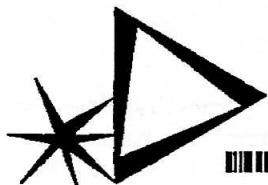


Spektroskopická společnost  
Jana Marka Marci <sup>1135</sup>  
166 29 Praha 6, Thákurova 7



SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARKA MARCI



BULLETIN  
SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI  
JANA MARKA MARCI

Číslo 110

prosinec 2001

<http://www.spektroskopie.cz>  
Nové telefonní číslo sekretariátu: (02) 3333 2343.

Kurz „Nejistota a návaznost výsledků spektroskopických metod“

*Jan Kučera*

Komise Zabezpečení jakosti výsledků uspořádala ve dnech 29. 10. – 1. 11. 2001 v hotelu Vltava v Řeži kurz „Nejistota a návaznost výsledků spektroskopických metod“. Pracovníkům různých spektroskopických oborů a manažerům jakosti předneslo 14 lektorů 16 odborných přednášek. Program byl doplněn třemi firemními přednáškami a informativními výstavkami celkem 7 firem, které jsou činné v daném oboru.

Kurz reagoval svou náplní na změnu legislativy v oboru chemické metrologie, zejména na novou normu ČSN ISO/IEC 17025 (2001) „Všeobecné požadavky na kompetenci zkušebních a kalibračních laboratoří“. Tato norma, na rozdíl od předcházející ČSN EN 45001 „Všeobecná kritéria pro činnost zkušebních laboratoří“, operuje s pojmy návaznost a nejistota výsledku měření, jež laboratoře, zejména akreditované, musí zavádět do denní praxe. První část kurzu byla proto věnována výkladu těchto pojmů. V úvodní přednášce „Nejistota výsledků chemických měření“ Z. Plzák vysvětlil principy vyhodnocování nejistot podle směrnice EURACHEM/CITAC (2000) „Quantifying Uncertainty in Analytical Measurements“ a v další přednášce poukázal V. Štěpánek na rozdíly mezi chybou a nejistotou. O tom, že údaje potřebné pro hodnocení nejistoty lze získat při validaci analytické metody a co vše tato činnost zahrnuje, přednášel M. Suchánek. Obecný význam pojmu „návaznost“ vysvětlil J. Kučera a jeho přednáška byla doplněna informací M. Suchánka o národním schématu návaznosti. O úloze Českého metrologického institutu v chemické

metrologii přednášel J. Tichý. Tento blok přednášek byl doplněn o problematiku nejistoty vzorkování, o níž pojednal P. Bernáth na příkladu vzorkování odpadních vod.

Druhá část kurzu byla věnována příkladům vyhodnocování nejistot vybraných spektroskopických metod. Nejvíce byly zastoupeny metody atomové spektroskopie, následované nukleárními analytickými metodami. Lektory této části byli kolegové O. Mestek a J. Kominčková (Nejistoty měření v metodě ICP-MS), J. Hajšlová a V. Kocourek (Nejistoty měření v GC-MS organických polutantů), J. Šperková (Stanovení Fe v sedimentu metodou ICP-OES – hodnocení nejistot), L. Peřina a J. Pavelka (Stanovení As a Cd v koňských játrech metodami AAS a ICP-OES – vyhodnocení nejistot), Z. Weiss (Nejistoty v metodě OES s buzením v doutnavém výboji), P. Šubrt (Některé způsoby odhadu a vyjadřování nejistot), P. Dryák (Germaniový detektor jako sekundární etalon radioaktivity – vyhodnocení nejistot), J. Kučera (Nejistota výsledků v neutronové aktivační analýze (NAA) a V. Havránek (Zdroje nejistoty výsledků v metodě PIXE). Autoři přednášek seznámili účastníky kurzu se svými zkušenostmi z vyhodnocování nejistot oběma možnými přístupy (identifikací a vyhodnocením jednotlivých složek nejistot a tzv. postupem „shora-dolů“ z výkonnostních parametrů metody), čímž nepřímo poskytli cenné informace i pro vyhodnocování nejistot v těch metodách, které nebyly na kurzu zastoupeny.

