

SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARKA MARCI



thermo
scientific

Authorized Distributor



NICOLET CZ
MOLECULAR SPECTROSCOPY



Agilent

Authorized
Distributor



Altium



INSTRUMENTS



analytika®

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,
firma ANALYTIKA®, spol. s r.o., dodavatel výrobků pro kontrolu a zajištění jakosti v laboratořích

BULLETIN SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI JANA MARKA MARCI

205

březen 2026

<http://www.spektroskopie.cz>

e-mail sekretariátu: immss@spektroskopie.cz

telefonní číslo sekretariátu: 722 554 326

119. schůze hlavního výboru Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci

Viktor Kanický a Pavel Matějka

Dne 22. ledna 2026 se tradičně v historické budově Univerzity Pardubice na náměstí Čs. legií uskutečnila 119. schůze hlavního výboru SS JMM. Zasedací místnost zajistila doc. Anna Krejčová z Ústavu chemického a environmentálního inženýrství Fakulty chemicko-technologické, za což jí patří poděkování.

Náročný program začal v 9 hodin a zahrnoval jednání hlavního výboru i Soutěž mladých spektroskopiků. Schůzi zahájil předseda prof. Pavel Matějka, který přivítal účastníky a představil program sestávající z následujících bodů: i) informace o finančních výsledcích akcí Společnosti uskutečněných v roce 2025; ii) akce SS JMM plánované na rok 2026; iii) různé; iv) Soutěž mladých spektroskopiků – prezentace soutěžících.

Akce Společnosti v roce 2025 pokryly veškeré náklady včetně režie. V případě 26. Školy hmotnostní

spektrometrie 2025 byla částka převyšující náklady (cca 130 tis. Kč) na návrh Sekce hmotnostní spektrometrie převedena do Fondu SMMS, určeného na odměny vítězů soutěže SMMS (cestovní granty). V roce 2025 se kromě 26. Školy hmotnostní spektrometrie uskutečnily Kurzy vibrační spektroskopie a Kurz ICP & Workshop LA 2025.

V roce 2026 bude uspořádána 27. Škola hmotnostní spektrometrie (21.–25. září 2026, Frymburk). V Olomouci se ve dnech 14.–18. září 2026 uskuteční 19. Česko-Slovenská spektroskopická konference spojená s konferencí Mössbauerovy spektroskopie v materiálových vědách. Kurzy vibrační spektroskopie 2026 proběhly ve dnech 5.–9. a 12.–16. ledna 2026 v Praze. Další plánovanou akcí je 20. Radiochemická konference 2026 (10.–15. května 2026, Mariánské Lázně), kterou organizuje Česká společnost chemická ve spolupráci s Katedrou jaderné chemie FJFI ČVUT v Praze; SS JMM je jedním ze spoluorganizátorů.

Profesor Matějka dále informoval přítomné o výsledcích volby revizní komise. Nově zvolenými členy se stali Mgr. Miroslava Bittová, Ph.D., Ing. Martin Člupek, Ph.D., RNDr. Jakub Hraníček, Ph.D., a RNDr. Tomáš Pluháček, Ph.D.

Po skončení jednání hlavního výboru následovala Soutěž mladých spektroskopiků. Podobně jako v loňském roce i v letech předcházejících byl i letošní ročník velmi zdařilý a zaznamenal vysoký počet účastníků. Do soutěže bylo přihlášeno 6 soutěžících v kategorii A a 13 soutěžících v kategorii B. Všechny přednesené příspěvky byly zaměřeny na aktuální směry spektroskopie a měly vysokou odbornou úroveň.

Čestnou předsedkyní poroty byla doc. Anna Krejčová. Organizaci soutěže zajišťoval doc. Antonín Kaňa z Vysoké školy chemicko-technologické v Praze. Oceněným soutěžícím bylo za první až třetí místo v obou kategoriích vyplaceno celkem 79 tis. Kč.

Průběhu soutěže, jejím účastníkům, vítězům a jejich prezentacím je věnován samostatný příspěvek uveřejněný v tomto čísle Bulletinu (č. 205).

26. Škola hmotnostní spektrometrie

Ondřej Novák, David Friedecký

Foto: Jitka Kopková

Letošní ročník Školy hmotnostní spektrometrie, pořádaný Spektroskopickou společností Jana Marka Marci, se opět navrátil do prostředí OREA Resortu

Horal ve Špindlerově Mlýně. Akce proběhla ve dnech 8.–12. září 2025 a navázala na úspěšný jubilejní ročník z loňského roku. Letošní téma „Hmotnostní spektrometrie a její aplikační potenciál“ zdůraznilo široké možnosti využití hmotnostní spektrometrie v oblastech farmaceutické analýzy, potravinářství, klinické diagnostiky, životního prostředí, toxikologie i moderních datových přístupů. Program byl zahájen již v neděli odpoledne sérií krátkých kurzů zaměřených na moderní chromatografické metody ve spojení s hmotnostní spektrometrií a statistiku s využitím umělé inteligence. Pondělní dopoledne pokračovalo kurzy věnovanými řešením problémů při vývoji nových LC-MS metod, multiomickým přístupům a hmotnostně-spektrometrickému zobrazování.

Oficiální zahájení proběhlo po obědě v pondělí 8. září 2025. Úvodní sekce nabídla dvě zvané přednášky a vystoupení vítěze sekce „Mládí vpřed 2024“. Zdeněk Kameník z Mikrobiologického ústavu AVČR představil využití MS při odhalování světa mikrobů, Jiří Danihlík z Univerzity Palackého aplikace LC-MS ve včelařském výzkumu a Mikuláš Vlk seznámil účastníky s využitím cyklické iontové mobility a chemického zesílení v plynné fázi ve strukturní analýze biomolekul. Následující slavnostní sekce byla věnována Ceně Vladimíra Hanuše za nejlepší publikovanou práci v oboru hmotnostní spektrometrie, kterou uděluje Spektroskopická společnost Jana Marka Marci. Letošní cenu s finanční dotací 30 000 Kč sponzorovala společnost Shimadzu. Vítězem se stal autorský kolektiv vedený Michalem Holčápkem z Fakulty chemicko-technologické Pardubické univerzity. Práce nesoucí název „Comprehensive characterization of complex glycosphingolipids in human pancreatic cancer tissues“ byla publikována v Journal of Biological Chemistry a představil ji první autor Karel Hořejší.



Výherci Ceny Vladimíra Hanuše (ve středu K. Hořejší a M. Holčápek)

Odborný program 26. Školy hmotnostní spektrometrie byl rozdělen do deseti tematických

sekcí, které pokrývaly široké spektrum aplikací hmotnostní spektrometrie. Každý den byl věnován konkrétnímu okruhu témat, přičemž ranní bloky poskytl základní vhled do principů MS, dopolední i odpolední sekce se zaměřily na praktické aplikace. První tematický blok se soustředil na environmentální analýzu, kde byly diskutovány aktuální problémy spojené s perzistentními organickými polutanty (POPs), poly- a perfluorovanými látkami (PFAS) či bromovanými retardéry hoření. Přednášky ukázaly, jak moderní MS techniky umožňují sledovat stopová množství těchto kontaminantů v životním prostředí i v lidské populaci. Další sekce byla věnována analýze potravin, která zdůraznila význam hmotnostní spektrometrie při kontrole kvality a bezpečnosti potravin. Účastníci se seznámili s aplikacemi hmotnostní spektrometrie při sledování kontaminantů v krmivech, analýze pivovarských a sladařských produktů či při detekci minerálních olejů (MOSH/MOAH) pomocí pokročilých GC×GC-MS metod. Poslední sekce představila praktické aplikace hmotnostní spektrometrie, od SFC-MS pro rostlinné extrakty přes HRMS v toxikologii a identifikaci molekul až po novou ionizační techniku LAESCI-HRMS. Středeční program se zaměřil na farmaceutickou analýzu, kde byly prezentovány postupy pro stanovení N-nitrosaminů v léčivech, analýzu proteinových bioléciv a terapeutických oligonukleotidů. Tyto přednášky ukázaly, jak MS přispívá k zajištění bezpečnosti a účinnosti moderních léčiv. Čtvrteční blok přinesl pohled na klinické aplikace hmotnostní spektrometrie. Diskutovaly se možnosti rutinní diagnostiky pomocí MS, analýza proteinů v klinických vzorcích a sledování PFAS v lidských matricích. Tyto aplikace potvrzují rostoucí význam MS v personalizované medicíně. Odpolední sekce čtvrtého dne byla věnována toxikologii a dalším aplikacím, včetně analýzy vlasů, kanabinoidů či vonných alergenů. Zajímavým tématem byla také analýza dechu pomocí MS, která se ukazuje jako perspektivní nástroj pro neinvazivní diagnostiku. Závěrečný den patřil novým trendům v hmotnostní spektrometrii. Přednášky se zaměřily na inovace v metabolomice, lipidomice a proteomice, stejně jako na využití umělé inteligence při zpracování dat.

Čtvrteční odpoledne patřilo mladým talentům – soutěžní sekce „Mládí vpřed“ opět ukázala, že budoucnost hmotnostní spektrometrie je v dobrých rukou. Šest inspirativních přednášek přineslo nové nápady i odvážné přístupy, přičemž nejvíce zaujala Martina Kadláčková se svou inovativní metodou FIA-MS/MS pro rychlou diagnostiku atypické myopatie u koní. Za svůj výkon si odnesla nejen ocenění, ale i příslib plně hrazené účasti na příštím ročníku a možnost vystoupit v hlavním programu.

