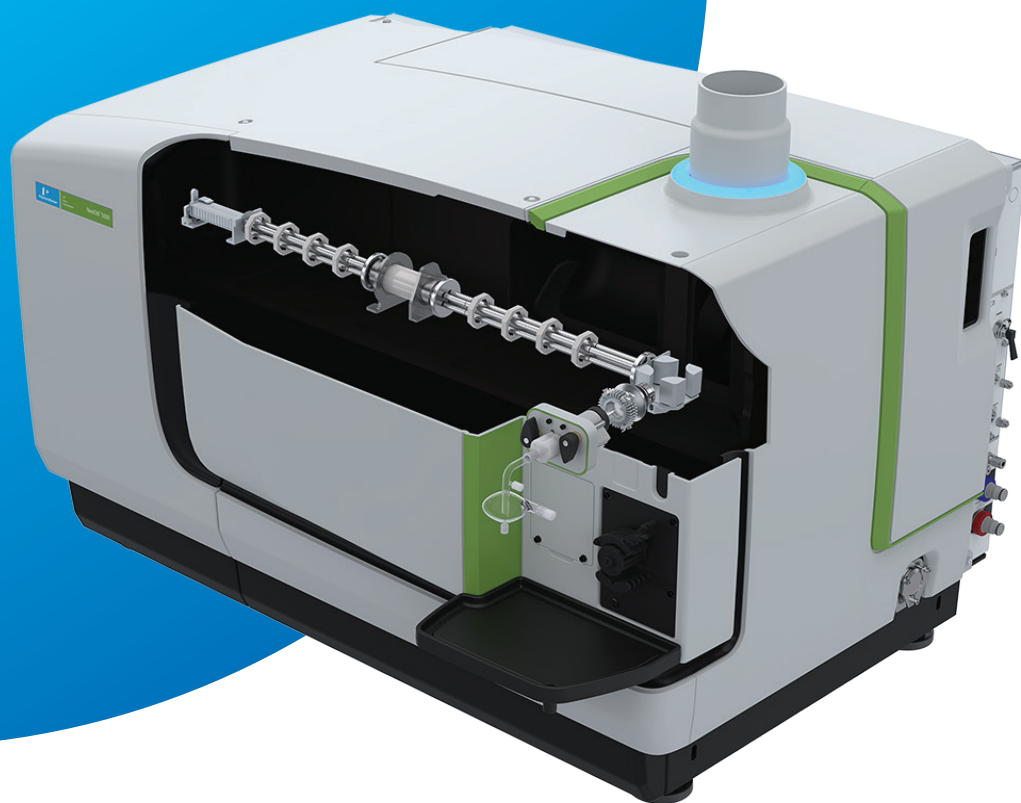
Authorized Distributor


PerkinElmer[®]
For the Better

Q⁴ ICP-MS pro další dekádu

NexION 5000

První multi-kvadrupólové ICP-MS



4Q jsou výkonnější než QQQ Jakýkoliv vzorek, matrice, interference

Výsledkem kontinuálního vývoje PerkinElmer v anorganické analýze je první multi-kvadrupólový Q⁴ ICP-MS. Díky technologickým inovacím a laditelné kolizně-reakční cele přístroj posouvá detekční limity o další desetinné místo. Unikátní konstrukcí je bezúdržbový - žádné čištění za sampler a skimmer kóny. Výkon QQQQ kvadrupólů.

 **PE Systems**

PerkinElmer
authorized distributor

www.pesystems.cz

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 |
|--|--|--|---|--------------------------------|--|
| | | | | | |
| Analýza v terénu, RTG a jiskrové/obloukové přístroje | Analýza kovových materiálů | Analýza pevných, kapalných a práškových materiálů | Analýza roztoků pro ultra nízké limity detekce | Plně simultánní MS spektrometr | Tavičky, lis, mlynky, spotřební a referenční materiály pro XRF |
| Referenční materiály | Automatické systémy | GD spektrometry | Analýzatory ořezových kovů | Ruční IČ spektrometry | Analýzatory 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

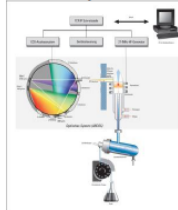
ICP spektrometr SPECTRO ARCOS Vlajková loď firmy SPECTRO

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...“).

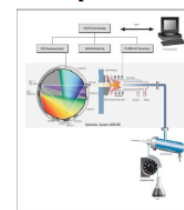
Přístroj se vyrábí jak s axiálním, tak s radiálním snímáním plasmu:



Radiální pohled - SOP



Axiální pohled - EOP



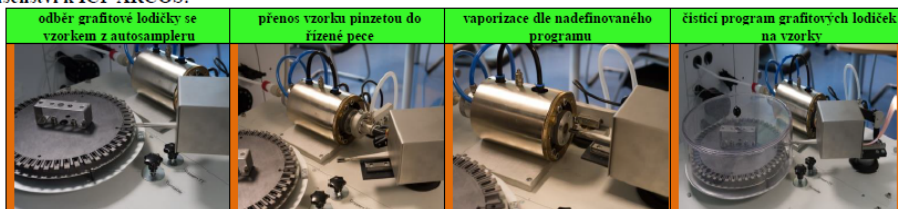
a nově i v provedení MULTI VIEW.

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 ovládan 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 převádění 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 |
| ATOMOVÁ ABSORPČNÍ SPEKTROMETRIE - KURZ AAS II (2019) – kovová kroužková vazba | 590,- Kč |
| ATOMOVÁ ABSORPČNÍ SPEKTROMETRIE - KURZ AAS II (2019) – vazba V2 | 690,- 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: 30. 6. 2021

uzávěrka příštího čísla: 15. 10. 2021