

## Program 9. ročníku Školy hmotnostní spektrometrie

### Téma: Intepretace hmotnostních spekter

pořádané Katedrou analytické chemie Univerzity Pardubice a Spektroskopickou společností J.M.M.

(datum aktualizace 17. září 2008)

#### Pondělí 22.9.2008

11:00-13:00 *Příjezd účastníků, registrace, instalace stánků firem, oběd*

##### Sekce 1 (předsedající M. Holčapek, J. Preisler)

13:00-13:10 Zahájení (M. Holčapek)

13:10-14:00 Po1: Co je to hmotnostní spektrum a jak vzniká (M. Polášek)

14:00-14:40 Po2: Základní pravidla intepretace hmotnostních spekter (V. Havlíček)

14:40-15:20 Po3: Mechanizmy fragmentačních reakcí organických iontů (M. Polášek)

15:20-16:00 Po4: Volba ionizační techniky a jejich vliv na spektra (K. Lemr)

16:00-16:30 *Přestávka na kávu*

##### Sekce 2 (předsedající P. Halada, J. Havliš)

16:30-17:10 Po5: Vliv funkčních skupin na fragmentační chování (M. Holčapek)

17:10-17:50 Po6: Typy skenů a jejich praktické využití (J. Preisler)

17:50-18:30 Po7: Vysoké rozlišení a vysoká přesnost určení hmoty (V. Havlíček)

##### Společenský večer firmy Bruker Daltonics

19:00-19:30 Po8: Prezentace Bruker Daltonics (A. Ingendoh)

19:30-??? Bruker - beatový seznamovací večírek s milým překvapením

#### Úterý 23.9.2008

##### Sekce 3

8:30-10:00 Ut1: Cvičení interpretace EI spekter (A/ M. Polášek, B/ I. Víden, C/ K. Ubik)

10:00-10:30 *Přestávka na kávu*

10:30-12:00 Ut2: Cvičení interpretace EI spekter (B/ M. Polášek, C/ I. Víden, A/ K. Ubik)

12:00-13:30 *Oběd*

##### Sekce 4 (předsedající K. Lemr, J. Cvačka)

13:30-14:10 Ut3: Počítačová intepretace hmotnostních spekter (R. Mistrík)

14:10-14:50 Ut4: Význam chromatografických dat pro úspěšnou identifikaci látek (K. Lemr)

14:50-15:30 Ut5: Kvantitativní analýza v hmotnostní spektrometrii (J. Havliš)

15:30-16:00 *Přestávka na kávu*

16:00-17:30 Ut6: Cvičení interpretace EI spekter (C/ M. Polášek, A/ I. Víden, B/ K. Ubik)

17:30-18:00 Ut7: Studium metabolismu xenobiotik (M. Holčapek)

18:00-18:30 Ut8: Diskuzní klub (M. Ryska)

##### Společenský večer firmy Waters

19:00-19:30 Ut9: A New Dimension of Tandem Quadrupole Technology - XEVO TQ MS (M. Rietdorf)

19:30-??? Posezení s cimbálovou muzikou Primáš a rautovým občerstvením

## **Středa 24.9.2008**

### **Sekce 5 (předsedající P. Bednář)**

8:30-10:00 St1: Cvičení interpretace spekter měkkých ionizačních technik (A/ M. Holčapek, B/ K. Lemr, C/ J. Cvačka)

10:00-10:30 *Přestávka na kávu*

10:30-12:00 St2: Cvičení interpretace spekter měkkých ionizačních technik (B/ M. Holčapek, C/ K. Lemr, A/ J. Cvačka)

12:00-12:30 St3: Jaké nové techniky identifikace látek umožňuje velmi vysoké rozlišení, přesná hmota a měření isotopické obálky u FT-MS přístrojů (Orbitrap) (P. Verner)

12:30-14:00 *Oběd*

14:00-18:30 *Sportovní odpoledne (volejbal, fotbal, stolní tenis, bowling, petanque, atd.)*

### **Společenský večer firmy Thermo Scientific**

19:30-??? Večer s country skupinou K.O. a venkovním grilováním

## **Čtvrtek 25.9.2008**

### **Sekce 6 (předsedající M. Polášek, I. Víden)**

8:30-10:00 Ct1: Cvičení interpretace spekter měkkých ionizačních technik (C/ M. Holčapek, A/ K. Lemr, B/ J. Cvačka)

10:00-10:30 *Přestávka na kávu*

10:30-11:00 Ct2: Analýza lipidů (M. Lísa)

11:00-11:30 Ct3: Analýza flavonoidů (P. Bednář)

11:30-12:00 Ct4: Analýza organokovových sloučenin (R. Jirásko)

12:00-13:30 *Oběd*

### **Sekce 7 (předsedající K. Ubik, P. Novák)**

13:30-14:10 Ct5: Základy interpretace hmotnostních spekter v proteomice (P. Halada)

14:10-15:40 Ct6: Cvičení interpretace spekter v proteomice (A/ P. Halada, B/ J. Havliš, C/ P. Novák)

15:40-16:10 *Přestávka na kávu*

16:10-17:40 Ct7: Cvičení interpretace spekter v proteomice (B/ P. Halada, C/ J. Havliš, A/ P. Novák)

17:40-18:10 Ct8: Kalibrace hmotnostní stupnice (J. Preisler)

18:10-18:30 Ct9: Diskuzní klub (M. Ryska)

### **Společenský večer firmy Applied Biosystems**

19:00-19:45 Ct10: ProteinPilot<sup>TM</sup> Software and the Paragon<sup>TM</sup> Algorithm: A Next Generation Search Engine (D. Weidelich)

19:45-??? Večer se skupinou Tango a překvapením

## **Pátek 26.9.2008**

### **Sekce 8 (předsedající M. Ryska, V. Havlíček)**

8:30-10:00 Pa1: Cvičení interpretace spekter v proteomice (C/ P. Halada, A/ J. Havliš, B/ P. Novák)

10:00-10:30 *Přestávka na kávu*

10:30-11:10 Pa2: Vybrané aplikace ICP-MS ve spojení s laserovou ablací (V. Kanický)

11:10-11:50 Pa3: Derivatizace v hmotnostní spektrometrii (P. Šimek)

11:50-13:00 *Oběd*

### **Sekce 9 (předsedající V. Kanický, M. Holčapek)**

13:00-13:40 Pa4: Vývoj a konstrukce MALDI-TOF hmotnostního spektrometru (J. Preisler)

13:40-14:10 Pa5: Novinky v hmotnostní spektrometrii (V. Havlíček)

14:10-14:30 Zakončení odborné části školy, vyhodnocení soutěže v interpretace spekter a soutěže o nejlepší poster, předání osvědčení o jejím absolovování

## **Sobota 27.9.2008 a neděle 28.9.2008**

Možnost prodloužení ubytování až do neděle pro účastníky (včetně doprovázejících osob) za účelem turistiky, cykloturistiky a poznávání krás přírody Železných hor.

**Termín:** 22.9.- 28.9.2008

**Místo konání:** hotel Jezerka, Seč-Ústupy, tel. 469 676 327, <http://www.hotel-jezerka.cz>

**Organizace školy je podpořena následujícími firmami (v abecedním pořadí): 2Theta, Applied Biosystems, Bruker Daltonics, HPST, Pragolab, Shimadzu, Sigma-Aldrich, Thermo Scientific, Waters.**