



AKADEMIE VĚD ČESKÉ REPUBLIKY

Dotazník Základní údaje o činnosti pracoviště AV ČR v roce 2011 a hlavní dosažené výsledky I. Textová část

1. **Název pracoviště: Ústav analytické chemie AVČR, v. v. i.**

Zkratka pracoviště: UIACH

IČ: 68081715

2. Vědecká činnost pracoviště a uplatnění jejích výsledků

2a) stručná charakteristika vědecké činnosti pracoviště

Česky: Předmětem hlavní činnosti pracoviště je výzkum a vývoj nových principů, metod a instrumentace v oblasti analytických metod použitelných pro rozvoj dalších vědeckých oblastí, především biologických a medicínských věd, ochrany zdraví člověka a životního prostředí. Základní výzkum je zaměřen zejména na separační a spektrální metody, systémovou miniaturizaci a nanotechnologie; v problémové oblasti je zaměřen na proteomiku, genomiku, analýzu léčiv, tělních tekutin a monitorování životního prostředí. Výzkum je prováděn v sedmi vědeckých odděleních, v nichž byli v roce 2011 zaměstnáni výzkumní pracovníci včetně doktorandů celkovým úvazkem 44,5. Směry výzkumu byly určeny Výzkumným záměrem AV0Z40310501 na léta 2005-2011 Moderní analytické techniky pro bioanalýzu, ekologii a nanotechnologie.

Anglicky: Scientific activities of the Institute of Analytical Chemistry are focused on research and development of new principles, methods and instrumentation in the field of analytical methods applicable for development of new scientific areas, especially biological and medical science, human health and environmental protection. Basic research is focused on separation and spectroscopic methods, systemic miniaturization and nanotechnology, in a problematic area is targeted on proteomics, genomics, drug analysis, body fluid analysis and environmental monitoring. Research activities are performed in seven scientific departments, in which scientific researchers and undergraduate students were employed with 44,5 hours of full time equivalent. Research orientation was defined by Institutional Research Plan AV0Z40310501 Advanced analytical techniques for bioanalysis, environmental analysis and nanotechnology.

2b) výčet nejdůležitějších výsledků vědecké činnosti

1 Pořadové číslo	2 Výsledek	3 Číslo citace výsledku
1	Při identifikaci chřipkových virů z hlediska izoelektrických bodů izolátů různých kmenů viru prasečí či koňské chřipky byla nalezena shoda mezi izoelektrickými body izolátů různých kmenů koňské nebo prasečí chřipky. Mobility jednotlivých kmenů u obou chřipkových virů se však při kapilární zónové elektroforéze liší. Výsledky byly konfrontovány s technikami PCR.	[1]
2	Na více kmenech bylo zjištěno, že <i>C. parapsilosis</i> , <i>C. orthopsilosis</i> a <i>C. metapsilosis</i> (biofilm-pozitivní i biofilm-negativní) jsou charakterizovány jak svými izoelektrickými body, tak se liší i svými mobilitami při kapilární izoelektrické fokusaci. Lyzáty těchto kvasinek na gelové izoelektrické fokusaci, hmotnostní gelové elektroforéze i 2-D elektroforéze jsou charakterizovány svými fingerprintovými profily zón. Obdobný výsledek byl získán při jejich hmotnostně spektrometrické analýze .	[2]
3	Byla vyvinuta metodika pro syntézu nanočástic oxidů železa a jejich následnou imobilizaci na povrch kapilárních monolitických kolon na bázi metakrylátů. Modifikace monolitů nanočásticemi vykazuje výrazně vyšší stabilitu, kapacitu a selektivitu ve srovnání s ostatními monolitickými materiály. Afinita nanočástic k fosforylovaným látkám byla demonstrována účinnou izolací fosfopeptidů s jejich následnou detekcí pomocí hmotnostní spektrometrie.	[3]
4	Elektromigrace kvantových teček, jejich konjugátů a imunokomplexů byla studována s ohledem na velikost a náboj částic a také v závislosti na iontové síle základního elektrolytu. Koncentrace a pH základního elektrolytu byla v konečné fázi optimalizována tak, aby bylo dosaženo plného rozlišení imunokomplexů a nezreagovaných komponent konjugační reakce.	[4]
5	Byla studována možnost využití kvantových teček jako luminoforů s vysokou jasností a možností ladění emise	[5]

1 Pořadové číslo	2 Výsledek	3 Číslo citace výsledku
	v závislosti na jejich velikosti. Byly studovány biokonjugační reakce s využitím "zero-length crosslinkers, long-chain linkers" a orientovaných technik pro připojení kvantových teček k proteinům. Anti-ovalbumin, anti-proliferating cell nuclear antigen, anti-hemagglutinin, a anti-CD3 membránový protein byly vybrány jako modelové protilátky a vazbě na kvantové tečky.	
6	Byl studován vliv uhličitánů na elektroforetické analýzy v alkalických systémech s vodivostní a nepřímou UV detekcí. Počítačové simulace a experimenty ukázaly, že absorpce vzdušného oxidu uhličitého může vést k tvorbě pohyblivých systémových zón nebo rozhraní, které negativně ovlivňují migraci analytů. Čím vyšší je pH, tím znatelněji se uvedené efekty projevují, a jejich spektrum zahrnuje např. změnu efektivních mobilit a selektivity v důsledku změny pH, výskyt dodatečných píků nebo složitějších artefaktů v detekčním signálu, nebo modifikaci separačního procesu přechodnou interakcí se složkami vzorku. Navržený teoretický přístup umožňuje předpovědět chování konkrétních systémů a tím eliminovat problémy s kvalitativním i kvantitativním vyhodnocením výsledků analýz.	[6]
7	Byl vyvinut systém pro in-line a on-line spojení clean-up metod s kapilární elektroforézou pro přímé dávkování komplexních vzorků. Jednorázové, krátké open-tubular iontově výměnné kolonky byly spojeny in-line s analytickou kapilární kolonou. Na aktivních místech kolonky dochází k zachycení matričních balastních látek (např. proteinů z tělních tekutin), zatímco malé analyty (anorganické ionty) volně procházejí do analytické kapiláry.	[7]
8	Pomocí elektromembránové extrakce (EME) byly v tělních tekutinách stanoveny endogenní a terapeutické koncentrace lithia a řada esenciálních aminokyselin, z nichž některé (fenylalanin, a aminokyseliny s rozvětveným řetězcem) jsou markery vrozených metabolických poruch. Při extrakci byl použit krátký segment porézního polypropylenového dutého vlákna, jehož stěny byly napuštěny organickým rozpouštědlem, a které představovalo lacinou extrakční jednotku pro jednorázové použití. Byla vypracována metoda využívající elektromembránovou extrakci a kapilární elektroforézu pro stopových stanovení chloristanu, který může způsobovat vážné poruchy funkce štítné žlázy, v pitných vodách a environmentálních vzorcích.	[8-10]
9	Byly stanoveny hlavní anorganické kationty v krevním séru, plasmě a krvi pomocí nově vyvinutého postupu pro úpravu biologických vzorků pomocí mikroelektrodialýzy. Proteiny a jiné vysokomolekulární sloučeniny vzorků jsou selektivně zachyceny na ultrafiltrační membráně, přes kterou projdou pouze ionty o určité velikosti, které jsou stanoveny kapilární elektroforézou.	[11]

