



AKADEMIE VĚD ČESKÉ REPUBLIKY

Dotazník

Základní údaje o činnosti pracoviště AV ČR – veřejné výzkumné instituce v roce 2007 a hlavní dosažené výsledky – I. Textová část

Název pracoviště: Ústav analytické chemie AV ČR, v.v.i.

Zkratka pracoviště: UIACH

IČ: 68081715

1. Vědecká (hlavní) činnost pracoviště a uplatnění jejích výsledků

a) stručná charakteristika vědecké (hlavní) 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 2005-2010 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.

b) výčet několika nejdůležitějších výsledků vědecké (hlavní) činnosti a jejich aplikací

| 1 Pořadové číslo | 2 Výsledek | 3 Kategorie výstupu | 4 Citace výstupu |
|---------------------|---|------------------------|--|
| 1 | Z experimentálních hodnot retenčních časů v superkritické fluidní chromatografii jsme stanovili limitní distribuční konstanty řady organických látek ve dvoufázovém systému, tvořeném superkritickým CO ₂ a iontovou kapalinou chloridem trihexyltetradecylfosfonia. | badatelský | Planeta, J., Karásek, P., Roth, M.: Limiting Partition Coefficients of Solutes in Biphasic Trihexyltetradecylphosphonium Chloride Ionic Liquid-Supercritical CO ₂ System: Measurement and LSER-Based Correlation. – Journal of Physical Chemistry B 111, 26: 7620-7625 (2007) |
| 2 | S pomocí vlastních dřívějších experimentálních výsledků jsme vypracovali skupinový model pro odhad rozpustností polycyklických aromatických uhlovodíků a heterocyklů ve stlačené horké vodě. | badatelský | Karásek, P., Planeta, J., Roth, M.: Solubility of Solid Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Pressurized Hot Water at Temperatures from 313 K to the Melting Point. – Journal of |

| 1 Pořadové číslo | 2 Výsledek | 3 Kategorie výstupu | 4 Citace výstupu |
|---------------------|---------------|------------------------|---|
| | | | <p>Chemical and Engineering Data 51, 2: 616-622 (2006); Karásek, P., Planeta, J., Roth, M.: Solubility of Solid Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Pressurized Hot Water: Correlation with Pure Component Properties. – Industrial & Engineering Chemistry Research 45, 12: 4454-4460 (2006); Karásek, P., Planeta, J., Roth, M.: Aqueous Solubility Data for Pressurized Hot Water Extraction for Solid Heterocyclic Analogs of Anthracene, Phenanthrene and Fluorene. – Journal of Chromatography A 1140, 1-2: 195-204 (2007); Karásek, P., Planeta, J., Roth, M.: Simple First-Order Group Contribution Scheme for Solubilities of Solid Polycyclic Aromatic Hydrocarbons and Solid Polycyclic Aromatic Heterocycles in Pressurized Hot Water. - Industrial & Engineering Chemistry Research, v tisku; Karásek, P.,</p> |

| 1 Pořadové číslo | 2 Výsledek | 3 Kategorie výstupu | 4 Citace výstupu |
|---------------------|---|------------------------|---|
| | | | Planeta, J., Roth, M.: Solubilities of Triptycene, 9-Phenylanthracene, 9,10-Dimethylantracene, and 2-Methylantracene in Pressurized Hot Water at Temperatures from 313 K to the Melting Point. - Journal of Chemical and Engineering Data, v tisku |
| 3 | Pokračovali jsme ve vývoji původního postupu pro reprodukovatelnou separaci vybraných mikrobiálních kmenů a biopolymerů zónovou elektroforézou a isoelektrickou fokusací s fluorescenční detekcí v modifikované křemenné kapiláře. Provedli jsme optimalizaci elektroforetických technik s optickou detekcí pro separaci vybraných dynamicky modifikovaných mikroorganismů, zejména kvasinek jako etiologickým agens nozokomiálních infekcí v humánní i veterinární medicíně a některých běžných rostlinných patogenů spadajících do oblasti zájmu rostlinolékařství. | badatelský | Horká, M., Kubíček, O., Růžička, F., Holá, V., Malinovská I., Šlais K.: Capillary isoelectric focusing of the native and inactivated microorganisms. – Journal of Chromatography A 1155, 2: 164-171 (2007); Horká, M., Růžička, F., Hla, V., Slais, K.: Capillary electrophoretic separation of proteins and yeasts dynamically modified by poly(ethylene glycol) pyrenebutanoate with fluorescence detection. - Electrophoresis 28, 13: 2300-2307 (2007); Růžička, F., Horka, M., Hla, V., Votava, M.: Capillary Isoelectric Focusing - Useful tool for detection of the |

| 1 Pořadové číslo | 2 Výsledek | 3 Kategorie výstupu | 4 Citace výstupu |
|---------------------|--|------------------------|---|
| | | | biofilm formation in Staphylococcus epidermidis. - Journal of Microbiological Methods 68, 3: 530-535 (2007); Horká, M., Horký, J., Matoušková, H., Šlais, K.: Separation of Plant Pathogens from Different Hosts and Tissues by Capillary Electromigration Techniques. - Analytical Chemistry, v tisku |
| 4 | Navrhli a ověřili jsme zcela novou metodu průtokové isoelektrické fokusace s rozbíhavým tokem kapaliny (divergent flow IEF), která umožňuje kombinovat rychlost IEF v mikrofluidických kanálech s výkonem preparativních zařízení. | badatelský | Šlais, K.: Divergent flow isoelectric focusing. - Electrophoresis, v tisku |
| 5 | Původní nízkomolekulární barevné standardy isoelektrického bodu (pI markery) jsme použili pro kalibraci pH gradientů při kapilární isoelektrické fokusaci dynamicky značených mikroorganismů, při vývoji nové metody průtokové IEF, při preparativní fokusaci lyzátů proteinů a při kombinaci gelové IEF a MALDI aplikované na rostlinné proteiny. | badatelský | Horká, M., Kubíček, O., Růžička, F., Holá, V., Malinová I., Šlais K.: Capillary isoelectric focusing of the native and inactivated microorganisms. – Journal of Chromatography A 1155, 2: 164-171 (2007); Horká, M., Růžička, F., Holá, V., Šlais, K.: Capillary electrophoretic separation of proteins and yeasts dynamically modified by poly(ethylene glycol) pyrenebutanoate with fluorescence detection. - |

| 1 Pořadové číslo | 2 Výsledek | 3 Kategorie výstupu | 4 Citace výstupu |
|---------------------|---------------|------------------------|---|
| | | | <p>Electrophoresis 28, 13: 2300-2307 (2007); Růžička, F., Horká, M., Holá, V., Votava, M.: Capillary Isoelectric Focusing - Useful tool for detection of the biofilm formation in Staphylococcus epidermidis. - Journal of Microbiological Methods 68, 3: 530-535 (2007); Horká, M., Horký, J., Matoušková, H., Šlais, K.: Separation of Plant Pathogens from Different Hosts and Tissues by Capillary Electromigration Techniques. - Analytical Chemistry, v tisku; Šlais, K.: Divergent flow isoelectric focusing. - Electrophoresis, v tisku; Chmelík, J., Mazanec, K., Šlais, K.: Novel staining-free proteomic method for simultaneous identification of proteins and determination of their pI values by using low-molecular mass pI markers. - Electrophoresis 28, 18: 3315-3323 (2007); Tomáš, R., Yan, L. S., Křenková J., Foret, F:</p> |

| 1 Pořadové číslo | 2 Výsledek | 3 Kategorie výstupu | 4 Citace výstupu |
|---------------------|---|------------------------|--|
| | | | Autofocusing and ESI-MS analysis of protein digests in a miniaturized multicompartement electrolyzer. – Electrophoresis 28, 13: 2283-2290 (2007) |
| 6 | Sledovali jsme tvorbu systémových elektroforetických rozhraní v elektrolytech obsahujících slabé vícesytné kyseliny. Ukázali jsme, že i jednoduché systémy, jako např. běžný fosfátový pufr, mohou vykazovat velmi komplexní nelinearitu profilu rozhraní. To vedlo k objevu existence hybridních rozhraní dosud neznámých typů složených až ze dvou ostrých a dvou difúzních částí. | badatelský | Gebauer, P., Malá, Z., Šlampová, A., Boček, P.: Regular properties of simple electrophoretic BGEs with multiprotic weak acids: Discovery of complex hybrid system boundaries. - Electrophoresis, v tisku |
| 7 | Vypracovali jsme novou rigorózní a kompletní statistickou metodu ke zpracování dat mobilitních křivek jednosytných slabých kyselin a bází. Vytvořené matematické přístupy nemají žádná omezení v oblasti používaných číselných dat a jsou volně ke stažení na webových stránkách http://www.iach.cz/departments/emm . | cílený | Šlampová, A., Boček, P.: Statistical data processing of mobility curves of univalent weak bases. - Electrophoresis, v tisku; Šlampová, A., Boček, P.: Statistical data processing of mobility curves of univalent weak acids. - Electrophoresis, v tisku |
| 8 | Vypracovali a validovali jsme izotachoforetickou metodu pro stanovení nestabilních oxoaniontů síry, ditioničitanu a disiřičitanu v průmyslově důležitých vzorcích technických past a odbarvovačů. Disiřičitany a ditioničitany přítomné ve vzorcích jsme převedli na stabilní sloučeniny hydroxymetnasulfínát a hydroxymethansulfonát a stanovili souběžně v jedné analýze. Nový elektrolytový systém využívající cesia nebo rubidia jako | cílený | Nováková, M., Křivánková, L., Bartoš, M., Urbanová, V., Vytřas, K.: Isotachophoretic determination of hydrosulfite and metabisulfite in technical samples. - Talanta 74, 2: 183-189 (2007) Nováková, M., |

