

SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARKA MARCI



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., firma Agilent Technologies Inc. zastoupená autorizovaným distributorem Altium International s.r.o., firma Optik Instruments s.r.o., oficiální distributor společnosti BRUKER Optics v oblasti FTIR a Ramanovy spektrometrie

BULLETIN
SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI
JANA MARKA MARCI

199

duben 2024

<http://www.spektroskopie.cz>

e-mail sekretariátu: immss@spektroskopie.cz

telefonní číslo sekretariátu: 722 554 326

115. schůze hlavního výboru Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci

Viktor Kanický

Schůze hlavního výboru se konala 25. ledna 2024. Pod řadě on-line schůzí a soutěží se podařilo uspořádat osobní setkání, které se konalo již tradičně v historické budově Univerzity Pardubice na náměstí Čs. legií. Zasedací místnost zajistila docentka Anna Krejčová z Ústavu chemického a environmentálního inženýrství fakulty chemicko-technologické, za což jí

patří velký dík. Náročný program obsahoval jednání hlavního výboru a Soutěž mladých spektroskopiků. Z organizačních důvodů setkání začalo již v 9 hodin. Soutěží, v poledne proběhlo jednání hlavního výboru a po něm následovala druhá část soutěže, která skončila po 18. hodině. Průběhu soutěže, účastníkům, vítězům a jejich prezentacím je věnován samostatný příspěvek uveřejněný v tomto čísle Bulletinu (č. 199). Vítěze soutěže a názvy jejich prací naleznete také na webu Společnosti. Po mnoha letech převzal organizaci Soutěže od Dr. Tomáše Matouška z Ústavu analytické chemie AV ČR, v. v. i. docent

Antonín Kaňa z Vysoké školy chemicko-technologické v Praze. Dr. Matouškoví patří velký dík za dlouholetou obětavou a úspěšnou práci věnovanou studentům a mladým výzkumníkům. I letošní ročník byl vydařený a počet účastníků rekordní. Všechny přednesené příspěvky byly věnovány aktuálním směrům spektroskopie a na vysoké úrovni.

Jednání hlavního výboru probíhalo již v novém složení, vzešlém z voleb. Seznam členů výboru se obohatil o nové osobnosti a bude zveřejněn na webu Společnosti po provedení právního úkonu -zápisu do registru společností a firem. Na jednání byly zveřejněny výsledky voleb do předsednictva hlavního výboru. Za členy předsednictva byli zvoleni prof. Pavel Matějka, prof. Viktor Kanický, Dr. Jan Kratzer, doc. David Milde a doc. Anna Krejčová. Předsedy sekcí jsou prof. Jan Preisler, prof. Ivan Němec, Dr. Tomáš Matoušek a doc. Tomáš Černohorský. Podrobnosti budou zveřejněny na webu Společnosti rovněž po zápisu do registru společností a firem.

Schůze hlavního výboru projednávala organizační záležitosti nadcházející 18. česko-slovenské spektroskopické konference (CSSC, 27. až 31. 5., Kurdějov), s níž bude současně probíhat mezinárodní konference Mössbauerova spektroskopie v materiálových vědách. U příležitosti 50. výročí vzniku Ramanovy spektroskopie s využitím jevu zesílení povrchem (SERS) a 65. výročí úmrtí Adolfa Smekala, rakouského fyzika který předpověděl Ramanův jev, se v rámci CSSC setkají odborníci na mikrosymposiu „Pokroky ve vibrační spektroskopii“.

Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie 2023

Antonín Kaňa

Letošní ročník Soutěže o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie se uskutečnil v prostorách Univerzity Pardubice, kde na schůzi Hlavního výboru Spektroskopické společnosti prezentovalo svůj příspěvek rekordních 21 soutěžících. I přes vysoký počet přihlášených příspěvků byla kvalita všech prací vynikající. Na průběh soutěže dohlížel čestný předseda poroty **prof. Ing. Michal Holčápek, Ph.D.**

V kategorii diplomových prací, které se letos účastnilo čtrnáct soutěžících, se umístili na sdíleném prvním místě **Mgr. Jan Faltejsek** z Přírodovědecké fakulty Univerzity Karlovy v Praze s příspěvkem o makrocyclech a komplexaci velkých iontů kovů a **Ing. Roman Bushuiev** z Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i. v Praze s prací zaměřenou na samořízené strojové učení pro interpretaci molekulárních dat z hmotnostní spektrometrie. Na třetím místě se pak umístil **Ing. Filip Matějka**, působící ve Fyzikálním ústavu AV ČR, v. v. i. v Praze, věnující se syntéze plazmatem aktivovaných kapalin a jejich aplikaci pro povrchovou úpravu nanokrystalů křemíku.

V kategorii publikovaných prací, kde prezentovalo své příspěvky sedm soutěžících, se na prvním místě umístila **Ing. Mgr. Jana Pilátová, Ph.D.** z Matematicko-fyzikální fakulty Univerzity Karlovy v Praze s prací zaměřenou na demonstraci potenciálu Ramanovy mikrospektroskopie pro studium buněčných inkluzí, na druhém místě pak **Ing. Jakub Vrábel** ze Středoevropského technologického institutu CEITEC v Brně s příspěvkem o vývoji interpretovatelných neuronových sítí pro pokročilé zpracování spektroskopických dat. Shodné hodnocení pak vedlo k udělení dvou třetích míst pro **RNDr. Tomáše Pluháčka, Ph.D.** z Univerzity Palackého v Olomouci se souborem prací popisujícím analýzu ultrastopových koncentrací enantiomerů oxaliplatinu a jejich lékopisných nečistot pomocí CE-ICP-MS a pro **Mgr. Barboru Pisklakovou** z Univerzity Palackého v Olomouci za rozvoj rychlé a účinné LC-MS/MS diagnostiky dědičných metabolických poruch.

Závěrem bych rád poblahopřál oceněným a poděkoval ostatním soutěžícím za prezentaci výborných prací. Poděkování patří také autorům posudků soutěžních prací, kteří hodnocení věnují svůj čas a úsilí.

Souhrny oceněných prací přinášíme níže.

Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie 2023

POŘADÍ

KATEGORIE A

1. místo

Ing. Roman Bushuiev

Samofixované strojové učení pro interpretaci molekulárních dat z hmotnostní spektrometrie

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v. v. i.

1. místo

Mgr. Jan Faltejsek

Makrocykly a komplexace velkých iontů kovů

Univerzita Karlova

3. místo

Ing. Filip Matějka

Synthesis of plasma activated liquids and their application for surface modification of silicon nanocrystals

Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i.

KATEGORIE B

1. místo

Ing. Mgr. Jana Pilátová, Ph.D.

Nově objevené buněčné inkluze v jednobuněčných eukaryotech díky Ramanově mikrospektroskopii demonstrují potenciál této metody v biologii

Univerzita Karlova

2. místo

Ing. Jakub Vrábel

Interpretable Artificial Neural Networks for Advanced Processing of Spectroscopic Data

Vysoké učení technické v Brně

3. místo

Mgr. Barbora Piskláková – online

Rychlá a účinná LC-MS/MS diagnostika dědičných metabolických poruch: poloautomatický pracovní postup pro analýzu organických kyselin, acylglycinů a acylkarnitinů v moči

Univerzita Palackého v Olomouci a Fakultní nemocnice Olomouc

3. místo

RNDr. Tomáš Pluháček, Ph.D.

Analýza ultra stopových koncentrací enantiomerů oxaliplatinu a jejich lékopisných nečistot pomocí CE-ICP-MS

Univerzita Palackého v Olomouci

Samořízené strojové učení pro interpretaci molekulárních dat z hmotnostní spektrometrie