O tom, že se kurz neminul účinkem snad nejvíce svědčí bohaté diskuse, odehrávající se jak v přednáškové části, v závěrečné panelové diskusi, tak v části neformální, která byla doplněna společenským večerem. K důkladnému seznámení se s problematikou kurzu přispělo i vydání všech přednášek ve formě skript o 198 str., které účastníci kurzu obdrželi při registraci. Zájemci o tato skripta si je mohou objednat až do vyprodání zásob na adrese sekretariátu Společnosti (cena 460 Kč).

V závěru kurzu projevil jeho účastníci zájem o uspořádání další akce věnované této problematice ve formě semináře, na němž by již mohli diskutovat a konzultovat své vlastní zkušenosti, které budou muset v brzké době nabýt. Vyplývá to jak z hlediska již platné legislativy (zejména pro komerční organizace), tak z hlediska možnosti publikace vývojových a výzkumných prací v seriózních odborných časopisech. Vedení pořádající komise doufá, že se další akce zúčastní i ti kolegové, kteří se kurzu nemohli zúčastnit.

### **5<sup>th</sup> European Furnace Symposium a 10<sup>th</sup> International Solid Sampling Colloquium**

*Bohumil Dočekal*

Ve dnech 1. – 4. září 2002 se bude konat v Bulharsku na Jihozápadní Univerzitě v Blagoevgradu v pořadí již páté *European Furnace Symposium*, a to společně s *10. International Solid Sampling Colloquium*. Jak bývá tradicí, toto třídní setkání odborníků z celého světa bude věnováno různým aspektům elektrotermické atomizace v atomové spektroskopii. Soustředí se též i na stav a současný vývoj dávkování pevných

vzorků v metodách atomové spektroskopie. Odborný program symposia bude sestaven z vyzvaných přednášek předních světových odborníků, ústních sdělení a prezentace posterů. Bude také zahrnovat diskuse u kulatého stolu na aktuální témata. Částí programu budou věnovány teorii, aplikacím ve všech oblastech analýzy, instrumentaci, metodologii a chemometrickým aspektům.

Druhý cirkulář bude zaslán zájemcům v květnu 2002. Členové Společnosti budou průběžně o této akci informováni na jejích internetových stránkách, kde je také přístupný první cirkulář akce. Informace je možné také získat u předsedy sekce optické atomové spektroskopie RNDr. Bohumila Dočekala (e-mail: docekal@iach.cz).

Konferenční poplatek činí 100 EUR, pro studenty 25 EUR. Zahrnuje náklady účastníků v odborném programu včetně sborníku abstrakt a náklady na občerstvení. Předběžné přihlášky je možné zaslat do 1. března 2002 na adresu:

Dr. Ivanka Stankova  
Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences and Mathematics  
South West University  
Ivan Mihailov Str. 66  
2700 Blagoevgrad, Bulgaria  
Tel.č. +359/2/73 31825  
fax: +359/2/73 29325  
e - mail: chemistry@avala.bg

### **XVI. Slovenská spektroskopická konference**

Slovenská spektroskopická konference má dlouholetou tradici, která má počátek v r. 1970. Poslední konference se konaly ve Vysokých Tatrách, nadcházející 16. konference se bude konat v Košicích, a to pod záštitou rektora TU Košice u příležitosti 50. výročí založení Technické univerzity a Hutnické fakulty. Termín konání konference byl stanoven od neděle 26. června do čtvrtka 30. června 2002. Hlavními tématy konference budou atomová a molekulová spektroskopie, RTG spektrometrie a další spektroskopické metody, příprava vzorků, referenční materiály, chemometrie a aplikace spektroskopie v průmyslu, geochemii, v životním prostředí a dalších oblastech. První cirkulář konference je na internetových stránkách Společnosti a na stránkách konference [www.tuke.sk/sskkosice](http://www.tuke.sk/sskkosice). Předsedkyní organizačního výboru konference je Prof. Erika Krakovská a členy mezinárodního vědeckého výboru jsou např. A. Golloch (SRN), I. Grinshtein (Rusko), M. Hoenig (Belgie), H.-M. Kuss (SRN), M. Veber (Slovensko), G. Záray (Maďarsko) a z České republiky B. Dočekal. V organizačním a vědeckém výboru dále pracují přední slovenští odborníci, z nichž mnozí byli dříve funkcionáři naší Společnosti. Konferenční poplatek byl stanoven 2 500,- Sk, cena ubytování za 4 noci se pohybuje od 1 000,- do 6 000,- Sk podle kategorie (hotel, kolej).



