**Nová zobrazovací metoda biologických vzorků vyvinutá ve spolupráci ÚOCHB a Univerzity v Münsteru pomůže vědcům a lékařům rychleji identifikovat například rakovinné tkáně**

**7. 12. 2023**

**Vědci sdružení kolem mezinárodního projektu MZmine vedeného Dr. Robinem Schmidem a Dr. Tomášem Pluskalem z Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR nabídli světové vědecké komunitě software, který výrazně urychluje a zjednodušuje popis chemických látek v tkáních. Tento nástroj umožňuje badatelům molekuly s jistotou identifikovat i zobrazovat jejich přítomnost v orgánech. Nové algoritmy šetří čas strávený v laboratoři a zároveň zprostředkují podrobné informace o dějích například v nádorech nebo zánětech. Článek o nové metodě vyšel ve vlivném vědeckém časopise *Nature Communications*.**

Na vývoji softwaru SIMSEF (spatial ion mobility-scheduled exhaustive fragmentation) spolupracuje Robin Schmid z ÚOCHB s kolegy ze skupiny prof. Uweho Karsta z univerzity v německém Münsteru. Důležité je i zapojení vývojářů nejmodernějšího hmotnostního spektrometru TimsTOF fleX od společnosti Bruker Daltonics. Toto sofistikované zařízení umožňuje objasnit složení molekul pomocí měření pohyblivosti iontů na vysoké úrovni.

*„Až dosud mohli vědci pomocí hmotnostního spektrometru zjistit, jaký je chemický vzorec sledované molekuly, ovšem když se pak podívali do databáze a snažili se tuto látku identifikovat, bylo to velmi obtížné. Vzorek totiž může obsahovat velké množství různých lipidů a jejich kombinací, které se biologicky často značně liší. Teď je díky novému algoritmu možné nahlédnout do nitra molekuly, zjistit, z čeho se skládá, a dokonce porovnat obrázky mezi sebou,“* vysvětluje Robin Schmid. Tímto způsobem lze získat například i tak podstatnou informaci, že určitá část mozku obsahuje odlišný typ lipidu než jiná část tohoto orgánu. A taky, že se tento konkrétní lipid nevyskytuje v žádné jiné tkáni.

SIMSEF vznikl ve spolupráci s lékařskými odborníky z německých a švýcarských univerzit. Pro ně je důležité zejména to, že se urychluje detekování klinických biomarkerů pro diagnostiku. Dozvědět se velmi rychle například, zda mají co do činění s lipidem či metabolitem, který se nachází pouze v nádorové tkáni, hraje zásadní roli v rozhodování o další léčbě. A to do značné míry ovlivňuje její úspěšnost.

Nový algoritmus je součástí otevřeného softwaru MZmine, který od roku 2005 pomáhá odborníkům po celém světě analyzovat data z hmotnostní spektrometrie. Důležitým členem týmu MZmine a hlavním vývojářem algoritmů SIMSEF i prvním autorem článku právě publikovaného v časopise *Nature Communications* je Steffen Heuckeroth z Ústavu anorganické a analytické chemie na univerzitě v Münsteru. Dodává k tomu: „*Náš článek neobsahuje žádný konkrétní objev v oblasti biologie. Ovšem naše metoda, o které informujeme, pomůže mnoha vědcům zlepšit a urychlit jejich práci, což prostor pro nové objevy otevírá.“*

*„Podle mě je vždycky úžasné, když dalším lidem nejen umožníme vylepšovat pracovní podmínky pro jejich výzkum, ale taky o něm komunikovat s ostatními vědci. Díky zpětné vazbě ze strany vědecké komunity v MZmine se posouvají i samotné výsledky bádání,*“ doplňuje Robin Schmid z ÚOCHB.

*"O strojovém učení a umělé inteligenci dnes mluví všichni. Naši kolegové z týmu Tomáše Pluskala ji už využívají k řešení velmi specifických problémů ve výzkumu i klinické praxi,"* podotýká ředitel ÚOCHB, profesor Jan Konvalinka.

Třetí generace MZmine3, o níž na jaře 2023 informoval časopis *Nature Biotechnology*, dokáže zpracovat tisíce vzorků za hodinu. Nově vyvinuté algoritmy tohoto mezinárodního projektu dál rozšiřují jeho stávající možnosti, včetně kombinování dat z analytických a zobrazovacích metod, což dosud žádný akademický, ani komerční software neumožňoval.

**Původní článek:** Heuckeroth, S., Behrens, A., Wolf, C. et al. On-tissue dataset-dependent MALDI-TIMS-MS2 bioimaging. Nat Commun **14**, 7495 (2023). https://doi.org/10.1038/s41467-023-43298-9

**Ústav organické chemie a biochemie AV ČR / ÚOCHB** ([**www.uochb.cz**](http://www.uochb.cz)) je přední mezinárodně uznávaná vědecká instituce, jejímž hlavním posláním je základní výzkum v oblasti chemické biologie a medicinální chemie, organické a materiálové chemie, chemie přírodních látek, biochemie a molekulární biologie, fyzikální chemie, teoretické chemie a analytické chemie. Nedílnou součástí poslání ÚOCHB je přenos výsledků základního výzkumu do praxe. Důraz na mezioborové zaměření výzkumu ústí do řady aplikací v medicíně, farmacii a dalších odvětvích.

--- KONEC TISKOVÉ ZPRÁVY ---

**KONTAKT PRO NOVINÁŘE:**

Veronika Sedláčková (ÚOCHB – Komunikace): [veronika.sedlackova@uochb.cas.cz](mailto:veronika.sedlackova@uochb.cas.cz)

mob: +420 602 160 135