



AKADEMIE VĚD ČESKÉ REPUBLIKY

Dotazník Základní údaje o činnosti pracoviště AV ČR v roce 2009 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: Vědecká činnost Ústavu analytické chemie AV ČR, v.v.i. je orientována na výzkum a vývoj v oblasti analytických metod, na jejichž rozvoj klade velké nároky expanze nových poznatků v biologických vědách, především v genomice a proteomice, v oblasti medicíny, ochrany zdraví člověka a životního prostředí. Metodologický výzkum, vývoj instrumentace a metod je pokryt oblastí separačních a spektroskopických technik. Jedná se o metody elektroforetické, mikrokolonovou kapalinovou chromatografii, elektrochromatografii, superkritickou chromatografii a extrakci, hmotnostně spektrometrické metody, atomovou absorpční, emisní a fluorescenční spektrometrii. Velká pozornost je také věnována miniaturizaci instrumentace a nanotechnologiím. Směry výzkumu jsou 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 AS CR, v.v.i. are focused on the research and development in the field of analytical methods related to the rapid expansion of knowledge in biological sciences, especially in genomics, proteomics, medicine, human health and environmental protection. The methodological research, instrumentation and method development is covered by the field of separation and spectroscopic techniques and involves electrophoretic methods, microcolumn liquid chromatography, electrochromatography, supercritical fluid chromatography and extraction, mass spectrometry, atomic absorption, emission and fluorescence spectrometry. Great attention is paid to instrumentation miniaturization and nanotechnology. Research orientation is 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	Výzkum elektromigračního chování vzorků s obsahem soli, kde dochází k rozštěpení zóny analytu na části detegovatelné jako samostatné píky ukázal, že tyto efekty mají původ v přechodné fázi separace. Může současně vzniknout několik ostrých navzájem prostorově oddělených rozhraní, která jsou schopná zachytit (stackovat) dotyčný analyt. Získané poznatky umožňují jev identifikovat i nalézt vhodný způsob řešení pro konkrétní případ.	1
2	Vyvinuli jsme nový standardní systém pufrů umožňující měření pKa a iontových mobilit slabých bazí kapilární zónovou elektroforézou s vysokou přesností a bez anomálií způsobených interakcí s protiiontem. Měření je prováděno za konstantní iontové síly a Jouleova ohřevu. Spolehlivost a výhody nového systému pufrů byly doloženy měřením pKa a mobilit pro pyridin a problematickou skupinu aminů.	2
3	Popsali jsme nový separační princip v kapilární elektroforéze spočívající ve fokusaci slabých neamfoterních ionogenních látek a jejich transportu do detektoru na inverzním elektromigračně-disperzním profilu, kde pH klesá směrem k anodě pro fokusaci aniontových analytů nebo ke katodě pro fokusaci kationtových analytů. Vypracovali jsme teorii definující základní podmínky, za kterých je analyt fokusován na profilu tohoto typu, a doložili ji přesvědčivými experimenty.	3
4	Publikovali jsme řadu přehledných prací shrnujících a kriticky hodnotících současný stav poznatků. Jedná se o práce o kapacitně vázané bezkontaktní vodivostní detekci a průtokové analýze v kapilární elektroforéze, kde jsme se zaměřili na aplikační prostor s ohledem na požadavky současné praxe a možnosti kombinace s dalšími analytickými technikami. Přehled elektrochemických detekčních technik v kapilární a mikročipové elektroforéze	4-11

1 Pořadové číslo	2 Výsledek	3 Číslo citace výsledku
	<p>byl věnován základům jednotlivých metod a kritickému zhodnocení problémů způsobených separačním napětím. Přehled o elektromigraci iontových a neutrálních látek v komplexních biologických vzorcích diskutuje nejzajímavější použití elektroforetických metod v biotechnikách. Další přehled shrnuje principy elektroseparačních metod používaných při přípravě a prekoncentraci vzorků (elektrodialýza, elektroextrakce, elektro-membránová extrakce) a kritické zhodnocení jejich možností. Vypracovali jsme přehled shrnující nové poznatky na poli analytické kapilární izotachoforézy, přehled o elektrolytových systémech užívaných v kapilární elektroforéze při on-line kombinaci s hmotnostní spektrometrií a dva přehledy o stackovacích technikách v elektroforéze. Posledně jmenované 4 práce jsou uspořádány podle použitých operačních principů, zahrnují teorii, metodologii a analytické aplikace a jsou publikovány v prestižních číslech mezinárodního časopisu Electrophoresis.</p>	
5	<p>Pozornost jsme věnovali vývoji nových, tzv. binárních matic, které vzniknou kombinacemi matic běžně používaných pro analýzu sacharidů a proteinů. Binární matrice vzniklé kombinacemi 2,5-dihydroxybenzoové kyseliny s kyselinou 4-hydroxy-α-kyanskořicovou (2,5-DHB/CHCA) nebo kyselinou sinapovou (2,5-DHB/SA) poskytly hmotnostní spektra s nejvyšší kvalitou a prokázaly svoji univerzálnost.</p>	12
6	<p>Proces teplotní denaturace nespécifického lipid transfer proteinu z ječmene s kovalentně navázaným lipidem (ns-LTP1b) jsme studovali pomocí nukleární magnetické resonance (NMR) a diferenciální skenovací kalorimetrie (DSC) až do teploty 115°C. Zjistili jsme, že denaturace je nevratná a vysoce kooperativní.</p>	13
7	<p>Izoelektrickou fokusaci v divergentním toku (DF IEF) jsme využili pro přípravu proteomických vzorků pro hmotnostní spektrometrii. Metoda DF IEF je založena na separaci amfolytických sloučenin v pH gradientu vytvořeném v separačním kanále vyříznutém z polyesterové netkané textilie.</p>	14
8	<p>Využili jsme optimalizovaného protokolu extrakce hordeinů a jejich přímé analýzy pomocí MALDI-TOF hmotnostní spektrometrie pro identifikaci sladovnických odrůd ječmene.</p>	15
9	<p>Metoda chemického generování těkavých sloučenin stříbra pomocí redukce tetrahydroborátem je vhodná pro stanovení stříbra atomovou absorpční spektrometrií s křemenným atomizátorem. Pomocí radioindikátoru jsme stanovili účinnost produkce a transportu těkavé formy a detailní distribuci analytu v aparatuře. Metodami analýzy aerosolů a transmisní elektronové mikroskopie jsme experimentálně potvrdili hypotézu, že „těkavou“ formou jsou ve skutečnosti nanočástice obsahující stříbro.</p>	16
10	<p>Radioaktivní indikátory ^{125}Sb a $^{205,206}\text{Bi}$ jsme použili ke zjištění účinnosti záchytu a uvolnění hydridů analytu s následnou detekcí pomocí AAS. Rovněž jsme studovali prostorovou distribuci analytu v křemenné pasti.</p>	17