| 1 Pořadové číslo | 2 Výsledek | 3 Kategorie výstupu | 4 Citace výstupu |
|---------------------|---|------------------------|--|
| | vedoucích iontů byl použit pro izotachoforetické sledování obsahu draselných a amonných iontů v komplexních maticích vzorků siláží a hnojiv. | | Křivánková, L., Skalická, I., Bartoš, M., Vytřas, K.: Determination of Potassium and Ammonium in Complex Matrices by Capillary Isotachophoresis. - Chromatographia, v tisku |
| 9 | Kombinaci izotachoforézy se zónovou elektroforézou jsme použili k vypracování citlivé metody na stanovení obsahu glukuronidu, metabolitu alkoholu, v krevním séru. S využitím výpočtů a počítačových simulací jsme zvolili optimální separační podmínky umožňující spolehlivě odstranit vliv makrosložek a dosáhnout koncentračního limitu v řádu 10^{-9} M, což umožní zachytit etylglukuronid i několik hodin po konzumaci alkoholu. Tato metoda byla též použita k vypracování velmi citlivé analýzy jodidů v komplikovaných vzorcích životního prostředí, potravinářství a klinických vzorcích. Pomocí této metody jsme schopni stanovit jodidy v přebytku chloridů až 10^6 - 10^7 :1 a v koncentracích až 10^{-6} - 10^{-8} M v závislosti na matici vzorku. | cílený | Nováková, M., Křivánková, L.: Determination of ethyl glucuronide in human serum by hyphenation of capillary isotachophoresis and zone electrophoresis. - Electrophoresis, v tisku Pantůčková, P., Urbánek, M., Křivánková, L.: Determination of iodide in samples with complex matrices by hyphenation of capillary isotachophoresis and zone electrophoresis. - Electrophoresis 28, 20: 3777-3785 (2007) |
| 10 | Studovali jsme možnost využití elektrochemické detekce v kapilární elektroforéze, kapilární elektrochromatografii a také v kapilární kapalinové chromatografii. Amperometrickou detekci jsme využili pro stanovení sloučenin rtuti a bezkontaktní vodivostní detekci pro speciaci arsenu, stanovení anorganických iontů a stanovení biochemických molekul. Prokázali jsme, že kapilární elektroforéza s bezkontaktní vodivostní detekcí je vhodnou kombinací pro vývoj přenosného přístroje pro terénní | cílený | Kubáň, P., Houserová, P., Kubáň, P., Hauser, P.C., Kubáň, V.: Sensitive capillary electrophoretic determination of mercury species with amperometric detection at a copper electrode after cation exchange preconcentration. - |

| 1 Pořadové číslo | 2 Výsledek | 3 Kategorie výstupu | 4 Citace výstupu |
|---------------------|---|------------------------|---|
| | stanovení anorganických polutantů. | | Journal of Separation Science 30, 7: 1070-1076 (2007); Nguyen, H. T. A., Kubáň, P., Pham, V. H., Hauser, P. C.: Study of the determination of inorganic arsenic species by CE with capacitively coupled contactless conductivity detection. - Electrophoresis 28, 19: 3500-3506 (2007); Kubáň, P., Nguyen, H. T. A., Macka, M., Haddad, P. R., Hauser, P. C.: New fully portable instrument for the versatile determination of cations and anions by capillary electrophoresis with contactless conductivity detection. - Electroanalysis 19, 19-20: 2059-2065 (2007); Kubáň, P., Hauser, P. C.: High-performance liquid chromatography with contactless conductivity detection for the determination of peptides and proteins using a monolithic capillary column. Journal of Chromatography A 1176, 1-2: 185-191 (2007) |
| 11 | Studovali jsme separovatelnost strukturně chirálních klastrových aniontů boru nativními cyklodextriny a zjistili, že tyto anionty různé | badatelský | Horáková, H., Vespalec, R.: Chiral separability of hydrophobic |

| 1 Pořadové číslo | 2 Výsledek | 3 Kategorie výstupu | 4 Citace výstupu |
|---------------------|--|------------------------|--|
| | <p>velikosti a různých strukturních typů jsou separovatelné pouze β-cyklodextrinem. Studie selektivity separací strukturně chirálních aniontů obsahujících <i>nido</i>-7,8-dikarbaundekaboranový klastr s α-cyklodextrinem ukázala, že ji snižují silně elektronegativní substituenty, objemné substituenty a větší počet substituentů. Provedli jsme detailní elektroforetickou studii sloučenin považovaných za perspektivní meziprodukty syntézy homogenních chirálních selektorů zaměřenou na jejich elektroforetickou čistotu, stabilitu v pevné fázi i v roztoku, acidobazické vlastnosti a chiralitu.</p> | | <p>boron cluster anions with native cyclodextrins in water-methanol background electrolyte. - Electrophoresis 28, 20: 3639-3649 (2007); Horáková, H., Vespalec, R.: Influence of substituents on selectivity and efficiency of chiral separation anions containing single <i>nido</i>-7,8-dicarbaundecaborane cluster with alfa-cyclodextrin. - Journal of Chromatography A. 1143, 1-2: 143-152 (2007); Vespalec, R., Langauf, A., Laromaine, A., Viñas, C., Horáková, H.: Electrophoretic investigation of the boron cluster anion [7-(2'-pyridyl)-<i>nido</i>-7,8-dicarbaundecaborate]⁻ and its protonated zwitterionic product. - Journal of Separation Science 30, 16: 2733-2741 (2007)</p> |
| 12 | <p>Pro identifikaci posttranslačně změněných bílkovin ve sladu jsme vyvinuli a publikovali metodu založenou na kombinaci frakcionace proteinů pomocí monolitických disků a hmotnostní spektrometrie. Uvedená metoda poskytuje ve velmi krátkém čase požadované výsledky.</p> | badatelský | <p>Bobálová, J., Chmelík, J.: Proteomic identification of technologically modified proteins in malt by combination of protein fractionation using convective interaction media and matrix-assisted laser</p> |

| 1 Pořadové číslo | 2 Výsledek | 3 Kategorie výstupu | 4 Citace výstupu |
|---------------------|---|------------------------|---|
| | | | desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry. - Journal of Chromatography A 1163, 1-2: 80-85 (2007) |
| 13 | Rozvíjeli jsme proteomickou separační techniku bez nutnosti barvení gelů. Pro separaci proteinů využívá metodu isoelektrické fokusace na gelu společně s barevnými nízkomolekulárními pI markery. Jak pI markery, tak jednotlivé separované proteiny jsou poté identifikovány pomocí MS. Barevné pI markery umožňují dohled nad procesem fokusace, usnadňují řezání gelu a umožňují vypustit zdlouhavé barvení proteinů, což výrazně zkracuje dobu proteomické analýzy. | badatelský | Chmelík, J., Mazanec, K., Šlais, K.: Novel staining-free proteomic method for simultaneous identification of proteins and determination of their pI values by using low-molecular-mass pI markers. - Electrophoresis 28, 18: 3315-3323 (2007) |
| 14 | Pozornost jsme rovněž věnovali vlivu přípravy vzorku na identifikaci post-translační modifikace lipidem. Lipid transfer protein 1 z ječmene je malý globulární protein odpovědný za tvorbu pивní pěny. Práce ukazuje, že vhodná volba proteomického protokolu je důležitá pro zachování esterové vazby studovaného proteinu. | badatelský | Žídková, J., Řehulka, P., Chmelík, J.: Detection of hydrolysis of lipid post-translational modifications during gel-electrophoresis-based proteomic protocol. - Proteomics 7, 15: 2507-2510 (2007) |
| 15 | Vhodně zvolenou kombinací separačních a detekčních technik jsme navrhli a optimalizovali univerzální analytický postup pro stanovení komplexních směsí sacharidů z rostlinných matic. Navržený postup jsme využili k pozorování změn obsahu nestrukturních sacharidů a také velikosti a tvaru škrobových zrn v jehlicích smrku ztepilého. | badatelský | Cabálková, J., Wahlund, K. G., Chmelík, J.: Complex analytical approach to characterization of the influence of carbon dioxide concentration on carbohydrate composition in Norway spruce needles. - Journal of Chromatography A 1148, 2: |

| 1 Pořadové číslo | 2 Výsledek | 3 Kategorie výstupu | 4 Citace výstupu |
|---------------------|---|------------------------|--|
| | | | 189-199 (2007) |
| 16 | Pro on-line integraci kapilárních separací a hmotnostní spektrometrie s elektrosprejovou ionizací jsme připravili kapilární enzymatické reaktory. Experimentálně jsme ověřili, že velmi malá množství proteinu (fmol) mohou být štěpena během průtoku kapilárou o průměru 10 mikrometrů. Pro tuto aplikaci jsme testovali trypsin a pepsin a optimalizované kapilární reaktory jsme využili jako elektrosprejové emitory ve spojení s kapilární elektroforézou. | badatelský | Křenková, J., Klepárník, K., Foret, F.: Capillary electrophoresis mass spectrometry coupling with immobilized enzyme electrospray capillaries. - Journal of Chromatography A 1159, 1-2: 110-118 (2007) |
| 17 | Vyvinuli jsme nové elektrosprejové rozhraní využívající tlakovatelné kapalinové spojení. Toto uspořádání umožňuje použití elektrosprejových špiček s prakticky libovolně malým průměrem a dosáhnout tak vysoké ionizační účinnosti. Při práci jsme testovali špičky s průměrem v rozsahu desítek až jednotek mikrometru umožňující elektrosprejovou ionizaci attomolových množství analytu při průtoku jednotek až desítek nanolitru za minutu. | badatelský | Kusý, P., Klepárník, K., Aturki, Z., Fanali, S., Foret, F.: Optimization of a pressurized liquid junction nanoelectrospray interface between CE and MS for reliable proteomic analysis. - Electrophoresis 28, 12: 1964-1969 (2007) |
| 18 | Studovali jsme zařízení Microrotofor pro předseparaci tryptických fragmentů proteinu v izoelektrickém módu bez nutnosti použít nosné amfolyty. V této práci publikované v Electrophoresis, na které se podílel Prof. Yan (na roční stáži z Číny na oddělení BI), byly separované frakce analyzovány pomocí ESI-TOF/MS s využitím ESI jednotek mikrofabrikovaných pomocí reaktivního iontového leptání v polyimidu. Ukázalo se, že peptidové směsi lze účinně "autofokusovat" i bez použití nosných amfolytů a zvýšit tak pokrytí sekvence při hmotnostně spektrometrické analýze. | badatelský | Tomáš, R., Yan, L., Křenková, J., Foret, F.: Autofocusing and ESI/MS analysis of protein digests in a miniaturized multicompartement electrolyzer. - Electrophoresis 28, 13: 2283-2290 (2007) |
| 19 | Závažným problémem komplikujícím speciální analýzu tri- a pentavalentních anorganických a metylovaných sloučenin As pomocí selektivního generování těžkých sloučenin byla nutnost | badatelský | Matoušek, T., Hernandez-Zavala, A., Svoboda, M., Langrová, L., Adair, B., Drobná, |

| 1 Pořadové číslo | 2 Výsledek | 3 Kategorie výstupu | 4 Citace výstupu |
|---------------------|---|------------------------|--|
| | přídavku standardů jednotlivých forem As. Našli jsme takové experimentální podmínky, které nám umožnily provést kalibraci všech forem pouze proti anorganické formě As. Zajištění stejné účinnosti generování a atomizace pro atomovou absorpční spektrometrii (AAS) příslušných hydridů ze všech jednotlivých forem As jsme dosáhli v literatuře dosud nepopsaným spojením předredukce L-cysteinu s pufrem a námi vyvinutým multiatomizátorem. | | Z., Thomas, D. J., Stýblo, M., Dědina, J.: Oxidation State Specific Generation of Arsines from Methylated Arsenicals Based on L- Cysteine Treatment in Buffered Media for Speciation Analysis by Hydride Generation - Automated Cryotrapping - Gas Chromatography - Atomic Absorption Spectrometry with the Multiatomizer. - Spectrochimica Acta, Part B – Atomic Spectroscopy, v tisku; Hernandez-Zavala, A., Matoušek, T., Drobná, Z., Paul, D. S., Walton, F., Adair, B. M., Dědina, J., Thomas, D. J., Stýblo, M.: Speciation analysis of arsenic in biological matrices by automated hydride generation-cryotrapping-atomic absorption spectrometry with multiple microflame quartz tube atomizer (multiatomizer). – Journal of Analytical Atomic Spectrometry, v tisku |
| 20 | Na základě testování účinnosti chemických modifikátorů reakce jsme optimalizovali chemické generování těkavých sloučenin stříbra v uspořádání dávkování do proudu. Studium atomizace | badatelský | Matoušek, T.: The efficiency of chemical vapour generation of transition and noble metals. - |