Ing. Roman Bushuiev

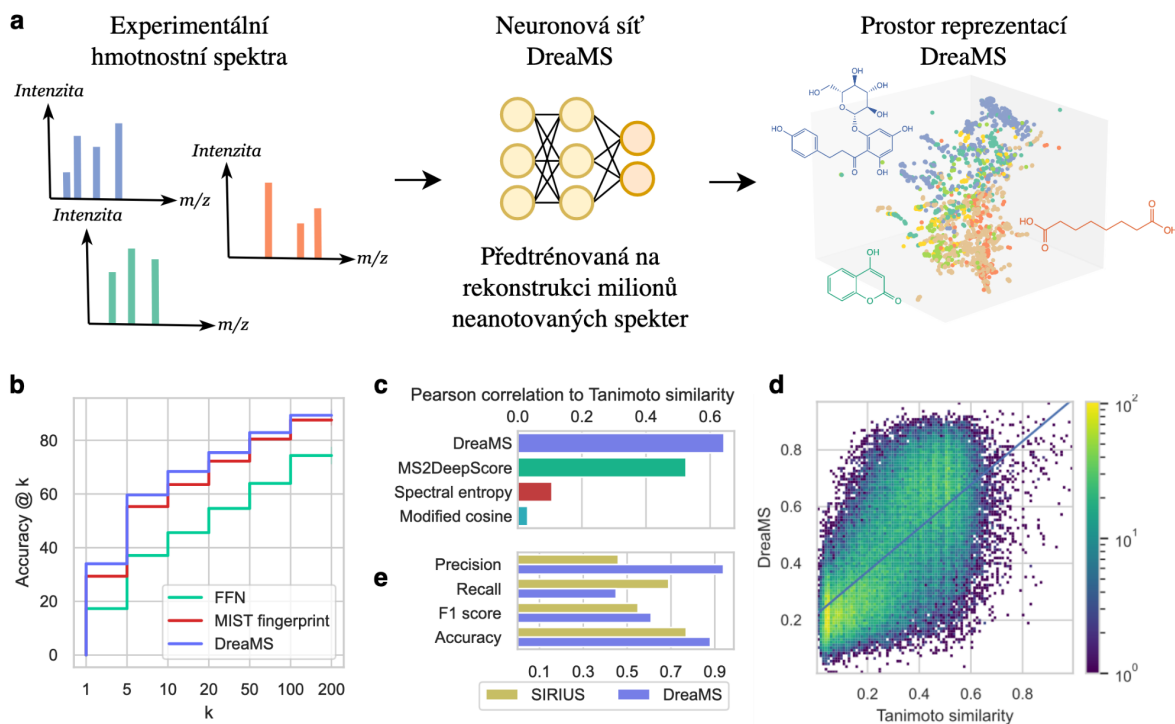
Ústav organické chemie a biochemie AV ČR,
Skupina Tomáše Pluskala,
E-mail: roman.bushuiev@uochb.cas.cz

Diplomová práce obhájena na Fakultě informačních technologií ČVUT v Praze

Objev a identifikace malých molekul a metabolitů je zásadní pro mnoho vědeckých oborů, včetně vývoje léčiv, analýzy životního prostředí a diagnostiky onemocnění [1]. Dosud byl však objeven a popsán pouze nepatrný zlomek molekul, odhadem 5% až 10% v lidském těle a v rostlinné říši [2]. Drtivá většina chemického prostoru vyskytujícího se kolem nás zůstává stále neprozkoumaná. Objev nových molekulárních struktur představuje velkou technologickou příležitost a výzvu k rozšíření našich biochemických znalostí o všech živých organismech [3]. Metabolomika založená na hmotnostní spektrometrii je nejpokročilejším přístupem ke studiu metabolitů a jejich biologických procesů v organismech. Avšak kvůli objemu a komplexitě experimentálních dat současné výpočetní metody dokáží interpretovat jen malou část z dostupných hmotnostních spekter. Pouze 2% dat hmotnostní spektrometrie mohou být anotovaná referenčními standardy a přibližně 10% pomocí existujících metod založených na strojovém učení [4].

V této práci představujeme nový přístup k dekódování hmotnostně-spektrometrických dat. Zatímco stávající nástroje se spoléhají na lidskou expertizu nebo strojové učení pomocí anotovaných referenčních knihoven, naše metoda umožňuje extrakci molekulárních informací přímo z experimentálních měření hmotnostních spektrometrů na základě samořízeného učení. Konkrétně, připravili jsme nové datasey, pojmenované MSVⁿ, obsahující 700 milionů neanotovaných hmotnostních spekter z mnoha různých studií a vyvinuli jsme neuronovou síť založenou na Transformeru, tedy architektuře, která způsobila revoluci v tradičních oborech strojového učení, jako je zpracování přirozeného jazyka nebo počítačové vidění. Natrénováni jsme naši neuronovou síť na datasetech MSVⁿ, aby predikovala maskované spektrální píky a chromatografické retenční časy – úkoly nevyžadující žádnou znalost molekulárních struktur. Ukazujeme však, že během trénování se neuronová síť sama naučila vlastnosti chemických struktur a uspořádala spektra do bohatých molekulárních sítí. Tyto neurální reprezentace hmotnostních spekter označujeme jako DreaMS (Deep Representations Empowering the Annotation of Mass Spectra). Adaptace DreaMS pro hlavní úkoly výpočetní hmotnostní spektrometrie, jako je predikce molekulárních fingerprintů nebo výpočet spektrální podobnosti, překonává nejmodernější dostupné metody (Obr. 1.).

V současné době integrujeme DreaMS do praktických aplikací v naší laboratoři na ÚOCHB a finalizujeme rukopis článku pro odeslání do časopisu *Nature Biotechnology*. Naše práce položila solidní základ pro budoucí výzkum v oblasti výpočetní metabolomiky. Vývoj neuronových generativních modelů nové generace, založených na DreaMS, má potenciál významně obohatit naše znalosti o chemickém prostoru kolem nás.



Obr. 1. a. Schematický přehled našeho přístupu navrženého v diplomové práci. Poté, co byla předtrénována v samořizovaném režimu, je neuronová síť DreaMS schopná extrahovat vektorové reprezentace neanotovaných experimentálních spekter, která charakterizují jejich příslušné molekulární struktury. Každý bod ve vizualizovaném prostoru DreaMS reprezentuje jeden mnohdimenzionální vektor, kde barvy označují chemické třídy molekul. **b.** Neuronová síť DreaMS, dotrénovaná pro predikci molekulárních fingerprintů, překonává nejmodernější metodu MIST [5] a klasickou dopřednou neuronovou síť (FFN) při vyhledávání sloučenin z PubChem na základě hmotnostních spekter. **c, d.** Kosinová vzdálenost v prostoru reprezentací DreaMS aproximuje Tanimoto podobnost na molekulárních strukturách a překonává nejpokročilejší metodu MS2DeepScore [6] i klasické algoritmy pro výpočet spektrální podobnosti. **e.** DreaMS, dotrénovaná pro detekci chemických látek obsahujících fluor, překonává nejpokročilejší metodu SIRIUS [7], a je při tom alespoň o tři řády výpočetně rychlejší. Jelikož fluor nemá stabilní izotopy kromě ^{19}F , detekce fluoru se považuje za obzvlášť náročný problém v oblasti hmotnostní spektrometrie.

Bibliografie

- [1] Cragg, G. M., & Newman, D. J. 2013, "Natural Products: A Continuing Source of Novel Drug Leads", *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)*, 10.1016/j.bbagen.2013.02.008.
- [2] Alseekh et al., 2021, "Mass Spectrometry-Based Metabolomics: A Guide for Annotation, Quantification and Best Reporting Practices", *Nat. Methods*, 10.1038/s41592-021-01197-1.
- [3] Giera et al., 2022, "Metabolite Discovery: Biochemistry's Scientific Driver", *Cell Metabolism*, 10.1016/j.cmet.2021.11.005.
- [4] de Jonge et al., 2022, "Good Practices and Recommendations for Using and Benchmarking Computational Metabolomics", *Metabolomics*, 10.1007/s11306-022-01963-y.
- [5] Goldman et al., 2023, "Annotating Metabolite Mass Spectra with Domain-Inspired Chemical Formula Transformers", *Nat. Machine Intelligence*, 10.1038/s42256-023-00708-3.
- [6] Huber et al., 2021, "MS2DeepScore: A Novel Deep Learning Similarity Measure to Compare Tandem Mass Spectra", *Journal of Cheminformatics*, 10.1186/s13321-021-00558-4.
- [7] Dührkop et al., 2019, "SIRIUS 4: A Rapid Tool for Turning Tandem Mass Spectra into Metabolite Structure Information", *Nat. Methods*, 10.1038/s41592-019-0344-8.

Makrocykly a komplexace velkých iontů kovů

Mgr. Jan Faltejsek

Univerzita Karlova, Přírodovědecká fakulta,
Katedra anorganické chemie, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha 2
E-mail: *Faltejsek.jan@seznam.cz*

Diplomová práce obhájena na Katedře anorganické chemie Přírodovědecké fakulty Univerzity Karlovy v Praze.

Radioizotopy kovových prvků jsou v nukleární medicíně, dnes už běžně, používány jak pro diagnostiku, tak pro terapii, nejčastěji různých druhů rakoviny. Aby se zamezilo nespecifické biodistribuci těchto radioizotopů v těle, musí být poutány do komplexů stabilních *in-vivo*. Následně jsou tyto komplexy většinou konjugovány na biologické vektory, pomocí nichž se dosaženo cílené distribuce. Vhodné komplexy/ligandy musí mít obecně nejméně tyto vlastnosti: (i) komplexy musí být stabilní *in-vivo*, což je zajištěno jejich termodynamickou stabilitou a především jejich kinetickou inertností. (ii) Pro potřeby nukleární medicíny musí komplexy kovových radioizotopů vznikat velice rychle a za mírných podmínek. (iii) Ligandy by měly být tzv. bifunkční, tj. mít ve své struktuře funkční skupiny umožňující konjugaci na biologické vektory. Tyto požadavky jsou obecně splněny nejlépe pro vhodně substituované makrocyclické ligandy s koordinujícími se pendantními rameny.