1 Pořadové číslo	2 Výsledek	3 Číslo citace výsledku
11	Pro zlepšení dynamického rozsahu a k dalšímu zvýšení odolnosti vůči interferencím při atomizaci hydridů jsme testovali různé přístupy k materiálu a designu optické trubice multiatomizátoru (křemenného atomizátoru s vícenásobným přívodem kyslíku). K tomu jsme použili dosud v literatuře nepopsanou modulární L-konstrukci atomizátoru.	18
12	V oblasti studia solvatačních vlastností stlačené horké vody jsme zveřejnili údaje o vodných rozpustnostech tuhých kyslíkatých aromatických látek [22]. Těchto údajů jsme využili k formulaci aktualizované verze skupinového modelu vodných rozpustností tuhých organických neelektrolytů; příslušnou práci jsme odeslali do tisku [23]. Zahájili jsme práce na měření vodných rozpustností tuhého ferrocenu v širokém teplotním oboru.	22, 23
13	V oblasti studia mezifázové distribuce organických látek ve dvoufázových systémech typu iontová kapalina + superkritický CO ₂ jsme publikovali výsledky získané s iontovou kapalinou methylsulfátem butylmethylimidazolia [24].	24
14	Rozvinuli jsme původní postup pro rychlou a reprodukovatelnou separaci a citlivou detekci mikrobiálních kmenů a biopolymerů zónovou elektroforézou a izoelektrickou fokusací. Aplikovali jsme jej na detekci zejména kvasinek, virů, konidií plísní a dalších patogenů v humánní i veterinární medicíně a rostlinolékařství. Postup se jeví jako výhodný komplementární doplněk stávajících rutinních metod detekce mikroorganismů.	27-31
15	Původní metodu izoelektrické fokusace v divergentním toku jsme modifikovali pro provoz bez nosných amfolytů a využili pro předkoncentraci a purifikaci proteinů v lyzátu <i>Saccharomyces cerevisiae</i> a v extraktu pšeničné mouky. Metoda umožňuje odsolení, předseparaci a až 30ti násobné zkoncentrování extrahovaných proteinů v preparativním měřítku a v jediném kroku. Nepřítomnost nosných elektrolytů v separovaných frakcích proteinů je podstatnou výhodou pro jejich další zpracování a analýzu.	33
16	Původní metodu izoelektrické fokusace v divergentním toku jsme využili pro předkoncentraci a purifikaci proteinů extraktů ječmene, sladu a piva. Zkoncentrované a přečištěné frakce jsme analyzovali pomocí MALDI-TOF/TOF hmotnostního spektrometru. Práce ukazuje spojení izoelektrické fokusace s MALDI hmotnostní spektrometrií jako velmi účinný a rychlý nástroj pro charakterizaci a identifikaci proteinů.	32
17	Pro zvýšení citlivosti UV detekce bioanalytů jsme vyvinuli barevný neionogenní tenzid poly(etylen glykol) 3-(2-hydroxy-5-n-oktylfenylazo)-benzoát, HOPAB, a zjistili jeho fyzikálně-chemické vlastnosti. Po optimalizaci separačních podmínek v kapilární elektroforéze jsme ho použili pro dynamickou modifikaci proteinů a mikroorganismů <i>Escherichia coli</i> , <i>Staphylococcus epidermidis</i> (biofilm-pozitivní a negativní), a kmenů kvasinkových buněk <i>Candida albicans</i> , <i>Candida parapsilosis</i> (biofilm-pozitivní a negativní). Hodnoty	30

1 Pořadové číslo	2 Výsledek	3 Číslo citace výsledku
	izoelektrických bodů nativních i modifikovaných bioanalytů se shodovaly, byly detegovány pikogramy injektovaných proteinů a méně než stovka buněk mikroorganismů, což je přibližně desítkrát menší počet buněk než u nativních buněk. Techniky jsme využili při identifikaci mikroorganismů v moči pacienta; získané výsledky se kvalitativně i kvantitativně shodovaly s rutinními výsledky z mikrobiologické laboratoře.	
18	Původní barevné nízkomolekulární pl markery byly úspěšně aplikovány při kapilární, gelové i free-flow izoelektrické fokusaci. Byly nenahraditelným nástrojem jak při vývoji nových analytických metod, tak i při jejich aplikaci na analýzu proteinů.	27-33
19	Vyvinuli jsme monolitické mikrokolony pro proteomickou analýzu.	34

2c) anotace nejvýznamnějších výsledků z bodu 2b)

Pořadové číslo anotace: 1

Název česky: Rychlá a selektivní separace a citlivá detekce mikrobiálních kmenů a biopolymerů zónovou elektroforézou a izoelektrickou fokusací

Název anglicky: Fast and selective separation and sensitive detection of microbial strains and biopolymers by zone electrophoresis and isoelectric focusing

Popis výsledku česky: S rostoucí globalizací se zvyšuje diverzifikace mikroorganismů i mimo místa jejich běžného výskytu. Tradičně používané mikrobiologické postupy jsou často nedostačující a je nutno je postupně rozšířit o nové analytické techniky, mezi které i v rutinních laboratořích dnes patří např. PCR a hmotnostně spektroskopické techniky, jako např. MALDI-MS. Jejich provoz i přístrojové vybavení jsou drahé, postupy často časově náročné, vyžadují obsáhlou datovou základnu. Proto se do oblasti zájmu separace a detekce mikroorganismů dostávají rychlé, levné, zejména kapilární elektromigrační techniky (prozatím pouze na úrovni základního výzkumu). Příkladem je citlivá fluorimetrická detekce a separace dynamicky modifikovaných mikroorganismů přímo z reálného vzorku [27], např. rostlinných patogenů ze suspenze tkáně rajčat [27]. Biofilm-pozitivní a biofilm-negativní kmeny rodu *Candida*, patřící mezi časté původce tzv. nemocničních infekcí spojených s vysokou mortalitou, byly od sebe odlišeny na základě "fingerpintových" profilů jejich rozpustných membránových proteinů technikou gelové izoelektrické fokusace a současně i citlivější kapilární izoelektrickou fokusací již během 4 hod [28] na místo běžných několika dní. Elektromigračního chování konidií bylo využito [29] pro rychlou identifikaci kmenů vláknitých hub např. rodu *Aspergillus*, kdy byly fluorimetricky detegovány až jednotky konidií. S využitím původního vyvinutého barevného neionogenního tenzidu pro dynamickou modifikaci bioanalytů byly detegovány pikogramy proteinů a méně než stovka buněk

mikroorganismů (desetkrát menší počet než u buněk nativních) z reálného vzorku moče pacienta s cystitidou [30]. Možnost využití detekce a separace virů elektromigračními technikami i pro běžné účely virologie a tedy i z reálných vzorků byla ověřena na viru koňské chřipky H3N8 a prasečí chřipky H1N2 [31].

Popis výsledku anglicky: With increasing of globalization the diversity of microorganisms outside their normal incidence increases. Traditionally used microbiological techniques are often insufficient and need to be extended by new analytical techniques, among which even in routine laboratories, e.g., PCR and spectroscopic methods including MALDI-MS. These analyses are expensive, time consuming and need appropriate database. Therefore, the fast and cheap electromigration methods of mainly capillary format draw attention for detection and separation of microorganisms (currently at the level of basic research). As an example the sensitive fluorimetric detection and separation of dynamically modified microorganisms directly in real samples, e.g., plant pathogens from tomato tissue were introduced in Ref. [27]. The biofilm-positive and biofilm-negative strains of genus *Candida* belonging to the origin of nosocomial infections associated with high mortality were recognized within 4 hours based on gel IEF fingerprint profiles of soluble membrane proteins together with confirmation by more sensitive CIEF [28] instead of several days. The electromigration properties of conidia have been used for the fast identification of filamentous fungi [29], e.g., the genus *Aspergillus* were fluorimetrically detected down to units of conidia. With use of our new chromophoric non ionogenic modifier the proteins down to picogram level and microorganisms down to hundreds cells were detected in the real urine sample from patient with cystitis [30]. It is one order of magnitude lower level in comparison with detection of native ones. The possibility to separate and detect the viruses by electromigration techniques for common virological purposes in real samples was verified on viruses of equine influenza H3N8 and swine influenza H1N2 [31].

Citace výstupu: Horká, M. - Horký, J. - Matoušková, H. - Šlais, K.: Free flow and capillary isoelectric focusing of bacteria from the tomatoes plant tissues. *Journal of Chromatography A*. Roč. 1216, č. 6 (2009), s. 1019-1024 ; Horká, M. - Růžička, F. - Holá, V. - Šlais, K.: Separation of similar yeast strains by IEF techniques. *Electrophoresis*. Roč. 30, č. 12 (2009), s. 2134-2141 ; Horká, M. - Růžička, F. - Kubesová, A. - Holá, V. - Šlais, K.: Capillary electrophoresis of conidia from cultivated microscopic filamentous fungi. *Analytical Chemistry*. Roč. 81, č. 10 (2009), s. 3997- 4004 ; Horká, M. - Růžička, F. - Holá, V. - Kahle, V. - Moravcová, D. - Šlais, K.: Capillary electromigration separation of proteins and microorganisms dynamically modified by chromophoric non-ionogenic surfactant. *Analytical Chemistry*. Roč. 81, č. 16 (2009), s. 6897- 6904 ; Horká, M. - Kubíček, O. - Kubesová, A. - Kubíčková, Z. - Rosenbergová, K. - Šlais, K.: Testing of the influenza virus purification by capillary isoelectric focusing. *Electrophoresis*. - v tisku

