

Výroční zpráva Ústavu analytické chemie AV ČR za rok 1995

1. Vědecká činnost pracoviště a uplatnění jejích výsledků

a) V roce 1995 se ústav zabýval kapilárními separačními metodami analytické chemie, analytickými spektrálními metodami a analytickou chemií životního prostředí, takže aktivita ústavu plynule navazovala na program v roce předcházejícím.

b) Nejvýznamnější výsledky dosažené v jednotlivých oblastech činnosti ústavu jsou:

Oblast separace, charakterizace a mikropreparace biopolymerů a částic

Byla vypracována kontinuální metoda mikropreparace bílkovin a nízkomolekulárních amfolytů pomocí elektrofokuse s využitím oboustranně řízeného složení iontové matrice (**B**, anotace výsledku je připojena). Při práci na projektu orientovaném na výzkum rychlých metod sekvencování DNA bylo zkonstruováno a otestováno zařízení pro kapilární elektroforézu s detekcí na bázi laserem indukované fluorescence (**B**). Pomocí tohoto zařízení byla mj. stanovena sekvence více než 800 bází modelových i reálných vzorků v době kratší než 1 hodina (**C**). Studium charakteru migrace molekul DNA separačními médii ukázalo, že AT-bohaté oblasti řetězce způsobují konformační změny, které ovlivňují elektroforetickou mobilitu molekuly DNA (**B**).

Oblast teorie a metodologie elektromigračních metod

V rámci studia metodiky on-line kombinace izotachoforézy a zónové elektroforézy byl matematicky popsán proces přechodu izotachoforetické migrace na migraci zónové elektroforetickou a vytvořený teoretický model byl experimentálně potvrzen (**B**). Pokračovalo studium teorie elektroforézy a elektrofokuse v kapilárách nekonstantního průřezu (**B**). Dále byl rozvíjen výzkum metod stanovení konstanty stability dynamicky stabilního asociátu chirální selektor - analyt (**B**). V rámci výzkumu cíleného na separace opticky aktivních látek byla dokončena podrobná studie vancomycinu jako elektroforetického chirálního selektoru pro dělení aniontových enantiomerních solutů (**C**). Pro zlepšení citlivosti chirálních analýz byl navržen postup, v němž je proces chirální separace oddělen od detekce separovaných enantiomerů (**B**, anotace výsledku je připojena).

Oblast stopové prvkové analýzy

Byly optimalizovány podmínky pro účinnou in-situ kolekci hydridů v grafitových atomizátorech (**B**). Ze závislosti charakteristické hmotnosti Se na rychlosti přívodu argonu při konstantní teplotě příčně vyhřívaného grafitového atomizátoru byla odvozena hodnota atomového absorpčního koeficientu spektrální čáry Se 196 nm, která se významně neliší od teoretické hodnoty, a byla ověřena metoda pro odhad difuzního koeficientu a pro kalibraci (**B**). Studium interakcí halogenů ve štítné žláze potkana ukázalo, že na rozdíl od jiných tkání zde zvýšený přívod bromu nenahrazuje chlor, ale jod (**B**). Byla vyvinuta metoda stanovení basálních a vyšších obsahů hliníku v lidském mozku metodou AAS (**C**, anotace výsledku je připojena). Byl zkonstruován dvoustupňový atomizátor pro přímou analýzu vysoce čistých materiálů pomocí elektrotermální AAS (**C**).

Oblast superkritické fluidní extrakce a chromatografie

Byla dále rozvíjena nová metoda záchytu analytů v off-line superkritické fluidní extrakci po expanzi fluidní směsi do přehřáté páry organického rozpouštědla (**C**). Automatizované zařízení pro kontinuální extrakci vodných médií bylo úspěšně testováno s využitím modelového systému kyselina salicylová - oxid uhličitý - voda (**B**). Byl proveden teoretický rozbor teplotní závislosti separačního faktoru v superkritické fluidní chromatografii za konstantní hustoty mobilní fáze a byla vypracována termodynamická analýza vlivu modifikátoru mobilní fáze na retenci solutu (**B**).

Oblast analytické chemie životního prostředí

S kladnými výsledky byly ověřeny možnosti využití oxidu dusnatého (koncentrace v jednotkách ppm) při terapii respiračního selhání u novorozenců a malých dětí (**B**). Pro Fakultní dětskou nemocnici v Brně byl zkonstruován inhalátor oxidu dusnatého (**C**). Při studiu nových obohacovacích principů byly v denuderu s tekoucím filmem kapaliny aplikovány nevodné roztoky a rozpouštědla pro kontinuální stanovení halogenovaných organických sloučenin ve vzduchu (**B**). Byly vypracovány nové metody chemiluminiscenčního stanovení dusitanů (10^{-9} mol/l) ve vodných médiích a ppb koncentrací oxidu dusičitého a ozónu ve vzduchu (**B**).