1 Pořadové číslo	2 Výsledek	3 Číslo citace výsledku
10	Byl testován nově vyvinutý analytický postup pro separaci a zakoncentrování těžkých kovů z reálných vzorků pitné vody a práškového mléka pomocí elektromembránové extrakce. Těžké kovy jsou vychytány z vodného roztoku donoru do vodného roztoku akceptoru přes stěny tenkého dutého vlákna, které je napuštěno organickou kapalnou membránou, a vodný extrakt je analyzován kapilární elektroforézou.	[12]
11	Byly publikovány práce shrnující nové poznatky na polích kapacitně vázané bezkontaktní vodivostní detekce, analytické kapilární izotachofórey, stackovacích technik v elektroforéze a elektrolytových systémů užívaných v kapilární elektroforéze při on-line kombinaci s hmotovou spektrometrií.	[13-16]
12	Byla vypracována a validována metoda stopové speciální analýzy arsenu přímo ze vzorků suspenzí tkání a buněk založená na selektivním generování hydridů, kryogenní prekoncentraci a separaci a na detekci atomovou absorpční spektrometrií. Tato metoda nevyžaduje rozklad vzorků ani extrakci analytů a unikátně tak umožňuje i stanovení velmi nestabilních forem arsenu v tkáních. (Spolupracující subjekt: University of North Carolina at Chapel Hill, Department of Nutrition, Chapel Hill, NC, USA.)	[17]
13	Interference molekulárního kyslíku a vodní páry v oblasti pod 200 nm, v blízkosti analytických čar hydridotvorných prvků - arsenu a selenu, byly studovány pomocí atomové absorpční spektrometrie ve dvou režimech měření, v módu generování hydridu As a Se s on-line atomizací a v režimu prekoncentrace hydridu v křemenném atomizátoru. Rozsah interference je závažný v režimu s prekoncentrací a záleží výrazně na teplotě atomizátoru. Použití spektrometru s kontinuálním zdrojem záření a monochromátorem s vysokým rozlišením (HR-CS AAS) prokázalo, že absorpce kyslíku vytváří strukturované pozadí, které nelze kompenzovat deuteriovým zdrojem, zatímco vodní pára vytváří ve studovaném intervalu pseudo-kontinuální pozadí, které lze tímto kompenzovat. (Spolupracující subjekt: ISAS-Institute for Analytical Sciences, Department of Interface Spectroscopy, Berlin, Germany.)	[18]
14	Byly studovány a porovnávány tři různé plazmové zdroje nízkého výkonu pracující za atmosférického tlaku (laboratorně zhotovený dielectric barrier discharge a radiofrekvenčně buzený doutnavý výboj i koronový výboj v komerční verzi DART zdroje). Všechny tři zdroje jsou srovnatelné a svými parametry způsobilé pro použití v ambientní hmotnostní spektrometrii, tj. mohou sloužit k desorpci a ionizaci pevných analytů pro jejich následnou detekci pomocí hmotnostní spektrometrie, jak bylo prokázáno na příkladu acetaminofenu jako analytu. (Spolupracující subjekt: National Research Council of Canada, Institute for National Measurement Standards, Ottawa, Ontario, Canada.)	[19]
15	Metoda stopové speciální analýzy arsenu přímo ze vzorků suspenzí tkání a buněk pomocí selektivního	[20]

1 Pořadové číslo	2 Výsledek	3 Číslo citace výsledku
	generování hydridů byla využita k ověření stability velmi snadno oxidovatelných trivalentních methylovaných specií arsenu ve vzorcích tkání a buněk během přípravy a skladování za různých podmínek. (Spolupracující subjekt: University of North Carolina at Chapel Hill, Department of Nutrition, Chapel Hill, NC, USA.)	
16	Námi vyvinutá metoda prekoncentrace antimonu v křemenném atomizátoru s následnou detekcí pomocí atomové absorpční spektrometrie byla použita pro stanovení antimonu ve vyluzích ze slitinových kelímků používaných pro servírování vína a octa. Závažná interference cínu jako hlavní složky slitiny byla eliminována zvýšením koncentrace HCl v matrici, čímž došlo ke snížení účinnosti generování hydridu cínu a omezení jeho vstupu do atomizátoru. Byla měřena časová závislost přestupu antimonu ze stěny kelímku do roztoku a bylo zjištěno, že již po 3 hodinách dochází k překročení povolené koncentrace antimonu (dle WHO i US EPA) v modelovém roztoku octa. (Spolupracující subjekt: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Química, Porto Alegre, Brazil.)	[21]
17	V prestižních médiích (Encyclopedia of Analytical Chemistry a Pure and Applied Chemistry) byly publikovány přehledy analytických metod založených na generování těžkých specií pro atomovou spektrometrii. Především se jednalo o kritickou diskuzi teorie, instrumentace, metodologie, interferencí a mechanismu chemické reakce analytu s tetrahydroboratem. Velká pozornost byla rovněž věnována speciální analýze jednotlivých hydridotvorných prvků.	[22, 23]
18	Byl izolován přirozený mutant Methanothermobacter thermautotrophicus odolný vůči harmalínu, inhibitoru Na ⁺ /H ⁺ antiportního transportéru. Pomocí hmotnostní spektrometrie bylo v mutantních kmenech pozorováno značné zvýšení obsahu membránových proteinů, flavoproteinu A a podjednotky C molybden-obsahující formylmethanofuran dehydrogenáza.	[24]
19	Byly syntetizovány a na základě spektrálních metod plně charakterizovány nové deriváty adamantanu. Vedle toho byly detegovány inkluzní komplexy těchto látek s beta-cyklodextrinem.	[25]
20	Byly publikovány výsledky měření mezifázové distribuce sirných aromatických heterocyklů v systému tvořeném iontovou kapalinou methylsulfátem butylmethylimidazolia a superkritickým oxidem uhličitým.	[26]
21	V návaznosti na předchozí studii provedenou se stlačenými organickými rozpouštědly byla dokončena studie antioxidační aktivity extraktů hroznových slupek stlačenou horkou vodou pomocí několika postupů včetně elektronové paramagnetické rezonanční spektroskopie (PHWE+EPR).	[27]
22	Analytickým přístupem založeným na použití afinitní chromatografie a MS/MS analýz byly sledovány a charakterizovány posttranslační modifikace rostlinných proteinů ze dvou vzorků: ječmene (<i>Hordeum vulgare</i>) a	[28]

1 Pořadové číslo	2 Výsledek	3 Číslo citace výsledku
	Arabidopsis thaliana.	
23	Změny v distribuci velikostí škrobových zrn v průběhu enzymatické degradace u vybraných odrůd ječmene byly sledovány pomocí gravitační field flow gravitace (GFFF) a současně byly pomocí MALDI-TOF MS charakterizovány nižší uvolňované cukry. Vhodnost použití GFFF jako jednoduché a levné metody byla potvrzena při sledování změn v distribuci velikostí škrobových zrn v průběhu amylolytické degradace.	[29]
24	Postupem založeným na využití HPLC a elektroforetické separace byl sledován profil proteinů v jednotlivých meziproduktech výroby piva (v ječném zrně, sladu, sladidě, mladině a prokvašené mladině). Nalezené proteiny byly úspěšně identifikovány pomocí MS analýz.	[30]
25	Technikou HPLC-RI bylo stanoveno zastoupení dextrinů ve sladidě, mladině a zeleném pivu vyrobených z vybraných sladů. Obsah dextrinů DP 4–7 byl výrazně ovlivněn odrůdou ječmene, zatímco vliv použitých postupů sladování byl málo výrazný.	[31]

2c) anotace nejvýznamnějších výsledků z bodu 2b)

<p>Pořadové číslo anotace: 1</p> <p>Název česky: Metodika pro stopovou speciální analýzu arsenu přímo ze vzorků suspenzí homogenizovaných tkání a buněk</p> <p>Název anglicky: A method for trace speciation analysis of arsenic directly in samples of slurries of homogenized tissues and cells</p> <p>Popis výsledku česky: Současným trendem stopové prvkové analýzy je přechod od stanovení celkové koncentrace prvku ke stanovení jeho jednotlivých forem - specií. Arsen je typickým příkladem prvku, kde toxicita silně závisí na formě, ve které se prvek vyskytuje. Toxikologicky nejzajímavějšími formami jsou specie vyskytující se v arsenovém metabolismu savců, tj. arsenitany a arseničnany, substituované jedním až třemi methylovými skupinami. Aktuálním problémem je stanovení methyl- a dimethylarsenitanů, které jsou mnohem toxičtější než odpovídající arseničnany. Tyto formy ale extrémně snadno podléhají oxidaci.</p> <p>Ve spolupráci s toxikologickým týmem z University of North Carolina jsme vyvinuli metodiku stanovení založenou na selektivním generování hydridů, jejich zachytu a separaci ve vymrazovací jednotce a detekci metodami analytické atomové spektrometrie, umožňující přímé stanovení všech metabolitů ze suspenze homogenizované tkáně nebo buněk.</p> <p>U vzorků jaterní tkáně byla dosažena velmi dobrá shoda se stanovením po mineralizaci (které však neposkytuje informaci o oxidačním stavu). Vynikající meze detekce umožňují i analýzy vzorků odpovídajících nízké zátěži arsenem. Pomocí této metodiky jsme zjistili stabilitu trivalentních sloučenin ve vzorcích jater a buněčných kultur po dobu až 3 týdnů, jsou-li uchovávány při –80°C. Prokázali jsme, že</p>
--

Ize získat kvantitativní speciaci arsenu, včetně informace o oxidačním stavu, ze vzorků tkání a buněk získaných v populačních studiích, a že podstatná část arsenu v jaterní tkáni je ve formě trivalentních methylovaných sloučenin. Naše metoda je v tomto unikátní a vytváří předpoklady pro významný pokrok v oboru toxikologie arsenu, protože alternativní přístupy, odkázané na metody kapalinové chromatografie, jsou pro přímou analýzu tkání nepoužitelné.

