



7 Konferencja Polskiego Towarzystwa Spektrometrii Mas

Warszawa, 2-6 IX 2023

PROGRAM Szkolenia i Konferencji



POLSKIE TOWARZYSTWO
SPEKTROMETRII MAS



ANCHEM

SPEKTROMETRIA MAS I CHROMATOGRAFIA

ThermoFisher
SCIENTIFIC

Mass spectrometry

Rethink what is possible

Orbitrap Astral mass spectrometer

Science isn't limited by ideas but by the ability to realize them. That is the inspiration behind the novel technology of the Thermo Scientific™ Orbitrap™ Astral™ mass spectrometer: to redefine what is possible for discovery and translational research. Faster throughput, deeper coverage, and higher sensitivity to empower you to accomplish your aspirations.



Learn more at anchem.pl/OrbitrapAstral

For Research Use Only. Not for use in diagnostic procedures. © 2023 Thermo Fisher Scientific Inc. All rights reserved. All trademarks are the property of Thermo Fisher Scientific and its subsidiaries unless otherwise specified. AD001724-EN 0423M

thermo scientific

PROGRAM SZKOLENIA

2 września 2023 (Sobota)

SZKOŁA MS

11:00	Powitanie
11:10	Techniki jonizacji a efekty matrycowe w spektrometrii mas <i>- Katarzyna Lech i Katarzyna Pawlak, Wydział Chemiczny PW</i>
11:55	Tryby pracy tandemowego i hybrydowego spektrometru mas <i>- Katarzyna Lech, Wydział Chemiczny PW</i>
12:40	Podstawy interpretacji widm masowych związków organicznych <i>- Witold Danikiewicz, Instytut Chemii Organicznej PAN</i>
13:25	PRZERWA
	Sesję poprowadzi Katarzyna Lech
14:00	Ustalanie budowy cząsteczek związków organicznych z wykorzystaniem spektrometrii mas <i>- Witold Danikiewicz, Instytut Chemii Organicznej PAN</i>
14:45	Oznaczanie i identyfikacja środków odurzających, substancji psychotropowych oraz psychoaktywnych i środków zastępczych za pomocą GC-MS <i>- Emilia Waraksa, Masdiag DNA</i>
15:15	PRZERWA
	Sesję poprowadzi Witold Danikiewicz
15:30	Zastosowanie spektrometrii mas w naukach farmaceutycznych – ujęcie praktyczne <i>- Damian Smuga, Celon Pharma SA</i>
16:15	Walidacja metod bioanalitycznych wg wytycznej ICH M10 <i>- Piotr Rudzki, Celon Pharma SA</i>

Sesję poprowadzi Agata Kot-Wasik

09:00 Chromatografia cieczowa i elektroforeza kapilarna jako metoda wprowadzania próbki do spektrometru mas

- Katarzyna Pawlak, Wydział Chemiczny PW

09:45 Przygotowanie próbek białkowych do analizy proteomicznej

- Paulina Czaplewska, Międzyuczelniany Wydział Biotechnologii UG i GUM

10:30 PRZERWA

Sesję poprowadzi Piotr Suder

10:45 Analiza ilościowa SWATH-MS w proteomice

- Katarzyna Macur, Międzyuczelniany Wydział Biotechnologii UG i GUM

11:30 Przygotowanie próbek do analiz z użyciem różnych metod ekstrakcji i mikroekstrakcji

- Agata Kot-Wasik, Wydział Chemiczny PG

12:15 LUNCH

Sesję prowadzi Paulina Czaplewska

13:30 Obrazowanie MS: czy ta złota rybka spełnia życzenia chemików?