c) V roce 1995 se pracovníci ústavu podíleli na řešení 18 domácích grantů (13x GAČR, 3x GAAVČR, 1x Ministerstvo zdravotnictví, 1x Ministerstvo školství) a 1 zahraničního grantu (EC - Copernicus).

d) V roce 1995 nebyly pracovníkům ústavu uděleny žádné patenty, nebyly podány přihlášky vynálezů ani uzavřeny licenční smlouvy.

e) Hodnocení ústavu Akademickým hodnotitelským grémiem (AHG) proběhlo ve dnech 22.-24. května 1995. Ústav jako celek byl hodnocen příznivě, i když AHG vzneslo řadu dílčích připomínek. Na základě doporučení AHG bude vypracována koncepce útvaru analytické chemie životního prostředí. Ke zlepšení úrovně ústních prezentací pracovníků ústavu, která byla v některých případech ze strany AHG kritizována, přispěje požadavek, aby účastníci každoroční soutěže publikovaných prací v UIACH přednášeli své příspěvky v angličtině. Ve shodě s doporučením AHG doplnit instrumentální vybavení ústavu byly vypracovány dvě přihlášky komplexních projektů ke Grantové agentuře ČR, a třemi projekty byla obeslána soutěž o účast v Programu podpory rozvoje přístrojového vybavení progresivních vědních oborů v AV ČR.

2. Spolupráce pracoviště s vysokými školami a dalšími domácími institucemi a vědecká výchova

2.1. Jmenovité zhodnocení všech významných domácích spoluprací pracoviště s našimi vysokými školami

a) Z UIACH byl v roce 1995 zajištěn dvousemestrální kurs *Aplikovaná termodynamika* (studenti PGS a 4. ročníku řádného studia, Katedra teoretické a fyzikální chemie PŘF MU, 56 hodin ročně). Pracovníci UIACH odpřednášeli v základní a postgraduální výuce na vysokých školách v Brně, Pardubicích, Olomouci a Praze celkem 110 hodin. Mimo přednášky

pracovníci ústavu rovněž zajistili laboratorní cvičení v elektromigračních metodách pro Katedru analytické chemie PřF MU a pro Chemickou fakultu VUT v Brně.

b) Vedlejší pracovní úvazek v ústavu nemá nikdo z pracovníků vysokých škol.

c) UIACH nemá společná pracoviště s vysokými školami.

d) Vědecká spolupráce s vysokými školami se v roce 1995 realizovala formou 11 společných projektů, z toho 10 společných grantových projektů (1x zahraniční grant, 8x GAČR, 1x Ministerstvo školství).

e) Kvalitativní a kvantitativní údaje o získávání a přípravě nových vědeckých pracovníků v roce 1995:

- vědeckou výchovou v rámci PGS procházelo celkem 8 pracovníků UIACH, z nichž 1 disertaci obhájil, 3 postgraduální studium v roce 1995 zahájili a 1 v průběhu roku odešel z AV ČR;

- na ústavu zpracovávali své diplomové práce 4 diplomanti, z nichž 1 diplomovou práci obhájil a 3 pokračují.

2.2. Zhodnocení spolupráce s dalšími mimovysokoškolskými výzkumnými a mimoakademickými pracovišti

V roce 1995 se pracovníci UIACH podíleli na 5 společných grantech s mimovysokoškolskými a mimoakademickými pracovišti (SEKO-K s.r.o. Brno - grant EC Copernicus, FDN G. Mendela v Brně - GAČR, FDN G. Mendela v Brně - Ministerstvo zdravotnictví, Státní veterinární ústav v Praze - GAČR a Státní zdravotní ústav v Praze - GAČR). Kromě toho pracovníci ústavu spolupracují s Ústavem péče o matku a dítě v Praze a se Státním zdravotním ústavem v Praze (mimo výše zmíněnou spolupráci v rámci grantu GAČR).

3. Mezinárodní vědecká spolupráce pracoviště

a) Mezi zahraniční pracoviště v oblasti separačních a spektrálních metod analytické chemie, se kterými pracovníci UIACH udržují intenzivní pracovní kontakty, patří mj.:

Department of Chemistry, Indiana University, Bloomington (IN), USA (Prof. M. Novotný),

Barnett Institute, Northeastern University, Boston (MA), USA (Prof. B. Karger),
Department of Physical Chemistry, University of Leeds, Leeds, Velká Británie (Prof. K. D. Bartle),

Istituto di Cromatografia del C. N. R., Řím, Itálie (Dr. S. Fanali),

Istituto di Chimica Analitica Strumentale del C. N. R., Pisa, Itálie (Dr. A. D'Ulivo) a
Sektion Analytik und Höchstreinigung, Universität Ulm, SRN (Prof. V. Krivan).

