

SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARKA MARCI



thermo
scientific

Authorized Distributor



Agilent

Authorized
Distributor



Generálními sponzory Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci jsou
firma ThermoFisher Scientific spolu s partnery Pragolab s.r.o. a Nicolet CZ s.r.o.,
firma Agilent Technologies Inc. zastoupená autorizovaným distributorem Altium International s.r.o.,
firma Optik Instruments s.r.o. oficiální distributor společnosti BRUKER Optics
v oblasti FTIR a Ramanovy spektrometrie

BULLETIN SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI JANA MARKA MARCI

202

březen 2025

<http://www.spektroskopie.cz>

e-mail sekretariátu: immss@spektroskopie.cz

telefonní číslo sekretariátu: 722 554 326

117. schůze hlavního výboru Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci

Pavel Matějka

Schůze hlavního výboru se konala 23. ledna 2025 tradičně v historické budově Univerzity Pardubice na náměstí Čs. legií. Zasedací místnost zajistila docentka Anna Krejčová z Ústavu chemického a environmentálního inženýrství Fakulty chemicko-technologické, za což jí patří velký dík. Náročný program obsahoval jednání hlavního výboru a Soutěž

mladých spektroskopiků. Setkání začalo již v 9 hodin jednáním hlavního výboru a po něm následovala soutěž, která byla z organizačních důvodů zahájena kategorií B. Průběhu soutěže, jejím účastníkům, vítězům a jejich prezentacím je věnován samostatný příspěvek uveřejněný v tomto čísle Bulletinu (č. 202). Vítěze soutěže a názvy jejich prací naleznete také na webu Společnosti. O organizaci soutěže se postaral docent Antonín Kaňa z Vysoké školy chemicko-technologické v Praze. I letošní ročník byl vydařený a počet účastníků byl vysoký. Všechny

přednesené příspěvky byly věnovány aktuálním směrům spektroskopie a byly na vysoké úrovni.

Schůze hlavního výboru projednávala organizační záležitosti proběhlé a nadcházející. Proběhlo oznámení o finanční výsledcích Kurzů vibrační spektroskopie 2024, 18. Česko-Slovenské spektroskopické konference 2024 a 25. Škole MS 2024. Bylo upřesněno konání akcí v roce 2025. V roce 2025 se budou konat Kurzy vibrační spektroskopie 2025 (již proběhlo), Kurz ICP & Workshop LA 2025, Workshop speciální analýza 2025 a 26. Škola hmotnostní spektrometrie 2025.

Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie 2024

Antonín Kaňa

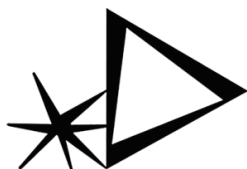
Lednová schůze Hlavního výboru Spektroskopické společnosti byla tradičně dějištěm dalšího ročníku Soutěže o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie. Soutěž se uskutečnila v prostorách Univerzity Pardubice, kde prezentovalo svůj příspěvek šest soutěžících v kategorii A a sedm soutěžících v kategorii B. Z hlediska počtu přihlášených prací tak byl tento ročník dobře vyvážený. Na průběh soutěže dohlížela čestná předsedkyně poroty prof. RNDr. Blanka Vlčková, CSc. Zastoupení tradičních oborů, jako je vibrační spektroskopie či hmotnostní spektrometrie, bylo letos doplněno poměrně vysokým počtem prací zaměřených na elektronovou spektroskopii.

Důkazem vysoké kvality soutěžních prací je také to, že v kategorii A, týkající se diplomových prací, se umístili Michael Foltýn z Vysokého učení technického v Brně s příspěvkem „Plazmonika neušlechtilých kovů“ a Mgr. Jan Biskupič z Masarykovy univerzity v Brně s prací „Zobrazovací metody (LA-ICP-MS a CT) pro testování teranostik a výzkum cévní mozkové příhody“ na sdíleném prvním místě. Třetí místo pak obdržel Ing. Martin Kovář z Centra výzkumu Řež s.r.o. za příspěvek „Vývoj metodik pro spektroskopickou analýzu magnetických ferro-, ferri-kyanidových sorbentů radionuklidů“.

V kategorii B publikovaných prací obsadil první pozici RNDr. Jan Blahut, Ph.D. z Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR s prezentací „Numericky optimalizované multidimenzionální NMR pulzní sekvence pro studium proteinů v pevné fázi“, druhé místo pak doc. Ing. Andrea Konečná, Ph.D. z Vysokého učení technického v Brně s příspěvkem „Nízkoenergieové polaritonové excitace zkoumané pomocí elektronů a fotonů“ a třetí místo Ing. Jakub Buday, Ph.D. také z Vysokého učení technického v Brně s příspěvkem „Investigating the evolution and characteristics of laser induced plasmas by methods in combination with LIBS“.

Závěrem blahopřeji všem oceněným a děkuji ostatním soutěžícím za prezentaci kvalitních prací. Poděkování patří také autorům posudků soutěžních prací, kteří hodnocení věnují svůj čas a úsilí.

Souhrny oceněných prací jsou součástí tohoto čísla Bulletinu.



SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARKA MARCI



Spektroskopická společnost Jana Marka Marci ve spolupráci s Přírodovědeckou fakultou MU
a pod záštitou děkana PřF MU prof. Mgr. Tomáše Kašparovského, Ph.D.,
pořádá

KURZ ICP & WORKSHOP LASEROVÉ ABLACE 2025

27. května – 30. května 2025
Univerzitní kampus Bohunice, Kamenice 5, Brno

MASARYKOVA
UNIVERZITA

MUNI
SCI

LAS LABORATOŘ
ATOMOVÉ
SPEKTROCHEMIE

Zaměření kurzu:

- fyzikální základy ICP
- základy ICP-MS a instrumentace
- interference v ICP
- příprava vzorků pro analýzu
- alternativní vzorkovací techniky
- speciální analýza
- ICP aplikace v geologii, archeologii
- ICP aplikace v bio-vědách a v životním prostředí
- stanovení izotopových poměrů/datování
- fyzikální principy laserů a plazmatu
- základy laserové ablace
- principy a vývoj instrumentace LIBS
- LA-ICP a LIBS aplikace v geologii, archeologii, analýzách předmětů kulturního dědictví
- LA-ICP a LIBS aplikace v bio-vědách
- LA-ICP-MS a LIBS zobrazování
- zpracování dat; zajištění kvality výsledků
- exkurze v laboratořích ICP a LIBS

Možné aktivní zapojení všech účastníků formou přednášky či posteru.

Cena kurzu:

- 5600 Kč + DPH pro členy SS JMM a studenty
- 8000 Kč + DPH pro ostatní

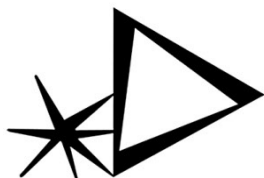
Přihlášení:

Informace o kurzu a přihlašovací formulář budou k dispozici:

https://www.spektroskopie.cz/kurz_ICP_2025

začátek registrace: **1. února 2025**

konec registrace: **2. května 2025**



Ústav chemie a Ústav veřejného zdraví Masarykovy univerzity vás zvou na

workshop SPECIAČNÍ A PRVKOVÁ ANALÝZA

Kdy a kde

9. – 12. června 2025 ve [Sklepě Skalák](#), Skalka u Ježova

Tematické okruhy

- Speciační a frakcionační analýza
- Izolace forem prvků ze vzorků
- Stanovení prvků a jejich forem metodami atomové a hmotnostní spektrometrie
- Využití spojení separačních a detekčních systémů

Program

- Účastnické prezentace formou přednášek
- Společenské večery, výlet

Účastnický poplatek

členové SSJMM, SSS a studenti 4500,- Kč bez DPH

ostatní 6400,- Kč bez DPH

V ceně poplatku je zahrnut sborník a společenský program.

Přihlášeným bude zaslána faktura na úhradu poplatku.

Ubytování

Dvoulůžkový pokoj/osoba včetně snídaně 900 Kč včetně DPH.

Jednolůžkový pokoj/osoba včetně snídaně 1050 Kč včetně DPH.

Oběd 200 Kč včetně DPH. Sklep Skalák, Skalka u Ježova.