| 1 Pořadové číslo | 2 Výsledek | 3 Kategorie výstupu | 4 Citace výstupu |
|---------------------|--|------------------------|--|
| | těchto sloučenin v křemenném multiatomizátoru pro AAS ukazuje na termální mechanismus atomizace, na rozdíl od H-radikálového mechanismu u těkavých hydridů. | | Analytical and Bioanalytical Chemistry 388, 4: 763-767 (2007) |
| 21 | Naše studie využívající modelového analytu antimonu vede k závěru, že plamenem vyhřívaný kovový atomizátor vyrobený ze slitiny Ni, Cr a Fe je praktickou alternativou ke "klasickým" křemenným atomizátorům hydridů. Jeho hlavní výhodou je, vedle robustnosti, nízká cena a velmi dlouhá životnost. | badatelský | Figueiredo, E. C., Dědina, J., Arruda, M. A. Z.: Metal furnace heated by flame as a hydride atomizer for atomic absorption spectrometry: Sb determination in environmental and pharmaceutical samples. - Talanta 73, 4: 621-628 (2007) |

c) anotace nejdůležitějších výsledků vědecké (hlavní) činnosti

Pořadové číslo anotace: 1

Název česky: Stlačená horká voda jako nekonvenční rozpouštědlo

Název anglicky: Pressurized hot water – an unconventional solvent

Popis výsledku česky: Kapalnou vodu obvykle pokládáme za vysoce polární rozpouštědlo s výraznou rolí vodíkových vazeb. Tento náhled ale neplatí vždy. S narůstající teplotou se solvatační schopnosti kapalné vody postupně mění, což je dáno především poklesem relativní permitivity (dielektrické konstanty) a poklesem hustoty kohezní energie. Voda tak s rostoucí teplotou nabývá překvapivých vlastností a postupně se stává „lepší a lepší“ rozpouštědlem nepolárních organických látek včetně uhlovodíků. V některých případech proto může stlačená horká voda sloužit jako náhrada škodlivých organických rozpouštědel. Dosavadní studium vodných rozpustností organických látek za vysokých teplot bylo převážně soustředěno na malé organické molekuly (do 8 atomů uhlíku). V literatuře tak lze nalézt jen poměrně málo údajů o vodných rozpustnostech tuhých organických neelektrolytů s většími molekulami za teplot vyšších než 100 °C, přestože v aplikacích stlačené horké kapalné vody mohou mít taková data značnou hodnotu. S cílem rozšířit okruh dostupných údajů tohoto typu jsme změřili vodné rozpustnosti řady tuhých polycyklických aromatických uhlovodíků a tuhých tricyklických aromatických heterocyklů v širokém oboru teplot. S použitím experimentálních výsledků jsme vypracovali jednoduché

prediktivní korelace pro rychlý odhad vodných rozpustností aromatických látek za vysokých teplot. Míra správnosti těchto korelací dovoluje jejich využití pro návrhy reálných extrakčních procesů využívajících stlačené horké vody.

Popis výsledku anglicky: Liquid water is usually considered a highly polar solvent with an important role of hydrogen bonds. Such a picture of water is not always fitting. With rising temperature, the solvent properties of liquid water change gradually in response to the declines in relative permittivity (dielectric constant) and in cohesive energy density. As the temperature increases, therefore, water gradually becomes a better solvent of nonpolar organic compounds including hydrocarbons. Consequently, there are some situations in which pressurized hot water can be used as an alternative to harmful organic solvents. High-temperature investigations of aqueous solubilities of organics have so far been largely concerned with relatively small organic molecules (up to 8 carbon atoms). However, the aqueous solubilities of solid organic nonelectrolytes with larger molecules at temperatures above 100 °C can be helpful in applications of pressurized hot water. As the current literature contains only a few data sets of this kind we have carried out extensive measurements of the aqueous solubilities of solid polycyclic aromatic hydrocarbons and solid tricyclic aromatic heterocycles within a wide range of temperature. We have also used the experimental data to construct simple predictive correlations to estimate the aqueous solubilities of aromatic solids at elevated temperatures. The correlations are sufficiently accurate to be used for an initial engineering design of extraction processes employing pressurized hot water.

Kategorie výstupu: badatelský

Citace výstupu: Karásek, P., Planeta, J., Roth, M.: Solubility of Solid Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Pressurized Hot Water at Temperatures from 313 K to the Melting Point. – Journal of Chemical and Engineering Data 51, 2: 616-622 (2006); Karásek, P., Planeta, J., Roth, M.: Solubility of Solid Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in Pressurized Hot Water: Correlation with Pure Component Properties. – Industrial & Engineering Chemistry Research 45, 12: 4454-4460 (2006); Karásek, P., Planeta, J., Roth, M.: Aqueous Solubility Data for Pressurized Hot Water Extraction for Solid Heterocyclic Analogs of Anthracene, Phenanthrene and Fluorene. – Journal of Chromatography A 1140, 1-2: 195-204 (2007); Karásek, P., Planeta, J., Roth, M.: Simple First-Order Group Contribution Scheme for Solubilities of Solid Polycyclic Aromatic Hydrocarbons and Solid Polycyclic Aromatic Heterocycles in Pressurized Hot Water. – Industrial & Engineering Chemistry Research, v tisku; Karásek, P., Planeta, J., Roth, M.: Solubilities of Triptycene, 9-Phenylanthracene, 9,10-Dimethylanthracene, and 2-Methylanthracene in Pressurized Hot Water at Temperatures from 313 K to the Melting Point. – Journal of Chemical and Engineering Data 53, 1: 160-164 (2008).

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): doc. RNDr. Michal Roth, CSc., 532 290 171, roth@iach.cz

Pořadové číslo anotace: 2

Název česky: Rychlá detekce a identifikace patogenních mikroorganismů a virů pomocí elektromigračních technik a hmotnostní spektrometrie

Název anglicky: Rapid detection and identification of pathogenic microorganisms and viruses by electromigration techniques and mass spectrometry

Popis výsledku česky: Vyvinuli jsme elektroforetickou metodu pro dělení mikroorganismů, a to zejména častých původců nemocničních infekcí v humánní i veterinární medicíně, a dále některých běžných rostlinných mikroorganismů spadajících do oblasti zájmu rostlinolékařství. Mikroorganismy a biopolymery byly označeny neionogenní látkou na bázi kyseliny pyren-máselné a fluorescenčně, tedy vysoce citlivě, detekovány. Izoelektrické body původních i dynamicky modifikovaných bioanalytů, které jsme vyhodnotili pomocí pI markerů vyvíjených na našem pracovišti, byly srovnatelné s hodnotami tabelovanými či zjištěnými u látek původních, přírodních. Detegovali jsme až jednotlivé mikroorganismy. Možnost použití této techniky jsme potvrdili i při analýze reálných vzorků z rostlinných suspenzí. Výsledky jsme porovnali s těmi, které byly získány klasickými časově náročnými mikrobiologickými technikami či při analýze mikrobiálních aminokyselin plynovou chromatografií. Pomocí elektromigračních technik jsme studovali i vlastnosti klinicky významných mikroorganismů podrobených fyzikálním či chemickým sterilizačním procedurám. Společně s bakteriemi a kvasinkami jsme studovali i vlastnosti zástupce skupiny virů. Výsledky budou sloužit pro další studium jiných mikroorganismů včetně virů s předpokladem jejich budoucí aplikace při studiu vysoce nebezpečných mikrobů na specializovaných pracovištích.

Popis výsledku anglicky: We have developed electrophoretic method for the separation of microorganisms, namely etiological agents of nosocomial infections in human and veterinary medicine and also some common phytopathogens. Microorganisms and biopolymers were marked by the non-ionogenic tenside based on pyrenebutanoate and fluorometric, high sensitive, detected. The low-molecular-weight pI markers developed in our institute we used for tracing of the pH gradient. The isoelectric points of the labeled pathogens we found comparable with pI of the native compounds. We have detected down to ones to tens of microorganisms. We successfully applied capillary electromigration for the separation of microbes directly from plant tissue suspensions. The findings of capillary isoelectric focusing we compared with the time consuming classical microbiological techniques or at the analyses of microbial amino acids by gas chromatography. Results were presented on several international symposia. Electromigration techniques we also applied for study of microbe inactivation procedures. In addition to bacteria and yeasts we studied the selected viruses. The results found are promising for examination of other model as well as high risk of microbes on the specialized laboratories.

Kategorie výstupu: badatelský

Citace výstupu: Horká, M., Kubíček, O., Růžička, F., Holá, V., Malinovská, I., Šlais, K.: Capillary isoelectric focusing of the native and inactivated microorganisms. – Journal of Chromatography A 1155, 2: 164-171 (2007); Horká, M., Růžička, F., Holá, V., Šlais, K.: Capillary electrophoretic separation of proteins and yeasts dynamically modified by poly(ethylene glycol) pyrenebutanoate with fluorescence detection. - Electrophoresis 28, 13: 2300-2307 (2007); Růžička, F., Horká, M., Holá, V., Votava, M.: Capillary Isoelectric Focusing - Useful tool for detection of the biofilm formation in Staphylococcus epidermidis. - Journal of Microbiological Methods 68, 3: 530-535 (2007); Horká, M., Horký, J., Matoušková, H., Šlais, K.: Separation of Plant Pathogens from Different Hosts and Tissues by Capillary Electromigration Techniques. - Analytical Chemistry, 79, 24: 9539-9546 (2007).

