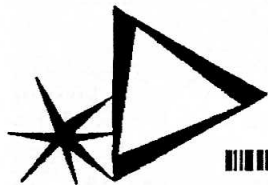


Spektroskopická společnost  
Jana Marka Marci 436  
166 29 Praha 6, Thákurova 7



SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARKA MARCI

BU L L E T I N

BULLETIN  
SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI  
JANA MARKA MARCI

Číslo 111

únor 2002

<http://www.spektroskopie.cz>  
e-mail sekretariátu: [immss@spektroskopie.cz](mailto:immss@spektroskopie.cz)  
nové telefonní číslo sekretariátu: (02) 3333 2343

Paní Pavla Vampolová



Troufám si říci, že téměř každému, kdo pracoval v oblasti spektroskopie a spektrochemické analýzy, se při vyslovení „Spektroskopická společnost“ okamžitě vybaví "paní Vampolová". Připouštím, že tomu tak nemuselo být ještě v dobách existence Sdružení pro výzkum ve spektrální analýze, ale za posledních třicet let to platí určitě. Dokonce si nedovedu ani představit, že by tomu mohlo být jinak. A to už patřím mezi skutečné pamětníky. Vzpomínám si, jak jednoho dne přišla do spektroskopické laboratoře Výzkumného ústavu ČKD PRAHA, který tehdy byl azylovým sídlem spektroskopické společnosti, paní, která se představila jako Vampolová, nová sekretářka Československé spektroskopické společnosti při ČSAV. Ani ve snu by mě tenkrát nenapadlo, že nová paní sekretářka bude jednou živoucí kronikou této společnosti.

S příchodem paní Vampolové se vyřešilo i trvalé sídlo sekretariátu společnosti, který byl přestěhován do domu, kde paní Vampolová bydlela, na dnes již památnou adresu Praha 6, Kozlovská 1. Tam se za vydatného přispění paní Vampolové začala psát významná etapa historie dnešní Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci.

Vím, že paní Vampolová před příchodem do společnosti pracovala jako sekretářka ředitele Výzkumného ústavu pro stavbu strojů v Běchovicích, kde jistě získala vynikající kvalifikaci. Ale já ji podezírám, že vedle svého zaměstnání musela nějak dálkově studovat problematiku spektroskopické společnosti, protože když přišla, začala okamžitě pracovat s takovým nasazením a přehledem, jakoby ve společnosti byla od samých začátků. Poměrně tehdy složitou organizační strukturu společnosti měla v malíčku, znala všechny funkcionáře a naprosto dokonale se orientovala ve vztazích s Úřadem prezidia ČSAV, kterému společnost tehdy podléhala, s čímž i mnozí ostřílení funkcionáři měli neskonale potíže. Jsem přesvědčen, že to byla především zásluha paní Vampolové, že nás prezidium bralo jako vysoce aktivní, uznávanou vědeckou společnost. Nikdy jsme nic závažného neprošvihli a kontroly se vyjadřovaly pouze pochvalně. Díky tomu měla společnost na prezidiu otevřené dveře kdykoli potřebovala třeba pozvat zahraniční hosty nebo uspořádat nějakou významnou mezinárodní akci, což bylo v tehdejších podmínkách skutečně velmi problematické.

To platilo zejména, když jsme připravovali a pořádali v roce 1977 Colloquium Spectroscopicum Internationale. Byla to velká a slavná akce. Samozřejmě bylo s ní spousta organizační práce a i když byly na organizační práce přijaty další dvě spolupracovnice paní Dvořáková a paní Večerková, hlavní tíha ležela na paní Vampolové. Obdivuhodné bylo, že Colloquium, stejně jako všechny jiné akce, zvládala paní Vampolová s naprostým přehledem a jak se říká, "vždy s úsměvem".

Rádi vzpomínáme na Československé spektroskopické konference, zvláště pak na ty, které se konaly v Českých Budějovicích. Bez paní Vampolové bychom si je nedovedli ani představit - a všechno vždy dopadlo dobře. Těch nejrůznějších požadavků zahraničních účastníků, hostů i našich účastníků, přání a dotazů, které musela paní Vampolová při těchto akcích řešit, to by vydalo na pořádně dlouhé litanie.