Číslo ilustrace: obr_UIACH_2c_1.jpg

Spolupracující subjekt: Mikrobiologický ústav LF a FN u sv. Anny v Brně, Státní rostlinolékařská správa, odbor diagnostiky Olomouc, Státní ústav jaderné, chemické a biologické ochrany, detašované pracoviště Brno

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Ing. Marie Horká, CSc., 532290221, horka@iach.cz

Pořadové číslo anotace: 2

Název česky: Rozpustnost tuhých organických neelektrolytů ve stlačené horké vodě

Název anglicky: Solubilities of organic nonelectrolyte solids in pressurized hot water

Popis výsledku česky: V důsledku proměnlivosti svých rozpouštěcích schopností v závislosti na teplotě a tlaku může stlačená horká kapalná voda v některých případech sloužit jako náhrada škodlivých organických rozpouštědel v rozličných aplikacích. To může vést k žádoucímu poklesu zátěže prostředí těkavými organickými látkami. Z tohoto důvodu jsou solvatační vlastnosti vody za vysokých teplot předmětem intenzivního studia. K důkladnému poznání solvatačních vlastností stlačené horké kapalné vody jsou nezbytné i spolehlivé údaje o rozpustnostech řady různých typů organických látek. Již dříve jsme vyvinuli jednoduchý skupinový model vodných rozpustností tuhých organických neelektrolytů v širokém oboru teplot. Odhady skupinových parametrů pro cyklickou éterovou a metylenovou skupinu však v tomto modelu nebyly dostatečně robustní a parametry pro karbonylovou skupinu zcela chyběly. Z těchto důvodů jsme změřili vodné rozpustnosti dvou diamantoidních uhlovodíků [25] a několika kyslíkatých aromatických sloučenin [22] v širokém oboru teplot za konstantního tlaku 5 MPa. Výsledky nám umožnily zdokonalit a rozšířit korelaci rozpustností s cílem zvýšit její užitečnost pro odhad vodných rozpustností tuhých organických neelektrolytů v širokém oboru teplot [23].

Popis výsledku anglicky: Because of tunability of its solvent properties through changes in operating temperature and pressure, water can in some cases be used to replace harmful organic solvents in diverse applications. This can result in a desirable relief of environmental burden by volatile organic compounds. Consequently, intense efforts have recently been spent to improve our knowledge of the solvating abilities of water at elevated temperatures. Reliable data on aqueous solubilities of organic compounds are also needed for thorough understanding of solvent properties of pressurized hot water. We have previously developed a group-contribution correlation of solubilities of heavy organic nonelectrolyte solids in pressurized hot water. In that correlation, however, group parameters for the ring methylene and the ring ether groups were not sufficiently robust and the carbonyl group was missing entirely. Therefore, we have measured the aqueous solubilities of two diamondoid hydrocarbons [25] and several oxygenated aromatic compounds [22] in a wide range of temperature along the 5-MPa isobar. The results made it possible for us to upgrade and extend the solubility correlation to improve its scope and utility in rapid estimation of aqueous solubilities of organic nonelectrolyte solids within wide range of temperature [23].

Citace výstupu: Karásek, P. - Planeta, J. - Roth, M.: Solubilities of oxygenated aromatic solids in pressurized hot water. *Journal of Chemical and Engineering Data*. Roč. 54, č. 5 (2009), s. 1457–1461 ; Karásek, P. - Planeta, J. - Roth, M.: Group contribution correlation for aqueous solubilities of solid aromatics, heterocycles, and diamondoids over 200-K temperature interval. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. – v tisku; Karásek, P. - Planeta, J. - Roth, M.: Solubilities of adamantane and diamantane in pressurized hot water. *Journal of Chemical and Engineering Data*. Roč. 53, č. 3 (2008) 816–819.

Číslo ilustrace:

Spolupracující subjekt:

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): doc. RNDr. Michal Roth, CSc., 532290171, roth@iach.cz

Pořadové číslo anotace: 3

Název česky: Systémové efekty v kapilární zónové elektroforéze se self-stackováním vzorku: štěpení píků analytů ve vzorcích s obsahem soli

Název anglicky: System effects in sample self-stacking CZE: Single analyte peak splitting of salt containing samples

Popis výsledku česky: V kapilární zónové elektroforéze může být problémem, pokud počet píků na detekčním záznamu neodpovídá počtu analyzovaných látek. Jednou z možných příčin takového chování je rozštěpení zóny analytu na vzájemně nezávislé části detegovatelné jako dobře vyvinuté samostatné píky, které se může objevovat u vzorků s obsahem soli. Byla vypracována teorie elektromigračního chování takových systémů a teoretickým zkoumáním a počítačovými simulacemi bylo zjištěno, že tyto efekty mají původ v přechodné fázi separace, kdy vzorek může vyvolat vznik paralelní existence několika přechodných ostrých rozhraní (včetně systémových), která jsou současně schopná zachytit (stackovat) dotýčný analyt. Jejich elektromigrace je konvergentní a v závislosti na tom, zda se setkají předtím, než se z nich analyt odloučí, se vytvoří trvalé nebo přechodné dvojitě nebo vícenásobné píky. Vzhled násobných píků může být velmi rozmanitý a pohybuje se od dvojitých či trojitých píků až k majoritnímu píku, který je v určité vzdálenosti doprovázen minoritním píkem. Teorie byla plně experimentálně ověřena. Poznatky o mechanismu štěpení píků umožňují identifikovat jejich přítomnost v daném základním elektrolytu a vzorku a nalézt pro konkrétní případ vhodný způsob řešení.

Popis výsledku anglicky: One of the problems that can be met in capillary zone electrophoresis arises when the number of peaks on the detection record does not correspond to the number of substances analyzed. One of the reasons for such behaviour is splitting of the analyte zone into mutually independent parts detectable as well developed distinct peaks that can occur with salt-containing samples. A theory of the electromigration behaviour of such systems was elaborated and theoretical investigations and computer simulations revealed that these effects originate in the transient phase of separation where the sample may induce parallel existence of several transient sharp boundaries (including system boundaries) that are simultaneously capable to stack an analyte. Their electromigration is convergent and depending on whether they merge before the analyte destacks from them, permanent or transient double or multiple peaks are formed. The appearance of multiple peaks can be very variable, ranging from double or triple peaks to a major peak with a minor peak quite apart. The theory was fully confirmed by experiments. Knowledge of the peak splitting mechanism allows both to identify its presence in a given background electrolyte and sample and to find effective remedy.

Citace výstupu: Malá, Z. – Gebauer, P. - Boček, P.: System effects in sample self-stacking CZE: Single analyte peak splitting of salt containing samples. Electrophoresis. Roč. 30, č. 5 (2009), s. 866-874.

Číslo ilustrace:

Spolupracující subjekt:

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

Pořadové číslo anotace: 4

Název česky: Izoelektrická fokusace v divergentním toku: rychlá a účinná metoda pro přípravu vzorků pro hmotnostní spektrometrii

Název anglicky: Divergent flow isoelectric focusing: fast and efficient method for protein sample preparation for mass spectrometry

Popis výsledku česky: V publikaci jsou popsány výhody použití izoelektrické fokusace v rozšiřujícím se toku (DF IEF) pro přípravu proteomických vzorků pro hmotnostní spektrometrii. Metoda DF IEF je založena na separaci amfolytických sloučenin v pH gradientu vytvořeném v separačním kanále o rozšiřujícím se tvaru vyříznutém z polyesterové netkané textilie. Amfolytické látky včetně proteinů jsou unášeny tokem (18-25 ml/hod) separačním kanálem v proudnicích daných jejich isoelektrickými body. pH gradient a jeho stabilita byla monitorována pomocí syntetizovaných barevných nízko-molekulárních pl markerů. Separované frakce byly sbírány do deseti mikrozkušavek a analyzovány pomocí MS. Purifikace, zkoncentrování, separace a odsolení vzorků v průběhu DF IEF pomohly výrazně zvýšit kvalitu následných hmotnostních spekter. To přispělo i ke zjednodušení sledování post-translačních modifikací a změn proteomu v průběhu sladování a vaření piva.