Posterová sekce v úterý a čtvrtek letos doslova praskala ve švech. 42 prezentovaných prací nabídlo pestrou paletu témat od základního výzkumu po aplikace v praxi. První cenu získal Anatolii Spesyvyi za práci „Strategies for charged proteins desorption from lipid membrane in vacuo“, druhé místo patřilo Janě Knytlové s projektem zaměřeným na ambientní hmotnostní spektrometrii a třetí Jakubu Lemberkovi za studium fytohormonů napříč organelami. Obě soutěže podpořila společnost Pragolab, která tak opět potvrdila svou roli klíčového partnera mladých vědců. Detailní abstrakta všech přednášek i posterů najdete na webu 26. Školy hmotnostní spektrometrie (<https://skolams2025.spektroskopie.cz/>).

Účastníci letošní Školy měli možnost zúčastnit se kulturně-poznávacího odpoledne (Hornické muzeum Harrachov, exkurze do Poniklé – výroba perličkových ozdob, pěší túra po Krkonoších). V pondělní odpoledne odstartovala šifrovací hra, která prověřila logické myšlení i týmovou spolupráci. Šifru MS připravil Antonín Bednařík z Masarykovy Univerzity a výhercem se stal tým Fytohormoni z Olomouce. Také turnaj MS OPEN 2025 ve stolním tenise přinesl pořádnou dávku adrenalinu i zábavy. Do hry se zapojilo 32 hráčů, kteří hráli systémem play-off. Finále nabídlo strhující souboj, z něhož jako vítěz vyšel Michal Albrecht, zatímco Pavel Hladík obsadil druhé místo. Bronz si odnesla Ivana Lemak po dramatickém zápase s Jakubem Lemberkem. Večerní program byl pestrý a každý den nabídl jinou atmosféru. V neděli se účastníci bavili na společenském večeru firmy Pragolab, pondělní večer patřil DJ Filipovi na akci pořádané firmou Waters. Úterý přineslo živou hudbu s kapelou The Stream na večeru firmy Altium, zatímco středa nabídla originální Silent Disco „Souboj 2 DJs“ pod záštitou Shimadzu. Čtvrteční závěrečný večer uzavřela kapela Gankino Quintet na akci sponzorované firmou AMEDIS, která se nesla ve velmi přátelském duchu.



Momentka z úspěšného společenského večera Silent Disco „Souboj 2 DJs“.

Za úspěchem 26. ročníku Školy hmotnostní spektrometrie stojí tým lidí, kteří spojili energii, nápady a organizační talent. Děkujeme všem přednášejícím za inspirativní příspěvky, které otevřely nové obzory a rozproudily živé diskuse. Obrovské uznání patří Mirce Bittové za precizní koordinaci a dalším členům organizačního výboru (Renému Lenobelovi, Aleši Pěncíkovi, Věře Doleželové a Jitce Kopkové). Velké díky míří také k týmům Laboratoře růstových regulátorů (jmenovitě Kateřina Cermanová, Pavel Hladík, Jakub Hrdlička, Ivo Chamrád, Michal Kaleta, Jakub Lemberk, Tereza Pavličková, Ivan Petřík, Radim Simerský a Natálie Zemánková) a Mass Spec.group (Radana Brumarová, Martina Horejšová, Martina Kadláčková, Richard Masař a Jakub Rozhon), jejichž nasazení bylo vidět na každém detailu, stejně jako Tomáši Vašinovi ze SSJMM a členům výboru Sekce hmotnostní spektrometrie. A nesmíme zapomenout na Milana Poskera a tým OREA Resortu Horal, kteří zajistili velmi pohostinnou atmosféru. Generálními partnery byly firmy Altium International, AMEDIS, Pragolab, Shimadzu a Waters, hlavními partnery Bruker, LECO a Phenomenex, partnery firmy Chromservis, Olchemim sa Watrex, mediálním partnerem LabRulez.

Příští ročník nás zavede do malebných jižních Čech! Hostiteli budou Biologické centrum AVČR a Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích. Akce se uskuteční v atraktivním prostředí Wellness Hotelu Frymburk v termínu 21.–25. září 2026.

Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie 2025

Antonín Kaňa

Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie byla i letos nedílnou součástí lednového zasedání Hlavního výboru Spektroskopické společnosti. Letošní ročník hostila tradičně Univerzita Pardubice a do soutěže bylo přihlášeno dvacet soutěžících, z toho sedm v kategorii A a třináct v kategorii B. Počet přihlášených prací tak znovu potvrdil, že tato soutěž zůstává pro mladé autory atraktivní a stabilně

vyhledávanou příležitostí k odborné prezentaci. Nad průběhem soutěže dohlížela čestná předsedkyně doc. Ing. Anna Krejčová, Ph.D. Samotný program pak dobře ukázal šíři současného spektroskopického výzkumu, přičemž jednotlivé směry a metody byly zastoupeny poměrně vyrovnaně. Soutěžní blok navíc nepředstavoval pouze přehled jednotlivých výsledků, ale poskytl i přehled o rozmanitosti metodických přístupů a aplikací současné spektroskopie.

V kategorii A, zaměřené na diplomové práce, porota udělila první místo Ing. Janě Knytové z Vysoké školy chemicko-technologické v Praze za práci na téma „Ambientní hmotnostní spektrometrie pro analýzu selektivních modulátorů androgenního receptoru“. Druhé místo získal Filip Jozefov z Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR za práci „Predikce molekul z vícestupňové hmotnostní spektrometrie pomocí grafových neuronových sítí a AI modelu DreaMS“ a třetí místo pak Mgr. Lucie Březinová z Ústavu analytické chemie AV ČR za práci „Začlenění stříbrných nanostruktur do kapilárního prostředí pro detekci povrchem zesílenou Ramanovu spektrometrii“.

V kategorii B publikovaných prací obsadil první místo Dr. rer. nat. Marius Constantin Chirita Mihaila z Matematicko-fyzikální fakulty Univerzity Karlovy v Praze za práci „Light-based Aberration Correction in Electron Optics for Advanced Spectroscopic Applications“. Na druhém místě se umístila Mgr. Markéta Bosáková, Ph.D. z Ústavu chemie Masarykovy univerzity za práci „Acoustic spectroscopy of laser-induced plasma“ a třetí místo obsadil Mgr. et Mgr. Vít Pavelka, Ph.D. z Ústavu analytické chemie AV ČR za práci „Povrchem zesílená Ramanova spektroskopie snadno a spolehlivě“.

Soutěž opět potvrdila svou roli důležité platformy pro prezentaci kvalitních prací mladých autorů a pro odbornou diskusi napříč spektroskopickými obory. Poděkování patří všem soutěžícím za předložené práce, hodnotitelům za pečlivé posouzení příspěvků a oceněným autorům náleží blahopřání k dosaženým výsledkům.

V letošním roce někteří naši členové slaví významná životní jubilea

Jubilantům upřímně blahopřejeme a přejeme pevné zdraví do dalších let

Spektroskopická společnost JMM

Prof. Ing. Jan Kučera, CSc. – osmdesátiletý jubilant, stále nejen „aktivačně“ aktivní

Jiří Mizera



Jan Kučera se narodil 4. března 1946 rodičům vězněným za Protektorátu nacisty, po matce jako potomek Horákova rodu silně zasaženého lidickou tragédií. Malému Jeníčkovi se jako prvnímu poválečnému lidickému dítěti stali kmotry Hana Benešová a Jan Masaryk, a snad

jako šťastné sudičky mu přáli dlouhý, bohatý a naplněný život. Ideály svých kmotrů se Honza Kučera vždy cítil vázán, dlouhá léta žije se svou ženou Alenou v Lidicích. Jako dítě vyrůstal s rodiči v Praze a od základní školy se zajímal o chemii. Jeden z jejích oborů, jadernou chemii, později v letech 1964 až 1969 vystudoval na Přírodovědecké fakultě UK (první dva roky) a na Fakultě jaderné a fyzikálně inženýrské ČVUT (FJFI). Na katedře jaderné chemie FJFI působil zhruba rok do základní vojenské služby jako odborný asistent a v roce 1979 zde získal vědecký titul CSc. na základě dizertace věnované mezím stanovitelnosti v neutronové aktivační analýze biologických materiálů.

Již v počátcích své odborné kariéry se Honza Kučera specializoval na radioanalytické metody, především neutronovou aktivační analýzu, která se stala hlavním tématem jeho dlouhodobého výzkumu. Radioanalytickým metodám se věnoval od roku 1971 v laboratoři Československého uranového průmyslu v Příbrami a od roku 1973 v oddělení aktivační analýzy Ústavu jaderného výzkumu. Toto oddělení vedl nepřerušeně od roku 1977, vč. přechodného převedení do Českého ekologického ústavu v letech 1993 až 1994. Jeho tým působil od roku 1994 jako skupina neutronové aktivační analýzy v Oddělení jaderné spektroskopie Ústavu jaderné fyziky AVČR, v.v.i. (ÚJF) v Řeži. Vedení skupiny jsem po Honzovi převzal v roce 2021 a o tři roky později ji v rámci reorganizace ÚJF převedl a úspěšně začlenil jako

skupinu radioanalytických metod do Oddělení neutronových a iontových metod.

