



INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Propojení pracovišť v oblasti translační medicíny a medicínální chemie v ČR
reg. číslo: CZ.1.07/2.4.00/17.0015

Zpráva ze služební cesty

Institute: Ústav molekulární a translační medicíny

V termínu od 3. srpna – 3. listopadu 2013 jsem pod záštitou projektu TransMedChem absolvovala vědecko – výzkumnou stáž ve firmě Thermo Fisher Scientific (San José, CA) pod vedením YingYing Huang, Ph.D.

Po dobu stáže jsem se věnoval práci na testování „acquisition tool“ softwaru pro měření spektrálních stromů, které budou obsaženy v nové databázi mzCloud (www.mzCloud.org). Spektrální stromy jsou tvořeny souborem fragmentačních spekter měřených za použití různých fragmentačních technik (CID, HCD) a různých kolizních energií. Struktura stromu je rozdělena na n úrovní podle několikanásobné fragmentace MS_n a šířka stromů je dána počtem prekurzorů pro MS_n fragmentace. Třetí rozměr spektrálního stromu (hloubka) je dána počtem skenů měřených při různých kolizních energiích a typech fragmentace. Databáze mzCloud využívá i nově vytvořeného „Hi-res“ vyhledávacího algoritmu, který má nižší vyhledávací rozptyl a pro data měřená s přesnou hmotou (využití FT-ICR nebo Orbitrap hmotnostních spektrometrů) má mnohem menší pravděpodobnost falešně pozitivních výsledků. Ve spojení se spektrálními stromy se stává užitečným nástrojem pro identifikaci molekul. Pomocí tzv. „spectral subtree search“ funkce můžeme také lépe indentifikovat neznámé molekuly (tzv. „unknowns“). Pro zaplnění databáze spektrálními stromy bylo nutné vytvořit speciální program, který bude distribuován pouze přispěvatelům mzCloudu. Právě na vývoji tohoto programu jsem spolupracoval s programátory HighChemu (Bratislava, SK), kteří jsou zároveň hlavními autory databáze mzCloud.

Práce také obsahovala sestavení základního seznamu metabolitů pro výše zmíněnou databázi. Porovnávání databázových listů vyžadovalo vývoj porovnávacích skriptů v R Software. Pro optimalizaci parametrů jsem se zaměřil na teorii a principy CID, HCD a PQD fragmentačních metod používaných u strojů Thermo Fisher Scientific.

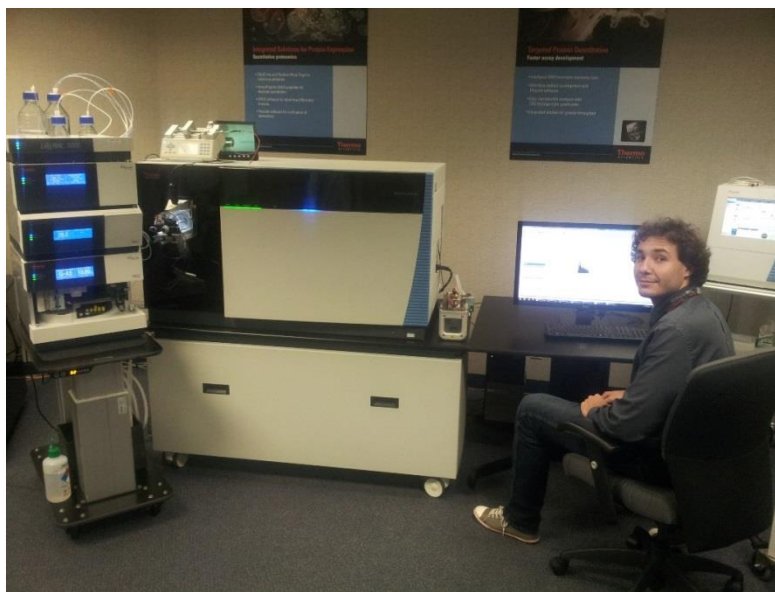
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Propojení pracovišť v oblasti translační medicíny a medicínální chemie v ČR
reg. číslo: CZ.1.07/2.4.00/17.0015

Fotka 1: Sídlo Thermo Fisher Scientific



Fotka 2: Demo laboratoř –
v pozadí Orbitrap Fusion
(uvedený na trh 06/2013)



Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Propojení pracovišť v oblasti translační medicíny a medicínální chemie v ČR
reg. číslo: CZ.1.07/2.4.00/17.0015

Fotka 3: Pohled na Silicon
Valley



Fotky 4: Metabolomická skupina
v Thermo Fisher Scientific (SJ,
CA) (vlevo dole vedoucí skupiny
Yingying Huang, Ph.D.)