Popis výsledku anglicky: Advantages of Divergent flow isoelectric focusing (DF IEF) for protein sample preparation for mass spectrometry are described in the paper. The DF IEF method is based on the separation of ampholytic compounds in the pH gradient in the separation channel of divergent shape cut from polyester nonwoven web. Ampholytic compounds, including proteins, drift through the channel carried by flow (18–25 ml/h) in streamlines given by their isoelectric points. The pH gradient and its stability during analysis have been monitored with synthesized colored low-molecular mass pl markers. Separated fractions were collected in ten microvials and further analyzed by MS. The purification, concentration, separation and desalting of samples during DF IEF improved significantly the quality of MS spectra. It also simplified monitoring of post-translational modifications and protein changes occurring during malting and brewing.

Citace výstupu: Mazanec, K. - Bobálová, J. - Šlais, K.: Divergent flow isoelectric focusing: fast and efficient method for protein sample preparation for mass spectrometry. Analytical and Bioanalytical Chemistry. Roč. 393, č. 6-7 (2009), s. 1769-1778.

Číslo ilustrace:

Spolupracující subjekt:

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Ing. Karel Mazanec, Ph.D., 532290145, mazanec@iach.cz

Pořadové číslo anotace: 5

Název česky: Chemické generování těkavých forem kovů s detekcí atomovou absorpční spektrometrií: stanovení účinnosti generování pomocí radioindikátoru a charakterizace těkavých forem

Název anglicky: Chemical vapour generation of metals with atomic absorption spectrometry detection: radiotracer efficiency study and characterization of volatile species

Popis výsledku česky: Rozvinuli a charakterizovali jsme chemické generování těkavých sloučenin kovů jako metodu vnášení vzorků pro atomovou absorpční spektrometrii. Při této metodě se analyzovaný kov přítomný ve vzorku ve stopové koncentraci převede pomocí chemické reakce - redukce tetrahydridboritanem - na těkavou látku, která je pak s vysokou citlivostí detekována pomocí analytické

atomové spektrometrie. Podařilo se nám vyvinout metodu pro generování těkavých sloučenin a stanovení stříbra a ve spolupráci se zahraničním stážiistou i zlata pomocí atomové absorpční spektrometrie za použití jednoduchých křemenných atomizátorů, s mezí detekce v řádu ng ml^{-1} . Poprvé byla podrobně stanovena účinnost generování a distribuce analytu v aparatuře pomocí radioindikátoru (izotopu ^{111}Ag pro stříbro); do plynné fáze se uvolní přes 20% kovu, 40% kovu zůstává v odpadní kapalině, a zbytek se usazuje v různých částech aparatury. S použitím přístrojového vybavení pro studium aerosolů a transmisní elektronové mikroskopie jsme jako první experimentálně potvrdili pro Ag a Au, že vlastní těkavou formou není hypotetická plynná sloučenina, jak bylo dosud obecně předpokládáno, ale jsou to nanočástice obsahující kov uvolněné do plynné fáze (viz ilustrace), o velikosti 8 ± 2 nm pro Ag a 10 ± 6 nm pro Au, sdružené do shluků od několika do několika desítek částic. Podařilo se také na tyto kovy aplikovat v naší laboratoři vyvinutou moderní techniku zachytu těkavých sloučenin přímo v křemenném atomizátoru, kdy je analyt nejprve vygenerován z většího objemu vzorku a postupně zachycen v atomizátoru. Poté je kov změnou podmínek v atomizátoru v krátkém čase atomizován, což přináší vysokou odezvu a další řádové snížení mezí detekce.

Popis výsledku anglicky: : We developed and characterized generation of volatile compounds of metals as a sample introduction method for analytical atomic spectrometry. In this method, analyzed metal present in sample at trace concentration is transformed by chemical reaction - reduction by tetrahydridoborate - to a volatile compound, which is then with high sensitivity detected by atomic spectrometry. We developed a method for generation of volatile compounds and determination of silver and, in cooperation with a visiting scientist, of gold by atomic absorption spectrometry with simple quartz tube atomizers. Achieved limits of detection were in ng ml^{-1} range. For the first time, efficiency of generation and detailed distribution of analyte was determined by the use of radiotracer (^{111}Ag radioisotope for silver); over 20% of metal was released into the gaseous phase, 40% remained in the waste liquid and the rest was found deposited over various parts of the generator system. Using the instrumentation for aerosol science and transmission electron microscopy, we brought the first experimental proof that for Ag and Au the actual volatile species are not hypothetic simple gaseous compounds, as supposed before, but metal containing nanoparticles released into the gaseous phase (see illustration), sized 82 nm and 106 nm for Ag and Au, respectively, present in clusters of few to few tens. We could also apply in-situ analyte collection directly in the quartz atomizer to those metals. This is a modern technique developed recently in our laboratory, when analyte is first generated from a bigger volume of sample and collected inside the atomizer, and subsequently rapidly atomized by a change of conditions in the atomizer. This allows further improvement of detection limits by an order of magnitude.

Citace výstupu: Musil, S. - Kratzer, J. - Vobecký, M. - Hovorka, J. - Benada, O. - Matoušek, T.: Chemical vapour generation of silver for atomic absorption spectrometry with the multiatomizer: radiotracer efficiency study and characterization of silver species. *Spectrochimica Acta. B.* Roč. 64, č. 11-12 (2009), s. 1240-1247.

Číslo ilustrace: obr_UIACH_2c_6.jpg

Spolupracující subjekt:

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Mgr. Tomáš Matoušek, Ph.D., 296442474, matousek@biomed.cas.cz

Pořadové číslo anotace: 6

Název česky: Studium teplotní denaturace nesespecifického lipid transfer proteinu (ns-LTP1b) z ječmene pomocí nukleární magnetické rezonance a diferenciální skenovací kalorimetrie

Název anglicky: Investigation of thermal denaturation of barley nonspecific lipid transfer protein 1 (ns-LTP1b) by nuclear magnetic resonance and differential scanning calorimetry

Popis výsledku česky: Nesespecifický lipid transfer protein 1b (ns-LTP1b) z ječmene je nejdůležitější bílkovina v pivu pro tvorbu pěny. Proces teplotní denaturace tohoto proteinu jsme studovali pomocí nukleární magnetické rezonance (NMR) a diferenciální skenovací kalorimetrie (DSC) až do teploty 115°C. Do tak vysoké teploty tento proces dosud nebyl systematicky zkoumán. Zjistili jsme, že denaturace je nevratná, což je pro vyhodnocení mnohem náročnější než běžně studované vratné denaturace. Vyvinuli jsme novou metodu numerické analýzy, která umožňuje vyhodnotit výsledky podle teorie přechodového stavu bez dalšího zjednodušování, na kterém byly založeny dříve publikované práce. Na základě získaných hodnot jsme spočítali rychlosti denaturace jako jednoduchá měřítka stability proteinu při různých teplotách. Studovali jsme také vliv disulfidových můstků na stabilitu proteinu. Práce má dopad jak metodologický (byl použit nový přístup sledování i vyhodnocování denaturace), tak praktický (výsledky popisují důležitý faktor ovlivňující kvalitu piva).

Popis výsledku anglicky: Non-specific lipid transfer protein 1b (ns-LTP1b) is the most important protein influencing beer foaming. Process of thermal denaturation of this protein was investigated by nuclear magnetic resonance (NMR) and differential scanning calorimetry (DSC) up to 115°C. The process has not been systematically studied up to such high temperature so far. The denaturation was found to be irreversible, which is a case much more difficult for evaluation than the commonly studied reversible denaturation. We developed a new method of numerical analysis allowing evaluation of results according to the transition-state theory without further simplification, which the previously published works have been based on. We calculated rate of denaturation from the values obtained at various temperatures as a simple measure of protein stability. We also studied the effect of disulfide bridges on the protein stability. The study has a methodological impact (a new approach was used to monitor and evaluate denaturation) as well as practical consequences (results describe an important factor for the quality of beer).

Citace výstupu: Matejková, M. – Žídková, J. – Žídek, L. – Wimmerová, M. – Chmelík, J. – Sklenář, V.: Investigation of thermal denaturation of barley nonspecific lipid transfer protein 1 (ns-LTP1b) by nuclear magnetic resonance and differential scanning calorimetry. Journal of Agricultural and Food Chemistry. Roč. 57, č. 18 (2009), s. 8444–8452.