- Piotr Suder, Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH

14:15 Strategie badawcze w metabolomice

- Katarzyna Pawlak, Wydział Chemiczny PW

15:00 PRZERWA

Sesję prowadzi Katarzyna Lech

15:15 Derywatywacja jako metoda wpływająca na czułość i selektywność w spektrometrii mas

- Remigiusz Bąchor, Wydział Chemii UW

16:00 Podstawy zastosowania HDX w określaniu struktury związków

- Maciej Modzel, Wydział Chemii UW

17:00 KONIEC SZKOLENIA

17:10 Przetwarzanie zdobytej wiedzy a może nawet małe co nieco

PROGRAM KONFERENCJI

4 września 2023 (Poniedziałek)

KONFERENCJA

09:00	Powitanie
	Sesja PN1
09:10	Historia spektrometrii mas jakiej nie znamy <i>- Witold Danikiewicz, Instytut Chemii Organicznej PAN</i>
09:55	What happens when mass spectrometry goes document dating? <i>- Monika Biernat, Wydział Chemii UWr</i>
10:15	Aging of α-pinene secondary organic aerosol by hydroxyl radicals in the aqueous phase; kinetics, and products <i>- Bartłomiej Witkowski, Wydział Chemii UW</i>
10:45	PRZERWA
	Sesję PN2 poprowadzi Pior Rudzki
11:15	Algorytmiczne wyzwania spektrometrii mas <i>- Anna Gambin, Wydział matematyki, informatyki i mechaniki UW</i>
11:45	False positive results – the pitfalls of peptide mapping <i>- Mateusz Dobrowolski, Mabion S.A./ Uniwersytet Medyczny w Łodzi</i>
12:05	AliceDB - the bioinformatic tool for natural variant and mutation detection in proteomic data <i>- Marcel Thiel, Międzyuczelniany Wydział Biotechnologii UG i GUMED</i>
12:25	Proteomic analysis of sialoliths - identification of potential biomarkers of deposit formation in salivary glands <i>- Natalia Musiał, Międzyuczelniany Wydział Biotechnologii UG i GUMED</i>
12:45	LUNCH
14:00	SESJA PLAKATOWA 1
15:15	ZEBRANIE CZŁONKÓW PTSM
19:00	KOLACJA I INTEGRACJA

Sesję WT1 | poprowadzi Remigiusz Bąchor

09:00 **Spektrometria mas ujawnia silną dynamikę struktur białkowych i weryfikuje podstawowe paradygmaty biologii strukturalnej**

- Michał Dadlez, Instytut Biochemii i Biofizyki PAN

09:45 **Omeprazole quantification using LC-MS method and its new isotopically labeled standard prepared by hydrogen/deuterium exchange**

- Paulina Grocholska, Wydział Chemii UWr

10:20 **Deeper proteome coverage and faster throughput for low input samples on the novel Thermo Scientific Orbitrap Astral mass spectrometer – Wykład Sponsora**

- André Müller, TSS LSMS Austria/Switzerland - Thermo Fisher Scientific

ANCHEM

10:45 PRZERWA

Sesję WT2 | poprowadzi Tomasz Bieńkowski – Young i szybka sesja

11:15 **ESI-MS and fluorescence analysis of stable bisquaternary ammonium dication adduct with TFA⁻, Cl⁻ and HSO₄⁻ anions**

- Marta Kowalska, Wydział Chemii UWr

11:25 **Complex analysis of HDX-MS data**

- Weronika Puchała, Instytut Biochemii i Biofizyki PAN

11:35 **Identification of levoglucosan organosulfate in secondary organic aerosol (SOA) with UPLC-MS**

- Klara Nestorowicz, Instytut Chemii Organicznej PAN

11:45 **Szybka dyskusja**

11:55 **PANEL DYSKUSYJNY**

1. Czy jakość czasopisma gwarantuje jakość publikacji? Jak oceniać jakość wyników?
2. Open Access jako złoty standard publikowania wyników naukowych w przyszłości

12:40 LUNCH

14:00 **SESJA PLAKATOWA 2**

Sesję WT3 | poprowadzi Katarzyna Pawlak – Szybka sesja

15:15 **Identification of surfactants with antibacterial activity produced by arctic bacterial strains**

- Magdalena Biesaga, Wydział Chemii UW

15:30 **Opracowanie metody oznaczania cyprofloksacyny w larwach *Lucilia sericata* z zastosowaniem elektroforezy kapilarnej w połączeniu z detekcją masową**

- Magdalena Czuma, Wydział Farmaceutyczny UJ Collegium Medicum

15:40 **Efekty matrycowe w analizie środków ochrony roślin o wysokiej polarności w paszach i produktach zbożowych przy wykorzystaniu LC-MS/MS**