Komplexy polyazamakrocyclických ligandů se v radiomedicíně používají pro diagnostické a terapeutické účely již dlouhou dobu. Nicméně neexistuje "obecný" ligand vhodný pro jakýkoli kovový ion v periodické tabulce, a proto by měl být nejvhodnější chelátor speciálně navržen pro každý kovový ion. V posledních letech se stále více používá k vnitřnímu ozařování nádorů alfa-zářením pocházející z radioizotopů těžkých prvků ze spodní části periodického systému. Příkladem mohou být ^{213}Bi nebo ^{225}Ac . Kationty těchto kovových prvků mají velké poloměry a vyžadují tedy ligandy dostatečně „velké“, aby tyto byly schopné takové ionty efektivně vázat. Ligandy, které by byly vhodné pro tyto velké kationty, mohou být nejlépe odvozeny od 18-členných makrocyclů.

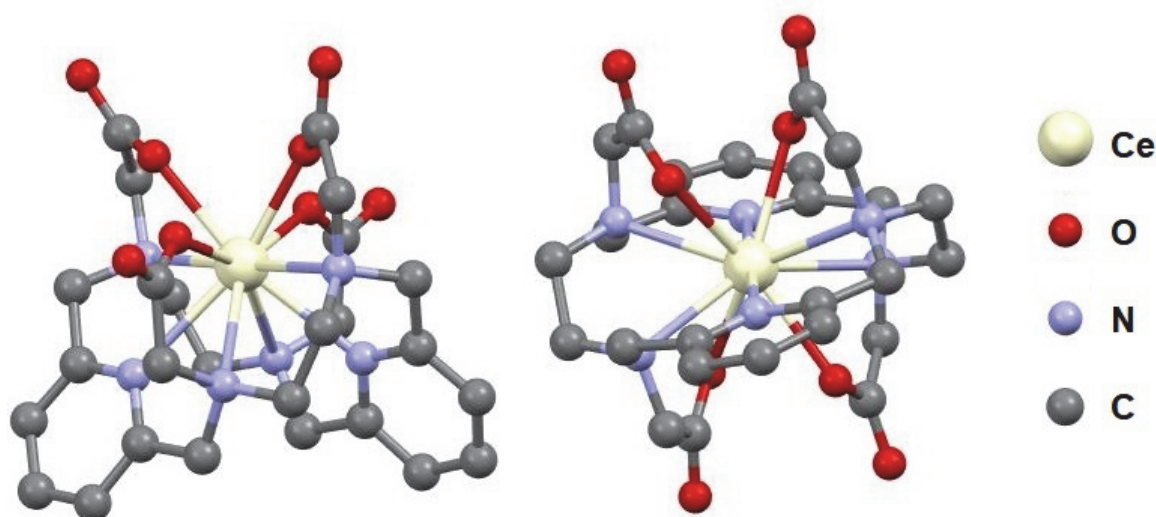
Tato diplomová práce si klade za cíl přispět k lepšímu pochopení koordinační chemie komplexů dosud velmi málo zkoumaných „velkých“ makrocyclů a jejich schopnosti vázat tzv. velké kationty. Pro studium komplexů v této diplomové práci byly vybrány ionty lanthanoidů, jejichž chemie je ovládána především jejich velikostí, a jsou tedy vhodné pro sledování vlivu velikosti kationtů na chování komplexů určitého ligandu. Navíc kation La(III) je pokládán za nejlepší dostupný model pro radioaktivní kation Ac(III) , jehož izotop ^{225}Ac je v současnosti nejzajímavějším radioizotopem pro alfa-terapii. Jako ligand byl vybrán ligand H_4pyta odvozený od 18-členného makrocyclu se dvěma pyridinovými kruhy (způsobující „zrigidnění“ ligandu) a čtyřmi aminovými skupinami, které jsou dále modifikovány skupinami acetátovými. To znamená, že ligand má velkou koordinační dutinu a může poskytovat až koordinační číslo 10 (CN 10). Tato práce se zabývá strukturními studii, kinetikou vzniku a rozpadu komplexů $\text{Ln(III)-H}_4\text{pyta}$ s využitím spektroskopických dat a rentgenostrukturní analýzy komplexů v pevném stavu. Hlavními metodami studia komplexů v roztoku jsou multijaderná NMR a UV-Vis. Spektroskopie NMR sloužila k určování struktur komplexů a komplexních intermediátů (potvrzení mechanismů (de)komplexace) v roztoku. UV-Vis spektroskopie byla především použita ke kinetickým měřením. Ačkoli byl ligand syntetizován už v polovině devadesátých let, téměř neexistují žádná data zaměřená na jeho možné využití v kontextu radiofarmak.

V pevném stavu bylo strukturně charakterizováno mnoho komplexů $\text{Ln(III)-H}_4\text{pyta}$ a ukázalo se, že ligand tvoří, v rámci lanthanoidové série, několik izomerů. Velké ionty Ln(III)

tvoří dekoordinované izomery (CN 10) se dvěma a dvěma acetáty koordinovanými na opačných stranách roviny N_6 tvořené atomy dusíku makrocycly (Obr. 1). Malé ionty Ln(III) váže ligand nonadentátním způsobem (CN 9) s jedním nekoordinovaným pendantním ramenem (Obr. 1). Uprostřed lanthanoidové série je možné pozorovat a izolovat oba izomery, které byly plně charakterizovány pro několik iontů Ln(III). Vznik komplexů probíhá třístupňovým mechanismem s okamžitým vznikem intermediárního komplexu *out-of-cage* (koordinace pouze pendantních acetátových ramen), který se velmi rychle přeměňuje (bazicky katalyzovanou reakcí) první komplex *in-cage* (koordinace všech donorových atomů; CN 10) jako kinetický produkt. V těchto kinetických izomerech jsou všechny acetátové skupiny umístěny na stejné straně roviny N_6 (Obr. 1). Tyto kinetické meziprodukty se pomalu přeměňují (protonem katalyzovanou reakcí) na konečné termodynamické izomery *in-cage*, které jsou totožné se strukturami nalezenými v pevném stavu. Dekoordinované komplexy velkých Ln(III) jsou extrémně kineticky inertní (např. pro komplex Ce(III)-H₄pyta je poločas dekomplexace ${}^d\tau_{1/2} = 9,39$ min; 5M HClO₄, 90 °C) a jejich kinetická inertnost roste od La(III) k Eu(III) (rozdíl poločasů rozpadu tři řády) a poté opět klesá k Ho(III) (taktéž řádově). Nonakoordinované komplexy malých iontů Ln(III) mají o několik řádů nižší kinetickou inertnost (např. pro komplex Yb(III)-H₄pyta je poločas dekomplexace ${}^d\tau_{1/2} = 0,28$ min; 5M HClO₄, 90 °C), která se ale s velikostí iontů příliš nemění. Kinetická inertnost komplexů malých Ln(III) je srovnatelná s inertností klinicky používaných komplexů Ln(III)-H₄dota.

Výše uvedená fakta velmi dobře korelují s radiochemickými daty pro radioizotopy ${}^{133}\text{La}$ a ${}^{177}\text{Lu}$ (radioaktivní značení ligandu H₄pyta a stabilita značených komplexů). Radiokomplexy Ln(III)-H₄pyta se tvoří relativně snadno již za mírných podmínek a tyto radiokomplexy jsou kineticky nejinertnějšími mezi dosud známými komplexy těchto radioizotopů. Radiochemická data taktéž potvrzují, že ligand H₄pyta je vhodným výchozím ligandem pro návrh účinných chelátorů pro radioizotopy velkých lanthanoidů a popř. i dalších těžkých prvků, a že tato struktura má dobrou perspektivu pro použití v nukleární medicíně.

Data v této diplomové ukazují, že ligandy odvozené od H₄pyta budou vhodnými chelátory pro velké kovové ionty a H₄pyta může být pokládán za nový „standardní“ ligand pro koordinační číslo 10.



Obr. 1. Struktury kinetického izomeru ${}^{400}[\text{Ce}(\text{pyta})]^-$ (vlevo) a termodynamického izomeru ${}^{220}[\text{Ce}(\text{pyta})]^-$ (vpravo) komplexu ligandu H₄pyta a ceritého kationtu.

Synthesis of plasma-activated liquids and their application for surface modification of silicon nanocrystals

Ing. Filip Matějka

Fyzikální ústav AV ČR v.v.i.