Číslo ilustrace:

Spolupracující subjekt:

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Mgr. Jitka Žídková, 532290107, zidkova@iach.cz

2d) domácí a zahraniční ocenění zaměstnanců pracoviště

1 Číslo	2 Jméno oceněného	3 Druh a název ocenění	4 Oceněná činnost	5 Ocenění udělil
1	Ing. Miloslav Vobecký, CSc.	Hanušova medaile	Významný prínos k rozvoji jaderné chemie	Česká společnost chemická
2	Ing. Karel Mazanec, PhD.	Cena za nejlepší poster na mezinárodní konferenci „3rd Central and Eastern European Proteomics Conference“ Budapest, 2009	Ocenění nejlepšího posteru na mezinárodní konferenci	3rd Central and Eastern European Proteomics Conference
3	Mgr. Stanislav Musil	Royal Society of Chemistry Poster Award	Nejlepší poster z oboru obecné analytické chemie na konferenci Colloquium Spectroscopicum Internationale XXXVI, Budapešť, Maďarsko	Royal Society of Chemistry- časopis Analyst
4	Yasin Arslan (stážista)	Royal Society of Chemistry Poster Award	Nejlepší poster z oboru atomové spektroskopie na konferenci Colloquium Spectroscopicum Internationale XXXVI, Budapešť, Maďarsko	Royal Society of Chemistry- časopis Journal of Analytical Atomic Spectrometry
5	RNDr. Jan Kratzer	Soutěž mladých autorů do 35 let v oboru spektroskopie, 1. cena v kategorii původních vědeckých prací	Soubor vědeckých prací (4 články a 3 patentové přihlášky) zabývající se vývojem, optimalizací a aplikacemi prekoncentrace hydridotvorných prvků v křemenných atomizátorech	Spektroskopická společnost Jana Marka Marci
6	Ing. Josef Planeta, Ph.D.	Ocenění posteru (poster award)	Ocenění nejlepšího posteru na mezinárodní konferenci The 8th Balaton Symposium on High-	Prof. Peter Schoenmakers a Prof. Danilo

1 Číslo	2 Jméno oceněného	3 Druh a název ocenění	4 Oceněná činnost	5 Ocenění udělil
			Performance Separation Methods and The 15th International Symposium on Separation Sciences, Siófok, Hungary	Corradini jménem organizátorů konference

2e) další specifické informace o pracovišti

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	PřF MU		ano			

1 Číslo	2 Magisterský program	3 Název VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
1	Pokročilé metody	PřF MU	ano	ano			
2	Pokroky v teorii a instrumentaci analytických metod	FChT UPa	ano				
3	Fyzika, obor Biofyzika	PřF MU			ano		
4	Biochemie	PřF MU	ano		ano		
5	Analytická chemie	PřF UK v Praze	ano		ano		
6	Analytická chemie	PřF MU	ano	ano	ano		
7	Potravinářská chemie a biotechnologie	FCH VUT v Brně		ano			
8	Analytika a technologie životního prostředí	FCH VUT v Brně	ano				
9	Trendy v analytické chemii	PřF MU	ano				
10	Analýzy biologických materiálů	FChT UPa			ano		

1 Číslo	2 Doktorský program	3 Název VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
1	Analytická chemie	FCH VUT v Brně	ano				
2	Analytická chemie	MZLU v Brně			ano		konzultant
3	Analytická chemie	PřF MU			ano		
4	Fyzika	PřF MU			ano		
5	Biochemie	PřF MU v Brně			ano		
6	Potravinářská chemie a biotechnologie	FCH VUT v Brně			ano		
7	Analytická chemie	PřF UK v Praze			ano		
8	Moderní metody analytické chemie	FCH VUT v Brně	ano				
9	Analytická chemie	FChT Pa			ano		

1 Číslo	2 Doktorský program	3 Název VŠ	4 Přednášky	5 Cvičení	6 Vedení prací	7 Učební texty	8 Jiné
10	Chemie a technologie ochrany životního prostředí	FCH VUT v Brně			ano		

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

1 Číslo	2 Akce	3 Pořadatel/škola	4 Činnost
1	Chemická olympiáda	MŠMT ČR	Spoluorganizace krajských kol ChO kategorií A, C a D v kraji Praha ve školním roce 2008/2009 i 2009/2010
2	Praxe 2 žáků SPŠCH Brno	SPŠCH Brno	Vedení praxe dvou středoškolských studentů

3c) vzdělávání veřejnosti

1 Číslo	2 Akce	3 Pořadatel	4 Činnost

3d) seznam titulů vydaných na pracovišti

--

4. Činnost pro praxi

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

Pořadové číslo: 1

Dosažený výsledek: Vlasy mohou být využity ke zjištění endogenní expozice metylrtuti. Anorganicky vázaná rtuť a metylrtuť ve vlasech skupiny zubařů, lidí pracujících v rybím průmyslu a rtuť nezatížená populace byly stanoveny validovanou analytickou metodou. Byla nalezena vysoce signifikantní korelace mezi konzumací ryb a obsahem metylrtuti ve vlasech.

Uplatnění/Citace výstupu: Wranová, K. - Čejchanová, M. - Spěváčková, V. - Korunová, V. - Vobecký, M. - Spěváček, V.: Mercury and methylmercury in hair of selected groups of Czech population. Central European Journal of Public Health. Roč. 17, č. 1 (2009), s. 36-40.

Název projektu /programu v češtině: Rtuť a metylrtuť ve vlasech vybrané populace v ČR jako bioindikátor expozice rtuti

Název projektu/programu v angličtině: Mercury and methylmercury in hair of selected population of the Czech Republic as an indicator of mercury exposition

Poskytovatel: IGA MZ - NR/8953 - 3/2006

Partnerská organizace: Státní zdravotní ústav v Praze

Pořadové číslo: 2

Dosažený výsledek: Vyvinuli jsme zařízení pro vícekolonovou kapilární elektroforézu s hydrodynamicky uzavřenými kolonami, dávkovacím zařízením a vymývacím blokem pro transport separovaných látek do hmotnostně spektrometrického rozhraní.

Zařízení sestává z jedné nebo více separačních kolon, dávkovacího zařízení s obtokovým blokem a polopropustnou membránou, elektrolytových zásobníků oddělených polopropustnými membránami od separačních kolon a vymývacího bloku. Zařízení je sestaveno

pro elektroforetickou separaci v jedno, či více kolonovém systému s možností odvádění separovaných zón do hmotnostně spektrometrického rozhraní.

Uplatnění/Citace výstupu: PV 2009-141, Zařízení pro připojení uzavřeného elektroforetického systému k hmotnostnímu spektrometru
Název projektu /programu v češtině: LC06023 Integrované bioanalytické technologie pro mikroanalýzy a diagnostiku s využitím LIF a hmotnostní spektrometrie

Název projektu/programu v angličtině: LC06023 Integrated bioanalytical technologies for microanalysis and diagnostics with LIF and MS detection

Poskytovatel: MŠMT

Partnerská organizace: Villa Labeco, s.r.o., Sp. N. Ves, Slovensko

Pořadové číslo: 3

Dosažený výsledek: Studovali jsme glykací proteinu Z pomocí kombinace gelové elektroforézy, kapalinové chromatografie a hmotnostní spektrometrie. Pro jednoznačné potvrzení glykací byla použita detailní fragmentační analýza nemodifikovaného peptidu a jeho glykované formy. Dále byla metoda pro izoelektrickou fokusaci v rozšiřujícím se toku (Divergent flow isoelectric focusing - DF IEF) použita pro separaci a purifikaci proteinových vzorků z ječmene, sladu a piva s důrazem na možnosti studia posttranslačních modifikací proteinů v průběhu procesu vaření piva. Studie teplotní denaturace byla také doplněna o pozorování výsledků námi vyvinuté metody určování aktivační entalpie a entropie a jinými způsoby vyhodnocení a o nově naměřená hmotnostní spektra potvrzující otevření vodíkových můstků účinkem redukčních činidel a o experimenty potvrzující monomerní charakter denaturovaného proteinu. Popsali jsme také postup pro rychlou identifikaci sladovnických odrůd ječmene s využitím optimalizovaného protokolu extrakce hordeinů a jejich přímé analýzy pomocí MALDI hmotnostní spektrometrie. Pro analýzu proteinů s nízkým obsahem lysinů a argininů byl optimalizován postup modifikace cysteinů 2-bromethylaminem, který převede cystein na homologní aminokyselinu k lysinu a je pak následně rozpoznán trypsinem jako místo vhodné pro štěpení. To má za následek zvýšení počtu enzymatických štěpů a tím i spolehlivosti hmotnostně-spektrometrické identifikace dané bílkoviny.