Přestože Spektroskopické konference byly vždy vyvrcholením odborného snažení, pro většinu praktických spektroskopiků byly nezapomenutelné pověstné odborné semináře v Chlumu u Třeboně a v Klučenicích. Chlum u Třeboně se stal legendárním místem a Mekkou atomových spektroskopiků od světově proslulého Colloquia '77, které zde pokračovalo sekcí atomové absorpční spektrometrie. V Klučenicích na radioanalytických seminářích INAA, kde byl ženský prvek značně omezen, mohla paní Pavla Vampolová uplatnit zkušenosti z výchovy svých tří synů. Silní mužové, včetně správce klučenického zařízení, ji poslouchali téměř na slovo a za zásluhy při zajišťování pozdních druhých večerí ji téměř na rukou nosili. Na těchto seminářích by nebyla tak skvělá a přátelská atmosféra, nebýt vstřícnosti, organizačního talentu a operativnosti paní Vampolové. Její obdivuhodná paměť na jména a lidské tváře jí dovoluje každého vždy správně oslovit a zařadit a podle možností okamžitě vyhovět všem rozumným a často i nerozumným přáním.

Nepamatuji si, že by si paní Vampolová nějak moc stěžovala nebo že by se pod organizační tíhou hroutila. Samozřejmě problémů bylo vždy dost, ale paní Vampolová měla vždy

dostatek sil a energie a když přišel večer sedla si s námi k družné zábavě a byla-li příležitost, tak si s námi i zatancovala. Nejsem žádný vášnivý tanečník, ale polku s paní Vampolovou jsem si vždy rád zatančil. A bylo mnoho dalších, kteří se také těšili na taneček s paní Vampolovou.

Jednu mimořádnou schopnost paní Vampolové ale musím zvláště zmínit. Neznám nikoho, kdo by dovedl upéct lepší štrůdl, než ona. Občas ho upekla a přinesla na zasedání předsednictva společnosti v Kozlovské. Takže telefonické pozvání na schůzi znělo: "nemůžeš si to nechat ujít, paní Vampolová peče štrůdl".

S paní Vampolovou jsme zažili mnoho příhod, které se již staly součástí historie Spektroskopické společnosti. A byly to události mnohdy nepříjemné, které se musely řešit v tehdejších podmínkách politického tlaku na odborné společnosti velmi obezřetně. Lidský, logický a vždy optimistický přístup paní Vampolové k řešení ale dokázal překonat bariéry, které si dnes již nedokážeme ani představit.

Já si myslím, že když se paní Vampolová narodila (to měla pochopitelně jiné příjmení), tak u její kolébky stáli místo sudiček určitě pánové Jan Marek Marci z Lanškrouna, Kirchhoff s Bunsenem a pan profesor Otakar Quadrát. Ti zřejmě rozhodli, že se milá Pavla později stane paní Vampolovou a že své životní poslání naplní prací pro rozvoj spektroskopie. Tak se také stalo - a jak říkáme my ateisté, "Díky Bohu!". Proto nás ani nepřekvapí, že právě tato mimořádná dáma se 6. 3. 2002 v plné svěžesti a pracovním elánu dožívá významného životního jubilea, které pochopitelně nemohu prozradit. Ale mohu říci, že na tu sedmdesátku vůbec nevypadá.

*Takže vážená a milá naše paní Vampolová, dovolte, abych jménem pamětníků "od spektroskopu" a hlavně jménem všech, kteří Vás mají rádi a velice si Vás a Vaši práci váží, Vám poděkoval za obdivuhodné, i když mnohdy skryté, dílo pro českou spektroskopii, za to, že nás máte ráda, a že jste to s tou spektroskopií i s námi tak dlouho vydržela. My všichni Vám gratulujeme ke krásnému životnímu výročí a přejeme Vám pevné zdraví a vše jen to nejkrásnější a nejlepší. Ať Vám Váš životní elán ještě dlouho a dlouho vydrží, abyste to mohla s námi a hlavně s těmi mladšími vydržet ještě dál.*

RNDr. Jan Mráz, CSc.