- Adam Perczak, Wydział Chemii UWr

15:50 **Zastosowanie różnych metod analizy ilościowej w toksykologii sądowej**

- Kaja Tusiewicz, Kat. Medycyny Sądowej, UM im. Piastów Śląskich, Wrocław

16:00 **Szybka dyskusja**

16:10 **PANEL DYSKUSYJNY**

1. *Problemy dotyczące spektrometrii mas*
2. *Potrzeby użytkowników*

19:30 **KOLACJA I INTEGRACJA**

Sesję SR1 | poprowadzi Witold Danikiewicz/Maciej Modzel

09:00 Solid phase enrichment and charge derivatization of cysteine- and selenocysteine-containing peptide for their sensitive analysis by mass spectrometry

- Remigiusz Bąchor, Wydział Chemii UWr

09:35 Specyfika podejścia do opracowywania metod LC-MS/MS do celów diagnostyki medycznej

- Konrad Kowalski, Masdiag Sp. z o.o

10:10 Cztery trendy we współczesnej spektrometrii mas: miniaturyzacja, wzrost dokładności mas i szybkości zbierania danych oraz ograniczenie zakresu przygotowania wstępnego próbki – Wykład Sponsora

- Paweł Stalica, „Shim-Pol A. M. Borzymowski” E. Borzymowska-Reszka, A. Reszka Spółka Jawna



10:30 PRZERWA

Sesję SR2 | prowadzi Katarzyna Lech/Katarzyna Pawlak

11:00 The day- and night-time chemistry of α -pinene and its oxidation products

- Agata Błaziak, Instytut Chemii Fizycznej PAN

11:20 Fragmentacja EAD jako pomocne narzędzie w analizie jakościowej

- Adrian Soboń, Bioanalytic Sp. z o.o.

11:50 Hydrogen scrambling in UVPD fragmentation of proteins and peptides

- Maciej Modzel, Wydział Chemii UWr

12:15 Ogłoszenie wyników Sesji plakatowej i szybkiej ustnej
Zamknięcie konferencji

12:30 LUNCH

SESJA PLAKATOWA P1

4 września 2023 (Poniedziałek)

(P101 - P108)

P101	Jesse Namu Ombugadu <i>Wydział Chemiczny PW</i>	A new method for discrimination of isobaric β - and γ - isoforms of tocopherol and tocotrienol using RPLC-ESI-MS
P102	Elżbieta Stolarczyk <i>National Medicines Institute, Spectrometric Method Department, Warsaw</i>	Development and validation of a universal LC-MS/MS method for the determination of 1-methyl-4-nitrosopiperazine (MNP) in multicomponent products with rifampicin
P103	Bartłomiej Witkowski <i>University of Warsaw, Faculty of Chemistry, Warsaw</i>	Oxidative decomposition of levofloxacin by hydroxyl and sulfate radicals in the aqueous solution - products and mechanism
P104	Aleksandra Pawłowicz <i>ICHB PAN, Zakład Biomolekularnego NMR, Poznań, Polska</i>	Spektrometria mas jako narzędzie wykorzystywane do potwierdzania czystości biomolekuł
P105	Katarzyna Macur <i>Core Facility Laboratories, Intercollegiate Faculty of Biotechnology UG-MUG, University of Gdańsk</i>	Investigation of the impact of methamphetamine on human monocyte-derived macrophages (hMDM) infected with HIV using discovery and targeted mass spectrometry-based proteomic approaches
P106	Radosław Jaźwiec <i>Celon Pharma S.A., R&D Center, Kazuń Nowy</i>	LC-MS/MS quantification of Esketamine and its three major metabolites in plasma
P107	Radosław Jaźwiec <i>Celon Pharma S.A., R&D Center, Kazuń Nowy</i>	LC-MS/MS bioanalytical method for quantification of the antiplatelet substance CZ40
P108	Katarzyna Gałązka <i>Celon Pharma S.A., R&D Center, Kazuń Nowy</i>	Optimized LC-MS/MS quantification of a drug candidate CPL409116 and its M3 metabolite in human plasma