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Ing. Marie Horká, CSc., tel.: 532 290 221, horka@iach.cz

Pořadové číslo anotace: 3

Název česky: Metodika pro speciální analýzu sloučenin arsenu v biologickém materiálu

Název anglicky: Method for speciation analysis of arsenic in biological material

Popis výsledku česky: Jedním z aktuálních problémů analytické chemie je speciální analýza toxikologicky významných forem arsenu, tj. arsenitanů a arseničnanů, jejich methylsubstituovaných derivátů a oxidu trimethylarseničného. K této analýze je využíváno selektivní generování arsanu a methylsubstituovaných arsanů, jejich prekoncentrace a následné separace v kryogenní koloně. Závažným problémem komplikujícím tento přístup ke speciální analýze byla nutnost přidavku standardů jednotlivých forem. To je nejen velmi pracné, ale také problematické, protože trivalentní methylsubstituované formy As jsou velmi nestabilní a komerčně nedostupné. Proto jsme hledali experimentální podmínky, které umožňují kalibraci všech forem pouze proti standardu jediné formy As. Pro 100% účinnost generování všech arsanů jsme zavedli v literatuře dosud nepopsané spojení předredukce pentavalentních forem L-cysteinem s generováním v reakčním prostředí pufru o pH 6. Pro 100% účinnost generování arsanů výhradně z trivalentních forem používáme stejné reakční prostředí bez předredukce a pentavalentní formy nejsou na arsany převedeny. Tím je zajištěna shodná citlivost pro všechny formy As, takže lze provádět kalibraci pouze proti standardu jediné formy As - nejvýhodnější je některá z anorganických sloučenin As, které jsou stabilní a snadno dostupné. Námi vyvinutá automatická kryoseparační jednotka kromě toho podstatně zjednodušuje celou proceduru. Tato metoda umožňuje rychlou speciální analýzu toxikologicky významných forem arsenu bez předúpravy vzorku v relativně složitých biologických maticích, například v tkáňových kulturách nebo v moči. Meze detekce pro atomovou absorpční spektrometrii se pohybují v řádu ng l^{-1} .

Popis výsledku anglicky: Speciation analysis of toxicologically important species of arsenic, i.e. arsenite, arsenate, their mono- and dimethylated derivatives and trimethylarsine oxide, belongs to key issues of contemporary analytical chemistry. Selective generation of arsine and methyl substituted arsines followed by their preconcentration and separation in a cryogenic column is typically employed. The critical problem of this approach was that standards of all analyzed species must be used. This makes the whole procedure problematic since the trivalent methyl substituted species, which are prone to very quick oxidation, not commercially available. Therefore we searched for experimental conditions enabling standardization on a single As species. To achieve 100% generation efficiency of arsines from tri- as well as pentavalent species we proposed a prereduction of pentavalent species by L-cysteine followed by the arsine generation from buffer reaction medium (pH 6) not yet described in the literature. To reach 100% generation efficiency of arsines exclusively from trivalent species we use the same reaction medium without prereduction, when the pentavalent species are not converted to arsines. In effect, the same sensitivity for all As species is obtained. This makes possible to use a single species of As as the standard - the most convenient is to work with common and stable arsenite or arsenate. An automated cryotrapping unit we

developed makes the whole procedure much more user friendly. In conclusion, our method permits a high-throughput speciation analysis of metabolites of inorganic arsenic in relatively complex biological matrices such as cell culture systems or urine without sample pretreatment. The limits of detection for atomic absorption spectrometry were at ng l⁻¹ level.

Kategorie výstupu: badatelský

Citace výstupu: Matoušek, T.: Jednotka pro vymrazování těkavých sloučenin, (2007) PV 2007-365, 28-5-2007; Paul, D. S., Hernandez-Zavala, A., Walton, F. S., Adair, B. M., Dědina, J., Matoušek, T., Stýblo, M.: Examination of the effects of arsenic on glucose homeostasis in cell culture and animal studies: Development of a mouse model for arsenic-induced diabetes. - Toxicology and Applied Pharmacology 222, 3: 305-314 (2007); Matoušek, T., Hernandez-Zavala, A., Svoboda, M., Langrová, L., Adair, B., Drobná, Z., Thomas, D. J., Stýblo, M., Dědina, J.: Oxidation State Specific Generation of Arsines from Methylated Arsenicals Based on L- Cysteine Treatment in Buffered Media for Speciation Analysis by Hydride Generation - Automated Cryotrapping - Gas Chromatography - Atomic Absorption Spectrometry with the Multiatomizer. - Spectrochimica Acta, Part B – Atomic Spectroscopy, v tisku; Hernandez-Zavala, A., Matoušek, T., Drobná, Z., Paul, D. S., Walton, F., Adair, B. M., Dědina, J., Thomas, D. J., Stýblo, M.: Speciation analysis of arsenic in biological matrices by automated hydride generation-cryotrapping-atomic absorption spectrometry with multiple microflame quartz tube atomizer (multiatomizer). – Journal of Analytical Atomic Spectrometry, v tisku

Kontaktní osoba (jméno, telefon, e-mail): Mgr. Tomáš Matoušek, Ph.D., tel.: 296 442 474, matousek@biomed.cas.cz, RNDr. Jiří Dědina, CSc., tel.: 296 442 490, e-mail: dedina@biomed.cas.cz

d) nejvýznamnější popularizační aktivity pracoviště

| 1 Číslo | 2 Název akce | 3 Popis aktivity | 5 Pořadatel | 6 Datum a místo konání |
|------------|---|---|-----------------|---------------------------|
| 1 | Analýza organických látek | Přednášky v rámci kurzu. Křivánková, L.: Principy kapilární elektroforézy a izotachoforézy; Planeta, J.: Superkritická fluidiní chromatografie | 2 Theta | 10.-13.10.2008 |
| 2 | Týden vědy a techniky 2007, Fascinace světlem | Přednášky a prezentace v rámci pořádané akce jsou určeny pro cílovou skupinu středoškolských studentů a široké veřejnosti. Mazanec, K.: Využití hmotnostní spektrometrie v proteomice piva (6.11.2007, Technické muzeum v Brně); Kubáň, P.: Anorganická analýza metodou kapilární elektroforézy (9.11.2007, | Akademie věd ČR | 1-11.11.2007, Brno |

| 1 Číslo | 2 Název akce | 3 Popis aktivity | 5 Pořadatel | 6 Datum a místo konání |
|------------|---|--|---------------------------------------|--|
| | | UIACH) | | |
| 3 | Den otevřených dveří | Přednášky určené vysokoškolským studentům a široké veřejnosti. Klepárník, K.: Bioanalytická instrumentace; Kubáň, Pavel: Anorganická analýza metodou kapilární elektroforézy | Ústav analytické chemie AV ČR, v.v.i. | 9.11.2007, Ústav analytické chemie AV ČR, v.v.i., Brno |
| 4 | Inovace v atomové absorpční a fluorescenční spektroskopii | Vzdělávací seminář určen široké veřejnosti zejména pražského regionu. Odborným garantem semináře byl RNDr. J. Dědina, CSc. Dočekal, B.: Základní přístupy k měření AAS, detektory v AAS a AAS s využitím laserových diod; Dočekal, B.: Přímá analýza pevných vzorků AAS s elektrotermickou atomizací; Dědina, J.: Principy a instrumentace; Dědina J.: AAS a AFS jako detektory pro speciální analýzu založenou na generování těkavých sloučenin | Pražské analytické centrum inovací | 21.-22.11. 2007, Pražské analytické centrum inovací |

e) domáci a zahraniční ocenění zaměstnanců pracoviště

| 1 Číslo | 2 Jméno oceněného | 3 Druh a název ocenění | 4 Oceněná činnost | 5 Ocenění udělitel |
|------------|-------------------------|--|--------------------------------|--|
| 1 | Mgr. Pavel Kubáň, Ph.D. | Prémie Otto Wichterleho pro vynikající mladé vědecké pracovníky Akademie věd České republiky | Ocenění výsledků vědecké práce | AV ČR, květen 2007 |
| 2 | Mgr. Pavel Kubáň, Ph.D. | Top Referee 2006 | Ocenění recenzní činnosti | Journal of Chromatography A, Elsevier, The Netherlands, únor |

| 1 Číslo | 2 Jméno oceněného | 3 Druh a název ocenění | 4 Oceněná činnost | 5 Ocenění udělil |
|------------|---------------------------|--|--|--|
| | | | | 2007 |
| 3 | Mgr. Stanislav Musil | 2. cena v Soutěži o nejlepší práci v oboru spektroskopie mladých autorů za rok 2007 v kategorii A - Diplomové práce | Diplomová práce On-line předredukce pětimocných sloučenin arsenu kyselinou thioglykolovou pro speciální analýzu atomovou absorpční spektrometrií se selektivním generováním hydridů a kolekcí vymrazováním | Spektroskopická společnost Jana Marka Marci |
| 4 | Mgr. Pavel Řehulka, Ph.D. | Cena za nejlepší poster na mezinárodní konferenci 2nd Congress of the Spanish Proteomics Society, 1st Meeting of the European Proteomics Association | Ocenění nejlepšího posteru prezentovaného na mezinárodní konferenci | 2nd Congress of the Spanish Proteomics Society, 1st Meeting of the European Proteomics Association, Valencia, 2007 |

f) další specifické informace o pracovišti

Dne 16.7.2007 náhle zemřel RNDr. Josef Chmelík, CSc., vedoucí Oddělení proteomiky a glykomiky. Na základě konkurzního řízení byla vedoucí tohoto oddělení jmenována Ing. Janette Bobál'ová, CSc. Náplň činnosti oddělení i personální obsazení zůstává nezměněno a jsou předpoklady pro úspěšné pokračování výzkumné činnosti útvaru. V listopadu bylo atestováno 37 výzkumných pracovníků. U 9 pracovníků bylo v souladu s atestačními kritérii navrženo převedení do vyššího kvalifikačního stupně, u jednoho do nižšího stupně (doktorand, který dosud neobhájil svou práci, byl převeden mezi odborné pracovníky výzkumu a vývoje).

2. Vědecká a pedagogická spolupráce pracoviště s vysokými školami

- a) **nejvýznamnější vědecké výsledky pracoviště vzniklé ve spolupráci s vysokými školami (kromě výsledků uvedených v bodě 2 b)**

| 1 Číslo | 2 Popis výsledku včetně uplatnění | 3 Forma spolupráce | 4 Spolupracující VŠ | 5 Kategorie výstupu |
|------------|---|---|--|------------------------|
| 1 | Část výsledků v oblasti studia vývoje a využití elektromigračních metod a solvatačních vlastností stlačené horké vody a v oblasti charakterizace rozpouštědlových systémů s iontovými kapalinami | GA203/05/2106 Moderní instrumentace v chemické, potravinářské a klinické analýze | Univerzita Pardubice | badatelský |
| 2 | Rychlá detekce a identifikace patogenních mikroorganismů a virů pomocí elektromigračních technik a hmotnostní spektrometrie | GA AV IAAX00310701 Rychlá detekce a identifikace patogenních mikroorganismů a virů pomocí elektromigračních technik a hmotnostní spektrometrie | LF MU Brno, FN Pekařská | badatelský |
| 3 | Na základě experimentů sledujících vliv relevantních experimentálních parametrů (teplota záchytu, průtok vodíku a teplota volatilizace) na prekoncentrační účinnost jednotlivých analytů jsme našli optimální podmínky pro stanovení As, Se, Bi a Sb. S pomocí námi navrženého modulárního L-designu atomizátoru hydridů jsme testovali různé materiály pro optickou trubici multiatomizátoru. Zjistili jsme, že nejslibnější materiál je křemen, buď porézní, nebo | GA AV ČR IAA400310507 Speciační analýza atomovou fluorescenční a atomovou absorpční spektrometrií založená na generování hydridů, GAUK 306 /2006/BCH/PrF Vývoj a optimalizace křemenných prekoncentračních zařízení a atomizátorů pro | Katedra analytické chemie PŘF UK v Praze | badatelský |