Ve své vědecké práci se Honza Kučera zaměřil především na vývoj a aplikaci vysoce citlivých radioanalytických metod založených na neutronové a fotonové aktivační analýze, umožňujících stanovení stopových až ultra-stopových koncentrací chemických prvků v širokém spektru materiálů, využitelných v geo- a kosmochemii, materiálovém výzkumu, environmentálních studiích, biologii, medicíně, nebo při analýze kulturního dědictví. Při vývoji metodologie neutronové aktivační analýzy se zaměřil především na metody s radiochemickou separací (RNAA), kde vyvinul či aplikoval řadu postupů RNAA pro jednotlivé prvky i skupinové separace. Významnou částí jeho odborné činnosti je též vývoj metodik pro zajištění kvality analytických měření a chemickou metrologii vč. přípravy a certifikace referenčních materiálů. Na těchto projektech spolupracoval s prestižními zahraničními institucemi jako IAEA a NIST. Do mezinárodní spolupráce se Honza zapojil již v roce 1979 získáním stipendia IAEA pro stáž v Technical University v Delftu. Následovaly IAEA podpořené stáže v J. Stefan Institute v Ljubljani a v laboratoři IAEA v Seibersdorfu, a stipendiem NATO podpořená stáž v NIST v Gaithersburgu. Vlastní a získané zkušenosti Honza Kučera ochotně předával zahraničním kolegům z řady zemí (Alžírsko, Bangladéš, Etiopie, Korea, Libye, Černá Hora, Rusko, Sýrie, Thajsko, Tunisko), ať už jako expert IAEA vyslaný do těchto zemí nebo jako školitel stipendistů IAEA vyslaných do jeho laboratoře v ÚJF. Základy aktivační analýzy a dalších radioanalytických metod i vlastní zkušenosti předává též v rámci pedagogické činnosti na FJFI, a to jak v rámci vyučování studentů bakalářského, magisterského a doktorského studia, tak při vedení diplomových a disertačních prací.

Aplikace jaderných analytických metod, zejména neutronové aktivační analýzy, zavedla Honzu do nejruznějších oborů a do nejruznějších koutů světa. Od aplikací v geochemii, výzkumu a monitorování životního prostředí, pracovní medicíny a vývoje prvních českých cytostatik na bázi platiny postupoval ke studiu vlivu vybraných stopových prvků na neurodegenerativní onemocnění, jako např. Parkinsonova choroba. V oboru kosmochemie se zapojil do analýzy meteoritů, v archeologii přispěl

k hledání provenience stavebních materiálů khmerských chrámů v Kambodži. Ke studiu a ochraně kulturního dědictví přispěly jeho analýzy vzorků ostatků historických osobností jako Bedřicha Smetany, Tychona Braha či Jana Zhořeleckého, které mají význam i v oboru kriminalistické forenzní analýzy. V posledních letech se zapojil do mezinárodních projektů zaměřených na jaderné technologie, bezpečnost a forenziku. V neposlední řadě, stále na poli radioanalytických metod, je třeba zmínit Honzovu roli jako vedoucího projektu RAMSES (Výzkum ultrastopových izotopů a jejich využití v sociálních a environmentálních vědách urychlovačovou hmotnostní spektrometrií; MŠMT, 2018-2023), v jehož rámci bylo v Řeži vybudováno a zprovozněno první české pracoviště urychlovačové hmotnostní spektrometrie (AMS – Accelerator Mass Spectrometry). Partnery projektu vedeného ÚJF jsou FJFI a Archeologický ústav AV ČR Praha. Skupina radioanalytických metod se zaměřila na výzkum kosmogenních radionuklidů Be-10 a Al-26 a jejich využití pro datování v geologii a archeologii. Hned první vlaštvou je přelomová studie publikovaná v roce 2024 v časopisu Nature, která datuje příchod prvních lidí do Evropy na 1,4 milionu let.

Profesor Kučera je autorem a spoluautorem téměř dvou stovek prací v mezinárodních impaktovaných časopisech, stovky konferenčních příspěvků (z velké části vyzvaných) a několika kapitol v monografiích. S těmito výsledky koresponduje i jeho účast v domácích i mezinárodních výzkumných projektech a dále členství v domácích i mezinárodních odborných společnostech. Kromě jeho práce v naší SSJMM, kde od roku 1972 aktivně působí v odborné skupině instrumentálních radioanalytických metod, to jsou či byly např. členství a práce v odborné skupině Jaderná chemie České společnosti chemické, International Society of Trace Elements in Humans, American Society for Testing and Materials, Association of Official Analytical Chemists, International Committee of Nuclear Analytical Methods in Life Sciences, International Committee on Activation Analysis, a EURACHEM – Czech Republic. Je členem Hevesy Medal Laureates Board časopisu Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry (JRNC). Nelze zapomenout ani na Honzův podíl na organizaci mezinárodní radiochemické

konference RadChem. Letošní dvacátý ročník konference s 65-letou tradicí se bude konat v květnu jako obvykle v Mariánských Lázních.

Vysoká úroveň vědecké a odborné činnosti prof. Kučery byla domácí i mezinárodní vědeckou komunitou několikrát oceněna: v roce 2002 to bylo ocenění medailí Jana Marka Marci z Kronlandu naší SSJMM, v roce 2006 medailí George Hevesyho udělovanou časopisem JRNC, a v roce 2016 medailí Vladimíra Majera udělovanou odbornou skupinou Jaderná chemie České společnosti chemické. Profesní dráha profesora Kučery je příkladem dlouhodobé systematické vědecké práce, která významně přispěla k rozvoji a rozšíření využití jaderných analytických metod v řadě vědeckých oborů. Jeho výzkum pomohl upevnit mezinárodní postavení českých pracovišť v oblasti neutronové aktivační analýzy a dalších pokročilých analytických metod.

Osobně mě k Honzovi Kučerovi váže dlouholetý kolegiální i přátelský vztah, proto snad nepřekvapí a neurazí jistá familiárnost tohoto medailonku. Když pomínu svá první setkání s Honzou v rámci mého studia na FJFI, poprvé jsme se blíže poznali na 14. ročníku konference RadChem v dubnu 2002, kde mi Honza „hodil lano“ a nabídl mi přechod z FJFI do jeho skupiny v ÚJF. Dodnes tuto nabídku oceňuji a nelituji, že jsem ji přijal a krátce po ničivých povodních v září 2002 k Honzovým „aktivačnickům“ nastoupil. Honza Kučera se mi spolu s kolegou doc. Zdeňkem Řandou stali trpělivými učiteli aktivační analýzy i dalších radioanalytických metod i inspirací pro mé další vědecké směřování. V kolegiální a přátelské atmosféře skupiny pro mě byla a dosud je radost pracovat, a Honza k ní nadále přispívá. Díky za vše, Honzo!

Milý Honzo, přeju Ti za sebe i jménem celé SSJMM pevné zdraví, a nadále hodně energie a nadšení pro Tvé osobní i profesní aktivity, a to i v rámci činnosti naší společnosti.

*Mnoga ljeta, mnoga ljeta, mnoga ljeta, živijó,
mnoga ljeta, mnoga ljeta, mnoga ljeta, živijó!
Živijó, živijó, živijó!*

Soutěž o nejlepší práci mladých autorů v oboru spektroskopie 2025

POŘADÍ

Kategorie A

- 1. místo** **Ing. Jana Knytlová**
Ambientní hmotnostní spektrometrie pro analýzu selektivních modulátorů androgenního receptoru
Vysoká škola chemicko-technologická v Praze
- 2. místo** **Filip Jozefov**
Predikce molekul z vícestupňové hmotnostní spektrometrie pomocí grafových neuronových sítí a AI modelu DreaMS
Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v. v. i.
- 3. místo** **Mgr. Lucie Březinová**
Začlenění stříbrných nanostruktur do kapilárního prostředí pro detekci povrchem zesílenou Ramanovou spektrometrií
Ústav analytické chemie AV ČR, v. v. i.

Kategorie B

- 1. místo** **Dr. rer. nat. Marius-Constantin Chirita-Mihaila**
Light-based Aberration Correction in Electron Optics for Advanced Spectroscopic Applications
Univerzita Karlova
- 2. místo** **Mgr. Markéta Bosáková, Ph.D.**
Acoustic spectroscopy of laser-induced plasma
Masarykova univerzita
- 3. místo** **Mgr. et Mgr. Vít Pavelka, Ph.D.**
Povrchem zesílená Ramanova spektroskopie snadno a spolehlivě
Ústav analytické chemie AV ČR, v. v. i.