Uplatnění/Citace výstupu: Výsledky byly publikovány:

Laštovičková, M. - Chmelík, J. - Bobálová, J.: The combination of simple MALDI matrices for the improvement of intact glycoproteins and glycans analysis. *International Journal of Mass Spectrometry*. Roč. 281, č. 1-2 (2009), s. 82-88 ; Matejková, M. – Žídková, J. – Žídek, L. – Sommerová, M. – Chmelík, J. – Sklenář, V.: Investigation of thermal denaturation of barley nonspecific lipid transfer protein 1 (ns-LTP1b) by nuclear magnetic resonance and differential scanning calorimetry. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. Roč. 57, č. 18 (2009), s. 8444–8452 ; Mazanec, K. - Bobálová, J. - Šlais, K.: Divergent flow isoelectric focusing: fast and efficient method for protein sample preparation for mass spectrometry. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, Roč. 393, č. 6-7 (2009), s. 1769-1778 ; Šalplachta, J. –

Bobáľová, J.: MALDI-TOF mass spectrometry of hordeins: rapid approach for identification of malting barley varieties. *Journal of Mass Spectrometry*. Roč. 44, č. 9 (2009), s. 1287-1292 ; Řehulková, H. - Marchetti-Deschmann, M. – Pittenauer, E. – Allmaier, G. – Řehulka, P.: Improved identification of hordeins by cysteine alkylation with 2-bromoethylamine, SDS-PAGE and subsequent in-gel tryptic digestion. *Journal of Mass Spectrometry*. Roč. 44, č. 11 (2009), s. 1613–1621.

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: MZLU v Brně

Pořadové číslo: 4

Dosažený výsledek: Studovali jsme použití nových monolitických kolon založených na metakrylátu pro MALDI-TOF/TOF MS analýzu v proteomice pro prekoncentraci a separaci peptidů odvozených ze štěpení proteinů. Peptidy byly eluovány lineárním gradientem 0-60% roztokem acetonitrilu ve vodě s 0,1% kys. trifluoroctovou. Jednotlivé frakce separovaných proteinů byly sbírány přímo na MALDI terčik, pokryty roztokem alfa-kyan-4-hydroxyskořicové kyseliny a analyzovány pomocí MALDI-TOF/TOF MS. Dosažené výsledky potvrzují, že počet detegovaných peptidů je přibližně 3-4krát vyšší ve srovnání s analýzou bez předcházející separace. Použití vyvíjené techniky umožňuje získat kvalitnější informace o vzorku díky vyššímu počtu identifikovaných peptidů a lepšímu pokrytí proteinové sekvence. Byl sledován vliv kadmia na expresi proteinů v liniích Inu cv. Jitka a cv. Tábor. Pomocí 2D-GE následované obrazovou analýzou a MALDI-TOF/TOF MS identifikací bylo nalezeno 14 proteinů s rozdílnou expresí.

Uplatnění/Citace výstupu: Moravcová, D. - Kahle, V. - Řehulková, H. - Chmelík, J. - Řehulka, P.: Short monolithic columns for purification and fractionation of peptide samples. *Journal of Chromatography A*. Roč. 1216, č. 17 (2009), s. 3629–3636 ; Hradilová, J. - Řehulka, P. - Řehulková, H. - Vrbová, M. - Griga, M. - Brzobohatý, B.: Comparative analysis of proteomic changes in contrasting flax cultivars upon cadmium exposure. *Electrophoresis*. – v tisku

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: MZLU v Brně

Pořadové číslo: 5

Dosažený výsledek: Chuťové vlastnosti piva jsou významně ovlivňovány obsahem tzv. α - a β -hořkých kyselin (humulonů a lupulonů), takže správné stanovení těchto látek ve chmelu a chmelových produktech je velmi důležité. Vlastnímu stanovení, které se provádí buď pomocí kapalinové chromatografie nebo konduktometricky, musí předcházet extrakce hořkých kyselin ze vzorku. Dosud používaný

extrakční postup je poměrně zdlouhavý a pracný. Cílem této studie bylo posoudit možnosti využití kapalinové extrakce za zvýšených teplot a tlaků (pressurized solvent extraction, PSE) v této aplikaci. Ukázalo se, že v porovnání s dosavadní extrakční metodou poskytuje PSE zcela srovnatelné výtěžky cílových analytů, přičemž PSE je zhruba 3x rychlejší a spotřeba organického rozpouštědla při PSE je zhruba 4x nižší než u dosavadní metody.

Uplatnění/Citace výstupu: Čulík, J. - Jurková, M. - Horák, T. - Čejka, P. - Kellner, V. - Dvořák, J. - Karásek, P. - Roth, M.: Extraction of bitter acids from hops and hop products using pressurized solvent extraction (PSE). Journal of the Institute of Brewing. Roč. 115, č. 3 (2009), s. 220–225.

Název projektu /programu v češtině: neformální spolupráce

Název projektu/programu v angličtině: informal cooperation

Poskytovatel: GA ČR, GA203/08/1536; AV ČR, AV0Z40310501

Partnerská organizace: Výzkumný ústav pivovarský a sladařský, a.s., Praha

Pořadové číslo: 6

Dosažený výsledek: Na základě chromatografických měření jsme stanovili jednotlivé dextriny ve vzorcích sladiny, mladiny a mladiny prokvašené a studovali vliv použité odrůdy, lokality, roku sběru a technologických podmínek sladování. Izolační postupy jsme rozšířili na další chromatografické kolony a jejich kombinace, za optimalizovaných podmínek jsme využili vysokou citlivost hmotnostně spektrometrické detekce.

Uplatnění/Citace výstupu: Dosavadní výsledky jsme prezentovali formou posterových sdělení na odborných konferencích.

Název projektu /programu v češtině: Vývoj nových metod charakterizace zbytkového extraktu, které umožní identifikovat a hodnotit složení dextrinů typických pro české pivo

Název projektu/programu v angličtině: Development of new methods for characterization of nonfermentable extract that allow identification and evaluation of composition of dextrans typical for Czech beer

Poskytovatel: Projekt NPVII MŠMT 2B06037

Partnerská organizace: Výzkumný ústav pivovarský a sladařský, a. s.

Pořadové číslo: 7

Dosažený výsledek: Vypracovali jsme metodické postupy pro odběr vzorků pro analýzy v radiometrické polní kontejnerové laboratoři AL-2/R. Postupy jsou určeny pro operační použití a jejich cílem je především poskytnout nezbytné údaje pro přijetí včasného rozhodnutí ke splnění stanoveného úkolu a k zajištění radiální ochrany vojsk. Kromě toho aplikace těchto metodických postupů umožní jednoznačně potvrdit použití radioaktivních látek v daném prostoru a garantuje, že výsledky produkované radiometrickou polní kontejnerovou laboratoří AL-2/R mohou být využity i v rámci soudních sporů s cílem prokázání porušování mezinárodních úmluv.

Uplatnění/Citace výstupu: Metodické pokyny pro práci v radiometrické polní kontejnerové laboratoři AL-2/R
 Název projektu /programu v češtině: Výzkum metod odběru a úprav radioaktivních vzorků vhodných pro polní analytické metody - RADAL
 Název projektu/programu v angličtině: Research of sampling methods and treatments of radioactive samples fits for analyses under battle field situations
 Poskytovatel: Ministerstvo obrany ČR
 Partnerská organizace: VF a.s., Černá Hora

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	FCH VUT v Brně, Fluka	Byly připraveny, testovány a dodány barevné nízkomolekulární markery izoelektrického bodu pro izoelektrickou fokusaci.	Analýza proteinů kapilární izoelektrickou fokusací.