Popis výsledku anglicky: Current trend of trace element analysis is a shift from determination of total element concentration to an analysis of its individual forms- a speciation. Arsenic is a typical example of an element, which toxicity is strongly dependent on its chemical form. The most toxicologically important forms are species found in mammalian metabolism of arsenic, i.e. arsenites and arsenates substituted with one to three methyl groups. An actual problem is an analysis of trivalent methylated species, which are much more toxic than their pentavalent counterparts. These species extremely easily oxidize.

In a cooperation with a toxicological group from University of North Carolina, we developed an analytical method based on selective hydride generation, their collection and separation in a cryogenic unit and detection by methods of atomic spectrometry. It allows direct analysis of all metabolites from a slurry of cells or homogenized tissues.

For samples of liver tissue, we achieved very good agreement with results of analysis after mineralization (which does not provide oxidation state information). Excellent limits of detection allow analyses at levels corresponding to low arsenic exposure. By our method, we found that trivalent species in liver tissue and cells are stable up to 3 weeks when stored at -80°C . We proved that quantitative oxidation state specific speciation is available for samples of tissues and cells obtained in population studies, and that a substantial portion of arsenic is in the form of trivalent methylated species. In this respect our method is unique, and since alternative approaches, relying on methods of liquid chromatography, are unsuitable for direct analysis of tissues, it helps to push the frontiers of arsenic toxicology.

Citace výstupu: Currier, J. M. ; Svoboda, M. ; de Moraes, D. P. ; Matoušek, T. ; Dědina, J. ; Stýblo, M. Direct analysis of methylated trivalent arsenicals in mouse liver by hydride generation-cryotrapping- atomic absorption spectrometry. Chemical Research in Toxicology, 2011, Roč. 24, č. 4, s. 478-480. [17].

Currier, J. M. ; Svoboda, M. ; Matoušek, T. ; Dědina, J. ; Stýblo, M. Direct analysis and stability of methylated trivalent arsenic metabolites. Metallomics, 2011, Roč. 3, č. 12, s. 1347-1354. [20].

Číslo ilustrace: Obr_UIACH_2c_1

Spolupracující subjekt: University of North Carolina at Chapel Hill, Department of Nutrition, Chapel Hill, NC, USA.

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Mgr. Tomáš Matoušek, Ph.D., (+420) 241062474, matousek@biomed.cas.cz

Pořadové číslo anotace: 2

Název český: Významné elektromigrační efekty oxidu uhličitého v kapilární zónové elektroforéze při vysokém pH

Název anglicky: Important electromigration effects of carbon dioxide in capillary electrophoresis at high pH

Popis výsledku česky: Byl prozkoumán vliv uhličitánů na elektroforetické analýzy v alkalických systémech s vodivostní a nepřímou UV detekcí. Počítačové simulace a experimenty ukázaly, že absorpce vzdušného oxidu uhličitého může vést k tvorbě pohyblivých systémových zón nebo rozhraní, které negativně ovlivňují migraci analytů. Čím vyšší je pH, tím znatelněji se uvedené efekty projevují a jejich spektrum zahrnuje např. (i) změnu efektivních mobilit a selektivity v důsledku změny pH, (ii) výskyt dodatečných píků nebo složitějších artefaktů v detekčním signálu, nebo (iii) modifikaci separačního procesu přechodnou interakcí se složkami vzorku. Navržený teoretický přístup umožňuje předpovědět chování konkrétních systémů a tím eliminovat problémy s kvalitativním i kvantitativním vyhodnocením výsledků analýz.

Popis výsledku anglicky: The effect of carbonate on electrophoretic analyses was investigated for alkaline systems with conductivity and indirect UV detection. Computer simulations and experiments have shown that the absorption of carbon dioxide from air can cause formation of moving system zones and system boundaries that negatively influence the migration of analytes. The higher the pH of the BGE, the stronger these effects and the broader their spectrum, involving (i) changes of effective mobilities and selectivity due to changes in pH of the BGE, (ii) occurrence of additional peaks, dips or more complex disturbances in the detection signal, (iii) modification of the separation process due to temporary interactions with sample components. The proposed theoretical approach allows prediction of behavior of individual systems and elimination of problems with qualitative and quantitative evaluation of results of analyses.

Citace výstupu: Malá, Z. ; Gebauer, P. ; Boček, P. Important electromigration effects of carbon dioxide in capillary electrophoresis at high pH. *Electrophoresis*, 2011, Roč. 32, č. 12, 1500-1507. [6]

Číslo ilustrace:

Spolupracující subjekt:

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Prof. RNDr. Petr Boček, DrSc., (+420) 532290239, bocek@iach.cz

Pořadové číslo anotace: 3

Název česky: Polymerní monolitické kolony modifikované nanočásticemi oxidů kovů pro izolaci fosfopeptidů

Název anglicky: Iron oxide nanoparticle coating of organic polymer based monolithic columns for phosphopeptide enrichment:

Popis výsledku česky: Charakterizace fosfoproteinů se nejčastěji provádí jejich proteolytickým štěpením a detekcí vzniklých fosfopeptidů pomocí hmotnostní spektrometrie. Avšak díky iontové supresi dochází k výraznému snížení účinnosti ionizace fosfopeptidů v přítomnosti nefosforylovaných peptidů. Proto je nutné provést jejich účinné obohacení pomocí selektivních afinitních technik před hmotnostně-spektrometrickou analýzou ke zvýšení ionizační účinnosti a citlivosti detekce fosfopeptidů přítomných ve vysoce komplexních vzorcích peptidů.

V této práci jsme vyvinuli nové monolitické kapilární kolony modifikované nanočásticemi oxidů železa pro izolaci fosfopeptidů. Nanočástice oxidů železa byly připraveny precipitační metodou a stabilizovány citrátovými ionty. K jejich imobilizaci na povrch monolitu bylo využito

multivalentních elektrostatických interakcí mezi citrátovými ionty na povrchu nanočástic a kvartérními amoniiovými skupinami na povrchu monolitu. Afinita nanočástic k fosforylovaným látkám byla demonstrována účinnou a selektivní izolací fosfopeptidů z tryptických digestů α -kaseinu a β -kaseinu s následnou charakterizací pomocí MALDI/MS. Modifikace monolitů nanočásticemi vykazuje výrazně vyšší stabilitu, kapacitu a selektivitu ve srovnání s ostatními monolitickými materiály a vyvinuté kolony představují nový nástroj pro fosfoproteomickou analýzu.

Popis výsledku anglicky: Phosphoproteins are mostly characterized using mass spectrometry (MS) after proteolysis. However, phosphopeptides may be difficult to analyze by MS due to lower ionization efficiency in the presence of non-phosphorylated peptides. Therefore, an efficient enrichment of phosphopeptides using selective affinity techniques prior to MS detection is necessary to increase their ionization efficiency and detection sensitivity from highly complex peptide mixtures.

We have developed a new monolithic capillary column with an iron oxide nanoparticle coating for enrichment of phosphopeptides. Iron oxide nanoparticles were prepared by a co-precipitation method and stabilized by citrate ions. A stable coating of nanoparticles was obtained via multivalent electrostatic interactions of citrate ions on the surface of iron oxide nanoparticles with a quaternary amine functionalized poly(glycidyl methacrylate-co-ethylene dimethacrylate) monolith. The affinity of iron oxide nanoparticles towards phosphorylated compounds was demonstrated by the efficient and selective enrichment of phosphopeptides from peptide mixtures of α -casein and β -casein digests, and their MALDI/MS characterization in off-line mode. The nanoparticle coating provides a significantly higher stability, capacity and selectivity, when compared with other monolithic materials. The developed column demonstrates its potential as a new tool for phosphoproteomic analysis.