**SPECTRO CS**

S. r. o.

Rudná 51, 700 30 Ostrava-Zábřeh

☎ 069 676 2840

Fax: 069 676 2849

e-mail: info@spectro.cz

http://www.spectro.cz

**specialisté v oboru spektrometrie nabízejí:**

**PŘENOSNÉ A MOBILNÍ SPEKTROMETRY:**

SPECTROPORT CCD  
SPECTROPORT

- široký rozsah analytických možností, analýza včetně C, P a S
- kontrola záměny, třídění a analýza
- určení jakosti, váha 12 kg
- mobilní spektrometr s parametry laboratorního přístroje

SPECTROTEST

**STACIONÁRNÍ - LABORATORNÍ SPEKTROMETRY:**

SPECTROLAB Jr  
SPECTROLAB F

- **NOVINKA – informace na telef. zavolání**
- rozsah vlnových délek 160 – 800 nm
- analytické moduly pro jednu nebo dvě báze
- maximálně 48 kanálů

SPECTROLAB M (S)

- rozsah vlnových délek 120 – 800 nm
- analytické moduly pro všechny báze
- maximálně 96 (128) kanálů

SPECTRUMA GDL 150 (750)

- spektrometr s doutnavým výbojem, optika 150 (750) mm
- měření různých vrstev pokovení atd.

**AUTOMATICKÉ SYSTÉMY:**

SPECTROLUX  
SPECTROTEST ROBOTIC

- bezobslužná provozní laboratoř
- třídění velkého množství materiálu bez obsluhy

**PŘÍSTROJE S ICP:**

SPECTROFLAME M120  
CIROS<sup>CCD</sup>

- sekvenční spektrometr, monochromátor od 120 nm
- simult. analýza všech čar mezi 120-800 nm za 10 sekund
- měření prvků C, N, Br, I, Cl a emulzí (tzv. „slurry“ technika)
- ICP-MS spektrometr s velmi užitečnými vlastnostmi

SPECTROMASS 2000

**RENTGENOVÉ SPEKTROMETRY:**

SPECTRO X-LAB 2000  
SPECTRO XEPOS  
SPECTRO ASOMA

- výkonný, velmi citlivý RTG spektrometr pro náročná použití
- nový stolní RTG.. spektrometr pro analýzu Na – U
- malé, stolní, levné analyzátoř včetně systémů on-line

**FTIR SPEKTROMETRY:**

BIO-RAD: série EXCALIBUR

- spektrální rozsah 25000 – 50 cm<sup>-1</sup>, USB spojení s počítačem
- optické rozlišení až 0,1 cm<sup>-1</sup>
- GC-IR, TGA-IR, FT-Raman, IR mikroskopy aj.

**LASEROVÉ GRANULOMETRY:**

SEISHIN: LMS-30

- stanovení velikosti částic 0,1 – 1000 μm
- mokřý i suchý způsob měření

CERTIFIKOVANÉ REFERENČNÍ MATERIÁLY: fy MBH Analytical, Velká Británie

**Pro všechny produkty žádejte podrobnější informace**

**Kurz spojení vysokoúčinné kapalinové chromatografie a hmotnostní spektrometrie (HPLC/MS)**

*Michal Holčapek*

Ve dnech 5. - 7.11.2001 proběhl v kongresové hale Univerzity Pardubice 1. ročník kurzu spojení vysokoúčinné kapalinové chromatografie a hmotnostní spektrometrie (HPLC/MS), který byl pořádán komisí pro aplikaci spektroskopických metod pro kontrolu životního prostředí a odbornou skupinou hmotnostní spektrometrie. Kurzu se zúčastnilo 109 účastníků, kteří vyslechli 30 přednášek od 19 lektorů. Přednášky pokrývaly celý rozsah problematiky, např. historie HPLC/MS, názvosloví, princip základních ionizačních technik a analyzátorů používaných pro HPLC/MS, problém validace a kvantity v HPLC/MS, spojení kapilární elektroforézy a hmotnostní spektrometrie, a také řadu zajímavých aplikačních přednášek, kde dominovaly biochemické aplikace. Hlavními přednášejícími kurzu byli M. Ryska, K. Ubik, K. Lemr, V. Havlíček a M. Holčapek. Z přednášek prezentovaných na kurzu byla vydána skripta „Spojení HPLC/MS“, která obdrželi při registraci všichni účastníci. Zbývající výtisky je možné zakoupit v sekretariátě Spektroskopické společnosti.