Důležité termíny

- Přihláška do 30. 4. 2025
- platba účastnického poplatku do 9. 5. 2025
- abstrakty do 16. 5. 2025

Za organizační výbor: RNDr. Ondřej Zvěřina, PhD. a prof. RNDr. Josef Komárek, DrSc.

Kontaktní osoba: Tomáš Vašina, tel.: 722 554 326, e-mail: immss@spektroskopie.cz

workshop

SPECIAČNÍ

A PRVKOVÁ

ANALÝZA

2025

Skalka u Kyjova



POŘADÍ

KATEGORIE A

1. místo

Mgr. Jan Biskupič

Zobrazovací metody (LA-ICP-MS a CT) pro testování teranostik a výzkum cévní mozkové příhody

Masarykova Univerzita

1. místo

Ing. Michael Foltýn

Plazmonika neušlechtilých kovů

Vysoké učení technické v Brně

3. místo

Ing. Martin Kovář

Vývoj metodik pro spektroskopickou analýzu magnetických ferro-, ferri-kyanidových sorbentů radionuklidů

Centrum výzkumu Řež s.r.o.

KATEGORIE B

1. místo

RNDr. Jan Blahut, Ph.D.

Numericky optimalizované multidimenzionální NMR pulzní sekvence pro studium proteinů v pevné fázi

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

2. místo

doc. Ing. Andrea Konečná, Ph.D.

Nízkoenergie polaritonové excitace zkoumané pomocí elektronů a fotonů

Vysoké učení technické v Brně

3. místo

Ing. Jan Buday, Ph.D.

INVESTIGATING THE EVOLUTION AND CHARACTERISTICS OF LASER INDUCED PLASMAS BY COMPLEMENTARY METHODS IN COMBINATION WITH LIBS

Vysoké učení technické v Brně

Zobrazovací metody (LA-ICP-MS a CT) pro testování teranostik a výzkum cévní mozkové příhody

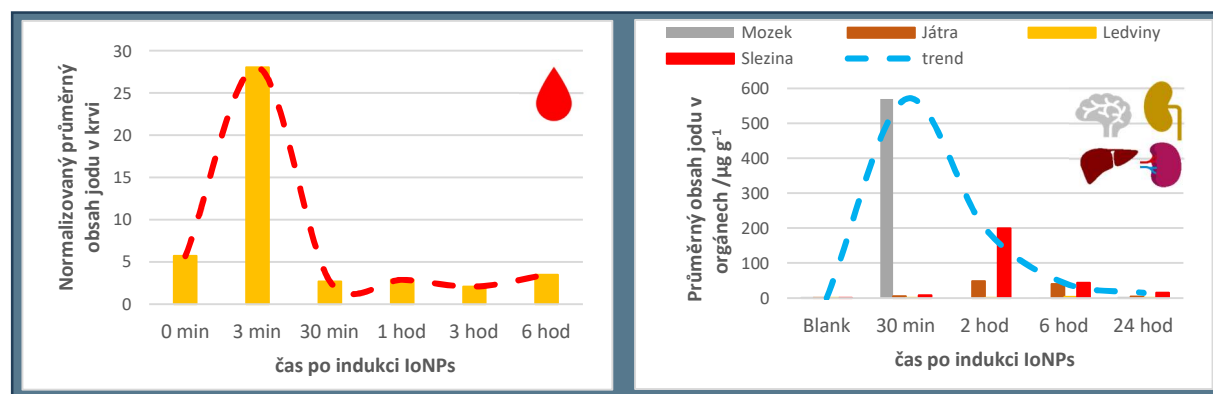
Mgr. Jan Biskupič

Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta,
Ústav analytické chemie, Kamenice 753/5, 625 00 Brno
E-mail: 495294@muni.cz

Cévní mozková příhoda (CMP) představuje druhou nejčastější příčinu úmrtí celosvětově ¹, a i přes pokročilou úroveň zdravotní péče ve vyspělých zemích zanechává trvalé následky u velkého počtu pacientů ². S tím jsou spojeny i ekonomické dopady na zdravotnictví, které roku 2017 činily v EU okolo 60 miliard eur, což je ekvivalent 59 eur na občana ³. Jak tedy můžeme zlepšit dlouhodobou prognózu přeživších a snížit celkové náklady? **Klíč k úspěchu je čas.** CPM již v dnešní době umíme úspěšně diagnostikovat. Ovšem v každé konkrétní situaci nastává problém s detekcí nástupu mrtvice, což je klíčové pro zvolení vhodné léčby, a tedy záchranu života. 20–25 % mozkových příhod se vyskytuje ve spánku a přesná doba nástupu příznaků je tedy neznámá, tzv. “wake-up stroke”. Tito pacienti jsou vyloučeni z konvenční metody léčby a bohužel mají nejhorší prognózu ⁴.

Nedostatečné nástroje pro zobrazení krevních sraženin mohou být překonány použitím polyjodovaných biodegradabilních nanočástic (IoNPs), což by mohlo výrazně zlepšit diagnostiku a léčbu CMP. IoNPs umožní včasné určení stáří sraženiny, což povede k rychlejší a efektivnější léčbě. Díky svým fyzikálním vlastnostem zůstávají v krevním oběhu déle než molekulární jód, čímž snižují potřebnou koncentraci pro diagnostiku a díky své afinitě k fibrinu umožňují cílené působení bez nežádoucích vedlejších účinků ^{5,6}. Navíc, jejich schopnost nést vázané léčivo poskytuje základ pro moderní teranostiku (kombinace terapie a diagnostiky). Tato inovativní metoda, v kombinaci s raketovým růstem a vývojem automatizovaných AI diagnostických nástrojů v klinické praxi, má potenciál zlepšit dlouhodobou prognózu pacientů a snížit celkové náklady na léčbu CMP.

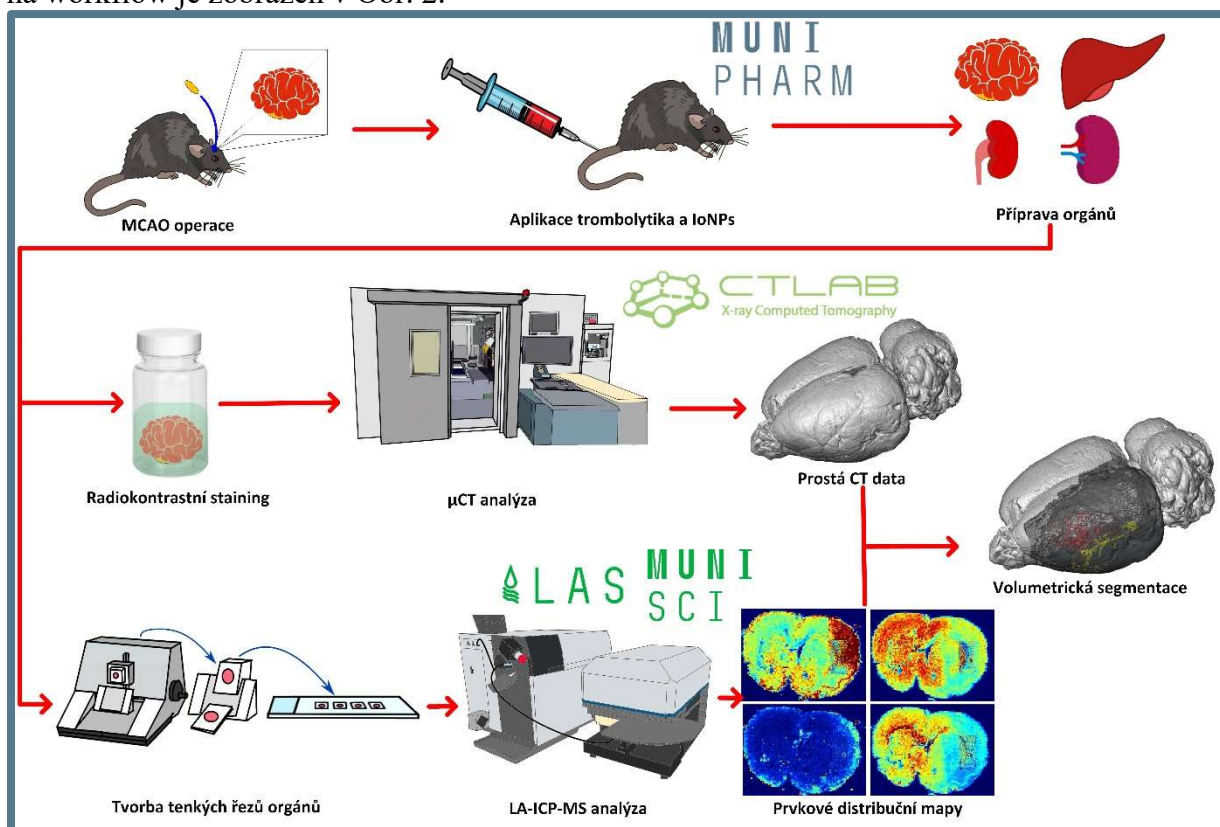
Tato diplomová práce se zaměřuje na popis chování a perzistence IoNPs v modelovém organismu laboratorního potkana a na přípravu nové metodologie zobrazení CMP pomocí radioopacitního barvení pro analýzu na CT. V první části této diplomové práce byly prezentovány výsledky farmakokinetického pozorování IoNPs v krvi a orgánech (mozek, játra, slezina, ledvina), kde byl potvrzen průnik IoNPs z krevního řečiště do mozku již po 30 minutách od jejich intravenózní aplikace. Následně docházelo k akumulaci ve slezině a postupnému odbourávání IoNPs pomocí jater přes žlučové cesty. Již po 24 hodinách od aplikace byl pokles obsahu IoNPs v organismu o 96 % nižší než 30 minut po aplikaci (viz. Obr. 1). Tím byla potvrzena hypotéza rychlé biologické odbouratelnosti IoNPs.