Oddělení tenkých vrstev a nanostruktur – Praha, Cukrovarnická

E-mail: matejkaf@vscht.cz

Diplomová práce obhájena na Ústavu fyzikální chemie Vysoké školy chemicko-technologické v Praze

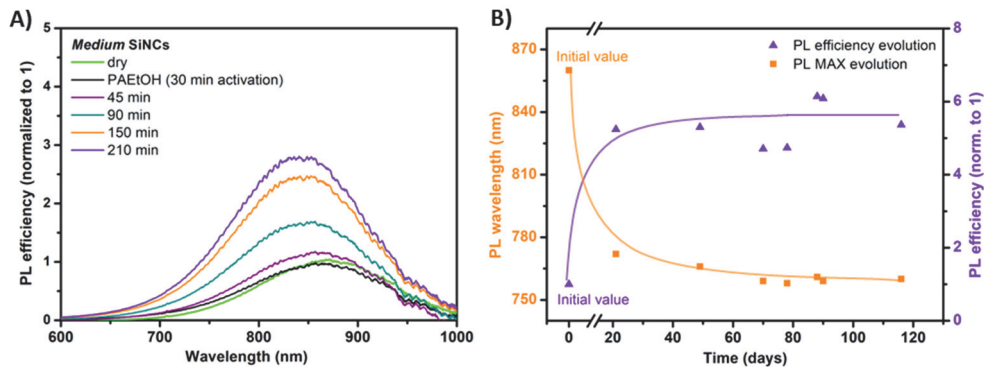
Příprava a studium nanostrukturálních objektů je v oblasti vědy a průmyslu velmi zkoumané téma. Jedněmi z nejrozšířenějších nanostruktur jsou ty utvořené z polovodičových materiálů, zejména pak z křemíku. Nanostrukturální křemík se díky efektu prostorového omezení vlnové funkce stává účinným zdrojem světla. Vlastnosti emitovaného záření, luminiscence, jsou laditelné pomocí změny velikosti nanokrystalů (NK). Protože vlnová funkce excitovaného elektronu (nebo díry) v NK je často delokalizována v reálném prostoru, a to jak v jádru NK, tak na jeho povrchu, je možné nastavit optické vlastnosti i pomocí modifikace povrchu vhodnými navázanými skupinami. Lze tedy dosáhnout specifického ladění vlastností NK pro dané aplikace, ať už se jedná o elektroniku, opto-elektroniku či medicínu. Vzhledem k optickým vlastnostem křemíkových NK (SiNK) je nutné proces povrchové modifikace monitorovat pomocí spektroskopických metod. Rovněž kvalitu výsledných NK je třeba podrobit spektroskopické charakterizaci, a to na úrovni jedno i mnoha fotonových experimentů.



Obrázek 1: Ilustrace změny povrchu u křemíkového nanokrystalu

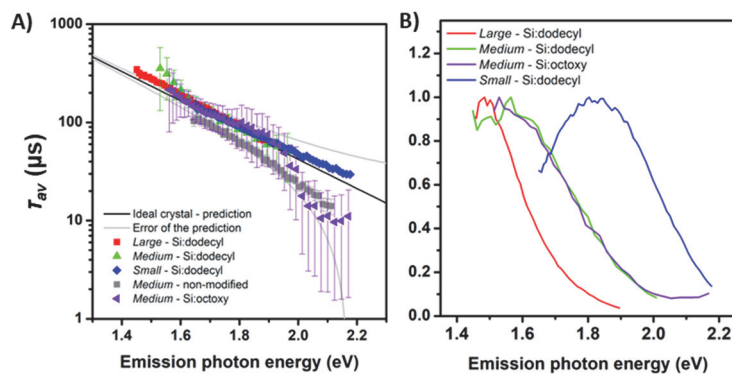
Diplomová práce pojednává o vývoji nové a rychlé techniky využívající k povrchové úpravě SiNK systém netermálního plazmatu (NTP) zajišťující vysoce reaktivní prostředí v kapalinách („aktivace kapalin“). Nejprve je prezentován detailní pohled na mechanismy chemických reakcí při aktivaci vody a též na to, jak jednoduše pozmeněná geometrie reaktoru mění dominantní mechanismy procesu aktivace. Proces je zkoumán pomocí emisní spektroskopie výboje, která navazuje a propojuje v bakalářské práci prezentované výsledky fotoluminiscenční spektroskopie provedené *in-situ* z modifikovaných SiNK. Intenzity vybraných pásů emisního spektra jsou korelovány s měřením koncentrací odpovídajících látek v lokální atmosféře i ve vodném roztoku. Při modifikaci ve vodném prostředí dochází ke komplexnímu obohacení povrchu dusíkatými strukturami, což vede ke změně fotoluminiscenčních vlastností SiNK, zejména pak k zesílení intenzity a modrému posuvu. Kvalita a změna optických parametrů

výsledných SiNK je dále zkoumána pomocí fotoluminiscenční spektroskopie (laserové excitační vlnové délky jsou 325 a 442 nm).



Obrázek 2: (A) Vývoj luminiscence povrchově modifikovaných SiNK, (B) Změna intezity a modrý posun pro modifikované SiNK

V druhé části práce je prezentována možnost plazmatické aktivace organických kapalin. Její implementace pro povrchovou modifikaci SiNK organickými strukturami je zcela nový vědecký přístup. Za tímto účelem byla v rámci práce navržena komora a reaktor, díky kterým dochází k úspěšné aktivaci (tvorbě reaktivního prostředí, tj. radikalizaci, či odštěpování částí struktur) organických kapalin. S pomocí nově navrženého zařízení bylo dosaženo úspěšné modifikace povrchu SiNK etoxy, octoxy, dodecyl a acetyl skupinou. Díky širší možnosti úpravy SiNK, vedoucí k zesílení fotoluminiscenčních vlastností, modrému posuvu a zlepšení disperzí (měřeno pomocí DLS v rámci práce), byla rozšířena aplikovatelnost SiNK v kombinaci s mimořádnou rychlostí reakce v prostředí NTP. Vzhledem k rozličným mechanickým i elektrickým povahám navázaných struktur umožňuje nově tato technika specificky upravit povrch pro danou optickou aplikaci včetně laditelnosti polohy luminiscence, a to od oranžové po blízkou infračervenou oblast. Luminiscence byla excitována vlnovými délkami 325 a 442 nm, kdy pro jednotlivé modifikace docházelo k různým změnám intezity a posunům maxima emise. Výsledky NTP modifikace byly dále srovnány s výsledky hydrosilylační reakce s dodecenem, jejíž implementace je taktéž součástí práce. V rámci sledování kvality modifikací byla optimalizována metoda extrakce SiNK z disperze v reaktantu do více těkavých rozpouštědel. Tato extrakce vedla k možnosti studia změny povrchu pomocí ATR FTIR spektroskopie. Kvalita modifikace povrchu byla též studována pomocí časově rozlišené spektroskopie (využit pulzní fs laser, excitace 254 a 315 nm, frekvence 1 kHz), která vzhledem k teorii popsané v nedávné době naší skupinou, dokáže objasnit kvalitu povrchu na základě předpokladu ideálního chování, odvíjejícího se od *vnitřního* kvantového výtěžku. Na základě časů doznívání, které představují dobu rekombinace páru elektron-díra, lze určovat kvalitu vzorku, tj. počet *svítivých* a *temných* SiNK jako součást úplné charakterizace výsledných SiNK.



Obrázek 3: (A) Doby doznívání pro jednotlivé vlnové délky, (B) Luminiscenční spektra studovaných SiNK

Nově objevené buněčné inkluze v jednobuněčných eukaryotech díky Ramanově mikrospektroskopii demonstrují potenciál této metody v biologii

Ing. Mgr. Jana Pilátová, Ph.D.

Přírodovědecké fakulta Univerzity Karlovy – Katedra experimentální biologie rostlin,
Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy – Oddělení fyziky biomolekul,
Biologické centrum AV ČR, v. v. i. – Parazitologický ústav
E-mail: jana.pilatova@natur.cuni.cz

Seznam soutěžních prací:

Barcytė, D., **Pilátová, J.**, Mojzeš, P., Nedbalová, L.

The arctic *Cylindrocystis* (Zygnematophyceae, Streptophyta) green algae are genetically and morphologically diverse and exhibit effective accumulation of polyphosphate. *Journal of Phycology*, **2020**, *56*(1), 217–232.

Mojzeš, P., Gao, L., Ismagulova, T., **Pilátová, J.**, Moudříková, Š., Gorelová, O., Solovchenko, A., Nedbal, L., Salih, A.

Guanine, a high-capacity and rapid-turnover nitrogen reserve in microalgal cells. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **2020**, *117*(51), 32722–32730.

Pilátová, J., Pánek, T., Oborník, M., Čepička, I., Mojzeš, P.

Revisiting biocrystallization: purine crystals are widespread in eukaryotes. *The ISME Journal*, **2022**, *16*(9), 2290–2294.

Pilátová, J., Tashyreva, D., Týč, J., Vancová, M., Bokhari, S. N. H., Skoupý, R., Klementová, M., Küpper, H., Mojzeš, P., Lukeš, J.

Massive accumulation of strontium and barium in diplomemid protists. *mBio*, **2023**, *14*(1), e03279-22.