### **Předsednictvo hlavního výboru Spektroskopické společnosti JMM blahopřeje**

dlouholeté pracovníci sekretariátu **paní Pavle Vampolové** u příležitosti jejího životního jubilea, děkuje jí za dosavadní práci i za zásluhy na zvládání organizačně náročných úkolů a přeje mnoho zdraví, stále dobré nálady a osobních i pracovních úspěchů do dalších let.

*Prof. Karel Volka, předseda*

## **Soutěž o nejlepší práci v oboru spektroskopie mladých autorů (do 35 let), ročník 2002**

vyhlašuje Spektroskopická společnost JMM, a to ve dvou kategoriích:

**A** - diplomové práce

**B** - publikované původní práce, resp. soubor prací.

Součástí soutěže je ústní prezentace výsledků práce na veřejné části zasedání hodnotící komise. Zasedání komise bude ukončeno vyhlášením výsledků soutěže a předáním cen. V každé kategorii budou vyhodnoceny maximálně 3 nejlepší práce; s oceněním je spojena finanční odměna až ve výši 3 000,- Kč pro kategorii A, resp. 5 000,- Kč pro kategorii B. O uskutečnění soutěže rozhodne předsednictvo Spektroskopické společnosti JMM podle počtu přihlášených prací.

Podmínky účasti v soutěži:

Zaslání či osobní doručení přihlášky a 2 exemplářů soutěžní práce (příp. prací) na adresu sekretariátu od 15. 5. do 15. 10. 2002.

V přihlášce do soutěže je třeba uvést:

**jméno, příjmení, tituly**

**datum narození**

**kategorii soutěžních prací**

**obor spektroskopie**

**adresu pracoviště, na němž byla práce vypracována**

**současnou kontaktní adresu (včetně PSC, příp. fax, telefon, E-mail).**

V případě přihlášky do kategorie B je třeba přiložit **prohlášení spoluautorů** o podílu soutěžícího na předložené práci.

Ústní prezentace proběhne v prosinci a přihlášení účastníci budou k účasti na ústní prezentaci písemně vyzváni. Po skončení soutěže budou všechny doručené materiály soutěžícím vráceny. Po ústní prezentaci budou mimopražským účastníkům uhrazeny cestovní náklady na základě předložených jízdenek.

**Adresa sekretariátu:** Thákurova 7, 166 29 Praha 6.

Další informace je možné získat na [www stránkách www.spektroskopie.cz](http://www.spektroskopie.cz).

## **Výzva členům Společnosti**

Vedení Společnosti se snaží prostřednictvím Bulletinu a webových stránek přinášet co nejvíce aktuálních informací o dění ve Společnosti, a to zejména o větších a vícedenních akcích, které organizačně zajišťuje. Vlastní život Společnosti v našich podmínkách ale spočívá především v akcích menších, třeba půldenních, které organizují odborné skupiny. In-

formace o těchto akcích se nám z Bulletinu vytratily, i když byly dříve hojně publikovány. Připomínáme proto, že do Bulletinu může každý z členů Společnosti přispět, ať již zprávou o připravovaných nebo uskutečněných odborných setkáních, nebo aktualitou, zkušenostmi či zajímavými postřehy ze seminářů a z konferencí.

Mrzí nás také, že přes veškerou snahu má naše soutěž mladých spektroskopiků malou odezvu. Počet soutěžících je malý, někdy už nejde o soutěž, ale vystoupení jednotlivců. Rád bych požádal především všechny kolegy na vysokých školách či na ústavech AV ČR, aby o soutěži informovali studenty nebo své kolegy na pracovištích a pokusili se je pro soutěž získat. Je to jistě v zájmu spektroskopie.

*Prof. Karel Volka, předseda*

## **2002 Winter Conference on Plasma Spectrochemistry, Scottsdale, Arizona**

*Viktor Kanický*

Ve dnech 6. až 12. ledna 2002 se uskutečnila ve Scottsdale v Arizoně v pořadí již dvanáctá Winter Conference on Plasma Spectrochemistry konaná na americkém kontinentu. Tato konference pořádaná každé dva roky je věnována pokrokům ve spektrochemické analýze s indukčně vázaným plazmatem (ICP), stejnosměrným plazmovým výbojem (DCP), mikrovlnným plazmatem (MIP), doutnavým výbojem (GDL, HCL) a v analýze s využitím laseru. Konference je organizována Dr. Ramonem M. Barnesem z University Research Institute for Analytical Chemistry (URIAC), Amherst, Massachusetts s finanční podporou *ICP Information Newsletter*.