Ambientní hmotnostní spektrometrie pro analýzu selektivních modulátorů androgenního receptoru

Ing. Jana Knytllová

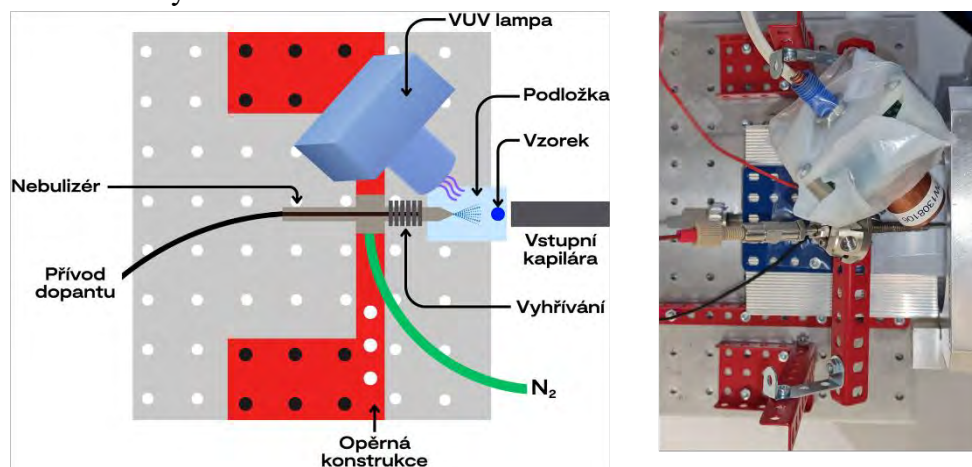
Ústav analytické chemie VŠCHT Praha,
Skupina molekulové hmotnostní spektrometrie,
E-mail: knytllovj@vscht.cz

Ambientní hmotnostní spektrometrie (AMS) umožňuje analýzu vzorků různých skupenství za atmosférického tlaku v jejich přirozeném stavu, a navíc s žádnou nebo jen minimální úpravou. Kratší doba přípravy představuje značnou časovou úsporu, a proto se zcela logicky nabízí využít AMS jako nástroj pro semikvantitativní screening, např. různých nelegálních látek. V práci je prezentována aplikace komerčního ambientního iontového zdroje Sicrit na bázi dielektrického bariérového výboje (DBDI, *Dielectric Barrier Discharge Ionization*) pro analýzu selektivních modulátorů androgenního receptoru (SARM, *Selective Androgen Receptor Modulators*). SARM spadají do skupiny látek s anabolickým účinkem stejně jako anabolické androgenní steroidy. Tyto látky nebyly doposud schváleny regulačními agenturami jako je např. Evropská agentura pro léčivé přípravky (EMA, *European Medicines Agency*), americký Úřad pro kontrolu potravin a léčiv (FDA, *Food and Drug Administration*) nebo Státní ústav pro kontrolu léčiv (SÚKL), pro žádnou terapeutickou indikaci. Nicméně, jejich silné anabolické účinky jsou známé, a proto je jejich výroba i distribuce v ČR nezákonná. Přesto bývají SARM zneužívány sportovci pro nárůst svalové hmoty a je tedy žádoucí mít k dispozici metodu pro rychlý screening přípravků potenciálně obsahujících SARM. Pro analýzu za pomoci iontového zdroje Sicrit byly vzorky tablet a tobolek rozpuštěny v methanolu a zředěny vodou. Dávkování probíhalo pomocí mikrostříkačky vkládané do GC/SPME modulu iontového zdroje Sicrit, který byl zahříván. Vnitřní část zdroje byla proplachována dusíkem, aby byl systém izolován od vnějšího prostředí. Iontový zdroj Sicrit byl připojen na hmotnostní spektrometr s vysokým rozlišením Orbitrap Exploris 120 pracující v pozitivním modu. Pro ověření výsledků byly vzorky dále analyzovány metodou LC-MS/MS na kapalinovém chromatografu Agilent 1290 Infinity II spojeném s hmotnostním spektrometrem Agilent 6470 typu trojitého kvadrupólu, který pracoval v režimu MRM. Ačkoliv v kvantitativním měřítu LC MS/MS předčilo ambientní hmotnostní spektrometrii, výsledky kvalitativní analýzy obou technik byly ve velmi dobré shodě. Z celkového počtu 238 vyhodnocovaných dvojic vzorek-analyt byla pozorována 94,4 % shoda. To poukazuje na možné použití ambientních technik pro semikvantitativní screening potravinových doplňků na přítomnost nelegálních látek s anabolickým účinkem.



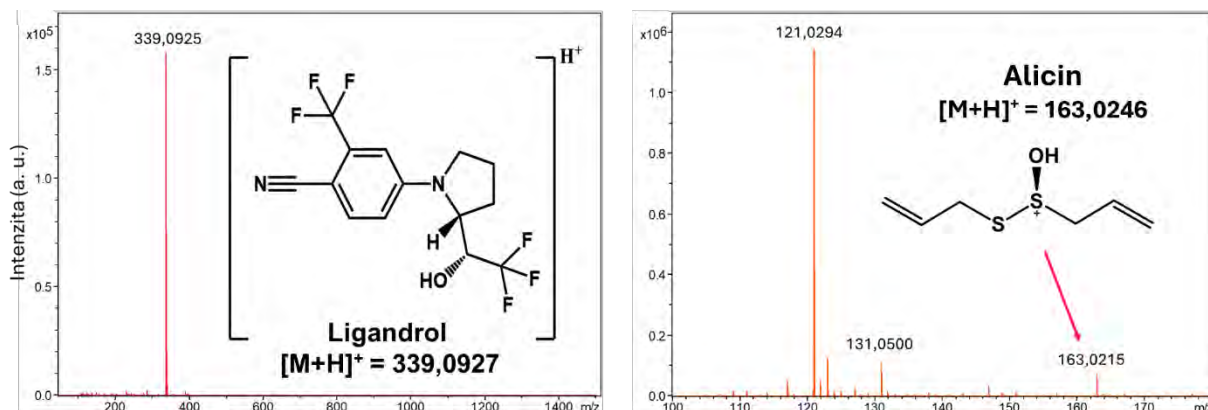
Obrázek 1. Výběr analyzovaných tablet a tobolek s jejich obaly.

V rámci práce byl také sestaven laboratorní prototyp vlastního ambientního iontového zdroje na bázi desorpční fotoionizace za atmosférického tlaku (DAPPI, *Desorption Atmospheric Pressure PhotoIonization*). Tento iontový zdroj sestával z dvou hlavních komponent: nebulizéru (elektrosprejové jehly) a VUV lampy (Obrázek 2). Základem opěrné konstrukce byla stavebnice značky Merkur.



Obrázek 2. Schéma (vlevo) a fotografie (vpravo) laboratorní konstrukce ambientního iontového zdroje typu DAPPI.

Funkce iontového zdroje byla ověřena na pevném vzorku naftalenu a kanabidiolu (CBD), plynném vzorku alicinu (antibakteriální látky zodpovědná za charakteristické aroma česneku) a nakonec byl použit k analýze kalibračního roztoku jednoho ze zástupců SARM – ligandrolu (Obrázek 3). Pro tyto experimenty byl iontový zdroj připevněn na hmotnostní spektrometr s vysokým rozlišením Bruker Impact II typu kvadrupól-analyzátor doby letu (QTOF, *Quadrupole Time-Of-Flight*).



Obrázek 3. Hmotnostní spektra ligandrolu a alicinu změřená na hmotnostním spektrometru s vlastním iontovým zdrojem typu DAPPI.

Predikce molekul z vícestupňové hmotnostní spektrometrie pomocí grafových neuronových sítí a AI modelu DreaMS

Mgr. Filip Jozefov

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

Skupina Tomáše Pluskala

E-mail: filip.jozefov@uochb.cas.cz

Diplomová práce obhájena na Fakultě informatiky Masarykovy univerzity

Metabolomika je vědní disciplína zaměřená na identifikaci a kvantifikaci malých molekul, které řídí biologické systémy. Přesto zůstává značná část těchto molekul dosud neznámá. Hlavní technologií pro strukturální identifikaci metabolitů ve velkém měřítku je tandemová hmotnostní spektrometrie (MS2). Interpretace jejich spekter je však často nejednoznačná a neúplná, a proto většina dat zůstává bez anotace, tzv. *dark metabolome* tak zůstává z velké části neprozkoumaný. I když strojové učení v posledních letech významně pokročilo, současné modely obvykle pracují pouze s jedním stupněm fragmentace (MS2), což omezuje jejich schopnost zachytit detailnější informace o molekulární struktuře.

V této práci navrhujeme nový směr: využití vícestupňových fragmentačních dat (*multi-stage MSn*), při nichž dochází k postupnému štěpení již fragmentovaných molekul. Tento přístup umožňuje získat detailnější pohled na molekulární strukturu a tím zpřesnit anotaci. Na rozdíl od konvenční hmotnostní spektrometrie, která molekulu fragmentuje pouze jednou (MS2), metoda MSn fragmentuje produkty předchozích štěpení, čímž vytváří hierarchický fragmentační strom namísto jednoho spektra. Klíčové je, že MSn je plně kompatibilní se stávajícími MS2 pracovními postupy, rozšiřuje je, nikoli nahrazuje. V minulosti se MSn data využívala jen výjimečně kvůli složitosti akvizice a veřejné knihovny hmotnostních spekter prakticky neobsahovaly data nad rámec MS2 (Brungs C. et al., *Nat. Methods* 2025).

Za účelem prozkoumání tohoto přístupu jsme vyvinuli první neuronové modely trénované přímo na MSn spektrech. Tyto modely kombinují pokročilé grafové neuronové sítě a velký AI model pro hmotnostní spektrometrii DreaMS (Bushuiev R. et al., *Nat. Biotechnol.* 2025). Modely jsme otestovali ve dvou klíčových úlohách: (1) zpětné vyhledávání molekulární struktury z množiny kandidátů a (2) *de novo* generování struktury.