Ve svém souboru prací demonstrují verzatilitu a velký informační potenciál Ramanovy mikrospektroskopie pro použití v mikrobiologii. Na příkladech identifikace a charakterizace několika nově objevených buněčných inkluzí, popř. jejich neočekávané lokalizace v kontextu buňky, ilustrují možnosti této doposud v biologii málo používané mikrospektroskopické metody pro studium chemického složení buněk *in vivo*.

V prvním článku jsme nejdřív narazily na zvláštní struktury chloroplastů jednobuněčné spájkivky *Cylindrocystis* sp. (Zygnematophyta, Streptophyta) během jejich prostorové rekonstrukce. Následná analýza Ramanovou mikrospektroskopií prokázala masivními akumulace polyfosfátu, který není jako v jiných druzích v cytoplazmě, ale právě uvnitř chloroplastů, což nebylo dosud známo. Zároveň jsme vyvrátili přítomnost Kopetzky-Rechtbergova tělíska. Tato nově objevená schopnost zygneumatofyt, sesterské skupiny suchozemských rostlin, nás vede ke spekulacím o možné adaptaci na extrémní arktické podmínky nebo dokonce preadaptaci vedoucí k terestrializaci rostlin.

V druhém a třetím článku shrnujeme znovu objevení purinových krystalických inkluzí u obrněnek (Dinoflagellata, Alveolata) a dalších mikroskopických řas. Nejprve jsme zkoumali druhy způsobující toxické vodní květy a zooxantely, endosymbionti korálů budujících útesy. Dále jsme prokázali, že purinové krystaly fungují jako dynamická vysokokapacitní zásobárna

Interpretable Artificial Neural Networks for Advanced Processing of Spectroscopic Data

Ing. Jakub Vrábek

Central European Institute of Technology (CEITEC),
Laboratory of Laser Spectroscopy,
E-mail: jakub.vrabel@ceitec.vutbr.cz

List of works:

1. Vrábek, J.; Pořízka, P.; Kaiser, J.
Restricted Boltzmann Machine method for dimensionality reduction of large spectroscopic data.
Spectrochim. Acta B. **2020**, *167*, 105849.
2. Vrábek, J.; Képeš, E.; Pořízka, P.; Kaiser, J.
Artificial neural networks for classification (book chapter in *Chemometrics and Numerical Methods in LIBS*, edited by Palleschi, V.)
John Wiley & Sons, Ltd. **2022**, 213-240.
3. Vrábek, J.; Képeš, E.; Nědelník, P.; Buday, J.; Cempírek, J.; Pořízka, P.; Kaiser, J.
Spectral library transfer between distinct laser-induced breakdown spectroscopy systems trained on simultaneous measurements.
J. Anal. At. Spectrom. **2023**, *38*, 841-853.
4. Képeš, E.; Vrábek, J.; Brázdil, T.; Holub, P.; Pořízka, P.; Kaiser, J.
Interpreting convolutional neural network classifiers applied to laser-induced breakdown optical emission spectra.
Talanta. **2024**, *266*, 124946.

Extensive adoption of machine learning (ML) algorithms became prevalent in all aspects of life, naturally including research. In spectroscopy, rapid instrumental advances now allow for the collection of large datasets (up to millions of spectra) challenging traditional analytical methods. Artificial Neural Networks (ANNs) serve as the backbone of the current ML boom, excelling in the processing big data while consistently achieving state-of-the-art results and enabling novel applications such as data generation. However, the significant drawback of ANNs lies in their limited interpretability, often referred to as the black-box behavior (Fig. 1), which limits its scientific applicability. The presented series of articles covers pioneering endeavors in Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS), leveraging ANNs' strengths and addressing their limitations in spectroscopic applications.

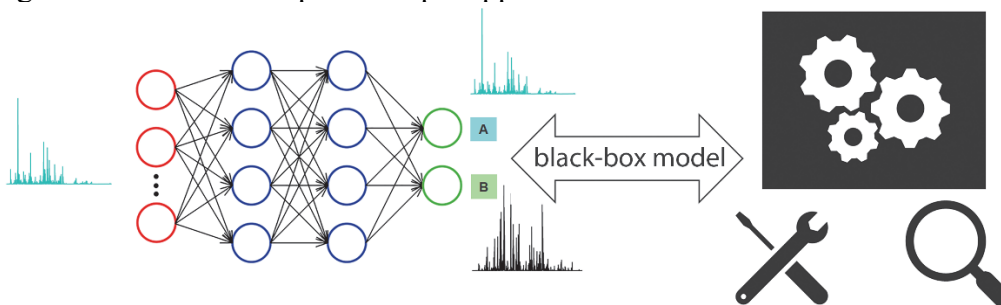


Fig. 1. (Illustration) Black-box behavior of the artificial neural network classifier.

The first article investigated the use of Restricted Boltzmann Machine (RBM), a generative ANN model inspired in physics, for dimension reduction and data generation. A large dataset with 10,000 wavelength variables was compressed to lower dimensions (5 – 100) and subsequently reconstructed back. This was benchmarked against the Principal Component Analysis (PCA). While RBM's reconstruction error was slightly higher, its computing time was notably faster (1:18 ratio with PCA) and it was not memory-bound. Importantly, RBM was capable to generate new, realistic spectra from a learned probability distribution, a crucial feature for low-data applications. Note that modern generative models recently gained an unprecedented popularity (in tools like DALL-E or ChatGPT).

The second publication, an invited book chapter, reviewed the use of ANNs for classification of LIBS spectra. It provides a formal introduction to key models such as multilayer perceptrons (MLPs) and convolutional neural networks (CNNs), specifically tailored for a spectroscopic audience. The chapter outlined best practices for achieving optimal model performance and included a comprehensive literature review on the application of ANNs in LIBS, tracing used architectures, regularization techniques, and performance metrics.

The third publication proposed a novel algorithm that combined a variational autoencoder (VAE) with an MLP for transferring spectra between LIBS systems with different resolutions and spectral ranges (Fig 2, a). A unique setup was employed to simultaneously measure spectra from two devices, providing the training data. The trained model was used to transfer unseen spectra from the system with a narrow spectral range to a wide-range primary system. Results yielded low transfer error (Fig 2, b), enabling the use of the methodology especially for the case of qualitative analysis (material detection, classification, clustering). The work also served as a proof of concept for the possibility of creating universal spectral libraries for LIBS.

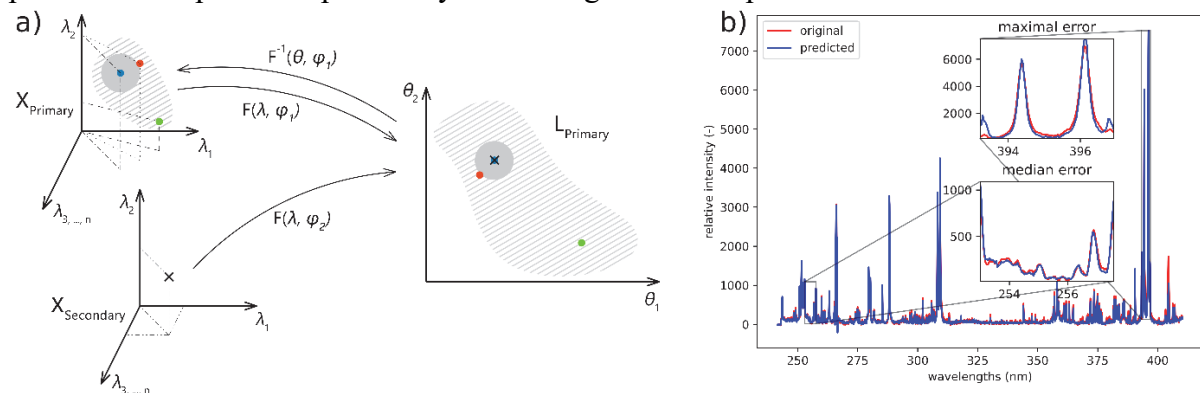


Fig. 2. Spectra transfer between two instruments. a) Model Architecture: Primary system spectra are reversibly mapped to a latent space via a VAE, while corresponding secondary system spectra are mapped to the same space using an MLP. b) Example of a spectrum transferred from the secondary to the primary system.

The fourth publication was a pioneering work aimed at interpreting black-box CNN models that were trained to classify LIBS spectra from the ChemCam instrument. We employed feature visualization techniques to compute class-optimal inputs for selected output neurons, generating prototype spectra that enlighten the model's perception of the classes/materials. Comparing these prototypes to real measurements confirmed that CNNs utilize meaningful features, such as spectral lines, for their predictions. Efforts towards ANN interpretability are crucial to enable high-stake spectroscopic applications (e.g., in medicine).