Historie konference spadá do počátku 80. let (San Juan, Puerto Rico 1980). V následujících letech se konala na těchto místech: Orlando, Florida (1982), San Diego, California (1984, 1988, 1992, 1994), Kailua-Kona, Hawaii (1986), St. Petersburg, Florida (1990), Fort Lauderdale, Florida (1996, 2000) a Scottsdale, Arizona (1998, 2002). Počet účastníků vzrostl z původních 170 na současných 600 ze 30 zemí. Příspěvky prezentované na konferencích byly publikovány v mezinárodních spektroskopických časopisech *Spectrochimica Acta Part B* (1981, 1983, 1985, 1987), *Journal of Analytical Atomic Spectrometry* (1988, 1990, 1992, 1994, 1996, 1998, 2000) a *Fresenius Journal of Analytical Chemistry* (1998, 2000).

Na letošní konferenci prezentovalo své výsledky více než 200 autorů ve 300 přednáškách a plakátových sděleních. Příspěvky budou publikovány na podzim v roce 2002 ve speciálních číslech časopisů *Analytical and Bioanalytical Chemistry* (vznikl spojením *Fresenius Journal of Analytical Chemistry* a *Analysis*) a *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*. Jednotlivá symposia byla věnována následujícím tematům: 1) Zavádění vzorků a transportní jevy; 2) Zavádění pevných vzorků a spektrochemická analýza; 3) Prvková speciace pomocí kombinace plazmových a separačních technik; 4) Plazmová spektrometrie

s využitím laserů; 5) Instrumentace, chemometrie, expertní systémy, mikroplazmata, on-line analýza, software, automatizace dálkově řízených systémů; 6) Příprava vzorků, zpracování a automatizace; 7) Excitační mechanismy, procesy v plazmatech a jejich modelování; 8) Spektroskopické standardy, referenční materiály a materiály vysoké čistoty; 9) Hmotnostní plazmová spektrometrie; 10) Hmotnostní a atomová spektrometrie s doutnavým výbojem; 11) Plazmová hmotnostní spektrometrie s vysokým rozlišením; 12) Přesná izotopová analýza se stabilními izotopy. Na uvedená témata zaznělo 6 plenárních a 20 vyzvaných přednášek. Vyzvanými řečníky byli významní odborníci v oboru analytické spektrochemie: J. S. Becker, R. Beckett, A. Bogaerts, J. Broekaert, J. Caruso, B. Denton, O. Donard, D. Douglas, I. Griffin, D. Guenther, K. Heumann, G. Hieftje, N. Jakubowski, G. Knapp, D. Koppenaal, R. Lobinski, R. K. Marcus, J.-M. Mermet, A. Montaser, N. Miller-Ihli, J. Olesik, A. Sanz Medel, S. Tanner a F. Vanhaecke. Panelové diskuse, sympozia a semináře moderovali F. Adams, A. Bengtson, M. Blades, R. Browner, I. Brenner, S. Caroli, C. Grégoire, V. Karanassios, H. M. Kingston, V. Majidi, L. Moens, P. Uden a W. Wegscheider.

Čtyři odpoledne byla věnována plakátovým sdělením zejména v oblastech aplikací, automatizace a nové instrumentace. Šest panelových diskusí ve večerních hodinách hodnotilo vývoj v oblastech zavádění vzorku, instrumentace, prvkové speciace, plazmové hmotnostní spektrometrie, řízení jakosti a nejistotě měření a dále vyučování spektroskopii. Konferenci doprovázela třídní výstava spektroskopické instrumentace, chemikálií, skleněných náhradních a spotřebních dílů, publikací a software, na niž se prezentovalo 40 společností a organizací. Ve večerních hodinách probíhal současně po tři dny seminář o nové spektroskopické instrumentaci, přídatných zařízeních a vybavení pro přípravu vzorků, na němž bylo předneseno 24 firemních přednášek. Pro platící zájemce byly uspořádány před vlastní konferencí ve dnech 4. až 6. ledna 3 krátké kurzy pod názvy Analýza plazmovou spektrometrií, Instrumentace a Plazmové spektrochemické techniky.