Obr. 1: Grafické znázornění farmakokinetiky IoNPs v krvi a orgánech

Druhá část diplomové práce pojednává o optimalizaci zobrazení CMP, trombu a krvácení, což byl důležitý mezikrok před testováním radioopacitních vlastností IoNPs na μ CT. Zároveň, pro současné zobrazení měkké mozkové tkáně a IoNPs je velmi nevhodné použití molekulárního jodu jako v současném zdravotnictví běžně používaného radioopacitního barvícího reagentu. Z toho důvodu byla vyvinuta **nová metoda stainingu pomocí roztoku uhličitanu cesného (Cs_2CO_3)**. Cesium má, stejně jako jod, radioopacitní vlastnosti, ale jeho schopnost pohlcení rentgenového záření se trochu liší vzhledem k rozdílnému protonovému číslu a hustotě⁷. Tato vlastnost je velmi příhodná, jelikož jdou na CT tyto prvky od sebe odlišit a bude možné současně sledovat vývoj nekrotické tkáně CMP i postupu IoNPs k trombu.

S novým přístupem k zobrazení patologických struktur v mozku se pojí i nová metodologie vyhodnocení CT dat – volumetrická segmentace. Tímto postupem lze z prostých obrazových CT dat vytvořit interaktivní 3D model mozku s rozlišenými strukturami, který poskytuje intuitivně ucelené průřezové i prostorové informace o chování IoNPs a vývoje CMP v celém objemu mozku. Pro exaktní potvrzení patologických struktur slouží „zlatý analytický standard“ prvkově specifického zobrazení řezu mozku pomocí LA-ICP-MS. Celkový pohled na workflow je zobrazen v Obr. 2.



Obr. 2: Workflow zobrazení CMP

Reference:

- 1 Institute for Health Metrics and Evaluation Available at: <https://vizhub.healthdata.org/gbd-results>. (Accessed: 25th September 2024) //
- 2 Gallacher, KI et al. (2014). *BMC Med.* 12, 151 //
- 3 Ramon Luengo-Fernandez et al. (2020). *Eur. Stroke J.* 5, 17–25 //
- 4 William J. Powers et al. (2019). *Stroke* 50, e344–e418 //
- 5 Criscione, JM et al. (2011). *Bioconjug. Chem.* 22, 1784 //
- 6 Hallouard, F et al. (2010). *Biomaterials* 31, 6249–6268 //
- 7 Sneha, KR & Sailaja, GS. (2021). *J. Mater. Chem. B* 9, 8569–8593 //

Plazmonika neušlechtilých kovů

Ing. Michael Foltýn

Fakulta strojního inženýrství VUT v Brně

Ústav fyzikálního inženýrství

E-mail: 216894@vutbr.cz

Lokalizované plazmonové rezonance (LPR) jsou kolektivní oscilace volných elektronů, které lze excitovat elektromagnetickou vlnou dopadající na kovovou nanočástici. Touto budící elektromagnetickou vlnou pak může být nejen klasická světelná vlna, ale i svazek elektronů. Atraktivita LPR tkví v jejich schopnosti zesílit lokální elektromagnetické pole v okolí samotné nanočástice. Pro tuto vlastnost se pak těmto plazmonicky aktivním kovovým nanočásticím říká plazmonické antény. Jedním ze způsobů analýzy plazmonických vlastností těchto antén je spektroskopie energiových ztrát elektronů (EELS) prováděná v transmisním elektronovém mikroskopu. Svazek elektronů svým průchodem excituje v nanočástici plazmonovou rezonanci a v průběhu tohoto neelastického rozptylu ztratí energii odpovídající energii vybuze LPR. Tyto prošlé elektrony pak lze za pomoci magnetického hranolu rozdělit dle energie a takto vytvořené energiové spektrum prošlých elektronů zaznamenat pomocí CCD kamery.

Plazmonické anténky jsou aktuálně používány především v biosenzorice [1], [2] a optice [3]. Jejich plazmonické vlastnosti však nabízejí také mnohé další použití. Mohou být použity například jako součást kvantových výpočetních modulů [4], jako absorbery v solárních článcích [5], či jako vysoce účinné světelné zdroje [6]. Hlavní limitací většího rozšíření plazmonických antén v každodenních aplikacích je především vysoká cena jejich výroby zapříčiněná nejen náročnými výrobními procesy, ale také použitými materiály (obvykle zlato, či stříbro). Cílem mé práce tedy bylo prozkoumat možnosti použití neušlechtilých kovů jako alternativních plazmonických materiálů.

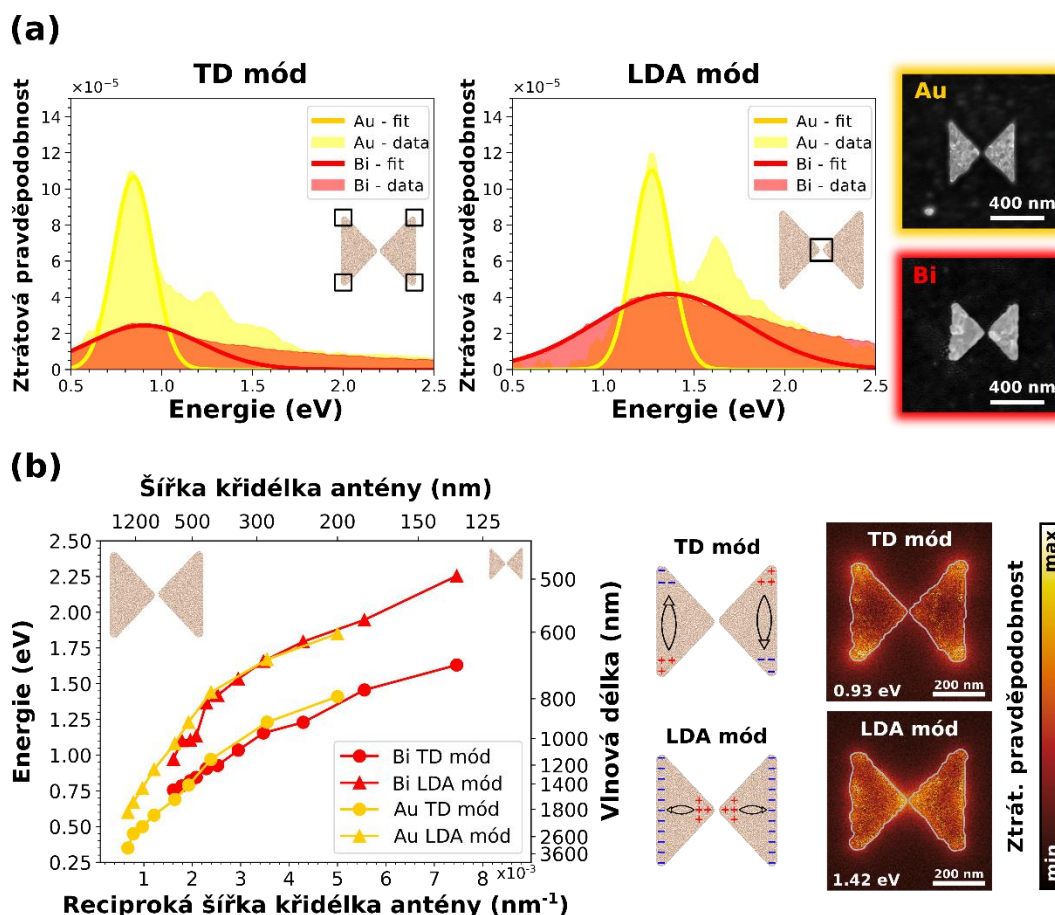
Na základě jednoduchých numerických simulací plazmonických antén vyrobených z olova, bismutu, india a cínu jsem se rozhodl zaměřit na bismut, jelikož simulované bismutové antény vykazovaly nejintenzivnější LPR.