| 1 Číslo | 2 Popis výsledku včetně uplatnění | 3 Forma spolupráce | 4 Spolupracující VŠ | 5 Kategorie výstupu |
|------------|--|---|------------------------|------------------------|
| | děrovaný svazkem elektronů. | ultrastopové stanovení hydridotvorných prvků metodou AAS | | |
| 4 | Použili jsme amperometrickou detekci v kapilárně elektroforetickém stanovení sloučenin rtuti a spolupracovali na sepsání přehledného článku o speciaci rtuti. | Spolupráce bez uzavřené smlouvy | MZLU v Brně | cílený |
| 6 | Byla vyvinuta matematická metoda založená na metodě konečných prvků umožňující modelovat elektrodynamické poměry v elektrosprejovém rozhraní. | GA AV ČR IAA400310505 Elektrická fokusační předkoncentrace a kontinuální prvková analýza aerosolů atomovou emisní spektrometrií | FSI VUT v Brně | badatelský |
| 7 | Využití kapilární elektroforézy pro studium chování klastrových sloučenin boru. | GA AV ČR IAA400310613 Hmotnostně spektrometrický a elektroforetický výzkum klastrových sloučenin boru | FCH VUT v Brně | badatelský |
| 8 | Využívání námi syntetizovaných pl markerů v rámci společného projektu. | GA203/06/117 Monolitické stacionární fáze pro moderní kapalinové separační metody | PřF MU | badatelský |
| 9 | Zkonstruovali jsme mikrofluidické zařízení integrující destrukci buněk, elektroforetickou separaci jejich molekulárních komponent a detekci pomocí laserem indukované fluorescence. Biologicky významné molekuly jsou v tomto zařízení identifikovány po | GA AV ČR IAA400310506 Systémy mikrofluidiky a hmotnostní spektrometrie pro diferenciální proteomickou a metabolickou analýzu | PřF MU | badatelský |

| 1 Číslo | 2 Popis výsledku včetně uplatnění | 3 Forma spolupráce | 4 Spolupracující VŠ | 5 Kategorie výstupu |
|------------|---|---|------------------------|------------------------|
| | označení imunofluorescenčními sondami na bázi kvantových teček. Tyto ve vodě dispergovatelné sondy jsme připravili několikasupřňovou syntézou jako polovodičové nanočástice CdTe o poloměru 3,5 nm modifikované kyselinou merkaptopropionovou a konjugované s vhodnou protilátkou. Mezi hlavní výhody těchto sond patří vysoká fotostabilita, úzké a symetrické emisní spektrum, široké excitační spektrum a vysoký kvantový výtěžek. | průmyslově významných mikroorganismů | | |
| 10 | Studovali jsme dynamiku proteomu v odpovědi na působení exogenních cytokininů u Arabidopsis. Hlavní metodou identifikace proteinů bylo MALDI-TOF/TOF MS. | GA AV ČR IAA600040701 Dynamika proteomu v odpovědi na zvýšené hladiny cytokininů u Arabidopsis | PřF MU | badatelský |

b) nejvýznamnější výsledky činnosti výzkumných center a dalších společných pracovišť AV ČR s vysokými školami

Pořadové číslo: 1

Název společného pracoviště česky: Centrum základního výzkumu

Název společného pracoviště anglicky: Basic Research Centre

Kategorie společného pracoviště: LC06023

Dosažený výsledek: V rámci činnosti společného Centra základního výzkumu LC06023, na kterém se spolupodílí UIACH, Masarykova univerzita a Dětská nemocnice v Brně, jsme rozpracovali nové metody pro aplikace mikrokolonových separací ve spojení s hmotnostní spektrometrií. Výsledky jsme prezentovali na interních setkáních účastníků centra, dále také v recenzovaných mezinárodních časopisech.

Kategorie výstupu: badatelský

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: Křenková, J., Klepárník, K., Foret, F.: Capillary electrophoresis mass spectrometry coupling with immobilized enzyme electrospray capillaries. - Journal of Chromatography A 1159, 1-2: 110-118 (2007); Kusý, P., Klepárník, K., Aturki, Z., Fanali, S., Foret, F.: Optimization of a pressurized liquid junction nanoelectrospray interface between CE and MS for reliable proteomic analysis. - Electrophoresis 28, 12: 1964-1969 (2007); Tomáš, R., Yan, L., Křenková, J., Foret, F.: Autofocusing and ESI/MS analysis of protein digests in a miniaturized multicompartiment electrolyzer. - Electrophoresis 28, 13: 2283-2290 (2007); příspěvky na konferencích International Symposium on Capillary Chromatography & Electrophoresis (Albuquerque), Advances in Chromatography and Electrophoresis 2007 & CHIRANAL 2007 (Olomouc), Medzinárodná konferencia Chromatografické metódy a zdravie človeka /16./ (Piešťany, SK)

Pořadové číslo: 2

Název společného pracoviště česky: Výzkumné centrum pro studium obsahových látek ječmene a chmele

Název společného pracoviště anglicky: Research center for study of active compounds in barley and hops

Kategorie společného pracoviště: 1M0570

Dosažený výsledek: V rámci Výzkumného centra pro studium obsahových látek ječmene a chmele jsme pomocí dvojdimenzionální gelové elektroforézy a MALDI-TOF hmotnostní spektrometrie sledovali změny v proteinovém profilu během sladování. Důraz byl kladen zejména na majoritní proteiny a jejich posttranslační modifikace. Analyzovanými vzorky byly obilky ječmene, zelený slad a hotový slad, z nichž jsme studovali ve vodě rozpustné bílkoviny. Pro účel tohoto výzkumu jsme vybrali dva kultivary ječmene – odrůdu Jersey a experimentální odrůdu KM1910, u nichž jsme zkoumali změny v proteinovém složení mezi obilkami a sladem (jak v rámci jedné odrůdy tak i mezi odrůdami). Rozdíly v elektroforetických profilech bílkovin jsme pozorovali mezi odrůdami i mezi zrnem a jeho zeleným a hotovým sladem. Pro identifikaci posttranslačně změněných bílkovin ve sladce jsme rovněž vyvinuli a publikovali metodu založenou na kombinaci frakcionace proteinů pomocí monolitických disků a hmotnostní spektrometrie.

Kategorie výstupu: badatelský

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: Bobálová, J., Chmelík, J.: Proteomic identification of technologically modified proteins in malt by combination of protein fractionation using convective interaction media and matrix-assisted laser desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry. - Journal of Chromatography A 1163, 1-2: 80-85 (2007)

Pořadové číslo: 3

Název společného pracoviště česky: Funkční genomika a proteomika ve šlechtění rostlin

Název společného pracoviště anglicky: Functional genomics and proteomics for crop improvement

Kategorie společného pracoviště: 1M06030

Dosažený výsledek: V rámci plnění úkolu výzkumného centra Funkční genomika a proteomika ve šlechtění rostlin jsme provedli rešerše pro používání bioinformatických nástrojů při identifikaci bílkovin a analýze vhodných programových nástrojů pro zpracování experimentálních dat. Rovněž jsme provedli optimalizaci protokolu pro relativní kvantifikaci proteinů prostřednictvím chemického značení peptidů pomocí stabilních izotopů (iTRAQ). Studovali jsme též vliv denaturace proteinů prostřednictvím redukce disulfidických můstků na následnou degradaci standardních proteinů prostřednictvím prolin-specifické proteázy.

Kategorie výstupu: badatelský

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: Řehulka, P., Řehulková, H., Chmelík, J.: Měření proteomických dat hmotnostní spektrometrií a jejich bioinformatická interpretace. - Chemické listy 101, 4: 279-286 (2007); Skalníková, H., Řehulka, P., Chmelík, J., Martinková, J., Zilvarová, M., Gadher, S. J., Kovářová, H.: Relative quantitation of proteins fractionated by the ProteomeLab™ PF 2D system using isobaric tags for relative and absolute quantitation (iTRAQ). - Analytical and Bioanalytical Chemistry 389, 5: 1639-1645 (2007); dosažené výsledky byly také prezentovány formou posterových sdělení na odborných konferencích

Pořadové číslo: 4

Název společného pracoviště česky: Vývoj nových metod charakterizace zbytkového extraktu, které umožní identifikovat a hodnotit složení dextrinů typických pro české pivo

Název společného pracoviště anglicky: Development of new methods for characterization of nonfermentable extract that allow identification and evaluation of composition of dextrans typical for Czech beer

Kategorie společného pracoviště: 2B06037

Dosažený výsledek: Z dodaných vzorků sladiny, mladiny a piva z Výzkumného ústavu pivovarského a sladadařského, a. s. jsme pomocí metod kapalinové chromatografie nejprve izolovali a poté rozdělili směs dextrinů. Složení jednotlivých sacharidických frakcí jsme stanovili za použití hmotnostní spektrometrie. Přřazení struktury sacharidů jsme docílili na základě fragmentačních spekter.

Kategorie výstupu: badatelský

Citace výstupu, příp. jiné uplatnění: Chmelík, J.: Optimization of particle separation in different elution modes in Field-Flow Fractionation. FFF 2007, 13th International Symposium on Field-and Flow-based Separation. Salt Lake City, State of Utah Center of Excellence for Biomedical Microfluidics, 2007.

c) spolupráce s vysokými školami na uskutečňování bakalářských, magisterských a doktorských studijních programů a vzdělávání středoškoláků

| 1 Číslo | 2 Bakalářský program | 3 Spolupracující VŠ | 4 Přednášky | 5 Cvičení | 6 Vedení prací | 7 Příprava textů | 8 Jiné |
|------------|-------------------------|------------------------|----------------|--------------|-------------------|---------------------|-----------|
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |

| 1 Číslo | 2 Magisterský program | 3 Spolupracující VŠ | 4 Přednášky | 5 Cvičení | 6 Vedení prací | 7 Příprava textů | 8 Jiné |
|------------|---|--|----------------|--------------|-------------------|---------------------|-----------|
| 1 | Potravinářská chemie a biotechnologie | FCH VUT v Brně, Ústav chemie potravin a biotechnologií | | ano | | | |
| 2 | Chemie | PřF MU | | | ano | | |
| 3 | Chemie | MZLU v Brně | | | ano | | |
| 4 | inženýrské studium na Ústavu analytické chemie, předmět Atomová spektrometrie | FCHI VŠCHT Praha, Ústav analytické chemie | ano | | | | |
| 5 | Chemie a technologie ochrany životního prostředí | FCH VUT v Brně | | | ano | | |
| 6 | Analytická chemie | PřF UK | ano | | | | |
| 7 | Analytická chemie | PřF Univerzita Pardubice | ano | ano | ano | | |

| 1 Číslo | 2 Doktorský program | 3 Spolupracující VŠ | 4 Přednášky | 5 Cvičení | 6 Vedení prací | 7 Příprava textů | 8 Jiné |
|------------|------------------------|------------------------|----------------|--------------|-------------------|---------------------|-----------|
| 1 | Chemie | AF MZLU v Brně | | | ano | | |

| 1 Číslo | 2 Doktorský program | 3 Spolupracující VŠ | 4 Přednášky | 5 Cvičení | 6 Vedení prací | 7 Příprava textů | 8 Jiné |
|------------|--|--------------------------|----------------|--------------|-------------------|---------------------|-----------|
| 2 | Chemie a technologie potravin | FCH VUT v Brně | | | ano | | |
| 3 | Fyzika | PřF MU | | | ano | | |
| 4 | Analytická chemie | PřF MU | | | ano | | |
| 5 | Analytická chemie | UP v Olomouci | | | ano | | |
| 6 | Analytická chemie | UP v Olomouci | | | ano | | |
| 7 | Moderní metody analytické chemie užívané při analýze životního prostředí | FCH VUT v Brně | ano | | | | |
| 8 | Chemie a technologie ochrany životního prostředí | FCH VUT v Brně | | | ano | | |
| 7 | Analytická chemie | PřF Univerzita Pardubice | | | ano | | |

d) vzdělávání středoškolské mládeže

| 1 Číslo | 2 Aktivita | 3 Pořadatel/škola | 4 Popis |
|------------|--------------------|--------------------------|--|
| 1 | Vedení praxe | SPŠCH Vranovská 65, Brno | Vedení praxe |
| 2 | Chemická olympiáda | MŠMT | Spoluorganizace chemické olympiády na krajské úrovni |