Citace výstupu: Křenková, J. ; Foret, F. Iron oxide nanoparticle coating of organic polymer-based monolithic columns for phosphopeptide enrichment. Journal of Separation Science, 2011, Roč. 34, č. 16-17, s. 2106-2112. [3]

Číslo ilustrace:

Spolupracující subjekt:

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Mgr. Jana Křenková, Ph.D., (+420) 532 290 237, krenkova@iach.cz

2d) domáci a zahraniční ocenění zaměstnanců pracoviště

1 Číslo	2 Jméno oceněného	3 Druh a název ocenění	4 Oceněná činnost	5 Ocenění udělil
1	Mgr. Jana Křenková, Ph.D.	Prémie Otty Wichterleho 2011	vynikající mladý vědec	AV ČR, v. v. i.
2	Mgr. Tomáš Matoušek, Ph.D.	Metallomics poster prize	Cena za nejlepší poster na konferenci „3rd International	RSC Publishing's Metallomics

1 Číslo	2 Jméno oceněného	3 Druh a název ocenění	4 Oceněná činnost	5 Ocenění udělil
			Symposium on Metallomics“ Münster, Německo	
3	RNDr. Jan Kratzer, Ph.D.	Elsevier's Spectrochimica Acta Part B-Atomic Spectroscopy Poster Award	Nejlepší poster 2. dne konference "CSI 37 – Colloquium Spectroscopicum Internationale“, Buzios, Brazílie	Spectrochimica Acta Part B
4	Ing. Pavel Karásek, Ph.D.	Best Poster Award at the 6th NoSSS Conference, Riga, Latvia, August 27, 2011	poster Modification of Silica Surface by Sub- and Supercritical Water with Potential Improvement in Analytical and Microfluidic Devices	Toxicological and Environmental Chemistry

2e) reflexe výsledků hodnocení pracoviště AV ČR za období 2005–2009 a další specifické informace o pracovišti

Personální politika se bude opírat o doporučení z výsledků hodnocení s přihlédnutím k aktuálním požadavkům řešených výzkumných projektů. Bude kladen důraz na prohloubení spolupráce mezi jednotlivými odděleními a zvýšeno úsilí ve vyhledávání mladých talentovaných spolupracovníků včetně studentů ze zahraničí. V horizontu dvou let dojde k tematickému sblížení výzkumu některých oddělení tak, aby tato oddělení mohla vytvořit jeden výzkumný tým s vyrovnanější věkovou strukturou a rozšířením řešené výzkumné tematiky. Budou posilovány perspektivní směry v oblasti separačních a spektroskopických metod analytické chemie a rozvoj nosných témat ústavu, oblast elektromigračních metod a bioanalytické instrumentace. Budou studovány základní principy transportu analytů přes fázová rozhraní a kapalné membrány se zřetelem na on-line předseparace komplexních vzorků pro kapilární elektroforézu. Velká pozornost bude věnována miniaturizaci instrumentace a nanotechnologiím, budou vyvíjeny nové technologie pro mikroseparační techniky ve spojení s hmotnostní spektrometrií a luminiscenční detekcí, mikrofluidiku a nanotechnologie pro analýzy malých vzorků až na úroveň jednotlivých buněk. Budou rozvíjeny pokročilé přístupy ke generování, prekoncentraci a atomizaci těkavých specií pro účely ultrastopové prvkové a speciální analýzy. Záběr bude rozšířen z atomové absorpční spektrometrie i na atomovou fluorescenční spektrometrii a na hmotnostní spektrometrii s indukčně vázaným plazmatem. Výzkum v oblasti analýzy životního prostředí bude zaměřen

na vývoj obohacovacích technik a jejich spojení s komerčně vyráběnou i na pracovišti vyvinutou analytickou instrumentací pro vyhledávání a sledování zdrojů biogenních a biologicky aktivních sloučenin a prvků ve všech složkách životního prostředí. Bude pokračovat rozvoj metod kapalinové chromatografie a elektroforézy v mikro i preparativním měřítku zahrnující též vývoj modifikačních barviv a barevných standardů pro izoelektrickou fokusaci. Budou vyvíjeny citlivé a rychlé metodiky pro analýzy posttranslačně modifikovaných bílkovin při studiu změn proteomu u matric biologického původu s možným potenciálem v diagnostice malignit. Vývoj termodynamických modelů systémů týkajících se stlačených organických rozpouštědel a stlačené horké kapalné (subkritické) vody bude utlučen a výzkum bude orientován na využití zmíněných rozpouštědel k analytickým účelům. Budou studovány možnosti využití superkritické vody k přípravě a úpravám analytických separačních zařízení.

3. Vzdělávací činnost

3a) účast pracoviště na terciárním vzdělávání (uskutečňování bakalářských, magisterských a doktorských studijních programů)

1 Číslo	2 Bakalářský program	3 Název VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
1	Analytická chemie	MU	ano	ano	ano		

1 Číslo	2 Magisterský program	3 Název VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
1	Analytická chemie	FCHT Univerzita Pardubice	ano				
2	Biochemie	PřF MU Brno			ano		
3	Analytická chemie	PřF MU Brno	ano	ano	ano	ano	
4	Analytická chemie	PřF UK v Praze	ano		ano		
5	Potravinářská chemie a biotechnologie	FCH VUT Brno			ano		

1 Číslo	2 Doktorský program	3 Název VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
1	Trendy v analytické chemii	PřF MU Brno	ano		ano		
2	Zemědělská chemie	MENDELU Brno			ano		
3	Analytická chemie	PřF MU Brno	ano	ano	ano	ano	
4	Biochemie	PřF MU Brno			ano		
5	Fyzika	PřF MU Brno			ano		
6	Analytická chemie	PřF UK v Praze			ano		
7	Chemie a technologie ochrany životního prostředí	FCH VUT Brno			ano		
8	Potravinářská chemie a biotechnologie	FCH VUT Brno			ano		

3b) účast pracoviště na sekundárním vzdělávání (středoškolská výuka)

1 Číslo	2 Akce	3 Pořadatel/škola	4 Činnost
1	Otevřená věda II	SSČ AV ČR, v. v. i	Stáž středoškolských studentů spojená s experimentální činností
2	Chemická olympiáda	MŠMT ČR	Spoluorganizace krajských kol ChO kategorií A, B, C a D v kraji Praha ve školním roce 2010/2011 i 2011/2012
3	Den vědy	Gymnázium Botičská, Praha 2	Přednáška pro středoškolské studenty (1 h)

3c) vzdělávání veřejnosti

1 Číslo	2 Akce	3 Pořadatel	4 Činnost
1	Týden vědy a techniky	SSČ AV ČR, v. v. i	Přednáška pro veřejnost v literární kavárně ACADEMIA v Brně
2	Kurz AAS II pro pokročilé	Spektroskopická společnost Jana Marka Marci	6 hodin přednášek (2. - 5.5. 2011)

3d) seznam titulů vydaných na pracovišti

Foret, F.: CECE 2011. Brno. 79 s. ISBN 978-80-904959-0-6.

4. Činnost pro praxi

4a-1) výsledky spolupráce s podnikatelskou sférou a dalšími organizacemi získané řešením projektů

Pořadové číslo: 1

Dosažený výsledek: V rámci spolupráce se Státní rostlinolékařskou správou v Olomouci byl navázán pracovní kontakt s Plant Protection Institute Maďarské akademie věd v Budapešti pro využití techniky kapilární izoelektrické fokusace, gelové IEF a hmotnostní spektrometrie využitok identifikaci kmenů *Agrobacterium*. Výsledky byly porovnávány jak s PCR tak plynovou chromatografií esterů nenasycených mastných kyselin ze zkoumaných patogenů. U vysoce rizikových patogenů jak z oblastí medicíny tak rostlinolékařství, veterinárního lékařství či ochrany obyvatelstva je nutnost řešit zakoncentrování většího objemu vzorku kontaminovaného mikroorganismy. Jako modelový analyt byly vybrány spóry hub *Monilinia laxa*, *M. fructigena*, *M. fructicola* a *M. polystroma*, které každoročně způsobují velké škody jak na rostlinách tak na plodech (např. moniliniová hniloba plodu). Důležitá je i jejich identifikace ve stopovém množství, ještě než se příznaky houbové choroby plně rozvinou. Tyto modelové kmeny byly separovány pomocí elektromigračních technik, stanoveny jejich izoelektrické body, fingerprintové profily na gelové IEF a pomocí hmotnostní spektrometrie. U každé této techniky byla ověřena možnost separace a detekce patogenu z reálného vzorku. Byla vyvinuta technika, kdy bylo možno tyto spory, popř. plísňě (*Penicillium expansum*) oddělit ze zkoumaného výluhu a po zhruba tisícinásobném zakoncentrování separovat.