Rychlá a účinná LC-MS/MS diagnostika dědičných metabolických poruch: poloautomatický pracovní postup pro analýzu organických kyselin, acylglycinů a acylkarnitinů v moči

Mgr. Barbora Piskláková

Oddělení klinické biochemie, Fakultní nemocnice Olomouc
Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci
E-mail: barbora.pisklakova@upol.cz

Seznam soutěžních prací:

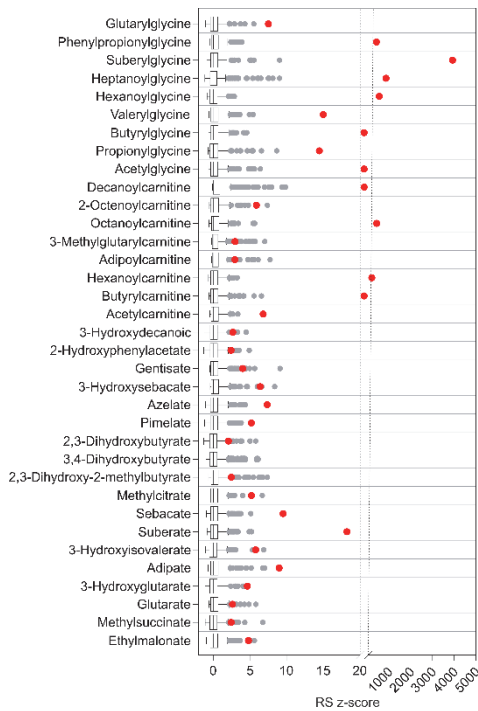
Piskláková, B., Friedecká, J., Ivanovová, E., Hlídková, E., Bekárek, V., Prídavok, M., Kvasnička, A., Adam, T. & Friedecký, D. (2023). Rapid and efficient LC-MS/MS diagnosis of inherited metabolic disorders: a semi-automated workflow for analysis of organic acids, acylglycines, and acylcarnitines in urine. *Clinical Chemistry and Laboratory Medicine (CCLM)*, **2023**, 61(11), pp. 2017-2027. <https://doi.org/10.1515/cclm-2023-0084>

Hmotnostní spektrometrie (MS) se mimo další oblasti laboratorní diagnostiky vyprofilovala v nepostradatelnou analytickou techniku pro diagnostiku dědičných metabolických poruch (DMP). Již více než 50 let se pro diagnostiku organických acidurií rutinně využívá kombinace technik plynové chromatografie a hmotnostní spektrometrie (GC-MS). Rutinní GC-MS metoda umožňuje analýzu širokého spektra organických kyselin, avšak vykazuje řadu omezení. Příprava zahrnuje dlouhou a složitou derivatizaci a dvoustupňovou extrakci, s čímž je spojena ztráta analytů. Vyhodnocení analýz je náročné a zdouhavé, vyžadující kvalifikovaný personál s letitými zkušenostmi. Celý proces od přípravy vzorku až po vyhodnocení trvá 8-10 hod, což činí tento přístup problematickým v případě urgentních požadavků u pacientů s akutní klinickou prezentací.

V rámci této práce byl vyvinut inovativní přístup diagnostiky organických acidurií založený na analýze organických kyselin, acylkarnitinů a acylglycinů v moči metodou vysokoúčinné kapalinové chromatografie ve spojení s tandemovou hmotnostní spektrometrií (LC-MS). Příprava vzorku je velmi jednoduchá, zahrnující pouze standardizaci vzorku moči naředěním na koncentraci kreatininu 1 mmol/L a přidavek směsi interních standardů (n=6). LC-MS analýza je provedena během 26 minut na chromatografické koloně Acquity HSS T3 C18 (1,8 μm, 100 x 2,1 mm, Waters) na HPLC přístroji Exion LC spojeném s hmotnostním spektrometrem QTRAP 6500+ (Sciex) vybaveným elektrosprejem. Detekce a kvantifikace celkem 146 analytů probíhá v časových oknech (scheduled MRM) v systému přepínání polarit. Metoda umožňuje současně analyzovat 99 organických kyselin, 32 acylkarnitinů a 15 acylglycinů, díky čemuž je touto metodou možné diagnostikovat více než 80 DMP.

Poloautomatické vyhodnocení je složeno z následujících kroků:

- 1) Automatická integrace chromatografických píků v software Sciex OS.
- 2) Výpočet robustně škálovaného (RS) z-skóre podle rovnice: $X=(x_i - \bar{X})/(Q_3 - Q_1)$, (x_i =poměr ploch daného analytu, \bar{X} =medián zdravých kontrol daného analytu, Q_3-Q_1 =interkvartilové rozpětí zdravých kontrol daného analytu).



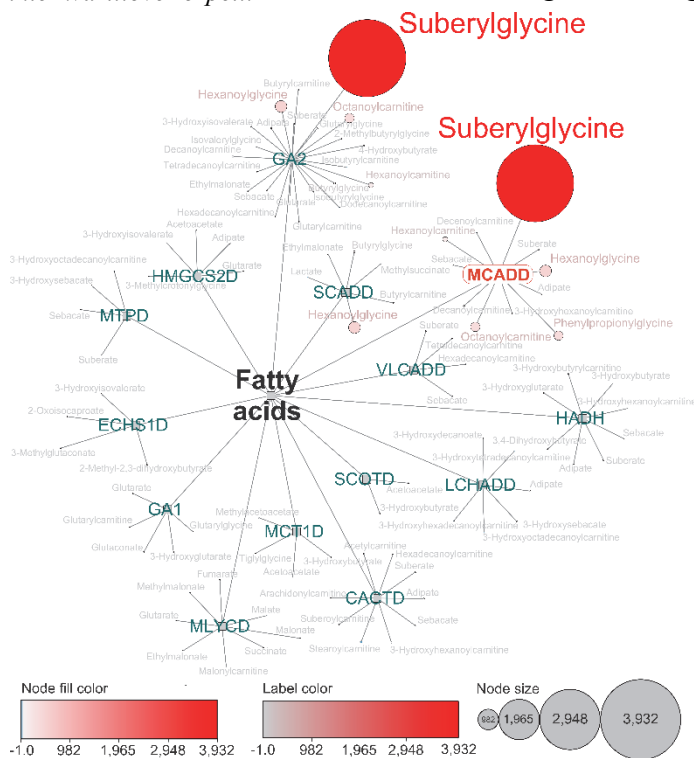
Obr. 1. Hodnoty RS z-skóre vynesené v softwaru GraphPad Prism pro pacienta s MCADD. Šedé body představují hodnoty RS z-skóre zdravých kontrol, červené body hodnoty pro pacienta s MCADD. Zobrazeny jsou pouze analyty s hodnotami RS mimo interkvartilové rozpětí.

3) RS z-skóre jsou pro všechny analyty vizualizována v GraphPad Prism pomocí krabicových grafů, kde je možné sledovat změny v hladinách biomarkerů pro každého pacienta ve srovnání se zdravou populací (příklad pacienta s deficitem acyl-CoA dehydrogenasy mastných kyselin se středně dlouhým řetězcem (MCADD) - obr. 1).

4) Pokročilá vizualizace výsledků v software Cytoscape, kde byla vytvořena metabolická mapa DMP a je možné tak pozorovat změny v hladinách biomarkerů na úrovni zasaženého metabolismu (pacient s MCADD - obr. 2).

Nová LC-MS metoda prošla plnou analytickou validací podle předpisů Evropské lékové agentury (EMA) a Úřadu pro kontrolu potravin a léčiv U.S. (FDA). Metoda byla v posledních dvou letech zařazena do rutinního diagnostického procesu naší laboratoře, kde bylo analyzováno již více než 1000 vzorků močí. V rámci klinické validace bylo správně diagnostikováno 93 pacientů s 34 různými DMP (externí hodnocení kvality z programu ERNDIM se 100% úspěšností). Metoda poskytuje medián stability retenčních časů CV=1,6 % pro všechny analyty při rutinním používání po dobu jednoho roku.

Tato metoda se v naší laboratoři stala první volbou pro diagnostiku organických acidurií a je také využívána pro vyloučení falešné positivity z novorozeneckého screeningu pro izovalerovou acidémii. Dříve používaná GC-MS je prováděná jen pro kontrolní účely. Výhodou této nové robustní metody je snadná integrace předem vybraných piků pomocí softwaru Sciex OS a následný výpočet RS z-skóre. Analýzu vzorku pacienta lze provést ihned po analýze slepého vzorku, podle našich zkušeností lze získat výsledek jednoho pacienta do 1 h od dodání vzorku, čímž se stala již nepostradatelnou pro akutní případy, jako jsou metabolické krize. Potřeba malého množství vzorku (100 µL) je výhodná v případech problematického odběru u malých dětí a přináší potenciál pro mikrovzorkovací technologie a domácí odběry. O metodu již projevil zájem klinické laboratoře v Norsku, Francii a na Slovensku a plánují ji taktéž zařadit do rutinního provozu.