Bohatý odborný program doplnila i dvě společenská setkání. Jejich pořádání bylo umožněno sponzorským příspěvkem 10 zúčastněných firem a bylo velmi kladně hodnoceno, protože nabídlo prostor k neformálním diskusím a navázání nových kontaktů mezi jednotlivými pracovišti. V pondělí byla organizována prohlídka zámku spojená s výstavou českého skla a následným občerstvením v gotickém sále pardubického zámku a v úterý byl společenský večer s hudbou a tancem v prostorách kongresové haly.

Vzhledem k úspěchu této akce a zájmu účastníků je uvažováno další pořádání tohoto kurzu v dvouletých intervalech, takže příští kurz je předběžně plánován na září 2003. Informace budou uveřejněny na webové stránce kurzu :

*ttp://user.upce.cz/~holcapek/hplcms.htm.*

**Jednání 72. schůze hlavního výboru Společnosti**

Dne 6. prosince 2001 se konala 72. schůze hlavního výboru Spektroskopické společnosti, kterou řídil předseda Prof. Karel Volka. Na programu byla zpráva o činnosti představenstva hlavního výboru za uplynulé období (Doc. Hála), zpráva o hospodaření (L. Svobodová) a zpráva o odborné činnosti za r. 2001. Součástí schůze bylo i vyhodnocení soutěže mladých spektroskopiků za r. 2001: v kategorii A byla udělena 1. cena Mgr. Josefu Kapitánovi a 3. cena Ing. Janě Komínkové (2. cena nebyla udělena), v kategorii B byla 1. cena udělena Ing. Marku Kuzmovi (další ceny nebyly uděleny). Abstrakta předložených a na schůzi prezentovaných prací přinášíme dále. Na schůzi byl projednán i předběžný plán akcí Společnosti na r. 2002 (uvádíme dále).

## 2 THETA

### Analytical standards and equipment

2 THETA ASE, s.r.o., P.S. 103, 737 01 Český Těšín  
Tel/fax 0659/732122, 732224, mobil 0602/720747  
E-mail: 2theta@2theta.cz, firemní stránky: www.2theta.cz

### PF 2002

**Přejeme Vám hodně štěstí v Novém roce 2002 a těšíme se na setkání s Vámi na našich akcích**

### Konference, semináře, kurzy 2002

#### Zajištění kvality analytických výsledků, seminář

18. – 20. 3., Komorní Lhotka, Beskydy

Odborný garant: Prof. Meloun – Univerzita Pardubice,  
RNDr. Pokorný – KHS Brno, Ing. Tichý – ČMI

#### Hutní analytika 2002, konference

15. – 19. 4., Luhačovice

Odborný garant: Česká zbrojovka Uherský Brod, a.s.

#### Automatická spektrometrie, kurz

10. – 14. 6., Žermanická přehrada, Těšínsko

Odborný garant: Prof. Piško – Bratislava,  
Ing. Tomášek – VŠB–TU Ostrava

#### Mikroelementy 2002, seminář

3. – 5. 9., okolí Prahy

Odborný garant: Dr. Koplík, Dr. Čurdová – VŠCHT Praha,  
Prof. Mader – Česká zemědělská univerzita Praha

#### Analýza organických látek v životním prostředí, seminář

14. – 17. 10., Komorní Lhotka, Beskydy

Odborný garant: Prof. Churáček, Doc. Ventura – Univerzita Pardubice,  
Prof. Ševčík – Univerzita Karlova

### Předběžný plán akcí Společnosti na rok 2002

Na 72. schůzi hlavního výboru společnosti dne 6. prosince 2001 byl prezentován následující plán akcí na rok 2002.