Uplatnění/Citace výstupu: Horká, M. ; Horký, J. ; Kubesová, A. ; Zapletalová, E. ; Šlais, K. The trace analysis of microorganisms in real samples by combination of a filtration microcartridge and capillary isoelectric focusing. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2011, Roč. 400, č. 9, s. 3133-3140. [32]. Označení ilustrace: Obr_UIACh_4a_1.jpg

Název projektu /programu v češtině: Rychlá detekce a identifikace patogenních mikroorganismů a virů elektromigračními metodami a hmotnostní spektrometrií.

Název projektu/programu v angličtině: Rapid detection and identification of pathogenic microorganisms and viruses by electromigration techniques and mass spectrometry

Poskytovatel: GA AV, Grant IAAX00310701

Partnerská organizace: Státní rostlinolékařská správa, odbor diagnostiky, Olomouc

Pořadové číslo: 2

Dosažený výsledek: S využitím kombinace různých separačních technik a hmotnostní spektrometrie byl zmapován proteinový profil ječmene na úrovni odrůdových rozdílů i na úrovni sledování změn v důsledku sladování. Pomocí metody isotopického značení peptidů iTRAQ byla provedena relativní kvantifikace vybraných proteinů v obilce ječmene a sladu. Výhoda iTRAQ metody spočívá zejména v tom, že dochází k označení všech přítomných peptidů v daném komplexním vzorku, čímž je umožněna efektivnější analýza peptidů v rámci jednoho daného proteinu včetně proteinů s posttranslačními modifikacemi.

Rovněž pro studium glykoproteinů izolovaných ze vzorků obilky ječmene a sladu a následnou analýzu sacharidické části těchto proteinů byla využita osvědčená kombinace kapalinové chromatografie (afinitní ConA, SEC), SDS-PAGE a MALDI MS/MS identifikace.

Nejdůležitějším krokem byla optimalizace separace s využitím monolitické afinitní kolony ProSwift® ConA-1S, pomocí které bylo dosaženo účinnější separace glykoproteinů z komplexního vzorku.

Dále byly studovány možnosti selektivní purifikace vzorků sladiny, mladiny a piva na rozsáhlém souboru sorbentů. Jako nejvhodnější fáze z pohledu účinnosti extrakce a přečištění sacharidů byly nalezeny grafitický uhlík a materiály zahrnující aminopropylovou skupinu.

Uplatnění/Citace výstupu:

Benkovská, D. ; Flodrová, D. ; Psota, V. ; Bobálová, J. Vliv pivovarského procesu na profil proteinů ječmene. *Kvasný průmysl*, 2011, Roč. 57, č. 7-8, s. 260-265. [30]

Laštovičková, M. ; Smětalová, D. ; Bobálová, J. The combination of lectin affinity chromatography, gel electrophoresis and mass spectrometry in the study of plant glycoproteome: Preliminary insights. *Chromatographia*, 2011, Roč. 73, Suppl 1, S113–S122. [28]

Benkovská, D. ; Flodrová, D. ; Bobálová, J. Concanavalin A lectin-based affinity chromatography for enrichment and determination of glycoproteins in barley malt. *Chemické Listy*, 2011, Roč. 105, č. 18, s.1008-1009. [33]

Čmelík, R. ; Žídková, J. ; Bobálová, J. Solid-phase extraction approach in comprehensive analysis of wort and beer samples. In Book of abstracts, 5th International Symposium on Recent Advances in Food Analysis. Praha : Institute of Chemical Technology, 2011. s. 237. ISBN 978-80-7080-795-8. [34]

Název projektu /programu v češtině: Výzkumné centrum pro studium obsahových látek ječmene a chmele

Název projektu/programu v angličtině: Research center for study of active compounds in barley and hops

Poskytovatel: Výzkumné centrum 1M0570 (MŠMT)

Partnerská organizace: Mendelova univerzita v Brně

Pořadové číslo: 3

Dosažený výsledek: Při proteolytickém štěpení proteinů byly studovány rychlé a účinné metody enzymatického štěpení proteinů. Pro tyto účely bylo využito ultrazvuku a infračerveného záření a obě aplikované metody byly porovnány s klasickou metodou štěpení při 37 °C přes noc. Pomocí technologie ultrazvuku a záření infračerveného světla bylo dosaženo lepších výsledků, než klasickým štěpením.

Dále bylo studium zaměřeno na enzymatickou degradaci škrobových zrn izolovaných ze dvou vybraných odrůd ječmene. Změny v distribuci velikostí škrobových zrn v průběhu degradace byly sledovány pomocí gravitační field-flow frakcionace a pomocí MALDI-TOF MS byly charakterizovány nižší cukry uvolňované při degradaci. Byly vyvinuty a optimalizovány postupy extrakce oligosacharidů využívající afinitních interakcí. Možnosti purifikace byly studovány na oxidu titaničitém a imobilizované kyselině fenyloboronové. Byla potvrzena nižší afinita glukánů k oběma typům fází zejména za nízké koncentrace pufrů. V případě TiO₂ mechanismus interakce odpovídal hilic sorbentům s dominantním vlivem pH a podílu organické složky v mobilní fázi. Extrakce pomocí boronátů vyžadovala práci při vysokém pH a dostatečnou reakční dobu.

Uplatnění/Citace výstupu:

Mazanec, K. ; Dyčka, F. ; Bobálová, J. Monitoring of barley starch amylolysis by gravitational field flow fractionation and MALDI-TOF MS. Journal of the Science of Food and Agriculture, 2011, Roč. 91, č. 15, s. 2756-2761. [29]

Čmelík, R. ; Žídková, J. ; Bobálová, J. Boronate and metal oxide affinity chromatography for efficient analysis of neutral glycans. In Nordic Separation Science Society 6th Conference. Program and Abstract Book. Latvia : Latvian Institute of Organic Synthesis, 2011. s. 85. [35]

Název projektu /programu v češtině: Funkční genomika a proteomika ve šlechtění rostlin

Název projektu/programu v angličtině: Functional genomics and proteomics for crop improvement

Poskytovatel: Výzkumné centrum 1M06030 (MŠMT)

Partnerská organizace: Mendelova univerzita v Brně

4a–2) výsledky spolupráce s podnikatelskou sférou a dalšími organizacemi získané na základě hospodářských smluv

1 Číslo	2 Zadavatel	3 Výsledek (anotace)	4 Uplatnění
1	VF.a.s Černá Hora	Testování nových čidel pro stanovení triciované vody v ovzduší	Kontrola radiační situace v atomových elektrárnách
2	VF. a.s. Černá Hora	Testování přístrojů na stanovení triciovaných sloučenin a sloučenin obsahujících C14 v ovzduší	Kontrola radiační situace v atomových elektrárnách
3	Univerzita obrany, Brno	Vývoj, konstrukce a testování analyzátoru energetických sloučenin ve složkách životního prostředí	Stopová analýza energetických sloučenin na povrchu předmětů a osob, na oblečení, v půdách a v ovzduší
4	Univerzita obrany, Brno	Vývoj, konstrukce a testování přenosného vzorkovače organických a anorganických sloučenin v ovzduší	Příprava vzorků před stopovou analýzou (GC, HPLC, IC, selektivní detektory)
5	EKOTOXA s.r.o. Kosmákova 28, č.p. 2195, 615 00 Brno, Židenice	V prostředí zemědělského objektu nedaleko Opavy byly po dobu 4 dnů kontinuálně měřeny koncentrace plynného amoniaku a amonných iontů vázaných na částice atmosférického aerosolu s časovým rozlišením 1 min. Pro detekci byla použita metoda vyvinutá na Ústavu analytické chemie AV ČR, v. v. i., Brno. Paralelně byly měřeny hlavní meteorologické parametry. Koncentrace plynného amoniaku a amonných iontů v aerosolu byly v průběhu měření zhruba srovnatelné.	Modelování rozptylu emisí amoniaku; kalibrace rozptylového modelu; studium distribuce amoniaku mezi plynnou a aerosolovou fází