3. Spolupráce pracoviště s dalšími institucemi a s podnikatelskou sférou

a) společné projekty výzkumu a vývoje podpořené z veřejných prostředků

Pořadové číslo: 1

Název projektu /programu v češtině: MZ NAZV 1B53002 Hodnocení bezpečnosti potravin pro bezlepkovou dietu

Název projektu/programu v angličtině: MZ NAZV 1B53002 Evaluation of food safety for celiac diet

Poskytovatel: Ministerstvo zemědělství České republiky

Partnerská organizace: Výzkumný ústav potravinářský v Praze a Mikrobiologický ústav AV ČR

Dosažený výsledek: V letošním roce jsme provedli stanovení biologické aktivity peptidů získaných z gliadinu působením různých enzymů. Pro tento účel jsme 60%-ní ethanolový extrakt z pšeničné mouky separovali pomocí gelové chromatografie. Během separace jsme sesbírali 5 frakcí, které jsme podrobili enzymatickému štěpení. K tomuto štěpení jsme použili enzymy pepsinu a specifickou prolin-endoproteázu imobilizované na magnetickou perlovou celulosu. Výsledné peptidy jsme dále analyzovali pomocí MALDI-TOF/TOF hmotnostního spektrometru (UIACH), pomocí ELISA testů (VUPP) a pomocí kitů pro stanovení biologické aktivity (MBU).

Uplatnění/Citace výstupu: Prezentace posteru na konferenci 1st Central and Eastern European Proteomic Conference, Praha 2007.

Pořadové číslo: 2

Název projektu /programu v češtině: NPVII MŠMT 2B06037 Vývoj nových metod charakterizace zbytkového extraktu, které umožní identifikovat a hodnotit složení dextrinů typických pro české pivo

Název projektu/programu v angličtině: NPVII MŠMT 2B06037 Development of new methods for characterization of nonfermentable extract that allow identification and evaluation of composition of dextrans typical for Czech beer

Poskytovatel: Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy

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

Dosažený výsledek: Z dodaných vzorků sladiny, mladiny a piva jsme pomocí metod kapalinové chromatografie nejprve izolovali a poté rozdělili směs dextrinů. Složení jednotlivých frakcí jsme stanovili pomocí hmotnostní spektrometrie.

Uplatnění/Citace výstupu: Zvaná přednáška na 13th International Symposium on FFF Separation, USA 2007.

Pořadové číslo: 3

Název projektu /programu v češtině: IGA MZ - NR/8955 - 3/2006 Rtuť a metylrtuť ve vlasech vybrané populace v ČR jako bioindikátor expozice rtuťi

Název projektu/programu v angličtině: IGA MZ - NR/8955 - 3/2006 Mercury and methylmercury in hair of selected population of the Czech Republic as an indicator of mercury exposition

Poskytovatel: IGA MZ - NR/8955 - 3/2006

Partnerská organizace: Státní zdravotní ústav v Praze

Dosažený výsledek: V rámci společného projektu s pracovníky Státního zdravotního ústavu v Praze jsme připravili radioindikátor rtuti ^{203}Hg ozařováním v jaderném reaktoru s následnou separací a přípravou metylrtuti značené radioindikátorem ^{203}Hg . Dále jsme validovali analytický postup stanovení Hg na přístroji AMA254 pomocí radioindikátoru ^{203}Hg . Tento postup jsme použili pro stanovení rtuti v 64 vzorcích lidských vlasů.

Uplatnění/Citace výstupu: Přednáška na konferenci CANAS'07 (Konstanz, Švýcarsko) a poster na 13. Spektroskopické konferenci (Lednice, ČR).

Pořadové číslo: 4

Název projektu /programu v češtině: SP/1B7/189/07 Snížení plnění celospolečenských funkcí lesa vlivem potenciačního působení přízemního ozonu v kontextu klimatické změny

Název projektu/programu v angličtině: The reduction of global social position of forests influenced by ground ozone from the point of view of climatic changes

Poskytovatel: Ministerstvo životního prostředí

Partnerská organizace: Ekotoxa Opava

Dosažený výsledek: Cílem projektu je získat více informací o vlivu ozonu na produkční a fyziologické aktivity Smrku ztepilého, přispět k vyhodnocení vlivu depozice ozonu na lesní prostředí, kvantifikovat a porozumět procesům kontrolujícím transport O_3 , CO_2 , H_2O , NO_2 a množství biogenních sloučenin v korunovém systému Smrku ztepilého, zpřesnit model popisující transport ozonu v ekosystému Smrku ztepilého na území ČR.

Uplatnění/Citace výstupu: Dosud nepublikováno.

Pořadové číslo: 5

Název projektu /programu v češtině: IAAX00310701 Rychlá detekce a identifikace patogenních mikroorganismů a virů pomocí elektromigračních technik a hmotnostní spektrometrie

Název projektu/programu v angličtině: IAAX00310701 Rapid detection and identification of pathogenic microorganisms and viruses by electromigration techniques and mass spectrometry

Poskytovatel: GA AV ČR

Partnerská organizace: Státní rostlinolékařský ústav, Olomouc, Státní ústav pro jadernou, chemickou a biologickou ochranu, (SUJCHBO), pobočka Brno

Dosažený výsledek: Provedli jsme optimalizaci elektroforetických technik s optickou detekcí pro separaci vybraných dynamicky modifikovaných mikroorganismů. Detegovány byly jednotky femtogramů proteinů až jednotky mikroorganismů. Výsledky jsme porovnávali s těmi, které jsme získali klasickými mikrobiologickými technikami či při analýze aminokyselin z mikrobiálních lyzátů plynovou chromatografií nebo v systému BIOLOG. Pomocí elektromigračních technik jsme studovali i vlastnosti klinicky významných mikroorganismů, podrobených sterilizačním fyzikálním či chemickým procedurám. Zde jsme společně s bakteriemi a kvasinkami studovali vlastnosti i zástupce skupiny virů, bakteriofágu Φ X 174. Výsledky slouží i při dalším studiu jiných modelových virů s předpokladem využití při studiu vysoce patogenních virů na pracovišti SUJCHBO.

Uplatnění/Citace výstupu: Horká, M., Kubíček, O., Růžička, F., Holá, V., Malinová, I., Šlais, K.: Capillary isoelectric focusing of native and inactivated microorganisms. - Journal of Chromatography A 1155, 2: 164-171(2007); Horká, M., Růžička, F., Holá, V., Šlais, K.: CE separation of proteins and yeasts dynamically modified by PEG pyrenebutanoate with fluorescence detection. - Electrophoresis 28, 13: 2300-2307 (2007)

Pořadové číslo: 6

Název projektu /programu v češtině: IAA500520602 Signální dráhy buněčné smrti v mesotheliomálních buňkách díky účinku farmakologických a imunologických induktorů apoptosy: genomický a proteomický přístup

Název projektu/programu v angličtině: IAA500520602 Cell death pathways in mesothelioma cells exposed to pharmacological and immunological inducers of apoptosis: genomic and proteomic approach

Poskytovatel: GA AV ČR

Partnerská organizace: Ústav molekulární genetiky AV ČR, v.v.i., Mikrobiologický ústav AV ČR, v.v.i.

Dosažený výsledek: Za účelem proteomické analýzy mesotheliomálních buněk jsme vzorky buněčných lyzátů, které obsahovaly in-gel tryptické digesty proteinů extrahovaných z lidské linie, odsolili pomocí Millipore nebo Varian C18 Zip Tipů a dále separovali pomocí 2-D HPLC. Poté jsme eluované peptidy smíchali s roztokem matrice a měřili jsme MS a MS/MS spektra pomocí MALDI-TOF/TOF MS. Data jsme zpracovali pomocí databázového softwaru MASCOT.

Uplatnění/Citace výstupu: Nejdůležitější výsledky byly prezentovány na 1st Central and Eastern European Proteomic Conference and 3rd Czech Proteomic Conference (Praha).

b) výsledky výzkumu a vývoje pro ekonomickou sféru (případně dosažené ve spolupráci s touto sférou) na základě hospodářských smluv

| 1 Číslo | 2 Zadavatel | 3 Výsledek (anotace) | 4 Uplatnění |
|------------|------------------------------------|---|---|
| 1 | RS Dynamics s.r.o., Praha | Výzkum, vývoj a příprava výroby portálového analyzátoru nitrolátek v rámci mezinárodního výzkumného projektu EUREKA, reg. číslo E!3442 | Pracovali jsme na snižování šumu luminolu při chemiluminescenční detekci |
| 2 | KUBÍČEK a.s., Brno | Spolupráce na vývoji tkanin pro transport plynů a balonářský průmysl | Měřili jsme propustnosti tkanin pro He a CH ₄ |
| 3 | VF, a.s., Černá Hora | Výzkum a zpracování dílčích postupů metodik odběru vzorků pro analýzy v radiometrické polní kontejnerové laboratoři v rámci projektu Č. VF 1G07-4002-05-S02 | Věnovali jsme se výzkumu a zpracování dílčích postupů metodik odběru vzorků pro analýzy v radiometrické polní kontejnerové laboratoři |
| 4 | Convergent Biosciences, Canada | Vývoj a dodávka barevných pl markerů | Standards pro isoelektrickou fokusaci |
| 5 | CSIRO Energy Technology, Australia | Vývoj a dodávka složek nových elektrolytů | Nové lithiové baterie |

| | |
|---|---|
| Celkový počet získaných výsledků | 5 |
|---|---|

c) nové firmy, které vznikly na základě výsledků činnosti ústavu v oblasti aplikovaného výzkumu