Obr. 2. Metabolická mapa DMP pro pacienta s MCADD. Zobrazena je pouze část mapy s metabolismem mastných kyselin. Koncové uzly představují biomarkery, které jsou napojeny na příslušné onemocnění. Podle hodnoty RS z-skóre dochází ke změně velikosti a barvy koncového uzlu (viz legenda).

Analýza ultra stopových koncentrací enantiomerů oxaliplatiny a jejich lékopisných nečistot pomocí CE-ICP-MS

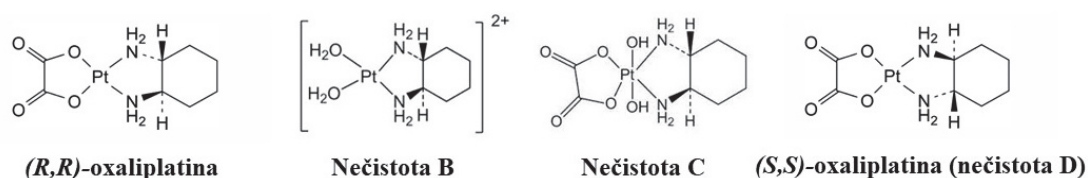
RNDr. Tomáš Pluháček, Ph.D.

Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta, Katedra analytické chemie,
E-mail: tomas.pluhacek@upol.cz

Seznam soutěžních prací:

- Šebestová A., Baron D., Pechancová R., Pluháček T., Petr J.
Determination of oxaliplatin enantiomers at attomolar levels by capillary electrophoresis connected with inductively coupled plasma mass spectrometry.
Talanta **2019**, 205, 120151.
- Švecová P., Baron D., Schug K. A., Pluháček T., Petr J.
Ultra-trace determination of oxaliplatin impurities by sweeping-MEKC-ICP-MS.
Microchemical Journal **2022**, 172, 106967.

Uvedené práce se věnují vývoji analytických metod využívajících unikátního „in-house“ spojení kapilární elektroforézy (CE) s hmotnostní spektrometrií s indukčně vázaným plazmatem (ICP-MS) pro kontrolu kvality farmaceutické výroby se zaměřením na chirální čistotu oxaliplatiny a přítomnost ultra stopových koncentrací lékopisných nečistot. Oxaliplatin patří do skupiny platinových cytostatik je celosvětově využívána pro léčbu různých typů nádorových onemocnění. Nicméně, v komerčně dostupných přípravcích může být přítomna kromě účinné látky ((*R,R*)-oxaliplatin) také celá řada vedlejších produktů (příbuzné či neznámé nečistoty), které musí být pravidelně monitorovány. V případě oxaliplatin se jedná o nečistotu A (kyselina šťavelová), nečistotu B, nečistotu C a nečistotu D s maximálním povoleným limitem 0,1 % (Ob. 1). [1, 2]

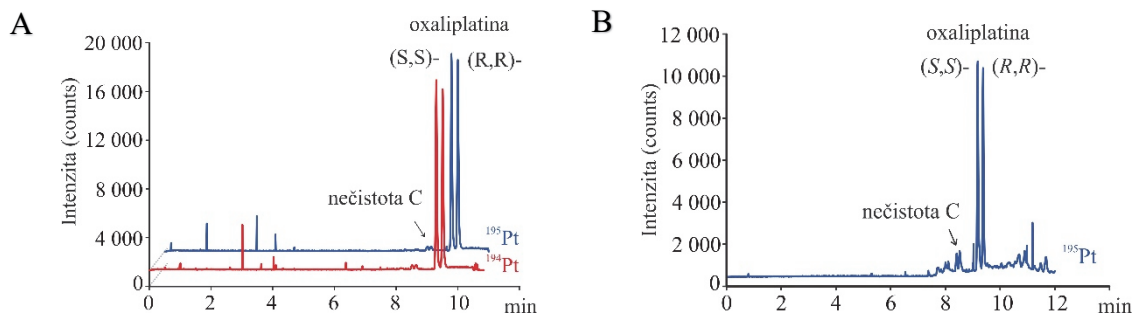


Obr. 1 Struktury (*R,R*)-oxaliplatinu a lékopisných nečistot obsahujících Pt: nečistota B, nečistota C, nečistota D.

Pro separaci enantiomerů oxaliplatinu a dalších nečistot obsahujících platinu byla využita kapilární elektroforéza, jenž je považována za výjimečnou separační techniku vyznačující se svou univerzálností, vysokou účinností, rychlostí separace a malou spotřebou vzorku či separačních elektrolytů. Značnou nevýhodou přístrojů vybavených UV-VIS detektorem je nedostatečná citlivost, kterou však lze kompenzovat využitím on-line/off-line pre-koncentračních technik či spojením CE s hmotnostním spektrometrem, popřípadě kombinací obou přístupů. [2] Pro dosažení vyšší citlivosti detekce enantiomerů oxaliplatinu a dalších nečistot bylo v naší laboratoři zkonstruováno „in-house“ robustní rozhraní* spojující CE (7100 CE) s prvkově/izotopově specifickou detekcí pomocí ICP-MS (7700x ICP-MS).

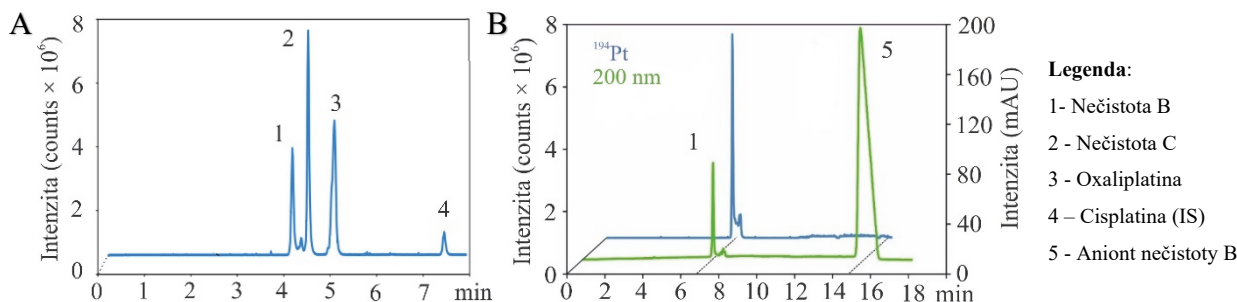
První práce byla zaměřena na studium chirální čistoty oxaliplatinu, kdy separace enantiomerů oxaliplatinu probíhala v prostředí separačního pufru o pH 9 s přídatkem 60 mg/ml sulfatovaného β -cyklodextrinu (*S*- β -CD). Vyvinutá CE-ICP-MS metoda poskytovala separaci velmi nízkých koncentrací enantiomerů (*R,R*)-, (*S,S*)-oxaliplatinu a nečistoty D v modelových

vzorcích (Obr. 2A). Mimoto, specifická a citlivá detekce (detekce 97 attomolů v nadávkované zóně) umožnila separovat a identifikovat analyty v modelových vzorcích moče (Obr. 2B), kde se interpretace CE-UV-VIS elektroforegramů ukázala být prakticky nemožná. [1]



Obr. 2 Separace enantiomerů oxaliplatin v modelovém vzorku (A) a vzorku moče (B). Optimalizované podmínky: 40 mM $H_3BO_3/NaOH$ pH 9,5 s 60 mg/ml S- β -CD, kapilára 25 $\mu m \times 64,5$ cm, + 30 kV, dávkování 100 mbar/5 s, pomocná kapalina 20 \times zředěný elektrolyt, monitorované izotopy ^{194}Pt , ^{195}Pt , integrační čas 200 ms.

Druhá práce je zaměřena na vývoj doposud nepublikovaného přístupu založeného na kombinaci micelární elektrokinetické chromatografie s on-line prekoncentrací (sweeping-MEKC-ICP-MS) pro simultánní stanovení ultra stopových koncentrací oxaliplatin a jejich lékopisných nečistot obsahujících Pt. Úplné separace analytů bylo dosaženo během 6 minut s rozlišením výrazně vyšším než 1,5 (Obr. 3A). Vyvinutá metoda byla úspěšně validována v rozsahu testování meze detekce, meze stanovitelnosti, linearity, pravdivosti a preciznosti. V porovnání s CE-UV-VIS detekcí dosahovalo spojení online prekoncentrace s ICP-MS až 3500x nižších mezí detekce na úrovni 1 ng/ml (nečistota C). Kromě unikátních mezí detekce, širokého lineárního dynamického rozsahu (až 6 řádů) se ICP-MS ukázalo být nenahraditelným nástrojem při identifikaci píku stabilizačního aniontu nečistoty B, který by mohl být chybně zaměněn s nečistotou B v případě nespecifické UV-VIS detekce (Obr. 3B). Sweeping-MEKC-ICP-MS metoda umožnila detekci lékopisných nečistot v modelových vzorcích oxaliplatin od 0,0003 %. Na závěr lze konstatovat, že CE-ICP-MS je univerzální, rychlou, vysoce účinnou a citlivou technikou separace, identifikace a detekce „metal-based“ organických molekul v různých typech vzorků od farmaceutických přípravků až po komplexní biologické vzorky.