Proces výroby bismutových plazmonických antén spočíval v naprášení polykrystalické bismutové vrstvy na tenkou membránu SiN_x a následné litografii antén za pomoci fokusovaného iontového svazku. Vyráběl jsem dva druhy antén, tyčinkovité anténky ve tvaru obdélníku a dále motýlkovité anténky tvořené dvěma trojúhelníky. Dále jsem pyrolýzou octanu bismutitého v roztoku ethylenglykolu syntetizoval monokrystalické bismutové nanočástice kulového tvaru. Plazmonické vlastnosti takto vyrobených polykrystalických antén a monokrystalických nanočástic jsem pak opět charakterizoval metodou EELS.

Energiová spektra naměřená na bismutových polykrystalických anténách obsahovala zřetelné píky odpovídající plazmonovým rezonančním módům typickým pro použité geometrie antén. Samotné píky však byly poměrně široké, což bylo zřejmě způsobeno tlumením plazmonových rezonancí vlivem velké drsnosti povrchu anténky. Srovnání plazmonových píků na bismutových anténách s píky nalezenými na zlatých anténkách stejných rozměrů pak ukázalo, že energie plazmonových rezonancí u bismutových a zlatých antén je v podstatě identická. Závislost energie na reciproké šířce bismutových a zlatých antén pak ukázala, že bismut zcela pokrývá a mírně i přesahuje interval použitelných vlnových délek zlatých antén, což z něj dělá materiál, který může v plazmonických aplikacích zcela nahradit zlato a přitom snížit náklady spojené s výrobou samotných antén.

Energiová spektra chemicky syntetizovaných nanočástic také prokázala přítomnost plazmonových rezonancí, avšak kvůli přítomnosti surfaktantových vrstev na povrchu nanočástic bylo určování a identifikace plazmonových píků ve spektrech problematické a méně

spolehlivá. Proto jsem pro plazmonické aplikace jsem jako vhodnější shledal výrobní metodu založenou na litografii nadeponovaných tenkých vrstev.



Obr. 1: a) EEL spektra z okrajů a středu zlaté (žlutá) a bismutové (červená) bowtie antény stejné velikosti. Ve spektrech jsou viditelné píky odpovídající transversálnímu dipólovému (TD) a longitudinálnímu dipólovému antivazebnému (LDA) plazmonovému módu. Obě antény jsou zobrazeny na mikrografech z rastrovacího transmisního elektronového mikroskopu. b) Závislost energie plazmonových rezonančních módů na reciproké šířce křídélka zlatých a bismutových antén. Z překryvu disperzních křivek obou materiálů je zřejmé, že bismut je levnější alternativou k doposud používaným zlatým anténkám. V levé části je schéma rozložení náboje v anténě pro LDA a TD módy a naměřené prostorové rozložení ztrátové pravděpodobnosti pro energii obou módů.

Reference:

- [1] Kusuma, S. A. F., et al. *Sensors*. **23**, p. 8172 (2023). <https://doi.org/10.3390/s23198172>
- [2] Wu, Y., et al. *Advanced Drug Delivery Reviews*. **194**, p. 114710 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.addr.2023.114710>
- [3] Ni, X., et al. *Light: Science & Applications*. **2**, p. 72, (2013). <https://doi.org/10.1038/lsa.2013.28>
- [4] Alonso Calafell, I., et al. *NPJ Quantum Information*. **5**(37), (2019). <https://doi.org/10.1038/s41534-019-0150-2>
- [5] Shagouli, E., et al.: *Results in Physics*. **50**, p. 106600 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2023.106600>
- [6] Liu, M., et al. *Nanotechnology*. **5**, p. 570-573 (2010). <https://doi.org/10.1038/nnano.2010.128>

Vývoj metodik pro spektroskopickou analýzu magnetických ferro-, ferri- kyanidových sorbentů radionuklidů

Ing. Martin Kovář

Centrum výzkumu Řež s.r.o.,
Oddělení Zpracování a ukládání nebezpečných odpadů,
E-mail: *martin.kovar@cvrez.cz*

Diplomová práce byla obhájena na Ústavu analytické chemie chemicko-inženýrské fakulty Vysoké školy chemicko-technologické v Praze.

Ferrokyanidy a ferrikyanidy kovů patří mezi často používané materiály pro sorpci radionuklidů v jaderném průmyslu. Mezi jejich významné charakteristiky se řadí vysoká adsorpční kapacita,



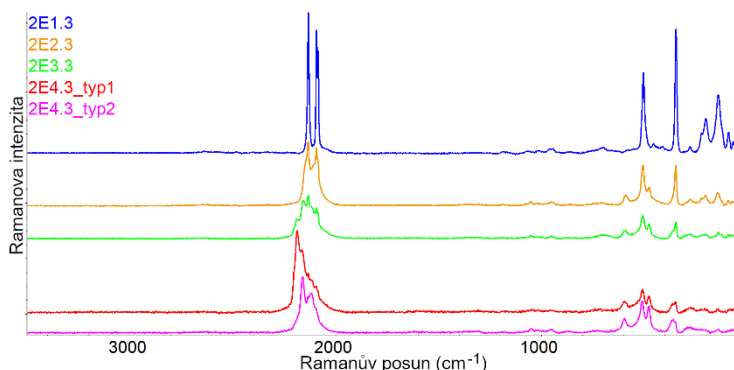
Obr. 1. Demonstrace možnosti separace připraveného sorbentu pomocí magnetického pole

specifický povrch a pórovitost, dobrá radiační stabilita, nízká rozpustnost a snadná syntéza. Nevýhodou těchto sorbentů je jejich nano- či mikrometrická velikost, která komplikuje separaci z roztoku. Možným řešením tohoto problému je modifikace magnetickými částicemi, což umožňuje přípravu sorbentů snadno separovatelných z roztoku pomocí magnetického pole. Tato práce se proto zaměřuje na přípravu magnetických sorbentů na bázi ferro- a ferri-kyanidů mědi a jejich následnou analýzu a charakterizaci pomocí spektroskopických a vícerozměrných statistických metod, čímž přispívá k rozvoji technologií pro nakládání s radioaktivními odpady.

Práce je rozdělena do čtyř hlavních částí. První část se zabývá syntézu ferro- a ferri-kyanidu mědi při různých proměnných parametrech, které mohou ovlivnit jejich sorpční vlastnosti, jako je teplota a poměr prekurzorů. Zkoumán byl také vliv doby zrání ferrokyanidu. Pro vybraný ferrokyanid mědi s optimálními vlastnostmi byla následně vyrobena řada magnetických sorbentů, a to spojením s částicemi magnetitu a zapouzdřením do matrice polyakrylonitrilu.