- Kurz měření vibračních spekter (21. – 25. 1. 2002, Praha)
- Kurz interpretace vibračních spekter (28.1. – 1. 2. 2002, Praha)
- Kurz kvantitativní molekulové spektroskopie (4. – 6. 2. 2002, Praha)
- Seminář OS rentgenové spektrometrie (22. – 24. 4. 2002, Lázně Bohdaneč)
- Seminář OS instrumentálních radioanalytických metod (2. čtvrtletí 2002, Praha)
- Komise pro životní prostředí: *Conference on Inorganic Environmental Analysis and Quality Assurance* (9. – 12. 9. 2002, Pardubice)
- 6. škola hmotnostní spektrometrie (14. – 18. 10. 2002, Červenohorské sedlo)
- Seminář OS spektroskopie povrchů a tenkých vrstev (termín bude upřesněn, Lázně Bohdaneč)
- Kurz AAS (bude upřesněno)
- Seminář OS Mössbauerovy spektroskopie
- 17. NMR Valtice (8. – 10. 4. 2002, Valtice)
- Spoluúčast na 16<sup>th</sup> European Experimental Nuclear Magnetic Resonance Conference (9. – 14. 6. 2002, Praha)
- Komise zabezpečení jakosti výsledků: spoluúčast na 14. Radiochemické konferenci (14. – 19. 4. 2002)
- 17. Mezinárodní konference o molekulární spektroskopii vysokého rozlišení (1.–5. 9. 2002, Praha).

Podrobnosti k jednotlivým akcím budou dále zveřejňovány (včetně internetových stránek Společnosti [www.spektroskopie.cz](http://www.spektroskopie.cz)). Podle zkušeností z minulých let doporučujeme zájemcům včasné podání přihlášky.

### Abstrakta oceněných prací v soutěži mladých spektroskopiků v r. 2001

#### Sekvenování cyklických peptidů pomocí hmotnostní spektrometrie

*Marek Kuzma*

Cyklické peptidy a depsiptydy reprezentují skupinu biologicky významných látek. Je možné je najít mezi antibiotiky, biologickými toxiny, imunomodulátory a dalšími biologicky aktivními látkami.

Hmotnostní spektrometrie dnes představuje důležitý nástroj při identifikaci struktury a studiu peptidů. Při sekvenční analýze cyklických peptidů je situace ve srovnání s lineárními peptidy komplikovanější, neboť nemají volný N, resp. C konec. I když se i



v případě cyklických peptidů uplatňují obdobné mechanismy jako u lineárních peptidů, v důsledku možnosti protonace většího počtu amidických dusíků, je situace pro jejich sekvenování tandemovou hmotnostní spektrometrií výrazně složitější.

V této práci byla studována série cyklosporinů a zkoumán vliv N-demethylace na mechanismus otevírání kruhu. Byla identifikována místa přednostní protonace v cyklosporinech typu [MeBmt<sup>1</sup>] Cs. Jedná se jednak o dusíkové atomy N-methylovaných aminokyselin - Sar<sup>3</sup>, MeLeu<sup>6</sup> a MeLeu<sup>9</sup>. Čtvrtým místem protonace je lakton, který se tvoří v důsledku intramolekulárního přesmyku.

Vedle cyklických peptidů - cyklosporinů, byla pozornost také věnována studiu látek ze skupiny depsipeptidů - beauverolidů. Byl identifikován jejich pravděpodobný fragmentační mechanismus. Ačkoliv nebylo možné vyloučit primární štěpení na vazbě mezi sekundárním uhlíkem C-3 a kyslíkem v příslušné β-hydroxykyselině, hlavní mechanismus fragmentace spočíval v otevření kruhu mezi zbytkem hydroxykyseliny a sousední aminokyselinou, v místě uzavření laktonového kruhu. Na základě získaných poznatků byla provedena sekvenční analýza tří nových beauverolidů.