| 1 Číslo | 2 Název firmy | 3 Důvod zřízení | 4 Kategorie firmy | 5 Činnost firmy |
|------------|------------------|--------------------|----------------------|--------------------|
| | | | | |

| 1 Číslo | 2 Název firmy | 3 Důvod zřízení | 4 Kategorie firmy | 5 Činnost firmy |
|------------|------------------|--------------------|----------------------|--------------------|
| | | | | |
| | | | | |

d) odborné expertizy zpracované v písemné formě pro státní orgány a instituce

| 1 Číslo | 2 Název | 3 Příjemce/zadavatel | 4 Popis výsledku |
|------------|---|---|---------------------|
| 1 | Hodnocení grantových projektů | Grantová agentura ČR | 16 posudků |
| 2 | Hodnocení grantových projektů | Grantová agentura Akademie věd ČR | 3 posudky |
| 3 | Hodnocení grantových projektů | Slovenská agentura VEGA | 2 posudky |
| 4 | Posudky prací zaslaných do mezinárodních časopisů | Jedná se o významné mezinárodní časopisy, především Electrophoresis, Journal of Chromatography, Journal of Separation Science, Analytical Chemistry, Journal of Analytical Atomic Spectrometry, Journal of Mass Spectrometry, Spectrochimica Acta Part B, Talanta, Current Analytical Chemistry, Analytical and Bioanalytical Chemistry, Brazilian Journal of Analytical Chemistry, Journal of Physical Chemistry B, International Journal of Environmental Analytical Chemistry, Journal of Brazilian Chemical Society, Central European Journal of Chemistry. | 226 posudků |

| | |
|--|-----|
| Celkový počet zpracovaných expertiz | 247 |
|--|-----|

4. Mezinárodní vědecká spolupráce pracoviště

a) 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 spoluřešitelů) | 7 Stát(y) | 8 Aktivita |
|------------|--|---------------------------------------|--|--|---|--------------|--|
| 1 | Fogarty Internatio nal Center a National Institute of Environm ental Health Sciences | | Fogartova cena mezinárodního výzkumu/ Fogarty International Research Collaboration Award | M. Stýblo, Department of Nutrition, University of North Carolina at Chapel Hill, Chapel Hill, NC, USA a s U. S. EPA, Research Triangle Park, North Carolina, U.S.A. | J. Dědina | | Vývoj optimalizovaných systémů pro speciální analýzu arsenu založenou na selektivním generování substituovaných arsanů, na jejich prekoncentraci v kryogenní pasti vymrazováním v kapalném dusíku a na jejich následné plynově chromatografické separaci. |

b) nejvýznamnější vědecké výsledky pracoviště dosažené v rámci mezinárodní spolupráce

Pořadové číslo: 1

Název programu: Vědecký pobyt Prof. L. Yana organizovaný čínskou vládou

Název projektu: Vědecký pobyt Prof. L. Yana organizovaný čínskou vládou

Koordinátor/řešitel (česky): F. Foret

Koordinátor/řešitel (anglicky): F. Foret

Význačný výsledek: Vypracování metody předfrakcionace peptidů

Uplatnění/Citace: Tomáš, R., Yan, L., Křenková, J., Foret, F.: Autofocusing and ESI/MS analysis of protein digests in a miniaturized multicompartiment electrolyzer. - Electrophoresis 28, 13: 2283-2290 (2007)

Pořadové číslo: 2

Název programu: Fogarty International Research Collaboration Award

Název projektu: Optimized Hydride Generation Systems for Arsenic Speciation Analysis

Koordinátor/řešitel (česky): M. Stýblo/J. Dědina

Koordinátor/řešitel (anglicky): M. Stýblo/J. Dědina

Význačný výsledek: Závažným problémem komplikujícím speciální analýzu tri- a pentavalentních anorganických a metylovaných sloučenin As pomocí selektivního generování těkavých sloučenin byla nutnost přidavku standardů jednotlivých forem As. Proto jsme hledali a našli takové experimentální podmínky, které nám umožnily provést kalibraci všech forem pouze proti anorganické formě As. To vyžadovalo zajistit stejnou účinnost generování a atomizace pro atomovou absorpční spektrometrii (AAS) příslušných hydridů ze všech jednotlivých forem As. Toho jsme dosáhli v literatuře dosud nepopsaným spojením předredukce L-cysteinu s pufrům a námi vyvinutým multiatomizátorem.

Uplatnění/Citace: Paul, D. S., Hernandez-Zavala, A., Walton, F. S., Adair, B. M., Dědina, J., Matoušek, T., Stýblo, M.: Examination of the effects of arsenic on glucose homeostasis in cell culture and animal studies: Development of a mouse model for arsenic-induced diabetes. - Toxicology and Applied Pharmacology 222, 3: 305-314 (2007); Matoušek, T., Hernandez-Zavala, A., Svoboda, M., Langrova, L., Adair, B., Drobna, Z., Thomas, D. J., Stýblo, M., Dědina, J.: Oxidation State Specific Generation of Arsines from Methylated Arsenicals Based on L- Cysteine Treatment in Buffered Media for Speciation Analysis by Hydride Generation - Automated Cryotrapping - Gas Chromatography - Atomic Absorption Spectrometry with the Multiatomizer. - Spectrochimica Acta, Part B – Atomic Spectroscopy, v tisku; Hernandez-Zavala, A., Matoušek, T., Drobna, Z., Paul, D. S., Walton, F., Adair, B. M., Dědina, J., Thomas, D. J., Stýblo, M.: Speciation analysis of arsenic in biological matrices by automated hydride generation-cryotrapping-atomic absorption spectrometry with multiple microflame quartz tube atomizer (multiatomizer). – Journal of Analytical Atomic Spectrometry, v tisku

Pořadové číslo: 3

Název programu: Stanovení anorganických polutantů pomocí přenosného přístroje / spolupráce bez uzavřené smlouvy

Název projektu: Stanovení anorganických polutantů pomocí přenosného přístroje

Koordinátor/řešitel (česky): P. C. Hauser, M. Haddad

Koordinátor/řešitel (anglicky): P. C. Hauser, M. Haddad

Význačný výsledek: Stanovení anorganických polutantů pomocí přenosného přístroje ve spolupráci s University of Basel, Basilej, Švýcarsko a University of Tasmania, Hobart, Austrálie.

Uplatnění/Citace: Kubáň, P., Nguyen, H. T. A., Macka, M., Haddad, P. R., Hauser, P. C.: New fully portable instrument for the versatile determination of cations and anions by capillary electrophoresis with contactless conductivity detection. - Electroanalysis 19, 19-20: 2059-2065 (2007)

Pořadové číslo: 4

Název programu: Stanovení specií arsenu / spolupráce bez uzavřené smlouvy

Název projektu: Stanovení specií arsenu

Koordinátor/řešitel (česky): P. C. Hauser

Koordinátor/řešitel (anglicky): P. C. Hauser

Význačný výsledek: Stanovení specií arsenu ve spolupráci s University of Basel, Basilej, Švýcarsko.

Uplatnění/Citace: Nguyen, H. T. A., Kubáň, P., Pham, V. H., Hauser, P. C.: Study of the determination of inorganic arsenic species by CE with capacitively coupled contactless conductivity detection. - Electrophoresis 28, 19: 3500-3506 (2007)

Pořadové číslo: 5

Název programu: Stanovení peptidů a proteinů v kapilární HPLC / spolupráce bez uzavřené smlouvy

Název projektu: Stanovení peptidů a proteinů v kapilární HPLC

Koordinátor/řešitel (česky): P. C. Hauser

Koordinátor/řešitel (anglicky): P. C. Hauser

Význačný výsledek: Stanovení peptidů a proteinů v kapilární HPLC ve spolupráci s University of Basel, Basilej, Švýcarsko.

Uplatnění/Citace: Kubáň, P., Hauser, P. C.: High-performance liquid chromatography with contactless conductivity detection for the determination of peptides and proteins using a monolithic capillary column. – Journal of Chromatography A 1176, 1-2: 185-191 (2007)

Pořadové číslo: 6

Název programu: KONTAKT 2006/13

Název projektu: Investigation of the barley grain proteome and glycome by means of low and high energy CID and the impact on quality of barley

Koordinátor/řešitel (česky): J. Chmelík (P. Řehulka), Ústav analytické chemie AV ČR, v.v.i.; G. Allmaier, Technická univerzita Vídeň

Koordinátor/řešitel (anglicky): J. Chmelík (P. Řehulka), Institute of Analytical Chemistry AS CR, v.v.i.; G. Allmaier, Vienna University of Technology

Význačný výsledek: Optimalizace modifikace cysteinů pro analýzu hordeinů v ječmeni pomocí tryptického štěpení.

Uplatnění/Citace: Pittenauer, E., Stübiger, G., Marchetti, M., Řehulka, P., Chmelík, J., Allmaier, G.: The reinvention and/or misinterpretation of high-energy CID of biomolecules obtained by MALDI-TOF/RTOF mass spectrometry. - 25th Informal Meeting on Mass Spectrometry. Book of Abstracts (2007)

c) akce s mezinárodní účastí, které pracoviště organizovalo nebo v nich vystupovalo jako spoluorganizátor

| 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 2007 – 4. Mezinárodní setkání o bioanalýze | CECE 2007 – 4 th international interdisciplinary meeting on bioanalysis | Ústav analytické chemie AV ČR, v.v.i./Institute of Analytical Chemistry of the ASCR, v.v.i. | 100/40 | |
| 2 | 8. konference České aerosolové společnosti | 8th Conference of Czech Aerosol Society | Česká aerosolová společnost/Czech Aerosol Society | 65/5 | |

d) 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. Yavuz O. Ataman | analytická chemie | Middle East Technical University, Ankara | Turecko |
| 2 | prof. Dr. Marco A. Z. Arruda | analytická chemie | Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP | Brazílie |
| 3 | Dr. Uwe Heitmann | analytická chemie | nstitute for Optics and Atomic Physics, Technical University of Berlin | Německo |
| 4 | Dr. Mirek Macka | analytická chemie | University of Dublin | Irsko |
| 5 | Prof. Salvatore Fanali | analytická chemie | CNR, Roma | Itálie |
| 6 | Prof. Andras Guttman | analytická chemie | University in Innsbruck | Rakousko |
| 7 | Prof. Ernst Kenndler | analytická chemie | University of Vienna | Rakousko |
| 8 | Prof. Dusan Kaniansky | analytická chemie | Comenius University, Bratislava | Slovensko |
| 9 | Prof. Alexander Leitner | analytická chemie | University of Vienna | Rakousko |
| 10 | Dr. Pavel Neuzil | analytická chemie | Institute of Microelectronics, Singapore | |
| 11 | Prof. Johan Nilsson | analytická chemie | Lund University | Švédsko |
| 12 | Prof. Frantisek Svec | analytická chemie | UC at Berkeley and LBL, Berkeley | USA |
| 13 | Prof. Edgar Arriaga | analytická chemie | University of Minnesota | USA |
| 14 | Prof. Alejandro Cifuentes | analytická chemie | CSIC, Madrid | Španělsko |
| 15 | Ing. Jaroslav Pól, Ph.D. | analytická chemie | Division of Pharmaceutical Chemistry, Faculty of Pharmacy, University of Helsinki | Finsko |
| 16 | Arnd Ingendoh | analytická chemie | Brukner Daltonik GmbH | |
| 17 | Prof. Sergey N. Krylov, Ph.D. | analytická chemie | Canada Research Chair in Bioanalytical Chemistry, Department of Chemistry York | Kanada |

| 1 Číslo | 2 Jméno vědce | 3 Význačnost vědce a jeho obor | 4 Mateřská instituce | 5 Stát |
|------------|----------------------|-----------------------------------|--|-----------|
| 18 | Pavol Kováč | analytická chemie | University, Toronto Laboratory of Bioorganic Chemistry, Principal investigator NIDDK, National Institutes of Health Bethesda, Maryland | USA |
| 19 | Prof. Gerhard Lammel | analytická chemie | Universität Hamburg, Meteorologisches Institut und Max-Planck-Institut für Meteorologie | Německo |

e) aktuální meziústavní dvoustranné dohody

| 1 Číslo | 2 Spolupracující instituce | 3 Stát | 4 Oblast (téma) spolupráce |
|------------|-------------------------------|-----------|-------------------------------|
| | | | |
| | | | |
| | | | |