UIACH se v roce 1995 nepodílel na pořádání mezinárodních konferencí.

b) Kvantitativní údaje o rozsahu zahraničních styků pracoviště: Pracovníci ústavu přednesli 4 zvané přednášky na mezinárodních konferencích, v 6 případech byli členy redakčních rad mezinárodních časopisů a 1 pracovník působil jako hostující editor zvláštního čísla časopisu Electrophoresis. Na ústavu přednesli přednášky 2 zahraniční hosté (A. Colmsjö, A. Bemgård, Arbetslivsinstitutet, Solna, Švédsko) a 1 zahraniční host (Dr. L. Lampugnani, Istituto di Chimica Analitica Strumentale del C.N.R., Pisa, Itálie) strávil na ústavu měsíční pracovní pobyt.

4. Předpokládané hlavní okruhy vědecké činnosti pracoviště v roce 1996

Oblast separace, charakterizace a mikropreparace biopolymerů a částic

Kapilární elektroforézy s detekcí na bázi laserem indukované fluorescence bude použito při výzkumu diagnostických metod a v genetice mikroorganismů. Aplikace pro genetiku a molekulární biologii budou orientovány na vývoj rychlých metod sekvenování a mapování genomové DNA a detekci mutací a chromosomálních aberací závažných dědičných onemocnění. Kombinace elektromigračních metod a technik frakcionace tokem v poli bude použito při studiu posttranslačních modifikací bílkovin. Pro identifikaci studovaných komplexních látek je nezbytné využít spojení kapilárních separačních technik s hmotnostní spektrometrií, zejména ve variantě MALDI (Matrix-Assisted Laser Desorption Ionization). V oblasti metod frakcionace tokem v poli (FFF) bude rozvíjena isoelektrická fokusační FFF pro mikropreparaci proteinů a gravitační FFF pro studium biologických vzorků.

Oblast teorie a metodologie elektromigračních metod

Bude pokračovat výzkum kombinací elektromigračních metod s cílem dále zvýšit účinnost a výpovědní schopnost kapilární elektroforézy. Teorie elektroforézy bude rozvíjena zejména v oblastech přechodových jevů, separací v kapilárách proměnného průřezu a technik pro koncentraci analytů. V oblasti kapilární isoelektrické fokusace bude studován vliv složení elektrolytového systému na tvar gradientu pH, na rozlišení a na rychlost analýzy.

Oblast stopové prvkové analýzy

Pro stanovení účinnosti in-situ kolekce v grafitových atomizátorech bude studován vliv operačních parametrů pomocí experimentů s radioaktivním izotopem ⁷⁵Se. S cílem zlepšit citlivost "flame-in-gas shield" atomizátorů pro AAS bude studován vliv jednotlivých faktorů na rozložení volných atomů. Bude sledována rychlost dosažení ustáleného stavu při interakci jodu s bromem ve štítné žláze a bude zjištěno, v jaké struktuře štítné žlázy se váže brom. Bude pokračovat spolupráce se Státním zdravotním ústavem při řešení problematiky ultrastopových obsahů analytů v biologickém materiálu. V oblasti charakterizace vysoce čistých látek budou vyvíjeny nové postupy a zařízení pro přímou analýzu speciálních materiálů atomovou absorpční a emisní spektroskopií.

Oblast superkritické fluidní extrakce a chromatografie

Budou sledovány vlivy operačních parametrů na stupeň záchytu analytů v kapalném rozpouštědle po superkritické fluidní extrakci tuhých vzorků, což umožní identifikovat klíčové procesy mechanismu záchytu analytů. S cílem optimalizovat účinnost extrakce vodných médií superkritickým oxidem uhličitým bude studován vliv geometrického uspořádání interagujících fází a pracovních podmínek na rozdělovací koeficienty a rychlosti mezifázového přestupu analytů. Studium teoretických principů superkritické fluidní extrakce a

chromatografie bude pokračovat v oblasti termodynamických aplikací retenčních dat a v oblasti popisu stavového chování soustav obsahujících oxid uhličitý a vodu.

Oblast analytické chemie životního prostředí

Problémově orientovaný výzkum v oblasti analytiky životního prostředí bude využívat nekonvenčních obohacovacích technik, totiž denuderů s kontinuálně obnovovaným povrchem a aerosolové obohacovací jednotky. Cílem výzkumu bude sledovat a definovat zdroje a zatížení pracovního prostředí anorganickými a organickými polutanty. Budou vyvinuty nové postupy speciálně spojením separačních technik s metodami atomové spektroskopie. Spolupráce s lékařskými pracovišti bude orientována na využití analýzy tělních tekutin při hledání možných rizik spojených s inhalací oxidu dusnatého při terapii selhání plic u novorozenců.

V Brně dne 8. ledna 1996

Doc. RNDr. Petr Boček, DrSc.
ředitel UIACH AV ČR