## Využití Ramanovy optické aktivity při studiu konformace biomolekul ve vodném prostředí

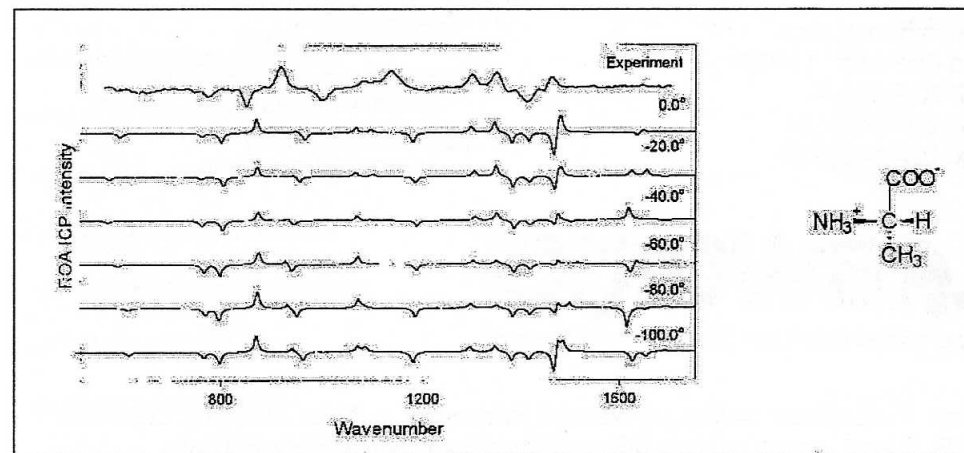
Josef Kapitán

Spektra Ramanovy optické aktivity (ROA) jsou mnohem více citlivá ke konformaci molekul než spektra absorpční nebo Ramanova. Interpretace experimentálních dat závisí na *ab-initio* výpočtech vibračních frekvencí a intenzit spektrálních pásů. Ukazuje se, že metoda funkcionálu hustoty je vhodná pro výpočet druhých derivací energie i elektromagnetických tenzorů potřebných pro simulaci spektrálních intenzit. Interpretace pomocí *ab-initio* výpočtů je však často složitá, zvláště díky konformační flexibilitě a silné interakci podvojných iontů s rozpouštědlem, kde vakuové modely selhávají.

Cílem diplomové práce bylo podílet se na budování nového ROA spektrometru opatřeného zpětně osvětlovaným CCD detektorem s vyšší kvantovou účinností a novým zobrazovacím spektrografem s vyšší světelností.

Dalším úkolem bylo najít vhodné modely pro simulaci spekter aminokyselin a jednoduchých peptidů, zvláště L-alaninu a L-alanyl-L-alaninu. Ke zlepšení výpočtu vibračních harmonických frekvencí byla použita kombinace moderních funkcionálů hustoty B3LYP a BPW91 s COSMO modelem rozpouštědla. Bylo zjištěno, že intenzity spekter ROA jsou velmi citlivé ke konformačním změnám a že některé spektrální rysy je možno vysvětlit jenom přítomností několika konformerů ve vzorku.

Byl prozkoumán konformační prostor podvojného iontu L-alaninu pomocí změny orientace skupin CH<sub>3</sub>, NH<sub>3</sub><sup>+</sup> a COO<sup>-</sup>. Závislost spektra ROA L-alaninu na rotaci skupiny NH<sub>3</sub><sup>+</sup> (<math>\angle C-C-N-H</math>) je zobrazena na obr. 1. K výpočtu byla použita metoda HF/6-31G\* a Onsagerův model rozpouštědla. Ze spekter je možno usoudit, že skupina NH<sub>3</sub><sup>+</sup> je volně otáčivá, na rozdíl od zbývajících skupin CH<sub>3</sub> a COO<sup>-</sup>.



Obr. 1. Simulace spekter ROA L-alaninu pro různé orientace skupiny NH<sub>3</sub><sup>+</sup>.

[1] P. Bouř, J. Kapitán, V. Baumruk: *J.Phys.Chem. A* 105 (2001), 6362-8.

## Stanovení zinku v rostlinných materiálech metodou isotopového zředování

Jana Komínková

Stanovení zinku zahrnuje přidavek roztoku isotopového standardu <sup>68</sup>Zn, mikrovlnný rozklad HNO<sub>3</sub> a H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, separaci Zn na koloně plněné iontoměničím Chelex 100 a měření isotopového poměru (<sup>64</sup>Zn + <sup>66</sup>Zn) / <sup>68</sup>Zn užitím ICP-MS. Separace je nutná kvůli odstranění barya, které může způsobovat spektrální interference. Po optimalizaci standardního operačního postupu byla metoda validována. Byla nalezena hodnota meze detekce 0,27 μg.g<sup>-1</sup> pro proceduru bez separace a 3,55 μg.g<sup>-1</sup> pro proceduru zahrnující separaci Zn na ionexu. Správnost metody byla ověřena analýzou několika certifikovaných referenčních materiálů. Byl proveden rozbor zdrojů nejistoty a vypočtena rozšířená nejistota. Hlavním zdrojem nejistoty jsou kontaminace během separačního procesu a standardní nejistota isotopového zastoupení přírodního zinku ve vzorku.