Podobně jako na předcházející *European Winter Plasma Spectrochemistry Conference* 2001 v Lillehameru, většina příspěvků, seminářů, diskusních panelů a plakátových sdělení se týkala hmotnostní spektrometrie s ICP zdrojem. Příčinou jsou dosahované nízké hodnoty mezi detekce, které tuto instrumentaci předurčují pro speciální prvkovou analýzu ve spojení se separačními technikami zpracovávajícími velmi malá absolutní množství vzorku. Speciace byly v několika příspěvcích zmiňovány jako podpurné, vysoce selektivní metody pro biochemické a molekulárně biologické výzkumy biomakromolekul. Spojení ICP-MS s laserovou ablací se objevovalo zejména v souvislosti s lokální analýzou například geologických materiálů, kde se uplatňují nízké meze detekce při zpracování signálu získaného jediným laserovým impulsem (single-shot analysis). Z metod založených na použití laseru se dostává do popředí zájmu laserová emisní spektrometrie založená na excitaci v laserovém mikroplazmatu (LIBS, laser induced breakdown spectroscopy), zejména pro analýzu „in situ“ v exponovaných situacích (radioaktivní materiály, tavby). Již tradičním tématem na této konferenci je izotopová analýza s ICP-MS s použitím spektrometrů s vysokým rozlišením. Svoje místo na slunci si postupně získávají alternativní

plazmové zdroje, spějící k miniaturizaci a jednoúčelovému nasazení například v procesní analytice. Jim bylo věnováno symposium „Plasma on chip“. Vedle ICP je pozornost věnována doutnavým výbojům, a to jak technickému vývoji a analytickým aplikacím, tak i modelováním procesů v plazmatu. Analytické aplikace všech metod se týkaly životního prostředí, potravin, farmaceutických produktů, medicíny, věd o Zemi, materiálových věd a mikroelektroniky.

Scottsdale jako část arizonské metropole Phoenix leží v Sun Valley s jeho 330 slunečnými dny v roce, což se projevilo příjemnými teplotami kolem +25°C. Dobře zorganizovaný vědecký program vhodně doplnil program společenský, ať již ve formě „social mixers“ nebo večere v „mexické haciendě“. Za úspěšný průběh konference je třeba vyjádřit dík Dr. Ramonu Barnesovi a kolektivu jeho spolupracovníků, k nimž patří i doc. Eva Reitznerová z Technické univerzity v Košicích.

### Mezinárodní projekt spektroskopické databanky

*Karel Volka*

Někteří čtenáři četli podobný anglický nadpis v článku Prof. A. N. Daviese, uveřejněném v loňském 5. čísle časopisu *Spectroscopy Europe*. Tento článek uváděl souvislosti, které daly vznik novému projektu s názvem EUROSPEC, či plným názvem: „Access to Research Spectroscopic Data and Associated Chemical Knowledge“. Jedná se o projekt, který byl podpořen v rámci 5. rámcového programu „EU Competitive and Sustainable Growth Programme“. Idea tohoto projektu je velmi prostá.

Dnes registrujeme kolem 20 milionů chemických sloučenin a pokud bychom chtěli získat přesný údaj, nestačilo by asi uvést jenom datum a hodinu (21. září 2001 v 10:06:45 bylo registrováno 18 683 587 organických a anorganických sloučenin). Naproti tomu nejrozsáhlejší databáze spekter obsahují v nejlepší podobě statisíce spekter. Přitom většina registrovaných látek byla charakterizována některou ze spektrálních technik. Kde jsou ta spektra?

Starší generace spektroskopiků pamatuje, že nebýval problém uvést spektrum v publikaci. Takové spektrum bylo sice často pro čtenáře málo informativní (zvláště pokud bylo překreslováno), ale určitou představu o měřené látce čtenář získal. Šetření místem pak vedlo k tomu, že se spektra zredukovala jen na výčet maxim, často ani to ne. Bylo nežádoucí takové materiály v pracích, které neměly vysloveně spektroskopický charakter, připojovat. Nikdo již neměl šanci se k takovému spektru vrátit, porovnat, analyzovat.