Celkový počet získaných výsledků

5

4a–3) nové firmy, které vznikly na základě výsledků činnosti pracoviště v oblasti aplikovaného výzkumu

1 Číslo	2 Název firmy	3 Důvod založení	4 Kategorie firmy	5 Činnost firmy

1 Číslo	2 Název firmy	3 Důvod založení	4 Kategorie firmy	5 Činnost firmy

4b) významné patenty, užité vzory, vynálezy, licenční smlouvy, ochranné známky

Pořadové číslo: 1

Název česky: Způsob prekoncentrace antimonu pro jeho stanovení metodami atomové spektrometrie

Název anglicky: Way of stibine preconcentration for subsequent atomic spectrometry determination

Kategorie: Český patent

Zapsán pod číslem: 302755

Popis česky: Metoda pro stanovení ultrastopových koncentrací antimonu pomocí generování hydridu a prekoncentrace v křemenném atomizátoru

Popis anglicky: Ultratrace determination of antimony by hydride generation in-atomizer trapping atomic absorption spectrometry

Využití: ultrastopová prvková analýza

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): doc. RNDr. Jiří Dědina DSc., (+420) 241062490, dedina@biomed.cas.cz

Pořadové číslo: 2

Název česky: Způsob prekoncentrace bismutu pro jeho stanovení metodou atomové absorpční spektrometrie.

Název anglicky: Method for bismuth preconcentration for its determination by atomic absorption spectrometry

Kategorie: Český patent

Zapsán pod číslem: 302757

Popis česky: Metoda pro stanovení ultrastopových koncentrací bismutu pomocí generování hydridu a prekoncentrace v křemenném atomizátoru

Popis anglicky: Ultratrace determination of bismuth by hydride generation in-atomizer trapping atomic absorption spectrometry

Využití: Ultrastopová prvková analýza

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): doc. RNDr. Jiří Dědina DSc., (+420) 241062490, dedina@biomed.cas.cz

Pořadové číslo: 3

Název česky: Kompaktní zařízení pro prekoncentraci a atomizaci hydridotvorných prvků pro jejich stanovení atomovou absorpční spektrometrií.

Název anglicky: Compact preconcentration and atomization device for the determination of hydride forming elements by atomic absorption spectrometry

Kategorie: Český patent

Zapsán pod číslem: 302891

Popis česky: Konstrukce univerzálního kompaktního křemenného zařízení pro prekoncentraci a atomizaci hydridotvorných prvků

Popis anglicky: design of a universal and compact quartz device to trap and atomize hydride forming elements

Využití: ultrastopová prvková analýza

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): doc. RNDr. Jiří Dědina DSc., (+420) 241062490, dedina@biomed.cas.cz

Pořadové číslo: 4

Název česky: Jednotka pro vymrazování těkavých sloučenin.

Název anglicky: Unit for cryotrapping of volatile compounds

Kategorie: český patent

Zapsán pod číslem: 302885

Popis česky: Jednotka umožňuje automatizované zachycení těkavých hydridů arsenu a dalších prvků, jejich prekoncentraci, separaci a uvolnění do detektoru, pro použití při stopové prvkové a speciální analýze metodami analytické atomové spektrometrie.

Popis anglicky: A unit for automated cryotrapping of volatile hydrides of arsenic and other elements, their preconcentration, separation and release into detector, useful for trace element and speciation analysis by methods of analytical atomic spectrometry.

Využití: Analytická chemie, zařízení pro stopovou analýzu sloučenin arsenu a dalších prvků

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Mgr. Tomáš Matoušek, Ph.D., (+420) 2410621474, matousek@biomed.cas.cz

Pořadové číslo: 5

Název česky: Modulární konstrukce atomizátoru hydridu pro atomovou absorpční spektrometrii.

Název anglicky: Modular design of hydride atomizers for atomic absorption spectrometry.

Kategorie: Český patent

Zapsán pod číslem: 302756

Popis česky: Vynález se týká nové konstrukce zařízení pro atomizaci těkavých sloučenin pro atomovou absorpční spektrometrii. Toto zařízení umožňuje výměnu optické trubice atomizátoru a, hlavně, využívat optických trubic také z jiných materiálů než je tavený křemen.

Popis anglicky: A novel modular L-shaped design of hydride atomizer for atomic absorption spectrometry is described. It makes it possible to replace the optical tube of the atomizer and, mainly, to employ optical tubes made also from other materials than fused quartz.

Využití: ultrastopová prvková analýza

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): doc. RNDr. Jiří Dědina DSc., (+420) 241062490, dedina@biomed.cas.cz

4c) výsledky spolupráce se státní a veřejnou správou

Pořadové číslo: 1

Dosažený výsledek: Stanovení rtuti metodou AAS v rybí svalovině i játrech bylo provedeno celkem u 31 vzorků odebraných z lokalit údolní nádrže Pastviny na Divoké Orlici a okolí obce Králíky na Tiché Orlici. U všech druhů ryb z nádrže Pastviny jsme našli zvýšené hodnoty koncentrace rtuti. Naopak koncentrace rtuti v tkáních pstruha obecného jako modelového organismu z lokality Králíky se pohybuje kolem hodnoty přirozeného pozadí pro rtuť v ČR $0,2 \text{ mg.kg}^{-1}$, což potvrzuje naše loňské výsledky.

Oblast uplatnění výsledku: Sledování stavu životního prostředí.

Uživatel/Zadavatel: Sdružení obcí Orlicko, v rámci projektu financovaného AV ČR, v. v. i.: Monitoring obsahu rtuti v rybích tkáních ve vybraných místech regionu Orlicko.

4d) odborné expertizy zpracované v písemné formě pro státní orgány, instituce a podnikatelské subjekty

1 Číslo	2 Název	3 Příjemce/Zadavatel	4 Popis výsledku
1	Recenze odborných příspěvků do impaktovaných vědeckých časopisů	Anal. Bioanal. Chem.; Anal. Chem.; Anal. Chim. Acta; Anal. Methods; Electrophoresis; J. Chrom. A,B; J. Pharm. Biomed. Analysis; J. Sep. Sci.; Microfluidics and Nanofluidics;	celkem 144 recenzí

1 Číslo	2 Název	3 Příjemce/Zadavatel	4 Popis výsledku
		Sensors and Actuators B; Talanta; J. Agric. Food Chem.; Spectrochimica Acta Part B; ISRN Analytical Chemistry; Journal of Chemical & Engineering Data; Journal of Chemical Thermodynamics; Industrial & Engineering Chemistry Research; Journal of Chemical Thermodynamics; Journal of Supercritical Fluids a The Open Thermodynamics Journal	
2	Posudky výzkumných projektů	Evropská unie	peer review 50 projektů z oblasti chemie a fyziky
3	Oponentura doktorské práce	FCH VUT Brno	Vypracování tří odborných posudků na doktorskou práci

Celkový počet zpracovaných expertiz

197

4e) zapojení do monitorovacích sítí

Pořadové číslo:

Objekt sledování česky:

Objekt sledování anglicky:

Název sítě česky:

Název sítě anglicky:

Provozovatel:

Důvody zapojení do monitoringu:

Program:

5. Mezinárodní vědecká spolupráce pracoviště

5a) přehled mezinárodních projektů, které pracoviště řeší v rámci mezinárodních vědeckých programů

1 Číslo	2 Název zastřešující organizace (zkratka)	3 Název programu česky/anglicky	4 Název projektu česky/anglicky	5 Koordinátor/řešitel česky/anglicky	6 Spoluřešitel /počet	7 Stát(y)	8 Aktivita
1	AVČR- CNR		Použití mikroseparací a hmotnostní spektrometrie v bioanalýze. / Application of micro separations and mass spectrometry in bio analysis.	Ing. K.Klepárník	Z. Aturki / 1	ČR, Itálie	výměnné stáže
2	UNC School of Public Health	Gillingsova inovace laboratoří / Gillings Innovation Labs	Analytická laboratoř pro vývoj biomarkerů environmentální expozice arzenem / Analytical Laboratory for Development of Biomarkers of Environmental Exposures to Aresenic	Dr. Stýblo	Dědina / 1	ČR, USA	Vývoj instrumentace, validace vyvinutých metod, implementace metod do studií v endemických oblastech výskytu arsenicosis.