Perkin Elmer, s.r.o.  
Nad Ostrovem 1119/7  
147 00 Praha 4  
Tel.: 02/41430534  
Fax: 02/41430535

## LABWORKS

Laboratory Information Management System

Firma PerkinElmer nabízí laboratorní informační a řídicí software Labworks™ LIMS. S jeho pomocí můžete řídit analýzy a zpracovávat výsledná data.

Software Labworks™ LIMS nabízí mnoho dalších funkcí jako jsou:

- ◆ Sledování vzorků v systému
- ◆ Rozsáhlá validace dat
- ◆ Snadná tvorba reportů pomocí MS Office
- ◆ Kompletní archivace a vyhledávání dat
- ◆ Interní uložení metod
- ◆ Výkonné nástroje pro správu záznamů
- ◆ Zabezpečení databází a aplikací
- ◆ Grafické uživatelské rozhraní
- ◆ Konfigurace oken a formátu podle požadavků uživatele
- ◆ Uživatelem definovaná pole
- ◆ Kompatibilní se všemi produkty Microsoft Office
- ◆ Možnost připojení čtečky čárového kódu vzorků
- ◆ Různé volby pro zpracování rutinních a naléhavých vzorků
- ◆ Údržba a kalibrace přístroje
- ◆ Statistické vyhodnocení dat
- ◆ MRP rozhraní (např. SAP, JD Edwards, AspenTech)

Prodej a servis analytických přístrojů:

- Anorganická analýza  
(AAS, ICP-OES, ICP-MS)
- Organická analýza  
(FTIR, UV/VIS, fluorescence, polarimetrie)
- Chromatografie  
(GC, GC-MS, LC, LC-MS)
- Termická a elementární analýza  
(DSC, TGA, TG/DTA, TMA, DMA, CHN/S/O)
- Informační systémy  
(LIMS, Sombriila, TotalChrom)

### NABÍDKA PUBLIKACÍ SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI JMM

Skripta AAS	42,- Kč
Inorganic Environmental Analysis	161,- Kč
Referenční materiály (přednášky)	93,- Kč
Proceedings of the 18 <sup>th</sup> IMMS	150,- Kč
Skripta AAS II (pro pokročilé)	373,- Kč
Názvosloví IUPAC (Part XII, XIII)	35,- Kč
Organická hmotnostní spektrometrie	80,- Kč
Kurz ICP pro pokročilé	120,- Kč
Kurz AAS pro pokročilé 1996	120,- Kč
Metodická příručka pro uživatele FTIR spektrometru	100,- Kč
Nejistota a návaznost výsledků spektroskopických metod. Základní kurz	460,- Kč
Kurz Spojení HPLC/MS (2001)	270,- Kč

Objednávky (do vyčerpání zásob) přijímá písemně nebo telefonicky sekretariát Společnosti (pí. Pavla Vampolová, tel. 02 – 3333 2343).

### NABÍDKOVÁ A POPTÁVKOVÁ SLUŽBA ČLENŮ SPOLEČNOSTI

Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích,  
Výzkumný ústav rybářský a hydrobiologický ve Vodňanech

nabízí k odprodeji plně funkční **atomový absorpční spektrofotometr Varian-SpectrAA-300** s kompletním vybavením (grafitový atomizátor GTA-96, generátor hydridů VGA-76, programovatelný podavač vzorků PSC-56, hořáky acetylen-vzduch a oxid dusný-acetylen, lampy, náhradní díly, spotřební materiál, pracovní příručky) za zůstatkovou cenu 312 tis. Kč. Informace na tel: 0342-382 632, Ing. Valentová.

### Pražské pracoviště Ústavu analytické chemie AVČR

má zájem o koupi jiskřiště z Q24 nebo PGS 2 Zeiss, případně i dalších optických elementů.

#### Kontakt:

Dr. Jiří Dědina

UIACH AVČR

Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4

tel.+ záznamník: (02) 4752490 (přímá linka)

fax: (02) 4752499

E-mail: dedina@biomed.cas.cz

---

### **Spektroskopická společnost Jana Marka Marci**

<http://www.spektroskopie.cz>

adresa sekretariátu: Thákurova 7, 166 29 Praha 6

redakční rada: Dr. Milan Fara (předseda), Doc. Viktor Kanický, Dr. Blanka Vlčková

tech. redakce: Pavla Vampolová

redakční uzávěrka: prosinec 2001, uzávěrka příštího čísla: únor 2002