Cílem projektu je tuto situaci změnit. Do redakce časopisu budou moci autoři zasílat nejen články, ale i spektra. V rámci projektu bude vytvořen webový systém, dovolující zaslání elektronických dat přímo do databáze. Spektrum se posoudí v rámci recenzního řízení.



# Thermo Elemental

## ICP - IRIS Intrepid

www.hilger.cz



- 3. generace spektrometrů s polovodičovým detektorem
- vynikající rozlišení - 3 pm/pixel
- rozsah vlnových délek od 130 nm do 1000 nm
- plasma - axiální, radiální, duo
- kompaktní, robustní provedení

HILGER s.r.o., Místecká 258, 720 02 Ostrava-Hrabová

Tel.: 069 6718912, fax: 069 6721158, e-mail: hilger@hilger.cz

Tím se zvýší nejen hodnota publikace, ale cenné spektroskopické informace budou uloženy pro další využití. Jakmile bude článek přijat k publikaci, spektroskopická data a s ním spojené chemické informace budou dostupné v elektronické verzi práce nebo – pro ty užívající tištěnou formu časopisu – prostřednictvím webového vyhledávače.

Podobnou praxi dosud provozovala jen obec proteinových krystalografů, která požaduje registraci dat použitých pro řešení struktury jako podmínku pro publikaci. Zdá se, že tato myšlenka bude podpořena i většinou vydavatelů chemických časopisů. I když se jedná o projekt podpořený EU, participovat budou i významné organizace americké, a tak lze očekávat, že se v řadě časopisů v dohledné době objeví v instrukcích pro autory výzva k ukládání spektrálních dat, spojených s danou prací.

Projekt má vybudovat potřebnou infrastrukturu pro ukládání spekter, aby bylo co nejněsnější ověřit její fungování (pamatováno bude na jazykové mutace a lze počítat s tím, že mezi prvními bude i příslušná webová stránka v češtině) i případná rizika a připravit podmínky pro její zachování po roce 2004, kdy tato úvodní fáze projektu skončí. Vysoká škola chemicko-technologická se stala spoluřešitelem tohoto projektu, což usnadní, abychom mohli členy naší Společnosti o všech novinkách průběžně informovat.

### Oznámení předsednictva hlavního výboru Spektroskopické společnosti JMM

Podobně jako v minulém roce, podpoří i letos naše Společnost své členy v účasti na konferencích se spektroskopickou tematikou.

Žádosti o podporu účasti členů Společnosti na konferencích se spektroskopickou tematikou v r. 2002 je třeba zaslat na adresu sekretariátu Společnosti do 30. března 2002. O podpoře rozhodne předsednictvo HV a seznam členů, kteří získají podporu, bude uveřejněn do konce dubna. Přednostně budou podpořeny žádosti, které budou jasně formulovat představu uchazeče o způsobu propagace naší Společnosti v rámci jeho účasti.

### Konference Anorganická analýza životního prostředí

Univerzita Pardubice a Spektroskopická společnost JMM pořádají v Pardubicích ve dnech 26. - 29. srpna 2002 konferenci s mezinárodní účastí III. Anorganická analýza životního prostředí. Konference navazuje na pravidelné semináře organizované komisí pro aplikaci spektroskopických metod pro kontrolu životního prostředí, její odborná náplň je však rozšířena tak, aby zahrnovala většinu metod zabývajících se anorganickou analýzou životního prostředí. Cílem konference je vytvoření diskusní platformy mezi pracovníky akademických ústavů, vysokých škol a širokým spektrem praktických laboratoří zabývajících se analýzou životního prostředí. Program bude doplněn také o diskusní odpoledne věnované problematice legislativy, akreditace laboratoří a informačních systémů.