5b) akce s mezinárodní účastí, které pracoviště organizovalo nebo v nich vystupovalo jako spolupřadatel

1 Číslo	2 Název akce v češtině	3 Název akce v angličtině	4 Hlavní pořadatel akce česky/anglicky	5 Počet účastníků celkem/z toho z ciziny	6 Významná prezentace
1	CECE 2011	CECE 2011	Ústav analytické chemie AV ČR, v. v. i. / Institute of Analytical Chemistry of the AS CR, v. v. i.	120/50	Lloyd M. Smith, University of Wisconsin-Madison, USA, New Technologies for the Genome Age
2	Konference České aerosolové společnosti	Conference of Czech aerosol society	Ústav chemických procesů AV ČR, v. v. i. / Institute of chemical process fundamentals of the AS CR v. v. i.	31/4	V. Levdansky, The National Academy of Sciences of Belarus , Size-Dependent Rate Constant of Chemical Reactions in Nanoscale Particles

5c) výčet jmen nejvýznamnějších zahraničních vědců, kteří navštívili pracoviště AV ČR

1 Číslo	2 Jméno vědce	3 Význačnost vědce a jeho obor	4 Mateřská instituce	5 Stát
1	Prof. Wolfgang Thormann	Přední odborník na teorii elektroforézy, počítačové simulace a na klinickou diagnostiku pomocí kapilární elektroforézy	Univerzita Bern	Švýcarsko
2	Dr. Mila Ródenas García	Odborník na studium fotochemických reakcí v atmosféře	Fundación CEAM - EUPHORE Labs. Valencia	Španělsko

1 Číslo	2 Jméno vědce	3 Význačnost vědce a jeho obor	4 Mateřská instituce	5 Stát
3	Prof. Gyula Vigh	Přední odborník na bioanalytické technologie a selektivní značení biologických látek	Texas A&M University	USA
4	Prof. Lloyd M. Smith	Přední odborník na bioanalytické technologie a technologii hmotnostní spektrometrie	University of Wisconsin-Madison	USA
5	Prof. Andras Guttman	Přední odborník na bioanalytické technologie, zejména separace DNA a glykoproteinů	University of Debrecen	Hungary
6	Dr. Aran Paulus	Přední odborník na bioanalytickou instrumentaci a mikrofluidiku	Bio-Rad Laboratories	USA
7	Dr. Pavel Neužil	Přední odborník na elektronické systémy v bioanalýze a mikrofluidice.	KIST, Saarbruecken	Germany
8	Prof. Miroslav Macka	Přední odborník na analytické separace	University of Tasmania, Hobart	Australia
9	Dr. Josef Beránek	Přední odborník na hmotnostní spektrometrii	Pacific Northwest National Laboratory, Richmond	USA
10	Prof. Steven Soper	Přední odborník na mikrofluidiku	University of North Carolina, Chapel Hill	USA

5d) aktuální meziústavní dvoustranné dohody

1 Číslo	2 Spolupracující instituce	3 Stát	4 Oblast (téma) spolupráce
1	UIACH AV ČR / Výzkumný ústav potravinářský v Bratislavě	SR	Využití extrakcí stlačenými tekutinami k získávání cenných látek z rostlinných materiálů a charakterizace antioxidačních vlastností extraktů.
2	CNR (Institut of Chemical Methodology)	Itálie	Spojení kapilární elektroforézy s hmotnostní spektrometrií

6. Seznam citací k oddílu 2b), 2c), ev. 4a)

1. Horká, M. ; Kubíček, O. ; Kubesová, A. ; Rosenbergová, K. ; Kubíčková, Z. ; Šlais, K. Rapid separation and identification of the subtypes of swine and equine influenza A viruses by electromigration techniques with UV and fluorometric detection. *Analyst*, 2011, Roč. 136, č. 14, s. 3010-3015.
2. Horká, M. ; Růžička, F. ; Kubesová, A. ; Němcová, E. ; Šlais, K. Separation of phenotypically indistinguishable *Candida* species, *C. orthopsilosis*, *C. metapsilosis* and *C. parapsilosis*, by capillary electromigration techniques. *Journal of Chromatography A*, 2011, Roč. 1218, č. 25, s. 3900-3907.
3. Křenková, J. ; Foret, F. Iron oxide nanoparticle coating of organic polymer-based monolithic columns for phosphopeptide enrichment. *Journal of Separation Science*, 2011, Roč. 34, č. 16-17, s. 2106-2112.
4. Klepárník, K. ; Voráčová, I. ; Lišková, M. ; Příklad, J. ; Hezinová, V. ; Foret, F. Capillary electrophoresis immunoassays with conjugated quantum dots. *Electrophoresis*, 2011, Roč. 32, č. 10, s. 1217-1223.
5. Lišková, M. ; Voráčová, I. ; Klepárník, K. ; Hezinová, V. ; Příklad, J. ; Foret, F. Conjugation reactions in the preparations of quantum dot-based immunoluminescent probes for analysis of proteins by capillary electrophoresis. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2011, Roč. 400, č. 2, s. 369-379.
6. Malá, Z. ; Gebauer, P. ; Boček, P. Important electromigration effects of carbon dioxide in capillary electrophoresis at high pH. *Electrophoresis*, 2011, Roč. 32, č. 12, s. 1500-1507.
7. Kiplagat, I.K. ; Doan, T.K.O. ; Kubáň, P. ; Kubáň, P. ; Boček, P. Use of disposable open tubular ion exchange pre-columns for in-line clean-up of serum and plasma samples prior to capillary electrophoretic analysis of inorganic cations. *Journal of Chromatography A*, 2011, Roč. 1218, č. 6, s. 856-859.
8. Strieglerová, L. ; Kubáň, P. ; Boček, P. Rapid and simple pretreatment of human body fluids using electromembrane extraction across supported liquid membrane for capillary electrophoretic determination of lithium. *Electrophoresis*, 2011, Roč. 32, č. 10, s. 1182-1189.
9. Strieglerová, L. ; Kubáň, P. ; Boček, P. Electromembrane extraction of amino acids from body fluids followed by capillary electrophoresis with capacitively coupled contactless conductivity detection. *Journal of Chromatography A*, 2011, Roč. 1218, č. 37, s. 6248-6255.
10. Kiplagat, I.K. ; Doan, T.K.O. ; Kubáň, P. ; Boček, P. Trace determination of perchlorate using electromembrane extraction and capillary electrophoresis with capacitively coupled contactless conductivity detection. *Electrophoresis*, 2011, Roč. 32, č. 21, s. 3008-3015.
11. Doan, T.K.O. ; Kubáň, P. ; Kubáň, P. ; Kiplagat, I.K. ; Boček, P. Analysis of inorganic cations in biological samples by the combination of micro-electrodialysis and capillary electrophoresis with capacitively coupled contactless conductivity detection. *Electrophoresis*, 2011, Roč. 32, 3-4, s. 464-471.