SESJA PLAKATOWA P1

4 września 2023 (Poniedziałek)

(P109 - P114)

P109	Jesse Namu Ombugadu <i>Wydział Chemiczny PW</i>	Fragmentation of saponins toward the development of precursor ion method extracted from soapwort
P110	Agnieszka Hołodyńska-Kulas <i>Instytut Ochrony Roślin - PIB, Zakład Badania Pozostałości Środków Ochrony Roślin, Poznań</i>	Opracowanie i walidacja metody oznaczania pozostałości środków ochrony roślin w próbkach wód z zastosowaniem układu Agilent Intuvo 9000 GC sprzężonym ze spektrometrem mas Agilent 7010B
P111	Agnieszka Hołodyńska-Kulas <i>Instytut Ochrony Roślin - PIB, Zakład Badania Pozostałości Środków Ochrony Roślin, Poznań</i>	Kompensowanie efektu matrycy w badaniu pozostałości środków ochrony roślin w próbkach zbóż w układzie Agilent Intuvo 9000 GC sprzężonym ze spektrometrem mas Agilent 7010B
P112	Tomasz Bieńkowski <i>Masdiag Sp. z o.o., Warsaw, Poland</i>	Comparison of ICP-MS and ED-XRF in multi-elemental analysis of hair
P113	Tomasz Bieńkowski <i>Masdiag Sp. z o.o., Warsaw, Poland</i>	Zastosowanie metody LC-MS/MS do analizy kannabinoidów i ich metabolitów w suchej kropli krwi jako potencjalnego narzędzia monitorowania terapii leku dla pacjentów stosujących preparaty na bazie konopi
P114	Tomasz Bieńkowski <i>Masdiag Sp. z o.o., Warsaw, Poland</i>	Porównanie metod oznaczania etanolu we krwi za pomocą systemów NMR i GC-FID

SESJA PLAKATOWA P2

5 września 2023 (Wtorek)

(P201 - P207)