## SPECTRO CS

S. r. o.

Rudná 51, 700 30 Ostrava-Zábřeh

☎ 069 676 2840

Fax: 069 676 2849

e-mail: [info@spectro.cz](mailto: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

SPECTROTEST

- mobilní spektrometr s parametry laboratorního přístroje

### 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 analyzátoři 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
- mokry i suchý způsob měření

**CERTIFIKOVANÉ REFERENČNÍ MATERIÁLY:** fy MBH Analytical, Velká Británie

**Pro všechny produkty žádejte podrobnější informace**

### Hlavní témata konference:

- ❖ Odběr a příprava vzorků, prekoncentrační techniky
- ❖ Atomová absorpční spektrometrie
- ❖ Optická emisní spektrometrie
- ❖ Atomová fluorescenční spektrometrie
- ❖ Anorganická hmotnostní spektrometrie
- ❖ Rentgenfluorescenční analýza
- ❖ Rentgenfluorescenční mikroanalýza
- ❖ NAA
- ❖ Speciace a spojené techniky
- ❖ Zabezpečení jakosti výsledků, zpracování dat, chemometrie

Príspevky budú prezentované jako zvané přednášky, plenární přednášky (40 min. + 5 min. diskuse), krátké přednášky (15 min. + 5 min. diskuse), postery (90x120 cm) a jako příspěvky do diskusního odpoledne (legislativa, akreditace aj., 5-10 min.). Preferovány jsou příspěvky v angličtině, možná je ale i čeština nebo slovenština; u posterů se předpokládá pouze angličtina. Konference bude doplněna doprovodným a společenským programem. Místem konání je kongresové centrum Univerzity Pardubice, ubytování je zajištěno v okolí (hotel cca 800,- Kč/noc, studentská kolej cca 250,- Kč/noc). Pro kolektivní členy Společnosti je poplatek včetně sborníku 1 200,- Kč.

Korespondenci týkající se konference je třeba zasílat na adresu [IEAconference@upce.cz](mailto:IEAconference@upce.cz). Podrobnosti o konferenci a přihlášku lze nalézt na internetové stránce Společnosti [www.spektroskopie.cz](http://www.spektroskopie.cz).

### Kurzy vibrační spektroskopie 2002

*Bohuslav Strauch*

OS vibrační spektroskopie ve spolupráci s Ústavem analytické chemie a pracovníky centrálních laboratoří VŠCHT Praha pořádala koncem ledna a počátkem února své již tradiční kurzy. K týdenním kurzům Měření infračervených spekter a Interpretace vibračních spekter přibyl jako novinka třídní kurz, věnovaný Kvantitativní molekulové spektroskopii, o němž pojednává dále Pavel Matějka. Kurzy se konaly v budově pražské Vysoké školy chemicko-technologické v posluchárně A11 a pracovnách Ústavu analytické chemie resp. centrálních laboratoří.

### **I. kurz „Měření infračervených spekter“, 21. - 25. 1. 2002, 30 účastníků**

Po úvodních slovech doc. B. Straucha o naší společnosti a krátké informaci o osobě Jana Marka Marci obdrželi frekventanti kurzovní materiály (seznam literatury z oboru, základní

typy spekter, vlastnosti optických materiálů v IČ oblasti, nepravé pásy ve spektrech a tzv. problémová spektra) a byli upozorněni na vhodné příručky resp. literaturu oboru.

Jako vždy je úvodní přednáška (Dr. S. Hilgard) věnována základním pojmům a popisu spekter. Následoval tzv. „Mixer“, při němž se frekventanti a vedoucí cvičení vzájemně představili. Kromě pracoviště a pracovní problematiky zhodnotil každý účastník svou zdatnost a projevil své zájmy, podle toho byly pak konstituovány pracovní skupiny ve cvičeních, jež následovala. Tento způsob se nám velmi osvědčuje.

Po přednášce o FTIR spektroskopii (Dr. Pásztor) pojednal o přípravě vzorků a standardních používaných technikách při měření infračervených spekter Ing. Machovič, který zastoupil nemocnou Ing. Novotnou, jejíž absence v letošních kurzech nás velmi mrzela. Nicméně, za její alespoň myšlenkovou pomoc zejména v nově koncipovaném kurzu Kvantitativní analýzy, jí patří dík organizátorů kurzů. Ing. Machovič prezentoval dnes silně frekventované metody reflexní spektroskopie a spolu s Dr. Matějkou se podílel na přednáškách o počítačovém zpracování spekter, knihovnách a spektrech na Internetu. Půldruhého hodiny bylo věnováno kvantitativní analýze (Ing. Tenkl) a možnostem analytických aplikací v blízké infračervené oblasti – NIR.