12. Kubáň, P. ; Strieglerová, L. ; Gebauer, P. ; Boček, P. Electromembrane extraction of heavy metal cations followed by capillary electrophoresis with capacitively coupled contactless conductivity detection. *Electrophoresis*, 2011, Roč. 32, č. 9, s. 1025-1032.
13. Kubáň, P. ; Hauser, P.C. Capacitively coupled contactless conductivity detection for microseparation techniques – recent developments. *Electrophoresis*, 2011, Roč. 32, č. 1, s. 30-42.
14. Gebauer, P. ; Malá, Z. ; Boček, P. Recent progress in analytical capillary isotachopheresis. *Electrophoresis*, 2011, Roč. 32, č. 1, s. 83-89.
15. Malá, Z. ; Gebauer, P. ; Boček, P. Contemporary sample stacking in analytical electrophoresis. *Electrophoresis*, 2011, Roč. 32, č. 1, s. 116-126.
16. Pantůčková, P. ; Gebauer, P. ; Boček, P. ; Křivánková, L. Recent advances in CE-MS: Synergy of wet chemistry and instrumentation innovations. *Electrophoresis*, 2011, Roč. 1, č. 32, s. 43-51.
17. Currier, J. M. ; Svoboda, M. ; de Moraes, D. P. ; Matoušek, T. ; Dědina, J. ; Stýblo, M. Direct analysis of methylated trivalent arsenicals in mouse liver by hydride generation-cryotrapping- atomic absorption spectrometry. *Chemical Research in Toxicology*, 2011, Roč. 24, č. 4, s. 478-480.
18. Kratzer, J. ; Dočekal, B. ; Heitmann, U. ; Dědina, J. Spectral interferences of oxygen and water molecules in hydride generation atomic absorption spectrometry with quartz atomizers: comparison of preconcentration and on-line atomization modes for As and Se determination. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, 2011, Roč. 26, č. 11, s. 2230-2237.
19. Kratzer, J. ; Mester, Z. ; Sturgeon, R. E. Comparison of dielectric barrier discharge, atmospheric pressure radiofrequency-driven glow discharge and direct analysis in real time sources for ambient mass spectrometry of acetaminophen. *Spectrochimica Acta. B*, 2011, Roč. 66, č. 8, s. 594-603.
20. Currier, J. M. ; Svoboda, M. ; Matoušek, T. ; Dědina, J. ; Stýblo, M. Direct analysis and stability of methylated trivalent arsenic metabolites. *Metallomics*, 2011, Roč. 3, č. 12, s. 1347-1354.
21. Dessuy, M. B. ; Kratzer, J. ; Vale, M. G. R. ; Welz, B. ; Dědina, J. Hydride generation in-atomizer collection atomic absorption spectrometry for the determination of antimony in acetic acid leachates from pewter cups. *Talanta*, 2011, Roč. 87, -, s. 255-261.
22. Dědina, J. Generation of Volatile Compounds for Analytical Atomic Spectroscopy. In *Encyclopedia of analytical chemistry : Supplementary Volumes S1-S3*. Chichester : John Wiley & Sons Ltd, 2011. s. 897-936. ISBN 978-0-470-97333-2.
23. D'Ulivo, A. ; Dědina, J. ; Mester, Z. ; Sturgeon, R. E. ; Wang, Q. ; Welz, B. Mechanisms of chemical generation of volatile hydrides for trace element determination (IUPAC Technical Report). *Pure and Applied Chemistry*, 2011, Roč. 83, č. 6, s. 1283-1340.
24. Vidová, M. ; Bobálová, J. ; Šmigáň, P. Harmaline-resistant mutant of *Methanothermobacter thermautotrophicus* with a lesion in Na⁺/H⁺-antiport. *General Physiology and Biophysics*, 2011, Roč. 30, SI, S54-S60.
25. Vícha, R. ; Rouchal, M. ; Kozubková, Z. ; Kuřitka, I. ; Marek, R. ; Branná, P. ; Čmelík, R. Novel adamantane-bearing anilines and properties of their supramolecular complexes with β -cyclodextrin. *Supramolecular Chemistry*, 2011, Roč. 23, č. 10, s. 663-677.

26. Planeta, J. ; Šťavíková, L. ; Karásek, P. ; Roth, M. Limiting partition coefficients of sulfur-containing aromatics in a biphasic [bmim][MeSO₄]-supercritical CO₂ system. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 2011, Roč. 56, č. 3, s. 527-531.
27. Šťavíková, L. ; Polovka, M. ; Hohnová, B. ; Karásek, P. ; Roth, M. Antioxidant activity of grape skin aqueous extracts from pressurized hot water extraction combined with electron paramagnetic resonance spectroscopy. *Talanta*, 2011, Roč. 85, č. 4, s. 2233-2240.
28. Laštovičková, M. ; Smětalová, D. ; Bobálová, J. The combination of lectin affinity chromatography, gel electrophoresis and mass spectrometry in the study of plant glycoproteome: Preliminary insights. *Chromatographia*, 2011, Roč. 73, Suppl 1, S113–S122.
29. Mazanec, K. ; Dyčka, F. ; Bobálová, J. Monitoring of barley starch amylolysis by gravitational field flow fractionation and MALDI-TOF MS. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, 2011, Roč. 91, č. 15, s. 2756-2761.
30. Benkovská, D. ; Flodrová, D. ; Psota, V. ; Bobálová, J. Vliv pivovarského procesu na profil proteinů ječmene. *Kvasný průmysl*, 2011, Roč. 57, č. 7-8, s. 260-265.
31. Psota, V. ; Čmelík, R. ; Sachambula, L. Vliv podmínek sladování na obsah dextrinů v meziproduktech výroby piva. *Kvasný průmysl*, 2011, Roč. 57, č. 7-8, s. 253-259.
32. Horká, M. ; Horký, J. ; Kubesová, A. ; Zapletalová, E. ; Šlais, K. The trace analysis of microorganisms in real samples by combination of a filtration microcartridge and capillary isoelectric focusing. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2011, Roč. 400, č. 9, s. 3133-3140.
33. Benkovská, D. ; Flodrová, D. ; Bobálová, J. Concanavalin A lectin-based affinity chromatography for enrichment and determination of glycoproteins in barley malt. *Chemické Listy*, 2011, Roč. 105, č. 18, s.1008-s1009.
34. Čmelík, R. ; Žídková, J. ; Bobálová, J. Solid-phase extraction approach in comprehensive analysis of wort and beer samples. In *Book of abstracts, 5th International Symposium on Recent Advances in Food Analysis*. Praha : Institute of Chemical Technology, 2011. s. 237. ISBN 978-80-7080-795-8.
35. Čmelík, R. ; Žídková, J. ; Bobálová, J. Boronate and metal oxide affinity chromatography for efficient analysis of neutral glycans. In *Nordic Separation Science Society 6th Conference. Program and Abstract Book*. Latvia : Latvian Institute of Organic Synthesis, 2011. s. 85.

7. Popularizační a propagační činnost

1 Číslo	2 Název akce	3 Popis aktivity	5 Spolupořadatel	6 Datum a místo konání
1	Týden vědy a techniky	Ing. Pavel Podešva: Miniaturizované technologie v analytické chemii, odborná přednáška pro veřejnost	SSČ AV ČR	8. 11. 2011, Literární kavárna a knihkupectví Academia v Brně

1 Číslo	2 Název akce	3 Popis aktivity	5 Spolupřadatel	6 Datum a místo konání
2	Den otevřených dveří	Seznámení středoškolských studentů (hromadné exkurze ze 3 středních škol, celkem cca 80 studentů) s pokročilými analytickými metodami a příslušným přístrojovým vybavením v laboratořích UIACH AV ČR, v. v. i.	SSČ AV ČR	11. 11. 2011, UIACH AV ČR, v. v. i., Veverčí 97, Brno
3	Soutěž o nejlepší práci v oboru spektroskopie mladých autorů (do 35 let)	Soutěž diplomových a publikovaných prací mladých autorů v oboru spektroskopie – organizační zajištění	Spektroskopická společnost Jana Marka Marci	12. 12. 2011, Praha
4	Popularizační článek v časopise Vesmír	V článku je představen řešený projekt na téma: Nanočástice a jejich zdravotní rizika		Vesmír, Roč. 90, č.12/2011, s. 718
5	Profil Ústavu analytické chemie AVČR, v. v. i.	Článek představuje čtenářům historii a současnou výzkumnou orientaci Ústavu		Public Service Review: European Union: Issue 22, s. 718-719

8. Seznam ilustrací

Oddíl: 2c Číslo řádku: 1

Název česky: Speciační analýza metabolitů arsenu v biologických vzorcích

Název anglicky: Speciation analysis of arsenic metabolites in biological samples

Popis česky: Toxikologicky nejzajímavějšími metabolity arsenu jsou velmi nestabilní trivalentní methylované arsenové specie.

Popis anglicky: The most interesting metabolites of arsenic for toxicology are very unstable trivalent methylated arsenic species.

Označení ilustrace: Obr_UIACH_2c_1

Oddíl: 4a Číslo řádku:1

Název česky: Stopová analýza mikroorganismů v reálných vzorcích s použitím kombinace filtrační mikrokolony a kapilární izoelektrické fokusace

Název anglicky: The trace analysis of microorganisms in real samples by combination of filtration micro-cartridge and capillary isoelectric focusing

Popis česky: Spóry v počtu několika stovek v jednom mililitru byly detegovány na povrchu jablka.

Popis anglicky: The spores in numbers of hundreds of particles per milliliter were detected from the apple surface.

Označení ilustrace: Obr_UIACh_4a_1.jpg

Vyplnil dne: 17. ledna 2012

Jméno: Ludmila Křivánková

tel.: 532290183

e-mail: krivankova@iach.cz