Naše výsledky ukazují, že vícestupňová fragmentace zvyšuje přesnost vyhledávání až desetkrát oproti konvenčním MS2 metodám. Navíc hlubší úrovně MSn poskytují výrazně bohatší a informativnější reprezentace hmotnostních spekter, což potvrzuje analýza pomocí *centered kernel alignment* (Kornblith S. et al., *ICML* 2019).

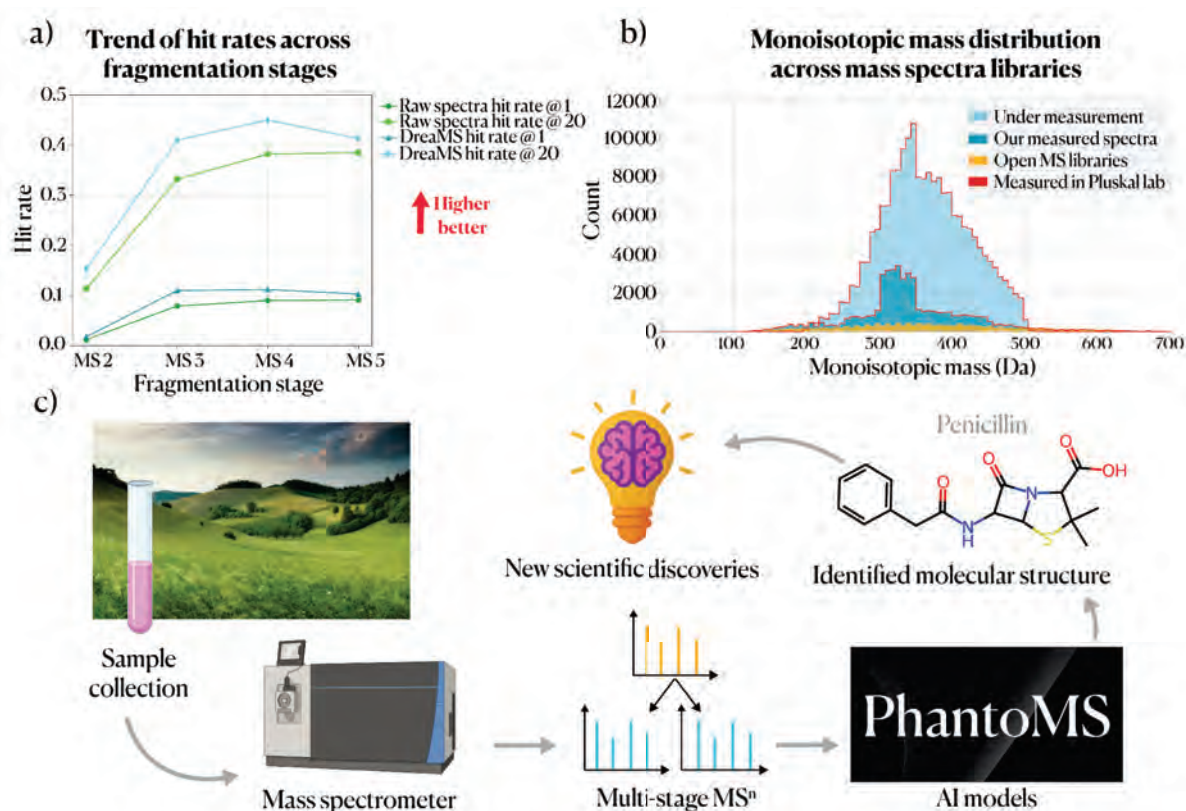
Pro podporu dalšího výzkumu a srovnatelnosti metod jsme vytvořili MassSpecGymMSn, první otevřený *benchmark* pro molekulární anotaci založenou na MSn datech. Tento *benchmark* poskytuje jednotný rámec pro férové a reprodukovatelné porovnávání různých přístupů a zahrnuje 16 476 fragmentačních stromů (až do úrovně MS5) a více než dva miliony anotovaných hmotnostních spekter, včetně nástrojů pro předzpracování.

Tato práce již byla prezentována na několika mezinárodních konferencích, včetně ICMB/ECCB 2025 (Liverpool, UK), kde získala cestovní grant, a konference Metabolomics

Society 2025 (Praha). Autor rovněž přednesl přednášku na EPFL Summer School (Lausanne, Švýcarsko).

Projekt byl dále podpořen grantem MISTI, který umožnil pokračování spolupráce v laboratoři Dr. Connora Coleyho na MIT. Získal rovněž doktorandské stipendium a *fellowship* od společnosti Enveda Therapeutics (Boulder, USA).

V současnosti rozšiřujeme naši datovou sadu více než pětinašobně a aplikujeme vyvinuté modely na reálné případové studie. Tyto aktivity představují klíčový krok v našem úsilí, které ve spolupráci s mezinárodními partnery směřuje k rozšíření dosahu a dopadu výzkumu. Naše práce tak posouvá hranice moderní metabolomiky založené na datech a umělé inteligenci a má potenciál urychlit vývoj léčiv, objasnit biosyntetické dráhy a podpořit pokrok v diagnostice.



Obr. 1. (a) Úspěšnost modelu napříč stupni fragmentace. Graf ukazuje, jak se přesnost modelu zlepšuje při trénování na hlubších fragmentačních stromech. Nejlepších výsledků je dosaženo při použití AI modelu DreaMS pro reprezentaci hmotnostních spekter a dat až do úrovně MS4, kdy *top-20 hit rate* dosahuje 45 %, což představuje přibližně čtyřnásobné zlepšení oproti modelu trénovanému pouze na MS2. (b) Rozložení monoisotopických hmot napříč spektrálními knihovnami. Žlutá část histogramu představuje veřejně dostupné molekuly, tmavě modrá část molekuly přidané v rámci této práce a světle modrá oblast molekuly aktuálně měřené. Červený obrys zvýrazňuje sloučeniny naměřené ve skupině Tomáše Pluskala na ÚOCHB. (c) Začlenění vyvinutých nástrojů do výzkumného procesu. Schéma ukazuje, jak nástroje vyvinuté v rámci této práce přispívají k vědeckým objevům. AI model PhantoMS zpracovává MSⁿ data a predikuje nejpravděpodobnější molekulární struktury, které lze následně experimentálně ověřit při identifikaci bioaktivních sloučenin.

Začlenění stříbrných nanostruktur do kapilárního prostředí pro detekci povrchem zesílenou Ramanovou spektrometrií

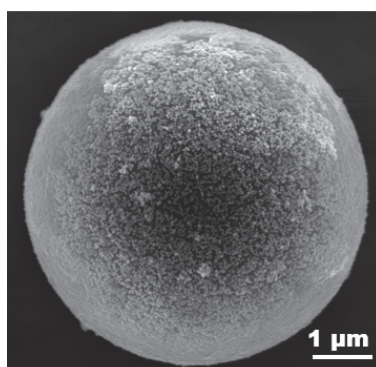
Mgr. Lucie Březinová

Ústav analytické chemie AV ČR, v. v. i.,
Oddělení bioanalytické instrumentace, pracoviště Brno
E-mail: *brezinova@iach.cz*

Diplomová práce obhájena na Ústavu Chemie Přírodovědecké fakulty Masarykovy univerzity v Brně

Povrchem zesílená Ramanova spektrometrie (SERS) představuje citlivou vibrační metodu umožňující detekci stopových koncentrací analytů. Její princip spočívá ve výrazném zesílení Ramanova rozptylu v blízkosti kovových nanostruktur, nejčastěji stříbra či zlata, na jejichž povrchu vznikají lokalizované povrchové plasmony. Ačkoliv byly publikovány práce, v nichž se pomocí SERS podařilo detekovat i jednotlivé molekuly, praktické využití této metody je nadále limitováno časově náročnou přípravou vzorků a složitou interpretací často velmi komplexních spekter. Tyto faktory snižují reprodukovatelnost a omezují možnosti automatizace měření. Řešením může být integrace SERS do mikrofluidních systémů, které by umožnily automatické smíchání vzorku se SERS substrátem a následnou detekci přímo v toku. Cílem této práce bylo vyvinout modelový mikrofluidický systém, v němž jsou stříbrné nanostrukтуры imobilizovány na mikročásticích ovlivnitelných akustickými silami, a následně ověřit jejich použitelnost pro průtokovou SERS detekci.

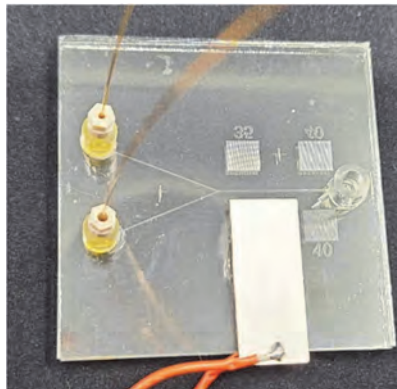
Stříbrné nanostrukтуры byly na povrch polystyrenových mikročástic imobilizovány chemickou redukcí dusičnanu stříbrného hydroxylaminem hydrochloridem v alkalickém prostředí. Optimalizovány byly parametry syntézy – koncentrace prekursoru, pH reakční směsi, poměr částic a rychlost přidavku reagensů – tak, aby bylo dosaženo homogenního pokrytí a vysoké stability výsledných kompozitních částic. Morfologie a povrchová struktura byly charakterizovány pomocí skenovací elektronovou mikroskopií (SEM), která potvrdila vznik vrstvy nanostruktur o velikosti přibližně 30–80 nm.