Obr. 2. Připravený magnetický sorbent



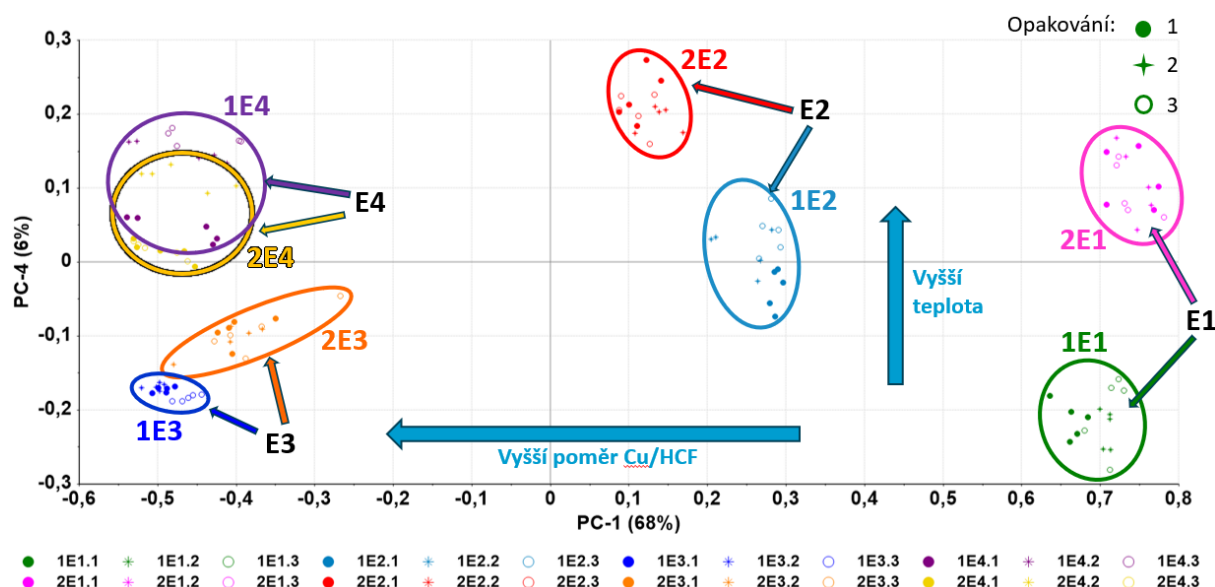
Obr. 3. Porovnání Ramanových spekter pro vybrané druhy ferrokyanidu

připravených sorbentů, zejména infračervenou a Ramanovou spektroskopií. Pro identifikaci krystalové struktury byla použita rentgenová difrakce, prvkové složení a struktura magnetického sorbentu byla zkoumána skenovací elektronovou mikroskopií.

Druhá část je věnována vsádkovým sorpčním experimentům pro ionty cesia. Tyto experimenty slouží k vyhodnocení sorpčních vlastností připravených sorbentů z hlediska kinetiky, kapacity a mechanismu adsorpce. Rovněž byl studován vliv pH a přítomnosti konkurenčních kationtů.

Třetí část práce se zabývá spektroskopickou analýzou

V poslední části jsou podrobně analyzována data z infračervené a Ramanovy spektroskopie pomocí vícerozměrných statistických metod ve srovnání s výsledky sorpčních experimentů. Cílem bylo odhalit vliv vstupních parametrů přípravy sorbentu na dosažené adsorpční kapacity, kontrolovat homogenitu připravených sorbentů a vyhodnotit opakovatelnosti syntézy. K tomuto účelu byla použita analýza hlavních komponent, klasifikace dat metodou měkkého nezávislého modelování třídy analogie a regrese adsorpčních kapacit metodou nejmenších čtverců.



Obr. 4. Analýza hlavních komponent pro infračervená a Ramanova spektra ferrokyanidů

Výsledkem práce bylo nalezení optimálních parametrů pro syntézu magnetického sorbentu na bázi ferro- a ferri-kyanidu mědi. Připravené magnetické sorbenty dosáhly adsorpční kapacity až $70 \text{ mg} \cdot \text{g}^{-1}$, přičemž samotný ferrokyanid mědi vykazoval kapacitu až $250 \text{ mg} \cdot \text{g}^{-1}$. Nejvyšší účinnost odstranění iontů cesia dosahovala 96 %. Na základě infračervených a Ramanových spekter byly vytvořeny klasifikační a regresní modely, které umožňují klasifikovat připravené ferrokyanidy do definovaných skupin a pomocí regrese predikovat jejich adsorpční kapacity. Tyto poznatky jsou klíčové pro optimalizaci výrobních procesů sorbentů na bázi ferro-, ferri- kyanidů a jejich úspěšnou aplikaci při zachytávání radionuklidů z kontaminovaných odpadních vod.

Numericky optimalizované multidimenzionální NMR pulzní sekvence pro studium proteinů v pevné fázi

RNDr. Jan Blahut, Ph.D.

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v. v. i.,
E-mail: jan.blahut@uochb.cas.cz

Seznam soutěžních prací:

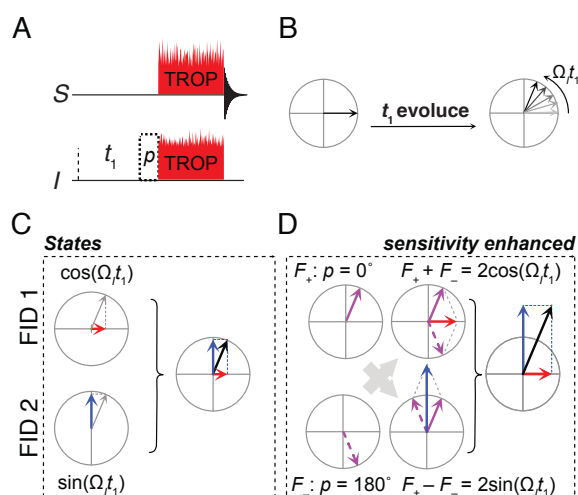
I) Tošner, Z.; Brandl, M. J.; Blahut, J.; Glaser, S. J.; Reif, B. Maximizing Efficiency of Dipolar Recoupling in Solid-State NMR Using Optimal Control Sequences. *Sci. Adv.* **2021**, 7(42), 1–11.

II) Blahut, J.; Brandl, M. J.; Pradhan, T.; Reif, B.; Tošner, Z. Sensitivity-Enhanced Multidimensional Solid-State NMR Spectroscopy by Optimal-Control-Based Transverse Mixing Sequences. *J. Am. Chem. Soc.* **2022**, 144 (38), 17336–17340.

III) Blahut, J.; Brandl, M. J.; Sarkar, R.; Reif, B.; Tošner, Z. Optimal Control Derived Sensitivity-Enhanced CA-CO Mixing Sequences for MAS Solid-State NMR – Applications in Sequential Protein Backbone Assignments. *J. Magn. Reson. Open* **2023**, 16–17, 100122.

Nukleární magnetická rezonance je dnes vedle rentgenové difrakce hlavní metodou pro studium struktury proteinů. Při měření NMR spekter velkých molekul v roztoku ale narážíme na zásadní limit, kterým je rozšiřování čar vlivem T_2 relaxace, která je tím výraznější, čím je molekula větší. Na druhou stranu NMR v pevné fázi tímto fenoménem netrpí a T_2 relaxace není závislá na velikosti proteinu. NMR v pevné fázi tak umožňuje studium například velkých proteinů fixovaných v membránách, nebo celých virových kapsid.^[1]

S rostoucí velikostí měřeného proteinu ale nastává problém výrazného překryvu signálů podobných skupin. Zde přichází na řadu další výhoda NMR, a tou je možnost měření mnohadimenzionálních (nD) experimentů. Spektra o čtyřech i více dimenzích dnes nejsou vzácností. Díky efektu T_2 relaxace a možnosti rychlejšího přenosu signálu mezi jádry dipolární interakcí jsou nD experimenty v pevné fázi účinnější než v roztoku. Například 5D experiment 100kDa proteinu v pevné fázi je asi 15x citlivější.^[2] Tak můžeme v rámci jednoho experimentu kupříkladu korelovat chemický posun ^{15}N a ^1H v jedné aminokyselině s ^{13}C , ^{15}N a ^1H aminokyseliny vedlejší.



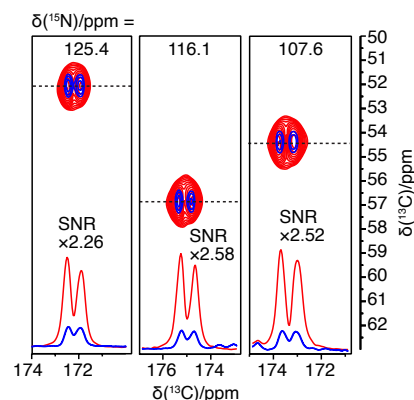
Obr. 1: Princip „sensitivity-enhanced“ detekce s využitím TROP pulzů. Během evoluce v nepřímé doméně t_1 sekvence (A) dochází k evoluci koherence (B) chemickým posunem Ω_1 . Ve „States“ schématu akvizice (C) jsou cosinově a sinově modulované složky (FID 1 a FID 2) získány postupným přenosem reálné a imaginární složky. Při „sensitivity-enhanced“ experimentu (D) jsou přeneseny obě složky (F_+) a (F_-) signálu a rozlišeny pomocí 180° pulzu p . Tyto dva FID jsou sečteny a odečteny, aby se získaly cosinově a sinově modulované signály s dvojnásobnou amplitudou. Díky kumulaci šumu se SNR zvýší o faktor $\sqrt{2}$.