Celkový počet získaných výsledků 1

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

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

Pořadové číslo:

Název česky: Mnohokanálový mikrosystém pro vysoce průchozí preparativní separaci a frakční kolekci a analýzu

Název anglicky: Multichannel microscale system for high throughput preparative separation with comprehensive collection and analysis

Kategorie: Chemie

Zapsán pod číslem: US patent 7,578,915

Popis česky: Zařízení pro automatický sběr frakcí v multikapilárních separacích

Popis anglicky: Instrument for automated collection of fractions in multicapillary separations

Využití: Chemie, molekulární biologie

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Ing. František Foret, CSc., 532290242, foret@iach.cz

4c) výsledky spolupráce se státní a veřejnou správou

Pořadové číslo:

Dosažený výsledek:

Oblast uplatnění výsledku:

Uživatel/Zadavatel:

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	Odborné příspěvky do impaktovaných vědeckých časopisů	Electrophoresis, Journal of Chromatography A-B, Analytical Chemistry, Journal of Physical Chemistry, Analytica Chimica Acta, Food Chemistry	Recenze: 56
2	Doktorská disertace	PřF UK Praha	Oponentura
3	Bakalářská práce	PřF UK Praha	Oponentura

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 Koordinařtor/řešitel česky/anglicky	6 Spoluřešitel /počet	7 Stát(y)	8 Aktivita
1	MŠMT	KONTAKT mobilita ČR – Maďarsko (MEB 040807)	Vývoj separačních technik pro proteomický výzkum / Development of separation techniques for proteomic research	Ing. Janette Bobálová, CSc., Ústav analytické chemie AV ČR, v.v.i / Institut of Analytical Chemistry of the	Dr. Tamás Janáky, Department of Medicinal Chemistry, University	ČR - Maďarsko	Separace, identifikace proteinů a studium jejich posttranslačních modifikací

1 Číslo	2 Název zastřešující organizace (zkratka)	3 Název programu česky/anglicky	4 Název projektu česky/anglicky	5 Kordinátor/řešitel česky/anglicky	6 Spoluřešitel /počet	7 Stát(y)	8 Aktivita
				ASCR ,v. v. i.	of Szeged / 1		
2	AV ČR a NRC- CNRC	Program interní podpory projektů mezinárodní spolupráce	Vývoj a optimalizace plazmového zdroje na bázi DBD pro optickou a hmotnostní spektrometrii za atmosférického tlaku - stanovení ultrastopových koncentrací hydridotvorných prvků / Development and optimization of a plasma source based on DBD for optical and ambient mass spectrometry – determination of hydride forming elements at ultratrace levels	Jan Kratzer	0	Kanada	6 měsíční stáž řešitele na zahraničním pracovišti National Research Council Canada
3	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 Arsenic	Dr. Stýblo	Dědina / 1	USA	1. Vývoj instrumentace a metodologie, založených na generování hydridů a na atomové absorpční a atomové fluorescenční spektrometrii, pro speciální analýzu

1 Číslo	2 Název zastřešující organizace (zkratka)	3 Název programu česky/anglicky	4 Název projektu česky/anglicky	5 Koordinařtor/řešitel česky/anglicky	6 Spoluřešitel /počet	7 Stát(y)	8 Aktivita
							<p>toxických metabolitů arzenu v biologických matricích</p> <p>2. Validace těchto nově vyvinutých metod pomocí vzorků získaných z laboratorních a populačních studií</p> <p>3. Implementace těchto metod pro studie v endemických oblastech výskytu arsenicosis</p>

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

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	Konference České aerosolové společnosti	Conference of the Czech Aerosol Society	Česká aerosolová společnost / Czech Aerosol Society	26 / 2	

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. Dr. Marco A. Z. Arruda	Čelný odborník, analytická atomová spektrometrie	Institute of Chemistry - Unicamp	Brazílie
2	Prof. Dr. Érico M. M. Flores	Čelný odborník, analytická atomová spektrometrie	Universidade Federal de Santa Maria	Brazílie
3	Prof. Miloš V. Novotný	Čelný odborník, bioanalytická chemie, biochemie	National Center for Glycomics and Glycoproteomics	USA

5d) aktuální meziústavní dvoustranné dohody

1 Číslo	2 Spolupracující instituce	3 Stát	4 Oblast (téma) spolupráce
1	C.S.I.C.	Španělsko	Mikroseparační techniky pro bioanalýzu

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

1. Malá, Z. – Gebauer, P. - Boček, P.: System effects in sample self-stacking CZE: Single analyte peak splitting of salt containing samples. *Electrophoresis*. Roč. 30, č. 5 (2009), s. 866-874.
2. Šlampová, A. – Křivánková, L. – Gebauer, P. – Boček, P.: Standard systems for measurement of pKs and ionic mobilities. 2. Univalent weak bases. *Journal of Chromatography A*. Roč. 1216, č. 17 (2009), s. 3637-3641.
3. Gebauer, P. – Malá, Z. – Boček, P.: A new electrophoretic focusing principle: Focusing of non-amphoteric weak ionogenic analytes using inverse EMD profiles. *Electrophoresis*. - v tisku
4. Kubáň, P. – Hauser, P.C.: 10 Years of axial capacitively coupled contactless conductivity detection for capillary zone electrophoresis - a review. *Electrophoresis*. Roč. 30, č. 1 (2009), s. 176-188.
5. Kubáň, P. – Hauser, P.C.: Flow analysis – capillary electrophoresis. *Advances in flow injection analysis and related techniques*. Elsevier, 2009 – (Kolev, S.; McKelvie, I.) – v tisku
6. Kubáň, P. – Hauser, P.C.: Fundamentals of electrochemical detection techniques for capillary and microchip electrophoresis. *Electrophoresis*. Roč. 30, č. 19 (2009), s. 3305-3314.
7. Kubáň, P. – Šlampová, A. – Boček, P.: Electric field enhanced transport across phase boundaries and membranes and its potential use in sample pretreatment for bioanalysis. *Electrophoresis*. – v tisku
8. Gebauer, P. – Malá, Z. – Boček, P.: Recent progress in analytical capillary isotachopheresis. *Electrophoresis*. Roč. 30, č. 1 (2009), s. 29-35.
9. Pantůčková, P. – Gebauer, P. – Boček, P. – Křivánková, L.: Electrolyte systems for on-line CE-MS. Detection requirements and separation possibilities. *Electrophoresis*. Roč. 30, č. 1 (2009), s. 203-214.
10. Malá, Z. – Šlampová, A. – Gebauer, P. – Boček, P.: Contemporary sample stacking in capillary electrophoresis. *Electrophoresis*. Roč. 30, č. 1 (2009), s. 215-229.
11. Gebauer, P. – Boček, P.: Electrophoretic sample stacking. *Electrophoresis*. Roč. 30, č. S1 (2009), s. S27-S33.
12. Laštovičková, M. – Chmelík, J. – Bobálová, J.: The combination of simple MALDI matrices for the improvement of intact glycoproteins and glycans analysis. *International Journal of Mass Spectrometry*. Roč. 281, č. 1-2 (2009), s. 82-88.
13. Matejková, M. – Žídková, J. – Žídek, L. – Wimmerová, M. – Chmelík, J. – Sklenář, V.: Investigation of thermal denaturation of barley nonspecific lipid transfer protein 1 (ns-LTP1b) by nuclear magnetic resonance and differential scanning calorimetry. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. Roč. 57, č. 18 (2009), s. 8444–8452.
14. Mazanec, K. – Bobálová, J. – Šlais, K.: Divergent flow isoelectric focusing: fast and efficient method for protein sample preparation for mass spectrometry. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. Roč. 393, č. 6-7 (2009), s. 1769-1778.
15. Šalplachta, J. – Bobálová, J.: MALDI-TOF mass spectrometry of hordeins: rapid approach for identification of malting baley varieties. *Journal of Mass Spectrometry*. Roč. 44, č. 9 (2009), s. 1287-1292.