Obr.1. SEM snímek polystyrenové kuličky pokryté stříbrnými nanočásticemi

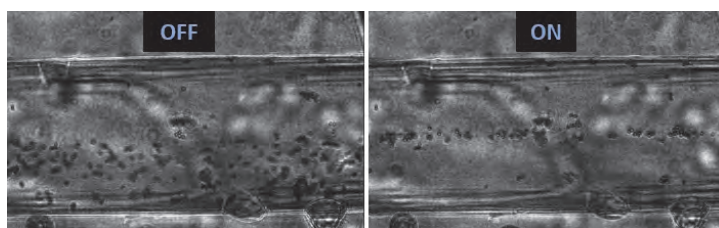
Následně byly částice zavedeny do kapilárního prostředí, kde byl sledován jejich pohyb v toku. U použité kapiláry byl připojen piezoelektrický krystal, který generoval stojaté ultrazvukové vlny umožňující manipulaci s částicemi pomocí akustické radiační síly. Tímto způsobem bylo dosaženo jejich fokusace do tlakových uzlů a lokálního zakoncentrování v detekční oblasti, což umožnilo stabilní měření SERS signálu i v průtokovém režimu.

Značná část práce se také zabývá přípravou skleněných mikrofluidických čipů. Ty byly připraveny fotolitografickou metodou na skleněných sklíčkách s naprášenými vrstvami chromu a zlata, na které se nanese fotorezist. Díky osvětlení světlocitlivé vrstvy připraveného designu laserem, byla vytvořena maska, která chránila části čipu před leptadlem. Po leptání a odstranění masky byly skleněné vrstvy tepelně spojeny, čímž vznikl uzavřený čip.



Obr.2. Finální podoba připraveného mikrofluidického čipu

Mikrofluidický čip byl navržen pro jednoduché míchání roztoku vzorku s připravenými postříbřenými polystyrenovými kuličkami. Ty byly do čipu vpravovány a sledovány při průtoku, přičemž byly optimalizovány průtokové rychlosti. Následně byl také na mikrofluidický čip nalepen piezoelektrický krystal, pomocí něhož byla použita akustofluidická manipulace k fokusaci kuliček do jednoho toku.



Obr.2. Fotografie toku kuliček bez a s použitím ultrazvukových vln

Pro ověření funkčnosti systému byla provedena SERS detekce malachitové zeleně jako modelového barviva. Spektra byla zaznamenávána na Ramanově spektrometru s excitační vlnovou délkou 532 nm. Získaná SERS spektra vykazovala charakteristické vibrační pásy malachitové zeleně při 1180, 1374 a 1622 cm^{-1} a prokázala výrazné zesílení intenzity signálu oproti měření bez připravených substrátů.

Výsledky této práce představují první experimentální krok k vývoji průtokové kyvety se SERS detekcí. Navržený koncept propojuje vysokou citlivost SERS s precizní kontrolou toku substrátu v mikrofluidických systémech. Takto vytvořená platforma může být v budoucnu integrována se separačními metodami, čímž by vznikl komplexní analytický systém umožňující citlivou, selektivní a plně automatizovanou detekci látek v reálném čase.

Competition for the Best Work of Young Authors in the Field of Spectroscopy – Category of Published Works and Their Collections

Dr. rer. nat. Marius Constantin Chirita Mihaila

Department of Chemical Physics and Optics, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, Prague, Czech Republic.
E-mail: marius.chirita@matfyz.cuni.cz

List of Submitted Works:

1. Chirita Mihaila, M.C., Koutenský, P., Moriová, K. and Kozák M. Light-based electron aberration corrector. *Nat. Photon.* (2025). <https://doi.org/10.1038/s41566-025-01760-8>.
2. Chirita Mihaila, M.C., Laštovičková Streshkova, N., and Kozák, M. (2025). Light-Based Chromatic Aberration Correction of Ultrafast Electron Microscopes. *Physical Review Letters*, 134(20), 203802.
3. Chirita Mihaila, M. C., and Kozák, M. (2025). Design for light-based spherical aberration correction of ultrafast electron microscopes. *Optics Express*, 33(1), 758-775.

Summary

Recent advances in ultrafast electron microscopy have opened a new regime for time-resolved electron spectroscopy, where the phase and energy of free-electron wavepackets can be controlled with femtosecond lasers. However, achieving true spectroscopic resolution in both space and time has been fundamentally constrained by electron-optical aberrations, particularly spherical and chromatic aberration, and by the intrinsic energy spread of the electron source, all of which distort the probe wavefront, degrade energy resolution, and limit quantitative spectroscopic analysis.

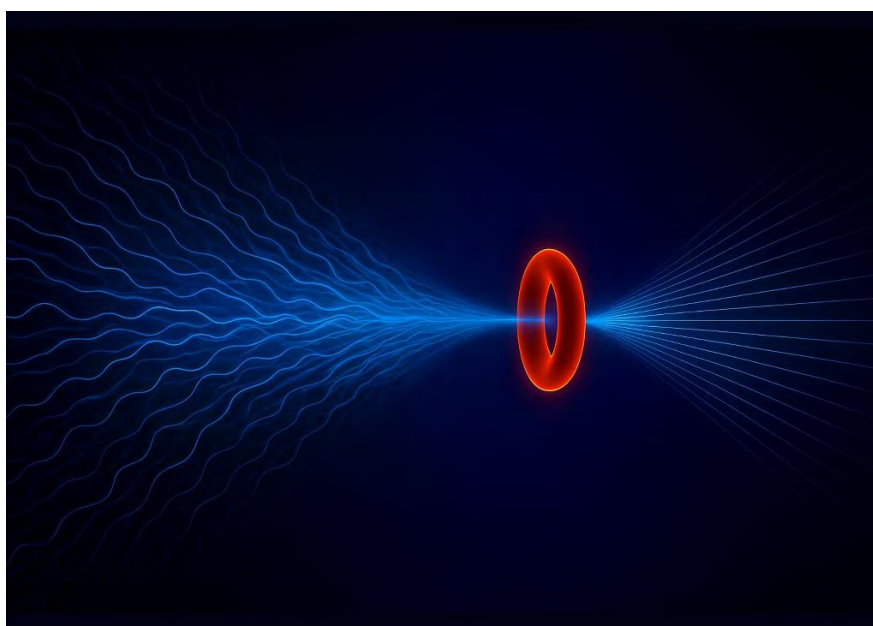


Figure1| Graphical visualization of light-based (red) aberration correction of electrons (blue).

The submitted collection of works presents a comprehensive experimental and theoretical framework for light-based aberration correction in electron beams using structured optical fields. Together, these studies establish a new approach in which laser–electron interaction adaptively shapes the electron wavefront and energy distribution. In the first paper (Nature Photonics, 2025), we experimentally demonstrate the correction of third-order spherical aberration in a cylindrically symmetric electron lens through interaction of electrons with a tailored Laguerre–Gaussian optical field. This optical field acts as a light-based electron aberration corrector that compensates the intrinsic positive spherical aberration of electromagnetic lenses, reducing the aberration coefficient from approximately 2.5 m to near zero. The second paper (Physical Review Letters, 2025) extends the concept to chromatic aberration correction, showing that an optical field can also compensate for aberration caused by the energy dispersion in an electron pulse. This approach paves the way for light-assisted, lossless monochromatization of the electron beam, producing narrowband and phase-stable electron pulses ideally suited for high-resolution electron energy-loss spectroscopy and photon-induced near-field electron microscopy. The third paper (Optics Express, 2025) provides the theoretical design and modelling framework for integrating such light-based correctors into next-generation ultrafast electron spectroscopic instruments, demonstrating that optical-field correction can be implemented compactly and dynamically within standard electron columns near the electron cross-over.

Light-based corrected electron beams exhibit enhanced spatial and temporal (energy) coherence, maintaining a well-defined phase relationship across the beam spectrum and enabling high-fidelity spectroscopic measurements. The demonstrated correction of spherical and chromatic aberrations represents a crucial step toward full optical control of electron beams. In particular, the light–electron coupling shown in the second paper (Physical Review Letters, 2025) offers the conceptual basis for light-assisted monochromatization, in which the electron energy spread could be dynamically reduced without any loss. Although this process remains to be experimentally validated, the present results show that light-based aberration correction provide a viable route toward next-generation, quantitatively precise, high-resolution spectroscopy of materials, nanostructures, and ultrafast dynamic processes.

Acoustic spectroscopy of laser-induced plasma

Mgr. Markéta Bosáková, Ph.D.

Ústav analytické chemie MU, Brno, Česká Republika
UMA LASERLAB, Málaga, Španělsko
E-mail: makibo@seznam.cz

Seznam soutěžních prací:

1. **BOSÁKOVÁ, Markéta**, Pablo PUROHIT, Cesar ALVAREZ-LLAMAS, Javier MOROS, Karel NOVOTNÝ and Javier LASERNA. A systematic evaluation on the impact of sample-related and environmental factors in the analytical performance of acoustic emission from laser-induced plasmas. *Analytica Chimica Acta*. Elsevier, 2022, roč. 1225, September, s. 1-9. ISSN 0003-2670.
<https://dx.doi.org/10.1016/j.aca.2022.340224>.