Pro správné zjištění chemického posunu musíme pro každou dimenzi zaznamenat reálnou i imaginární složku signálu. Toho se pro nepřímou detekovanou dimenzi typicky dosahuje metodou *States*, díky které ale klesá citlivost experimentu o faktor $\sqrt{2}$ za každou nepřímou dimenzi. Dlouho panoval názor, že je to v NMR pevné fáze nevyhnutelné, protože dostupné pulzní sekvence neumožňují přenos obou složek signálu z jednoho jádra na druhé (transverzální mixing). Princip „sensitivity-enhanced“ detekce využívající transversálního mixing je ve zkratce vysvětlen na obrázku 1.

A zde přichází naše práce: Rozhodli jsem se pomocí metody optimálních procesů (Optimal Control, OC), která využívá velmi efektivní optimalizační algoritmus, najít tvarovaný pulz pro transversální mixing numericky. Bylo však nejprve potřeba ukázat, že tento numerický přístup převzatý z ref. [3] je skutečně funkční a dostatečně robustní. V článku I) ukazujeme, že pulzní sekvence získaná pomocí OC nejen poskytuje výbornou shodu mezi teoretickou a experimentální účinností, ale i celkově přináší efektivnější přenos koherence mezi jádry než dosavadní metody. Zároveň je výrazně robustnější a nevyžaduje pečlivou optimalizaci před každým experimentem, či pro různé vzorky.

Účinný nástroj jsme si tedy připravili a bylo na čase jej použít pro kýžený transversální mixing. Ten se nám podařilo optimalizovat nejprve pro přenos mezi jádry různých (heteronukleární, článek II) a poté i stejných (homonukleární, článek III) prvků. V obou případech splnily OC pulzy (Transverse mixing Optimal control Pulses, TROP) očekávání a jejich využití v multidimenzionálních experimentech přináší zvýšení citlivosti o $\sqrt{2}$ za každou nepřímou dimenzi, jak ukazuje příklad SNR ve 3D experimentu na obrázku 2. To vzhledem k růstu citlivosti s odmocninou z experimentálního času (počtu scanů) vede k bezprecedentnímu zkrácení experimentů pro mnohadimenzionální spektra. Například měsíc trvající 5D experiment z Ref [2] by v naší sensitivity-enhance verzi trval pouhé dva dny. To je zásadní především u vzorků s velmi malou citlivostí, např. amyloidních plaků úzce spojených s neurodegenerativními chorobami, kde naše metoda zvedá citlivost přibližně trojnásobně (článek II).^[4]

Součástí publikací II a III je také sada speciálních 2D a 3D pulzních sekvencí využívajících našich OC pulzů, které umožňují kompletní přiřazení páteřního řetězce proteinů. Ukázalo se velmi užitečné tuto sadu nástrojů veřejně sdílet, protože na naší práci plynule navazují další pracoviště. Například C. Öster^[7] využil náš přístup pro vývoj 4D pulzních sekvencí. Ještě zajímavější je pak práce týmu L. Andrease, kteří našli analytický přístup pro transversální mixing, ale přiznávají, že je inspirovalo naše numerické řešení, bez něhož by i nadále byl tento způsob zvýšení citlivosti považován v NMR pevné fáze za neproveditelný.^[5,6]



Obr. 2: Porovnání 2D řezů (pro uvedený ^{15}N chemický posun) konvenčního (modrá) 3D hNCACO experimentu se „sensitivity-enhanced“ (červená) variantou pro jednotlivé aminokyseliny ve vzorku tripeptidu fMLF. 1D spektrum ukazuje řez pro chemický posun $^{13}\text{C}\alpha$ indikovaný čárkovanou čarou. Pozorované zvýšení citlivosti (SNR) mírně přesahuje teoretickou hodnotu (2) díky kompenzaci nehomogenit radiofrekvenčního pole v metodě OC.

- [1] Le Marchand, *Chem. Rev.* **2022**, 122, 9943–10018.
- [2] Klein, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **2022**, 119, e2114690119.
- [3] Tošner, *Angew. Chemie Int. Ed.* **2018**, 57, 14514–14518.
- [4] Daskalov, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **2021**, 118, 1–8.
- [5] Nimerovsky, *JACS Au* **2023**, 3, 2763–2771.
- [6] Nimerovsky, *J. Phys. Chem. Lett.* **2024**, 15, 6272–6278.
- [7] C. Öster, ChemRxiv 2024, doi: 10.26434/chemrxiv-2024-f6qmr.

Nízkoenergiové polaritonové excitace zkoumané pomocí elektronů a fotonů

doc. Ing. Andrea Konečná, Ph.D.

Fakulta strojního inženýrství a Středoevropský technologický institut, Vysoké učení technické v Brně

Ústav fyzikálního inženýrství

E-mail: andrea.konecna@vutbr.cz

Seznam soutěžních prací:

1. Konečná, A.; Li, J.; Edgar, J. H.; García de Abajo, F. J.; Hachtel, J. A.

Revealing Nanoscale Confinement Effects on Hyperbolic Phonon Polaritons with an Electron Beam.

Small **2021**, 2103404, 1-9.

2. Gallina, P.; Konečná, A.; Liška, J.; Idrobo, J. C.; Šíkola, T.

Strongly Coupled Plasmon and Phonon Polaritons as Seen by Photon and Electron Probes.

Phys. Rev. Appl. **2023**, 19, 024042, 1-9.

3. Chen, S.; Leng, P. L.; Konečná, A.; Modin, E.; Gutierrez-Amigo, M.; Vicentini, E.; Martín-García, B.; Barra-Burillo, M.; Niehues, I.; Maciel Escudero, C.; Xie, X. Y.; Hueso, L. E.; Artacho, E.; Aizpurua, J.; Errea, I.; Vergniory, M. G.; Chuvilin, A.; Xiu, F. X.; Hillenbrand, R. Real-space observation of ultraconfined in-plane anisotropic acoustic terahertz plasmon polaritons.

Nat. Mater. **2023**, 22, 860-866.

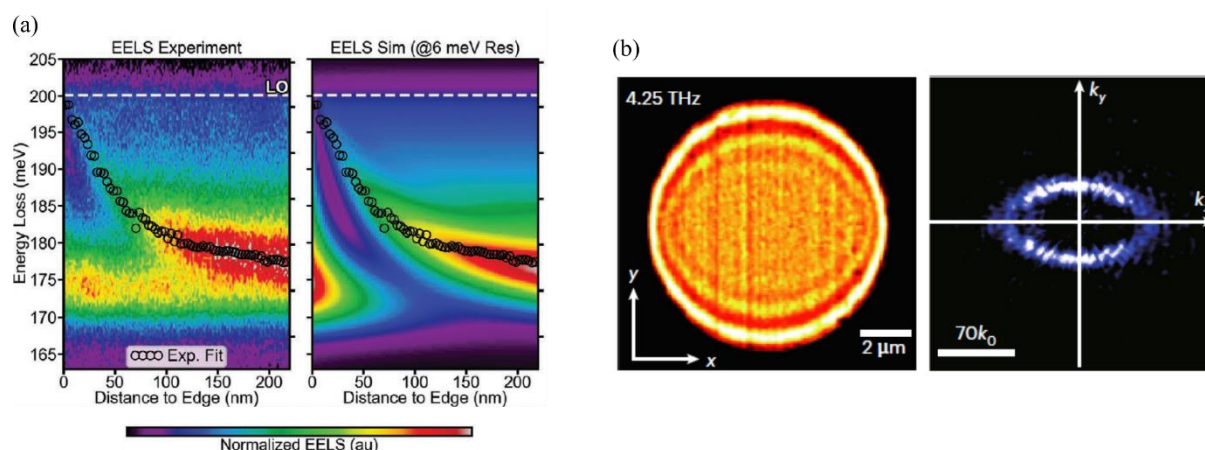
Polaritony jsou hybridní excitace světla a hmoty, které umožňují extrémní lokalizaci elektromagnetického pole a díky tomu mají řadu aplikací, například v (nano)zobrazování, senzorice, optoelektronice nebo vlnovodné technice. Vlastnosti polaritonových excitací mohou být kontrolovány pomocí (nano)strukturování a výběrem vhodného materiálového prostředí, avšak ověření kýžených vlastností nemusí být právě kvůli lokalizaci polaritonového pole pod difrakčním limitem snadné. Tento soubor prací představuje dvě techniky, kde jsme pro zkoumání polaritonů v infračervené oblasti spektra využili velmi lokalizované sondy v podobě úzkého elektronového svazku a světla zfokusovaného na nanometrický hrot.