Obr. 3 (A) Separace oxaliplatin a nečistot obsahujících Pt o koncentraci 0,5 $\mu g/ml$ (nečistota B) a 1,0 $\mu g/ml$ (Oxaliplatin, nečistota C); (B) identifikace nečistoty B a jejího stabilizačního aniontu. Optimalizované podmínky: 25 mM $H_3PO_4/NaOH$ pH 2,15 s 175 mM SDS, kapilára 50 $\mu m \times 64,5$ cm, - 30 kV, dávkování 50 mbar/90 s, monitorované izotopy ^{194}Pt , ^{195}Pt a ^{197}Au (interní standard – IS), integrační čas 300 a 100 ms.

Reference:

- [1] Šebestová A. et. al.: *Talanta* **2019**, 205, 120151.
 [2] Švecová P., et. al.: *Microchemical Journal*, **2022**, 172, 106967.

* Na konstrukci „in-house“ rozhraní se podíleli RNDr. Tomáš Pluháček, Ph.D., RNDr. Martin Švidrnoch, Ph.D., Mgr. Daniel Baron, Ph.D. a doc. RNDr. Vítězslav Maier, Ph.D.

UV-VIS SPEKTROFOTOMETRY THERMO SCIENTIFIC

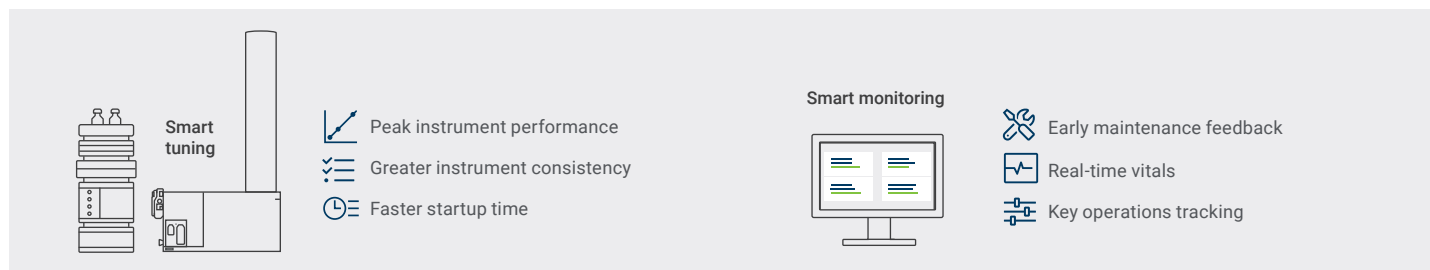


- široká paleta spektrofotometrů pro všechny běžné i sofistikovanější aplikace
- řada Genesys pro rutinní i náročné operace
- řada Evolution pro pokročilý výzkum a aplikace ve farmaceutickém průmyslu v souladu s doporučeními USP/EP/JP
- speciální softwarové vybavení pro Life-Science, pivovarský průmysl, validační softwary pro farmaceutický průmysl
- aplikační podpora
- výhodné ceny pro tento rok

(R)Evidentně nový QTOF

Ponořte se hlouběji do svého vzorku s novým Agilent Revident LC/QTOF MS

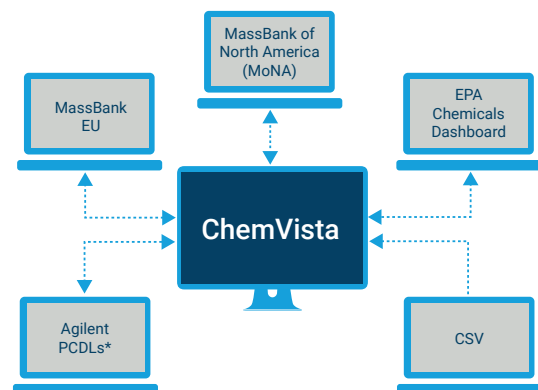
- **Nový design** celé dráhy iontů: vstupní optika, termostatovaná letová trubice a MCP detektor iontů
- Vyšší **MS rozlišení**, **stabilita** odezev i **robustnost**, širší **lineární dynamický rozsah**
- Vestavěná **intelligence**: SWARM ladění, plánované ladění, autodiagnostika a včasné upozornění na závady, pravidelné údržby
- **iReflex pro screening**: automatická reanalýza vzorku pro naměření cílených MS/MS spekter pro suspektní analyty



Zcela nové rozhraní HRMS knihoven

Agilent ChemVista library manager

- Použití **lokální knihovny spekter** nebo **internetových databází**
- Více než **14 500 analytů** z oblasti drog, léčiv, kontaminantů životního prostředí a potravin, z toho více než **6100 analytů s MS/MS spektry**
- Agilent **Metlin** revidovaná databáze knihovna spekter
- Knihovna pro **GC/QTOF** - metabolomika, přírodní látky, pesticidy a environmetální kontaminanty



PODÍVEJTE SE NA SVĚT NAŠÍ OPTIKOU



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

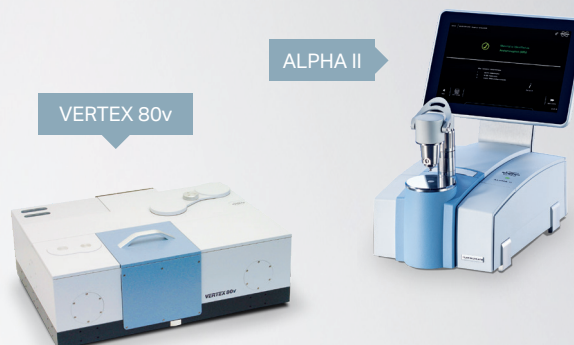
FT-IR spektrometry

ALPHA II

- Kompaktní spektrometr pro rutinní analýzu i výzkum
- Široká škála měřicích modulů

INVENIO | VERTEX série

- Nejvýkonnější výzkumné spektrometry na trhu
- Propojení s mikroskopem, Ramanem, TGA, GC...
- Rozšíření spektrálního rozsahu od FIR/THz do VIS/UV oblastí



Ramanovy a FT-NIR spektrometry

BRAVO
ruční Raman



MPA II FT-NIR
spektrometr



MultiRAM | RAM II | BRAVO

- Univerzální stolní FT-Ramanovy spektrometry
- BRAVO je ruční Raman nové generace

MPA II | TANGO | MATRIX

- FT-NIR spektrometry pro nejrůznější QC/QA aplikace
- MATRIX je procesní FT-NIR spektrometr přímo do výroby

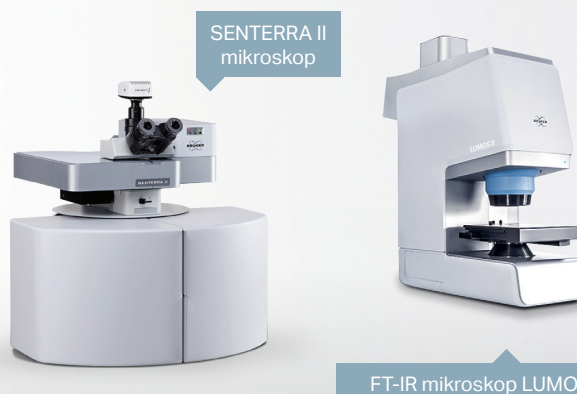
FT-IR a Ramanovy mikroskopy

HYPERION II | LUMOS II

- LUMOS II FT-IR mikroskop s vysokým stupněm automatizace a rychlým mapováním
- HYPERION je špičkový FTIR mikroskop umožňující QCL technologii pro nejrychlejší mapování a nejvyšší prostorové rozlišení.

SENTERRA II

- Kompaktní Ramanův mikroskop pro pohodlné mapování
- Umožňuje kombinaci až 4 laserů v rozmezí 1064-488 nm



SENTERRA II
mikroskop

FT-IR mikroskop LUMOS II

NABÍDKA PUBLIKACÍ SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI JMM

Podzimní škola rentgenové mikroanalýzy 2010, sborník přednášek na CD	199,- Kč
Názvosloví IUPAC (Part XII: Terms related to electrothermal atomization; Part XIII: Terms related to chemical vapour generation)	35,- Kč
5. kurz ICP spektrometrie 2009	350,- Kč
6. kurz ICP spektrometrie 2011	350,- Kč
Kurz AAS pro pokročilé (1996)	120,- Kč
12. Spektroskopická konference	190,- Kč
13. Spektroskopická konference (2007 Lednice)	130,- Kč
AAS II – kurz pro pokročilé (2006)	435,- Kč
Atomová absorpční spektrometrie - Kurz AAS I (2015) – kovová kroužková vazba	590,- 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, 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: 15. 2. 2024

uzávěrka příštího čísla: 17. 6. 2024