2. **BOSÁKOVÁ, Markéta**, Javier MOROS, Pablo PUROHIT, Cesar ALVAREZ-LLAMAS and Javier LASERNA. Chemical and Acoustical Mixed-Mapping of Geological Materials from Laser-Induced Plasmas: A Comprehensive Approach to Differentiate Mineral Phases. *Anal Chem* 96 (2024) 17444–17452.
<https://doi.org/10.1021/acs.analchem.4c05214>

3. **BOSÁKOVÁ, Markéta**; NOVOTNÝ, Karel; MOROS, Javier and LASERNA, Javier. Acoustic signal in overcoming the matrix effect in LIBS: Toward reliable applicability. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*. 2025, 226. ISSN 05848547. <https://doi.org/10.1016/j.sab.2025.107140>

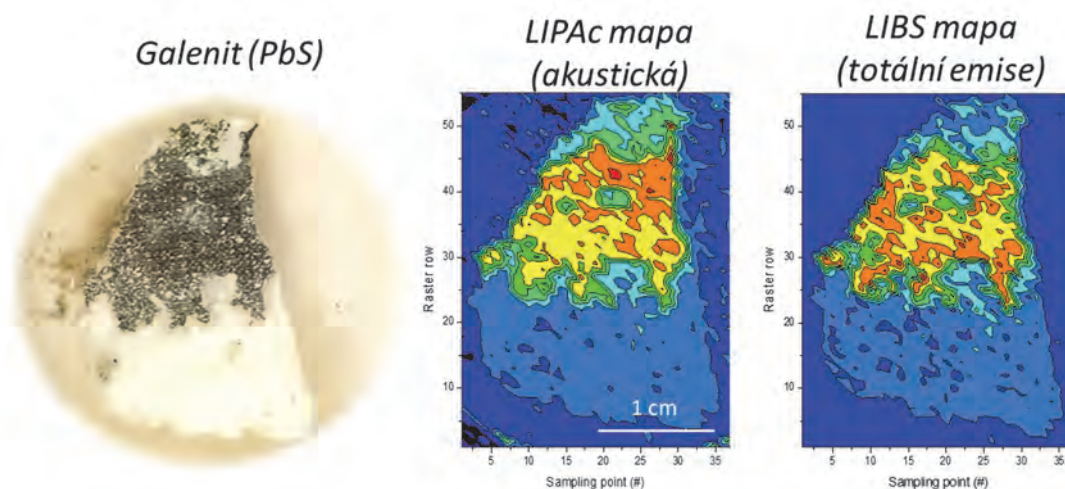
4. **BOSÁKOVÁ, Markéta**; MOROS, Javier; Vadillo, José Miguel; NOVOTNÝ, Karel; and LASERNA, Javier. Surveying the acoustics from laser-induced plasmas under non-standard atmospheric conditions: Implications for extraterrestrial missions. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*. 2025, vol. 234, s. 107320. ISSN 0584-8547. <https://doi.org/10.1016/j.sab.2025.107320>

Soubor článků představuje novou strategii ve využití akustického signálu u spektroskopie laserem buzeného plazmatu. Během posledních let se klade čím dál větší důraz na kombinaci různých metod s ohledem na zlepšení kvalitativních i kvantitativních analýz s ohledem na rychlost analýzy i spotřebu vzorku, případně jeho úpravu. Jedna z možných kombinací je právě využití akustického signálu vznikajícího při interakci mezi vzorkem laserovým pulsem, kterou aktivně využívá rover Perseverance na Marsu v rámci mise Mars 2020. Výše zmíněné a na sebe navazující články objasňují několik akusticko-spektroskopických jevů, které pokládají nové, a hlavně systematické vědecké základy pro finální komplementaritu těchto metod.

První článek vysvětluje vliv fyzikálně-chemických vlastností vzorků na akustický a emisní signál a mimo jiné zohledňuje i vliv pozice akustického přijímače, v našem případě komerčně dostupného kondenzátorového mikrofonu.

Druhý článek se zabývá využitím těchto znalostí do praxe, se zaměřením zejména na oblast geologie, s důrazem na chemické akusticko-emisní mapování. Bylo dokázáno, že akustický

signál poskytuje velmi kvalitní a přesné distribuční mapy s ohledem na složení vzorku, komplementární právě s chemickými mapami získanými z emisních spekter.



Ukázka akusticko-emisního mapování galenitu (fotka vzorku po analýze; LIPAc mapa = akustická mapa; LIBS mapa = mapa totální emise)

Třetí článek je zaměřen na studium vlivu instrumentace na akusticko-emisní analýzu, ve které byl zkoumán vliv vlnové délky excitačního zdroje a různé typy mikrofonů s důrazem na MEMS mikrofony (mikro-elektro-mechanické systémy) vyznačující se dobrou kompaktností, odolností, malou velikostí a širokým výběrem dle požadovaných akusticko-mechanických vlastností. Článek je rozšířen i o akusticko-emisní analýzu nano a mikro vrstev, v níž akustický signál poskytoval téměř stejné výsledky, jako emisní signál.

Poslední, čtvrtý článek této systematické studie je zaměřen na studium vlivu změny atmosférických podmínek, s hlavním zájmem napodobit atmosférické podmínky panující na Marsu, přibližující se reálným podmínkám, v nichž analyzuje právě rover Perseverance. Jedná se zejména o sledování změn způsobených kolísáním teploty (-40 až 20°C), změny v tlaku okolního plynu (v našem případě $1 - 30$ mbar CO_2) a změnou složení okolní atmosféry.

Všechny čtyři články představují první systematickou akusticko-emisní studii svého druhu a poskytují cenné poznatky pro budoucí využití LIBS-LIPAc (Laser-Induced Plasma Acoustic) metody v reálných výzkumech a nehostinných podmínkách.

Povrchem zesílená Ramanova spektroskopie snadno a spolehlivě

Mgr. et Mgr. Vít Pavelka, Ph.D.

Ústav analytické chemie AV ČR, v. v. i.,
Oddělení bioanalytické instrumentace
E-mail: pavelka@iach.cz

Seznam soutěžních prací:

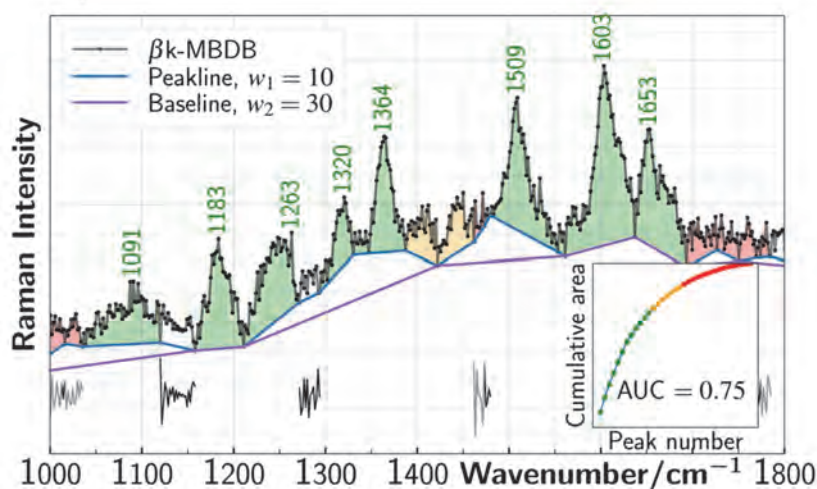
1. Pavelka, V.; Dvořák, J.; Čupera, J.; Hemzal, D.; Hrbáč, J.
Fabrication of SERS Substrates by 3D-Positioned Spark Discharges: Advanced Performance Refinement Using Raman Mapping of Adenine and Its Derivatives
J. Raman Spectrosc. **2025**, 56 (9), 850-859.

2. Pavelka, V.; Hemzal, D.; Hrbáč, J.
Complex evaluation of Raman spectra using morphological filtering: Algorithms, software implementation, and experimental verification of baseline correction, peak recognition, and cosmic ray removal in SERS of designer drugs
J. Raman Spectrosc. **2022**, 53 (12), 2100-2109.

Souhrn:

Předložené práce zahrnují dvě strany téhož: jak spolehlivě **zpracovat Ramanova/SERS data**, a jak mít **cenově dostupné a spolehlivé SERS substráty**.

Ve **starší práci** představuji jednoduchý, ale účinný způsob zpracování SERS/Ramanových spekter založený na **morfologických operátorech**. V jednom běhu zvládne **odečtení pozadí** i **rozlišení signálů** – a to **bez nutnosti dohledu uživatele**. Klíčové je dvouprůchodové schéma: nejprve jsou spočteny linie signálů a základní linie a poté zpřesněny jejich hranice (pomocí tzv. kontaktních bodů). Výhodou je rychlost a spolehlivost i pro velké datové sady, např. mapy nebo časové řady. Metodu jsme demonstrovali pomocí spekter vybraných syntetických drog, kde vedla i ke spolehlivějším shodám s databází.