16. Řehulková, H. – Marchetti-Deschmann, M. – Pittenauer, E. – Allmaier, G. – Řehulka, P.: Improved identification of hordeins by cysteine alkylation with 2-bromoethylamine, SDS-PAGE and subsequent in-gel tryptic digestion. *Journal of Mass Spectrometry*. Roč. 44, č. 11 (2009). s. 1613–1621.
17. Moravcová, D. – Kahle, V. – Řehulková, H. – Chmelík, J. – Řehulka, P.: Short monolithic columns for purification and fractionation of peptide samples. *Journal of Chromatography A*. Roč. 1216, č. 17 (2009), s. 3629–3636.
18. Musil, S. – Kratzer, J. – Vobecký, M. – Hovorka, J. – Benada, O. – Matoušek, T.: Chemical vapour generation of silver for atomic absorption spectrometry with the multiatomizer: radiotracer efficiency study and characterization of silver species. *Spectrochimica Acta. B*. Roč. 64, č. 11-12 (2009), 1240-1247.
19. Kratzer, J. – Vobecký, M. – Dědina, J.: Stibine and bismuthine trapping in quartz tube atomizers for atomic absorption spectrometry. Part 2: a radiotracer study. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*. Roč. 24, č. 9 (2009), s. 1222-1228.
20. Řezáčová, O. – Dědina, J.: Modular L-design of hydride atomizers for atomic absorption spectrometry. *Spectrochimica Acta. B*. Roč. 64, č. 7 (2009), s. 717-720.
21. Wranová, K. – Čejchanová, M. – Spěváčková, V. – Korunová, V. – Vobecký, M. – Spěváček, V.: Mercury and methylmercury in hair of selected groups of Czech population. *Central European Journal of Public Health*. Roč. 17, č. 1 (2009), s. 36-40.
22. Karásek, P. – Planeta, J. – Roth, M.: Solubilities of oxygenated aromatic solids in pressurized hot water. *Journal of Chemical and Engineering Data*. Roč. 54, č. 5 (2009), s. 1457–1461.
23. Karásek, P. – Planeta, J. – Roth, M.: Group contribution correlation for aqueous solubilities of solid aromatics, heterocycles, and diamondoids over 200-K temperature interval. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. – v tisku
24. Planeta, J. – Karásek, P. – Roth, M.: Distribution of organic solutes in biphasic 1-*n*-butyl-3-methylimidazolium methyl sulfate-supercritical CO₂ system. *Journal of Physical Chemistry B*. Roč. 113, č. 28 (2009), s. 9520–9526.
25. Karásek, P. – Planeta, J. – Roth, M.: Solubilities of adamantane and diamantane in pressurized hot water. *Journal of Chemical and Engineering Data*. Roč. 53, č. 3 (2008), s. 816–819.
26. Čulík, J. – Jurková, M. – Horák, T. – Čejka, P. – Kellner, V. – Dvořák, J. – Karásek, P. – Roth, M.: Extraction of bitter acids from hops and hop products using pressurized solvent extraction (PSE). *Journal of the Institute of Brewing*. Roč. 115, č. 3 (2009), s. 220–225.
27. Horká, M. – Horký, J. – Matoušková, H. – Šlais, K.: Free flow and capillary isoelectric focusing of bacteria from the tomatoes plant tissues. *Journal of Chromatography A*. Roč. 1216, č. 6 (2009), s. 1019-1024.
28. Horká, M. – Růžička, F. – Holá, V. – Šlais, K.: Separation of similar yeast strains by IEF techniques. *Electrophoresis*. Roč. 30, č. 12 (2009), s. 2134-2141.
29. Horká, M. – Růžička, F. – Kubesová, A. – Holá, V. – Šlais, K.: Capillary electrophoresis of conidia from cultivated microscopic filamentous fungi. *Analytical Chemistry*. Roč. 81, č. 10 (2009), s. 3997- 4004.

30. Horká, M. – Růžička, F. – Holá, V. – Kahle, V. – Moravcová, D. – Šlais, K.: Capillary electromigration separation of proteins and microorganisms dynamically modified by chromophoric non-ionogenic surfactant. *Analytical Chemistry*. Roč. 81, č. 16 (2009), s. 6897-6904.
31. Horká, M. – Kubíček, O. – Kubesová, A. – Kubíčková Z. – Rosenbergová, K. – Šlais, K.: Testing of the influenza virus purification by capillary isoelectric focusing. *Electrophoresis*. - v tisku
32. Mazanec, K. – Bobálová, J. – Šlais, K.: Divergent flow isoelectric focusing: fast and efficient method for protein sample preparation for mass spectrometry. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. Roč. 393, č. 6-7 (2009), s. 1769-1778.
33. Šťastná, M. – Šlais, K.: Preparative divergent flow IEF without carrier ampholytes for separation of complex biological samples. *Electrophoresis*. - v tisku
34. Moravcová, D. – Kahle, V. – Řehulková, H. – Chmelík, J. – Řehulka, P.: Short monolithic columns for purification and fractionation of peptide samples for matrix-assisted laser desorption/ionization time-of-flight/time-of-flight mass spectrometry analysis in proteomics. *Journal of Chromatography A* . Roč. 1216, č. 17 (2009), s. 3629-3636.
35. Foret, F.: Capillary electrophoresis of small ions using complex formation and indirect detection. *Electrophoresis*. Roč. 30, č. S1 (2009), s. 34-39.

7. Popularizační a propagační činnost

1 Číslo	2 Název akce	3 Popis aktivity	5 Spolupřadatel	6 Datum a místo konání
1	Týden vědy a techniky	Odborný výklad výzkumné činnosti pracoviště pro odbornou i laickou veřejnost. Přednáška Ing. Markéty Laštovičkové, Ph.D.: Proč je důležitá analýza proteinů a sacharidů		2. – 8. 11. 2009, Brno
2	Den otevřených dveří	Exkurze zájemců do laboratoří ústavu s výkladem pracovníků příslušných oddělení		6. 11. 2009, ÚIACH AV ČR Brno
3	Soutěž o nejlepší práci v oboru spektroskopie mladých autorů (do 35 let), ročník 2008	Soutěž diplomových a publikovaných prací mladých autorů v oboru spektroskopie - organizační zajištění	Spektroskopická společnost Jana Marka Marci	16. 12. 2009, Praha

8. Seznam ilustrací

Oddíl: 2b

Číslo řádku:15

Název česky: Monitorování autofokusace lyzátu kvasinek izoelektrickou fokusací v rozbíhavém toku

Název anglicky: Monitoring of autofocusing of yeast lysate by divergent flow isoelectric focusing

Popis česky: Monitorování autofokusace lyzátu kvasinek izoelektrickou fokusací v rozbíhavém toku

Popis anglicky: Monitoring of autofocusing of yeast lysate by divergent flow isoelectric focusing

Označení ilustrace: obr_UIACH_2b_15.jpg

Oddíl: 2b

Číslo řádku:16

Název česky: Monitorování použití izoelektrické fokusace v divergentním toku na extrakt ječmene pomocí barevných nízkomolekulárních pI markerů

Název anglicky: Monitoring of divergent flow isoelectric focusing of barley extract by colored low-molecular mass pI markers

Popis česky: Monitorování použití izoelektrické fokusace v divergentním toku na extrakt ječmene pomocí barevných nízkomolekulárních pI markerů

Popis anglicky: Monitoring of divergent flow isoelectric focusing of barley extract by colored low-molecular mass pI markers

Označení ilustrace: obr_UIACH_2b_16.jpg

Oddíl: 2b

Číslo řádku: 17

Název česky: CZE mikroorganismů dynamicky modifikovaných tenzidem HOPAB

Název anglicky: CZE of microorganisms dynamically modified by HOPAB tenside

Popis česky: CZE mikroorganismů dynamicky modifikovaných tenzidem HOPAB

Popis anglicky: CZE of microorganisms dynamically modified by HOPAB tenside

Označení ilustrace: obr_UIACH_2b_17.jpg

Oddíl: 2c

Číslo řádku: 1

Název česky: Kapilární IEF pI markerů a virů chřipky

Název anglicky: Capillary IEF of pI markers and influenza viruses

Popis česky: Kapilární IEF pI markerů a virů chřipky

Popis anglicky: Capillary IEF of pI markers and influenza viruses
Označení ilustrace: obr_UIACH_2c_1.jpg

Oddíl: 2c Číslo řádku: 5
Název česky: Shluk stříbrných nanočástic plynné fázi
Název anglicky: Cluster of silver nanoparticles found in the gaseous phase
Popis česky: Shluk stříbrných nanočástic plynné fázi
Popis anglicky: Cluster of silver nanoparticles found in the gaseous phase
Označení ilustrace: obr_UIACH_2c_5.jpg

Vyplnil dne: 15. 1. 2010

Jméno: Mgr. et Mgr. Jana Velebová

tel.: 532 290 231

e-mail: velebova@iach.cz