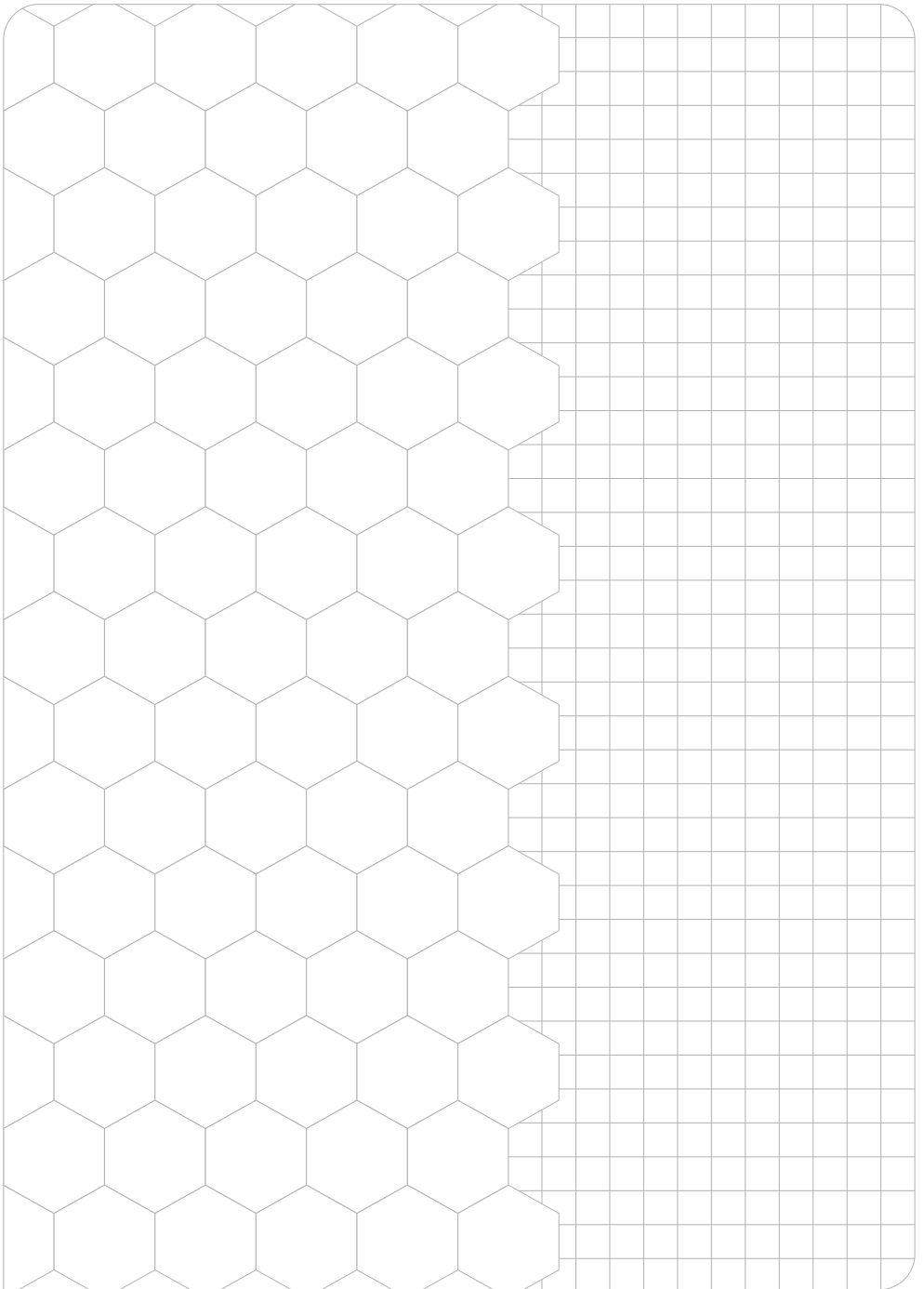
P201	Kinga Podgórnik <i>Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski</i>	Model reakcji tworzenia nowego wiązania C-C w reakcji dekarboksylacji kwasu adypinowego katalizowanej jonem magnezu z wykorzystaniem technik spektrometrii mas
P202	Rafał Motuła <i>Instytut Ochrony Roślin - PIB, Zakład Badania Pozostałości Środków Ochrony Roślin, Poznań</i>	Badanie pozostałości pestycydów w dorzeczach rzek Polski w latach 2020 i 2021
P203	Aleksandra Wołczyńska <i>National Medicine Institute, Spectrometric Method Department</i>	Identification and structure elucidation of unknown testosterone impurities
P204	Natalia Rzetecka <i>Poznan University of Medical Sciences, Department of Inorganic & Analytical Chemistry, Faculty of Pharmacy</i>	A trans-omic approach for the better diagnosis of childhood asthma
P205	Paulina Czaplewska <i>Międzyuczelniany Wydział Biotechnologii UG i GUMED, Uniwersytet Gdański</i>	Proteomic response of A549 lung cancer cell line to protein-polysaccharide complex Venetin-1 isolated from earthworm coelomic fluid
P206	Anna Witkowska <i>National Medicines Institute, Spectrometric Methods Department, Warsaw</i>	Antibiotic resistance profiling within one hour using LC-MS/MS - implementation IDAREMS technology in Poland
P207	Inez Mruk <i>University of Gdańsk, Intercollegiate Faculty of Biotechnology University of Gdańsk and Medical University of Gdańsk</i>	Peptidomics of follicular fluid – in search of oocyte quality biomarkers