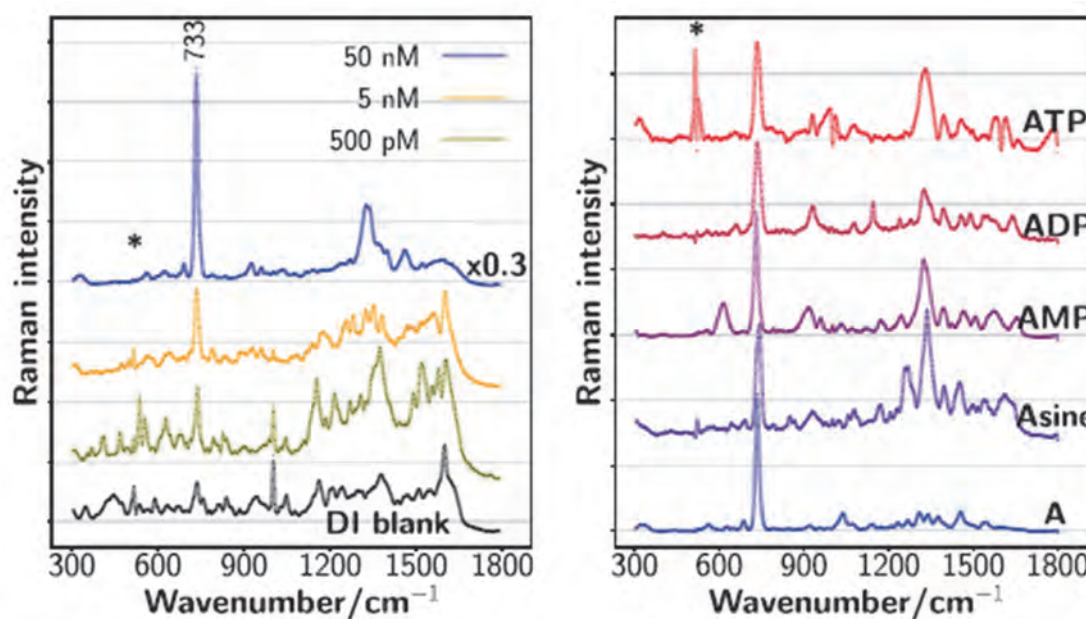
Obrázek 1: Morfologické filtrování jako dvojí klasifikátor: Demonstrace celkového zpracování SERS otisků prstů β k-MBDB jako syntetické drogy za využití linie signálů (w_1) a základní linie (w_2). Vložený obrázek ukazuje normalizovanou ROC křivku spektra, která je

barevně kódované dle dvou nastavitelných parametrů. Pro přijaté signály jsou vyznačené polohy maxim. Spodní čáry zobrazují jednobodové rozdílové spektrum v intervalech vyhodnocených jako pozadí (černých) a zavržených signálů (šedých).

Novější práce popisuje **přímou přípravu SERS substrátů jiskrovými výboji pomocí 3D pozicionéru**. Metoda je levná a obejde se bez chemických postupů přípravy: vysokonapěťový výboj mezi stříbrným hrotem a vodivým substrátem „natiskne“ vrstvu nanostruktur. Takto připravené substráty byly charakterizovány (mikroskopií v tmavém poli, elektronovou mikroskopií, UV-VIS spektroskopií a cyklickou voltametrií) a výsledné zesílení optimalizováno pomocí mapování Ramanových spekter adeninu (~16k spekter na jedno měření). Pro vyhodnocení byly použity dvě veličiny:

- **Ramanova odezva** – plocha dominantního signálu adeninu ($\sim 733\text{ cm}^{-1}$)
- **Pokrytí aktivními místy** – Podíl spekter s detekovatelným signálem adeninu

Tento postup umožnil vybrat vhodné parametry jiskření a **posunout citlivost k velmi nízkým koncentracím** (10^{-11} M adeninu). Na optimalizovaných podložkách byla pak naměřena a rozlišena i spektra několika **derivátů adeninu**, což demonstruje jejich kvalitativní využitelnost.



Obrázek 2: Detekce adeninu a jeho derivátů: Spektra nízkých koncentrací adeninu po automatickém odečtení pozadí (nalevo) a vybrané deriváty adeninu měřené při koncentraci $2\text{ }\mu\text{M}$ (napravo); hvězdička označuje polohu pozůstatku křemíkového signálu.

Oba popsané postupy (automatické zpracování spekter i tvorba substrátů) jsou **replikovatelné**, finančně i technicky **dostupné** a vhodné pro laboratoře, které potřebují provádět vysoké množství SERS experimentů za rozumnou cenu a s adekvátním lidským úsilím při zpracování statisíců spekter.

We cordially invite you to the joint meeting of Czech-Slovak Spectroscopic Conference and Mössbauer Spectroscopy in Material Sciences

Topics of the meeting:

- Atomic spectrometry → AAS, ICP-MS/OES, AFS,...
- Molecular spectroscopy → UV-Vis, IR, Raman, luminescence, NMR,...
- XRF spectrometry → EDS, WDS, XRF, PIXE, ...
- Mass spectrometry → GC-MS, ESI-MS, MALDI, DESI-MS, LC-MS,...
- Mössbauer spectroscopy
- Radio-analytical methods
- Applications in geology, environment, biology, medicine, ...



cssc2026.spektroskopie.cz

SEPTEMBER 14-18 — OLOMOUC, CZECH REPUBLIC



27. ŠKOLA HMOTNOSTNÍ SPEKTROMETRIE

Wellness Hotel Frymburk

Odborný program, krátké kurzy
a bohatý společenský program

skolams2026.spektroskopie.cz



21.-25. září 2026





Thermo Scientific™ Hypulse™

Systém pro analýzu povrchu a hloubkového profilování

Hloubkové profilování bez chemického poškození

Femtosekundový laser umožňuje kontrolované odstraňování vrstev bez změny chemického stavu

Rychlé XPS s vysokou citlivostí

Krátké doby odčerpávání · Unikátní prohlížení vzorku · Vysoká kvalita dat

Rozšířené spektroskopické techniky

ISS · REELS · UV fotoelektronová spektroskopie

Soudobé XPS přístroje používají k odstraňování jednotlivých vrstev paprsky monoatomických iontů nebo klastry iontů s vysokou energií. Tento proces je však primárně balistický proces a rozdíl v hmotnosti jednotlivých komponent dané vrstvy pak vede k rychlejšímu odstraňování lehčích komponent a nerovnoměrnosti.

Dále dochází k lokálnímu ohřevu a preferenčně jsou odstraňovány komponenty s nižší sublimační teplotou ve vakuu, než komponenty ostatní. Hypulse však využívá k ablaci velmi rychlý femtosekundový laser a díky tomu nemá výše uvedené nevýhody. Navíc se jedná o zkrácení efektivního času pro odstranění jednotlivé vrstvy a tím i výrazné zkrácení celého procesu profilování.



Nové možnosti v analýze stopových množství těkavých organických sloučenin a anorganických plynů - simultánní kvalitativní a kvantitativní v reálném čase

Přístroje SYFT nacházejí využití:

- v online monitorování životního a pracovního prostředí (například v polovodičovém nebo automobilovém průmyslu) – a to ve stacionárních i mobilních podmínkách
- v identifikaci a kvantifikaci kontaminantů ve spotřebním zboží a farmaceutických produktech
- v rychlém sledování těkavých látek v surovinách a produktech v potravinářském průmyslu

Bude na našem stánku
2. - 4. 6. 2026
PVA EXPO
Praha

 **LABOREXPO**
 **PROCESXPO**





REGISTRACE NA ŠKOLENÍ FTIR, NIR, RAMAN A SOFTWARE OPUS SPUŠTĚNA

8. a 9. dubna 2026

Teorie, workshopy i reálná práce
s daty během dvou dnů v Brně.

NOVÁ GENERACE VAKUOVÉ SPEKTROMETRIE

VERTEX NEO ULTRA





Certifikované Referenční Materiály



Pro stanovení celkového organického (TOC) a anorganického (TIC) uhlíku

- vstupní suroviny Na_2CO_3 , NaHCO_3

Pro stanovení celkového dusíku

- vstupní suroviny KNO_3 , NH_4Cl
nebo $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$

Využití

- analýza uhlíku a dusíku v pohonných hmotách
- stanovení organických složek v olejích
- hodnocení úrovně znečištění vod a půd
- aplikace ve zdravotnictví a farmaceutickém průmyslu
- analýzy v potravinářství



Ostatní referenční materiály

- CRM i RM pro AAS, ICP-OES, ICP-MS, IC
- CRM pro měření elektrické konduktivity
- CRM i RM pro měření pH
- CRM pro měření celkového anorganického dusíku
- standardy vyrobené dle požadavků zákazníka
- matricové referenční materiály



Minerální kyseliny a jiné reagensy

- čisté chemikálie
- vysoce čisté chemikálie pro stopovou analýzu (nečistoty < 1 ppb)
- ultračisté chemikálie pro ultrastopovou analýzu (nečistoty < 0,01 ppb)
- BLANK roztoky vysoce čistých kyselin
- dávkovač pro přesné dákování ultračistých chemikálií

Více na našem e-shopu www.analytika.net

ANALYTIKA®, spol. s r.o., Oddělení referenčních materiálů, výrobce RM č. 7501,
akreditovaný ČIA podle ČSN EN ISO 17034:2017

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: 16. 2. 2026

uzávěrka příštího čísla: 15. 6. 2026