5. Seznam ilustrací

| 1 Oddíl | 2 Číslo řádku | 3 Název (česky) | 4 Název (anglicky) | 5 Popis (česky) | 6 Popis (anglicky) | 7 Označení ilustrace |
|------------|------------------|--------------------|-----------------------|--------------------|-----------------------|-------------------------|
| | | | | | | |

6. Seznam titulů vydaných na pracovišti

Foret, F. (ed.): CECE 2007: 4th international interdisciplinary meeting on bioanalysis. Brno : UIACH AV ČR 2007, 45 s.

Vyplnil dne:

Jméno:

tel.:

e-mail:

Základní údaje o činnosti pracoviště AV ČR – veřejné výzkumné instituce v roce 2007 a hlavní dosažené výsledky
II. Číselná část

| | |
|---------------------------------|----------|
| Zkratka pracoviště | UIACH |
| Identifikační číslo (IČ) | 68081715 |

Vědečtí pracovníci, DSP, spolupráce s VŠ, vzdělávání

| | | | |
|--|-----------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|
| 1) Forma vědeckého vzdělávání | Počet absolventů v r. 2007 | Počet doktorandů k 31.12. 2007 | Počet nově přijatých v r. 2007 |
| Doktorandi (studenti DSP) v prezenční formě studia | 4 | 18 | 7 |
| Doktorandi (studenti DSP) v kombinované a distanční formě studia | 4 | 3 | 0 |
| C e l k e m | 8 | 21 | 7 |
| z toho počet doktorandů ze zahraničí | 0 | 1 | 0 |

| | |
|--|----|
| 2) Forma výchovy studentů pregraduálního studia | |
| Celkový počet diplomantů | 14 |
| Počet pregraduálních studentů podílejících se na vědecké činnosti ústavu | 14 |

| | | | | |
|--|--------------------------------|--------------------|---------------------------------|---------------|
| 3) Vědecké a vědecko-pedagogické hodnosti pracovníků ústavu | Věd. hodnost nebo titul | | Vědecko-pedagog. hodnost | |
| | DrSc., DSc. | CSc., Ph.D. | profesor | docent |
| Počet k 31. 12. 2007 | 3 | 32 | 1 | 5 |
| z toho uděleno v roce 2007 | 0 | 8 | 0 | 0 |

| | | |
|--|------------------------------|------------------------------|
| 4) Pedagogická činnost pracovníků ústavu | Letní semestr 2006/07 | Zimní semestr 2007/08 |
| Celkový počet odpřednášených hodin na VŠ v programech bakalářských/magisterských/doktorských | 39 | 26 |

| | | |
|--|---|---|
| Počet semestrálních cyklů přednášek/seminářů/cvičení v bakalářských programech | 0 | 0 |
| Počet semestrálních cyklů přednášek/seminářů/cvičení v magisterských programech | 2 | 5 |
| Počet pracovníků ústavu působících na VŠ v programech bakalářských/magisterských/doktorských | 7 | 9 |

| 5) Vzdělávání středoškolské mládeže | Školní rok | |
|--|------------|---------|
| | 2006/07 | 2007/08 |
| Počet odpřednášených hodin | 0 | 0 |
| Počet vypracovaných prací | 0 | 0 |
| Počet organizovaných/spoluorganizovaných soutěží | 1 | 1 |

| 5) Spolupráce ústavu s VŠ ve výzkumu | Pracoviště AV příjemcem | Pracoviště AV spolupříjemcem |
|---|-------------------------|------------------------------|
| Počet projektů a grantů, řešených v r. 2007 společně s VŠ (včetně grantů GA ČR a GA AV) | 3 | 7 |
| Počet pracovníků VŠ, kteří mají v ústavu pracovní úvazek | 0 | 0 |
| Počet pracovníků ústavu, kteří mají na VŠ pracovní úvazek | 0 | 0 |

K oddílu 1:

1. a 2. řádek:

uvádí se i studenti DSP, kteří se v ústavu školí (školitel je pracovníkem ústavu), třebaže proces akreditace tohoto programu pro ústav AV ČR nebyl dosud dokončen

K oddílu 2:

1. řádek:

uvádí se celkový počet diplomantů, kteří během roku měli vedoucího práce z ústavu AV ČR

2. řádek

uvádí se celkový počet bakalářů, kteří během roku měli vedoucího práce z ústavu AV ČR

K oddílu 3:

1. řádek:

uvádí se celkový počet fyzických osob v hlavním pracovním poměru (včetně pracovníků zaměstnaných na částečný úvazek)

K oddílu 4:

1., 2. a 3. řádek:

uvádí se celkový počet odpřednášených hodin, příp. počet cyklů na všech vysokých školách dohromady podle studijního programu (ve tvaru např. 0/10/20), ale pouze u těch vyučujících, kteří mají hlavní pracovní poměr v AV ČR,

4. řádek:

uvádí se počet pracovníků bez ohledu na rozsah úvazku v AV ČR

K oddílu 6:

1. řádek:

n e z a h r n u j í s e stipendia na zahraniční pobyty, granty určené pouze na nákup techniky, literatury apod. počty ved'te v členění GAČR/GAAVČR/programový projekt

Vědečtí pracovníci, DSP, spolupráce s VŠ, vzdělávání

pokračování
2

UIACH

7) Společná pracoviště ústavu s účastí VŠ

| Název společného pracoviště | Počet pracovníků | |
|---|------------------|------------|
| | fyz. p.d. | prům.přep. |
| <i>LC06023 Integrované bioanalytické technologie pro mikroanalýzy a diagnostiku s využitím LIF a hmotnostní spektrometrie</i> | | |
| Počet participujících pracovníků z ústavu | 8 | |
| Počet participujících pracovníků z partnerských pracovišť | 10 | |
| | | |
| Počet participujících pracovníků z ústavu | | |
| Počet participujících pracovníků z partnerských pracovišť | | |
| | | |
| Počet participujících pracovníků z ústavu | | |
| Počet participujících pracovníků z partnerských pracovišť | | |
| | | |

K oddílu 7:

doplňte název společného pracoviště a uveďte, zda jde o výzkumné centrum (1M), centrum základního výzkumu (LC), či založené na základě smlouvy o spolupráci (smlouva)

Základní údaje o činnosti pracoviště AV ČR – veřejné výzkumné instituce v roce 2007 a hlavní dosažené výsledky

II. Číselná část

| | |
|--------------------|-------|
| Zkratka pracoviště | UIACH |
|--------------------|-------|

Mezinárodní vědecká spolupráce

| | |
|---|----|
| 1. Počet konferencí s účastí zahraničních vědců (pracoviště jako pořadatel nebo spolupořadatel) | 2 |
| 2. Počet zahraničních cest vědeckých pracovníků ústavu | 45 |
| 2a/ z toho mimo rámec dvoustranných dohod AV ČR | 43 |
| 3. Počet aktivních účastí pracovníků ústavu na mezinárodních konferencích | 57 |
| 3a/ Počet přednášek přednesených na těchto konferencích | 20 |
| 3b/ z toho z v a n é přednášky | 10 |
| 3c/ Počet posterů | 52 |
| 4. Počet přednášejících na zahraničních univerzitách | 0 |
| 5. Počet členství v redakčních radách mezinárodních časopisů | 12 |
| 6. Počet členství v orgánech mezinárodních vědeckých vládních a nevládních organizací (společnosti, komitety) | 0 |
| 7. Počet přednášek zahraničních hostů v ústavu | 6 |
| 8. Počet grantů a projektů financovaných ze zahraničí | 1 |
| 8a/ z toho z programů EU | 0 |

k bodu 4: započítávají se semestrální nebo delší kursy nebo jim rovnocenné ucelené bloky přednášek;

n e z a p o č í t á v a j í s e jednotlivé izolované přednášky (semináře) v rámci návštěv

k bodu 5: počítá se každé členství v redakční radě u každého pracovníka ústavu

k bodu 6: počítá se každé členství pracovníka ústavu ve výboru nebo podobném orgánu mezinárodní vědecké organizace

k bodu 8: započítávají se granty a výzkumné projekty vypsané zahraničními nebo mezinárodními (např. EU) agenturami a firmami

2) např. STREP, IP, NoE, SSA, CA, Marie Curie atd.

3) uveďte instituci, zemi (např. Royal Veterinary and Agricultural University, Frederiksberg, Denmark)

4) odhad finančního podílu připadající na pracoviště na rok 2007

II. Číselná část

| | |
|--------------------|-------|
| Zkratka pracoviště | UIACH |
|--------------------|-------|

Počty udělených patentů, užitných vzorů, přihlášených vynálezů a platných licenčních smluv v AV ČR v roce 2007

| | |
|-----------------------------------|---|
| 1. Patenty udělené v ČR | 0 |
| 1a. v zahraničí | 0 |
| 2. Zapsané užitné vzory | 0 |
| 3. Přihlášky vynálezů | 3 |
| 4. Přihlášky užitných vzorů | 0 |
| 5. Platné licenční smlouvy celkem | 0 |
| 5a. z toho uzavřené v roce 2007 | 0 |

*Případné dotazy k vyplnění tabulky zodpoví Ing. Luděk Janů,
Patentové a licenční služby SSČ AV ČR, tel.: 221 403 301, email: janu@ssc.cas.cz.*

II. Číselná část

| | |
|--------------------|-------|
| Zkratka pracoviště | UIACH |
|--------------------|-------|

| Číselnou část vyplnil | |
|-----------------------|--------------------|
| Jméno | Mgr. Jana Kovářová |
| Telefon | 532 290 231 |
| e-mail | kovarova@iach.cz |
| Datum | |