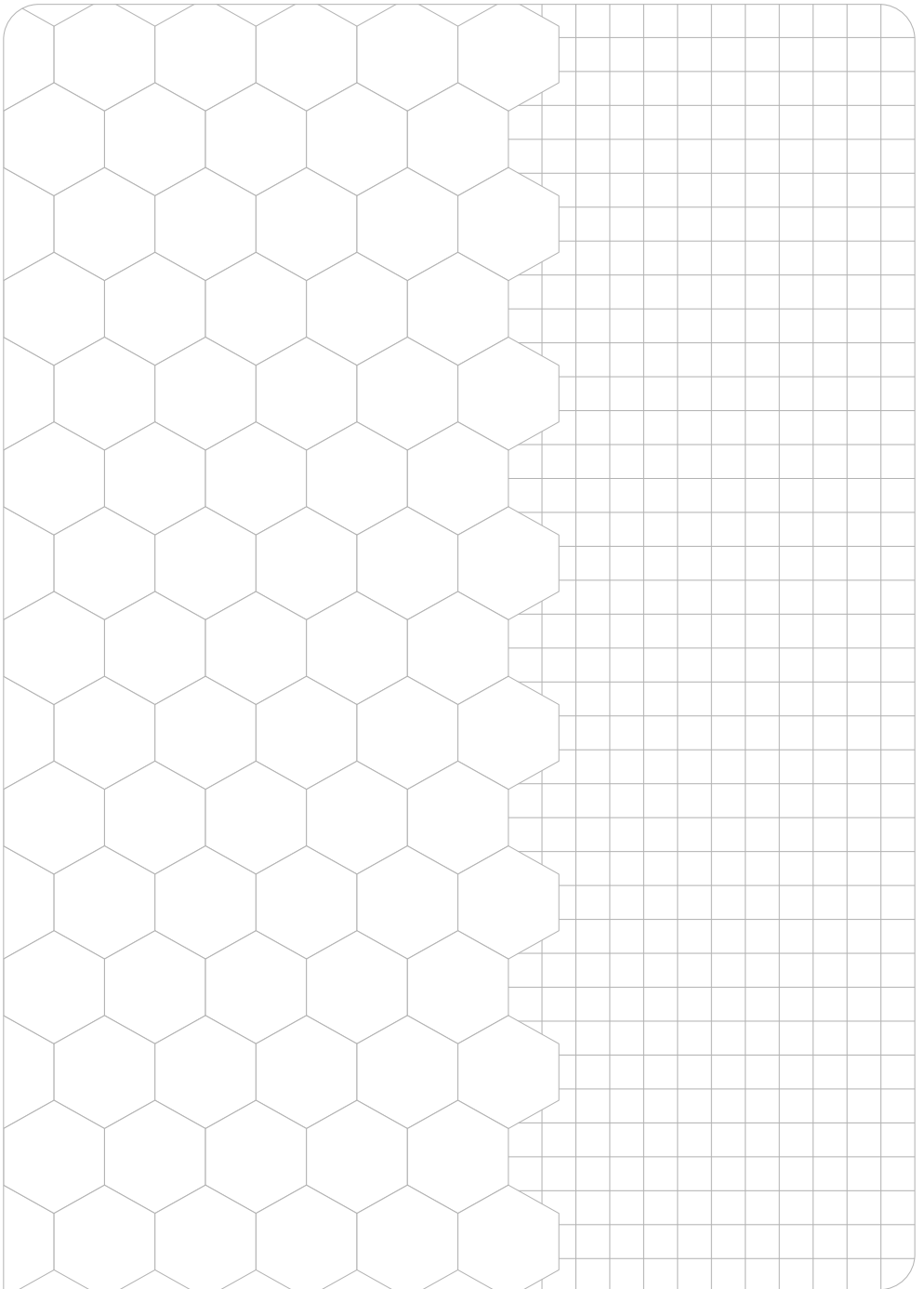
SESJA PLAKATOWA P2

5 września 2023 (Wtorek)

(P208 - P212)

P208	Eliza Matuszewska <i>Poznań University of Medical Sciences, Faculty of Pharmacy, Department of Inorganic and Analytical Chemistry</i>	MALDI-TOF/TOF-MS/MS characterization of the impact of <i>Apis mellifera</i> (honeybee) venom on the inhibition of SARS-CoV-infection
P209	Anna Czyż <i>Wydział Chemiczny PW</i>	Profilowanie zanieczyszczeń amfetaminy za pomocą GC-MS
P210	Ewelina Lewandowska <i>Celon Pharma S.A., Kazuń Nowy</i>	Oznaczanie zanieczyszczeń elementarnych za pomocą metody ICP MS w produkcie leczniczym stosowanym w farmakoterapii chorób sercowo-naczyniowych
P211	Magdalena Popławska <i>Narodowy Instytut Leków, Zakład Leków Sfałszowanych i Wyrobów Medycznych, Warszawa</i>	Zastosowanie modelowania <i>in silico</i> metody elektrochemicznej oraz wysokorozdzielczej spektrometrii mas do przewidywania metabolizmu nowych syntetycznych opioidów
P212	Dariusz Kruszka <i>Institute of Plant Genetics Polish Academy of Sciences, Poznań</i>	Application of high-resolution mass spectrometry for analysis of esterified alkaloids in <i>Lupinus angustifolius</i> L. leaves