První předkládaná práce se zabývá fononovými polaritony v tenkých vrstvách hexagonálního nitridu boru (hBN). Ukázali jsme, že fononové polaritony lze snadno vybudit pomocí elektronového svazku v rastrovacím prozařovacím elektronovém mikroskopu. Díky možnosti detekce velmi malých energiových ztrát elektronů a kontrolované pozici svazku na vzorku jsme dokázali vlastnosti fononových polaritonů charakterizovat jak spektrálně, tak prostorově [jak lze vidět ve spektrech na obr. 1(a)]. Za využití kombinace experimentálních výsledků a semi-analytického modelování jsme zjistili, že hrany vzorku nebo nehomogenity v substrátu mohou zásadně ovlivnit vlastnosti fononových polaritonů, konkrétně změnit jejich propagaci nebo zajistit větší lokalizaci pole, což by mohlo být klíčové pro nanosenzory nebo vlnovody vyrobené z hBN.

V druhé soutěžní práci jsme zkoumali možnost elektromagnetické vazby mezi dvěma různými typy polaritonových excitací: lokalizovaných plasmonových polaritonů ve zlatých nanočásticích, tzv. nanoanténách, a fononových polaritonů v tenké vrstvě oxidu křemičitého. Díky kombinované excitaci fononových a plasmonových polaritonů lze dosáhnout dalších

zajímavých efektů, jako je například spektrální posuv, řízení směrovosti propagace nebo fokusace pole. Vlastnosti těchto spřažených excitací jsme analyzovali pomocí infračervené spektroskopie v dalekém poli, ale také jsme využili spektroskopii energiových ztrát v elektronovém mikroskopu. Ukázali jsme, jak výsledky získané pomocí obou technik interpretovat a porovnat. Také jsme zjistili, že pomocí polohy elektronového svazku lze ovládat míru vybuzení plasmonových excitací a v důsledku i to, jak silné vazby mezi oběma typy excitací dosáhneme.

Poslední práce využívá pro prostorově-spektrální analýzu polaritonových excitací rastrovací optickou mikroskopii v blízkém poli. Tuto techniku jsme aplikovali ve studiu plasmonových polaritonů v telluridu stříbrném (Ag_2Te). Tento materiál se vyskytuje v monoklinické krystalové struktuře a za pokojové teploty chová jako slabě dopovaný polovodič. Zobrazováním tenké vrstvy a nanostruktur Ag_2Te jsme ukázali, že vlastnosti tohoto materiálu způsobují silnou anisotropii a nízkou energii plasmonů (odpovídající frekvencím v jednotkách THz), což je pro tento typ excitací velmi netypické – obvykle lze plasmonové polaritony excitovat v ušlechtilých kovech, kde je jejich propagace isotropní a energie řádově vyšší. Ag_2Te tedy představuje zajímavou alternativu pro plazmonické aplikace v oblasti THz.



Obr. 1. (a) Srovnání experimentálních (vlevo) a teoreticky modelovaných (vpravo) spekter energiových ztrát elektronů v závislosti na vzdálenosti elektronového svazku od hrany tenké vrstvy hBN. Pomocí modelu lze určit, že ve vrstvě jsou excitovány fononové polaritony a vyextrahovat disperzní závislost těchto excitací. Převzato z první soutěžní práce. (b) Disk Ag_2Te zobrazený pomocí světla s frekvencí 4.25 THz rastrovacím optickým mikroskopem v blízkém poli (vlevo) a fourierovská transformace obrazu (vpravo), kde je patrná excitace anisotropně se propagujících plasmonových polaritonů. Převzato z třetí soutěžní práce.

INVESTIGATING THE EVOLUTION AND CHARACTERISTICS OF LASER INDUCED PLASMAS BY COMPLEMENTARY METHODS IN COMBINATION WITH LIBS

Ing. Jakub Buday, Ph.D.

Brno University of technology
Institute of Physical Engineering
E-mail: *buday@vutbr.cz*

Seznam soutěžních prací:

1. Buday, J., Pořízka, P., & Kaiser, J.
Imaging laser-induced plasma under different laser irradiances.
Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, **2020**, 168, 105874.
2. Buday, J., Pořízka, P., Buchtová, M., & Kaiser, J.
Determination of initial expansion energy with shadowgraphy in laser-induced breakdown spectroscopy.
Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, **2021**, 182, 106254.
3. Buday, J., Prochazka, D., Záděra, A., Kaňa, V., Pořízka, P., & Kaiser, J.
Correlation of characteristic signals of laser-induced plasmas.
Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, **2022**, 194, 106476.
4. Mohan, M., Buday, J., Prochazka, D., Gejdoš, P., Pořízka, P., & Kaiser, J.
Laser-induced plasma on the boundary of two matrices.
Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 38(11), **2023**, 2433-2440.
5. Buday, J., Holub, D., Pořízka, P., & Kaiser, J.
Statistical behaviour of laser-induced plasma and its complementary characteristic signals.
Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 39(10), **2024**, 2461-2470.

Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS) is a method of analytical chemistry that provides a qualitative and quantitative sample analysis. As this method has been implemented in more and more applications, certain limitations and drawbacks have been raised from this progress. Some of these limitations are connected to the fact, that the ablation process of a sample is fast and dynamic and the changes of the plasma plume in time and space are a question of a few microseconds. As this can cause certain limitations in the analysis process, there has been a question of how to minimize or eliminate these problems. For this purpose, supplementary methods have been more and more implemented in the LIBS experiments. The goal is simple, acquire more information from the complex process of the ablation and improve the analytical performance of LIBS, be it in the scope of qualitative or quantitative analysis. Here lies the main motivation for this collection of work.

The goal of this collection was to research, implement and utilize complementary methods, that could be used in combination with the existing LIBS experimental setup. As a result, direct plasma imaging, shadowgraphy and sound analysis systems have been implemented and streamlined into the typical analytical process. Each of these methods brings certain additional information.

For direct plasma imaging, it can be the spacious- temporal morphology of the plasma plume, or the distribution of individual elements within its volume. This information is directly tied to the experimental conditions of homogeneity of the sample itself. It has been shown that the morphological information of the plasma plume can be utilized for spectra correction and improving the performance of the LIBS analysis.

The Shadowgraphy method can be used to calculate the energy spent on the ablation itself, pointing at the thermal properties of the analyzed sample. Since various samples have also different physical properties, the ablation rate across different samples is not uniform. Therefore, Shadowgraphy can bring more insight into the ablation process.

Lastly, the sound information from the generated shock wave is connected to the amount of ablated mass. All of the mentioned supplementary methods were examined and utilized within this collection. Insight into these methods together with the LIBS analysis was done individually for each method as well as from the point of their mutual combination. The theoretical information as well as their background is described and discussed. Moreover, the technical information is discussed and analyzed, be it the implementation of the LIBS experiment, or the actual data analysis process.

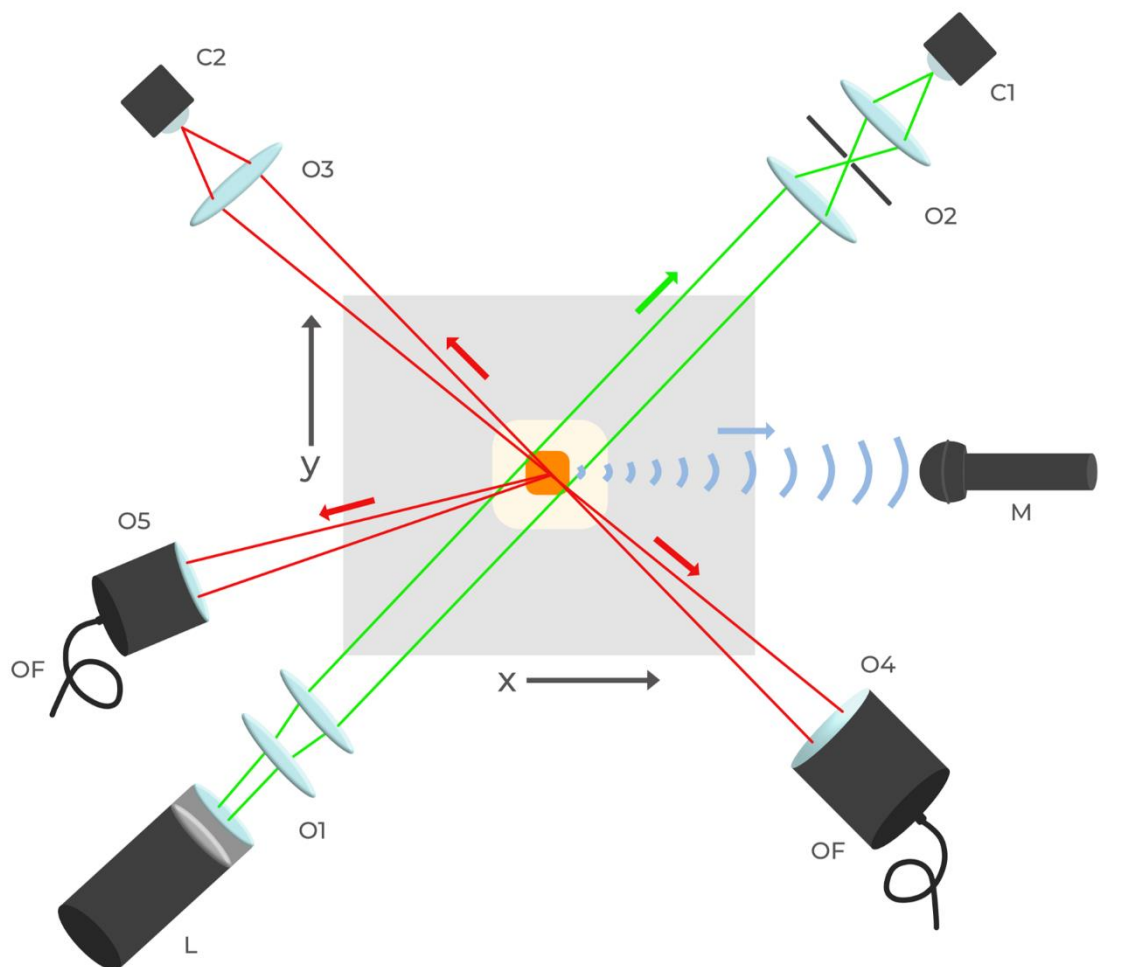


Figure 1: General top overview of the experimental setup. The sample is placed in the center of the stage, and signals from the plasma plume are collected. Laser (L) beam is expanded (O1) and focused by optics (O2) onto a camera (C1) = Shadowgraphy. Images of the plasma are transmitted by optics (O3) onto a camera (C2) = direct plasma imaging. Shock wave intensity is captured by a microphone (M) = sound. Characteristic radiation of the plasma plume is captured by collection optics (O4, O5) and transmitted by optical fibers (OF) to respective spectrometers = LIBS spectra.



Thermo Scientific iCAP MTX ICP-MS

Ignite your research

- Next-level interference removal
- Precise and consistent results
- Simplified, powerful analysis
- Advance your research





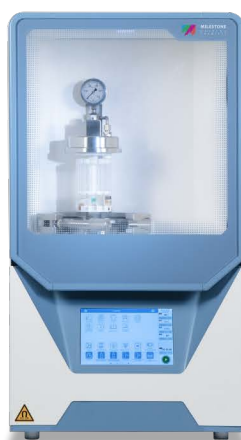
MILESTONE
H E L P I N G
C H E M I S T S

SPOLEHLIVÉ MIKROVLNNÉ ROZKLADY VZORKŮ



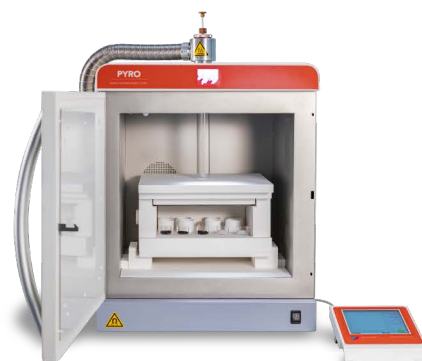
ETHOS UP

Vysoce výkonné mikrovlnné
rozkladné systémy



ultraWAVE 3

Mikrovlnné jednokomorové
rozkladné systémy



PYRO

Muflové mikrovlnné
pece

Zjistěte více na www.milestonesrl.com

Distributor pro Českou republiku

NOVĚ V NABÍDCE



Altium



Jan Marek, produktový specialista
jan.marek@altium.net
www.hpst.cz

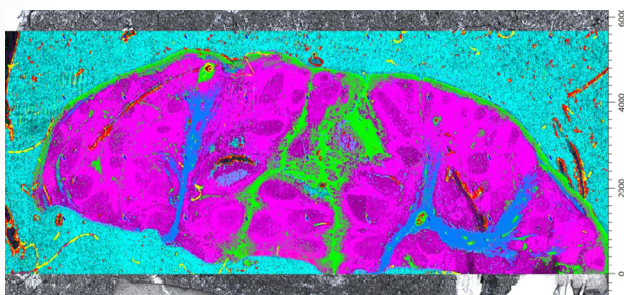
Revoluční technologie v mikroskopii



LUMOS II ILIM

Infračervené zobrazování v reálném čase!

- Extrémní rychlost chemického zobrazování > 60.000 spekter/s!
- Nejvyšší citlivost a prostorové rozlišení na trhu
- QCL technologie s plošným detektorem
- Automatizovaná IČ analýza částic, tablet a tkání
- Jedna z nejrychlejších technik zobrazování na trhu



RAMANTouch

Nejrychlejší Raman imaging na trhu

- Technologie liniového laseru v kombinaci s konvenčním CCD
- Měření 400 spekter najednou s libovolným integračním časem
- Aplikovatelné i na obtížně měřitelné vzorky
- Extrémně výkonné lasery
- Nejvyšší úroveň automatizovanosti
- Efektivní hloubkové profilování v z-ose

NABÍDKA PUBLIKACÍ SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI JMM

Podzimní škola rentgenové mikroanalýzy 2010, sborník přednášek na CD	199,- Kč
Názvosloví IUPAC (Part XII: Terms related to electrothermal atomization; Part XIII: Terms related to chemical vapour generation)	35,- Kč
5. kurz ICP spektrometrie 2009	350,- Kč
6. kurz ICP spektrometrie 2011	350,- Kč
Kurz AAS pro pokročilé (1996)	120,- Kč
12. Spektroskopická konference	190,- Kč
13. Spektroskopická konference (2007 Lednice)	130,- Kč
AAS II – kurz pro pokročilé (2006)	435,- Kč
Atomová absorpční spektrometrie - Kurz AAS I (2015) – kovová kroužková vazba	590,- Kč
Atomová absorpční spektrometrie - Kurz AAS II (2019) – kovová kroužková vazba	590,- Kč
Atomová absorpční spektrometrie - Kurz AAS II (2019) – vazba V2	690,- Kč

Spektroskopická společnost Jana Marka Marci

se sídlem: Ke Karlovu 2027/3, 120 00 Praha 2 - Nové Město e-mail: immss@spektroskopie.cz
<http://www.spektroskopie.cz>

Adresa pro zasílání korespondence: Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Kotlářská 2,
611 37 Brno

Adresa sekretariátu pro osobní kontakt: Univerzitní kampus Bohunice, pavilon C14

Úřední hodiny: úterý 10 – 12 h, čtvrtek 10 – 12 h

Telefon: 549 49 1436, mobil: 722 554 326, tajemník Tomáš Vašina

redakční rada:

prof. RNDr. Josef Komárek, DrSc. (předseda)

prof. Ing. Josef Čáslavský, CSc., prof. RNDr. Viktor Kanický, DrSc.

tech. redakce: Mgr. Rostislav Červenka, Ph.D.

redakční uzávěrka: 15. 2. 2025

uzávěrka příštího čísla: 15. 6. 2025