SELECT SERIES

The **SELECT SERIES Cyclic™ IMS** is a unique ion mobility mass spectrometer combining next generation cyclic ion mobility with a new high performance ToF.

Revolutionize Your Research

- Ultimate ion mobility resolution for complete confidence.
- Increased selectivity and advanced characterization.
- Increased experimental flexibility for solving complex problems.



The DESI XS / Xevo™ TQ Absolute for targeted mass spectrometry imaging

- Simply and quickly access lower limits of detection in molecular visualization directly from surfaces.
- Visualize the location of previously inaccessible components .
- Leverage the power of selectivity of the Multiple reaction monitoring (MRM) mode.



Accelerate your research and comprehensively identify analytes in your complex samples with the **SELECT SERIES™ MRT**, built with **Multi Reflecting Time-of-Flight (MRT) technology**. New resolution enhancement mode (REM) capable of 300,000 FWHM resolution, a 3X faster scan rate and ppb mass accuracy

All the benefits of time-of-flight technology. Redefined performance.

- Resolve nominally isobaric interferences with high mass resolution, at all scan speeds.
- Reveal isotopic fine structure for unambiguous elemental compositions.
- Achieve high data quality in both MS and MS/MS.
- Simplify data archiving and rapidly process data with reduced data files sizes.
- Redefining clarity in mass spectrometry imaging.



SELECT SERIES
Cyclic IMS in action
& NextGen MSI Series

Waters™

LCMS-9050-QTOF

Wysokorozdzielczy spektrometr mas

Kolejny krok milowy w spektrometrii mas wykonany przez firmę Shimadzu.

LCMS-9050-QTOF to obecnie najszybszy wysokorozdzielczy spektrometr mas na rynku o wysokim potencjale aplikacyjnym!



200 Hz
najszybszy
Q-TOF
na rynku

Przełomem jest możliwość jednoczesnej pracy w trybie jonów dodatnich i ujemnych, mimo że mamy do czynienia ze spektrometrem mas typu HRAM (ang. High Resolution Accurate Mass). Najwyższa dostępna szybkość akwizycji danych zadowoli najbardziej wymagających badaczy, szczególnie w obszarze nauk „omicznych”, gdzie wymagane są zaawansowane tryby DDA, DIA. Doskonała stabilność mas przez długi czas pozwala na bezproblemowe i nieprzerwane badania dużych serii pomiarowych. Nowy spektrometr LCMS-9050-QTOF wyróżnia duża uniwersalność zastosowań, a jego konstrukcja umożliwia rozbudowę o zaawansowane techniki jonizacji, takie jak: APCI, DART, PESI, czy SICRIT®. Firma Shimadzu zapewnia szeroki pakiet systemów „front end” UHPLC, wiele konfiguracji chromatografów z fazą w stanie nadkrytycznym SFC oraz chromatografów inertywnych, a także systemy zautomatyzowane począwszy od robotów CLAM dedykowanych do diagnostyki i toksykologii oraz systemu C2MAP do badania hodowli komórkowych, aż po najbardziej zaawansowane systemy iMScope QT służące do obrazowania tkanek techniką iMS.

Obrazowanie

iMScope QT to unikalne urządzenie do wysokorozdzielczego obrazowania tkanek biologicznych. Posiada wbudowany mikroskop optyczny oraz źródło MALDI z szybkim laserem. iMScope QT sprzężony z ultraszybkim Q-TOF-em to nowoczesny, zaawansowany technologicznie sprzęt analityczny nie mający odpowiednika na rynku.