Tzv. „hyphenated technics“ – spojení FTIR spektroskopie s ostatními metodami (FT-Raman, GC, LC, TGA) přednesené Dr. Šikolou doplnila informace o IČ mikroskopii (tentokrát Dr. Pásztor). Postavením a přínosem IČ ve vědě a praxi, její efektivitou se zabýval doyen instruktorského sboru, doc. Milan Horák. Přednáškový program kurzu ukončil doc. Strauch komentářem o literatuře z vibrační spektroskopie, upozornil na nepravé pásy jednak při stálých a jednak při proměnlivých vlnočtech a demonstroval příklady správně a chybně snímaných spekter. Na závěr kurzu pak spolu s Dr. Hilgardem uvedl příklady účinného použití IČ spektroskopie v praxi.

Praktická cvičení proběhla v šesti pracovních skupinách po tři odpoledne za kontrolované účasti frekventantů; jako obvykle byla na programu metodika měření plynů, kapalin, kalibrace a měření tloušťky květy, manipulace s optickým materiálem (Dr. Janečková, Ing. Kohoutová a Ing. Javůrková), spektra v pevné fázi s přípravou emulzí a tablet, problémy interakce (Dr. Kesner), reflexní metody – ATR, DRIFT (Dr. Pásztor) a procesní zpracování dat v IČ spektrech (Dr. Matějka).

Z „Mixeru“ a tradičních závěrečných anketních lístků lze usoudit, že pole působnosti IČ spektroskopie vedle tradičních sfér přichází do zbožíznalství, v zemědělství do pedologie, biologických procesů rostlinné výroby, rozšiřuje se dále problematika ochrany životního prostředí, velmi rozmanitý program anonují ze zlínské Univerzity T. Bati.

O zdar kurzu se významně zasloužili též pracovníci fy Nicolet CZ, s.r.o a svým příspěvkem i fa Bruker, Brno.

Na základě své účasti a aktivity obdrželi všichni účastníci osvědčení o absolvování kurzu s hologramem Jana Marka Marci.

## II. kurz „Interpretace vibračních spekter“, 28. 1. – 1. 2. 2002, 35 účastníků

Kurz opět zahájil doc. Strauch podrobnější informací o osobnosti Jana Marka Marci a o historickém vývoji vibrační spektroskopie zejména v přístrojové oblasti, opět byly frekventantům rozdány materiály pro cvičení v interpretaci spekter s tabulkami charakteristických frekvencí a úkoly k řešení. Doc. Strauch se v úvodní přednášce tradičně zabýval teorií vibrací jednoduchých molekul, základními vibračními mody, jejich klasifikací a spektrálními projevy. Dr. Hilgard se v chemické aplikaci věnoval charakteristickým frekvencím u jednotlivých typů organických látek a funkčních skupin a efektům okolí (substituce, druhy vazeb, spřažení) v molekulách. O vnějších interakcích a efektech pohovořil doc. Horák. V identifikacích látek ze spekter, databázích a internetovém využití tentokrát nemocnou Ing. Novotnou zastoupili Ing. Machovič a Dr. Matějka, který frekventantům předvedl také výukový program spektrálních metod Spectool. Ramanově rozptylu a spektrům v anorganické chemii se stručně věnoval doc. Strauch a souvislostmi ve vibračních spektrech a jejich využitím v současné vědě i praxi se zabývala doc. Vlčková. S přednáškami se průběžně prolínala analytická interpretační cvičení (Strauch, Hilgard) a taktéž skupina cvičení u počítačů (Matějka). Velké popularitě se opět těšil demonstrační program PE-TUTOR.

V závěru kurzu byla opět tradiční soutěž v interpretaci IČ spekter, připravená pracovníci Centrálních laboratoří VŠCHT, jejichž výsledky vyhodnocoval pak celý kolektiv vedení kurzů. Soutěžní spektra: toluen, nonanová kyselina, ethylisobutyryát, isobutyronitril, anilin, propionát sodný, 1,6-hetandien-4-ol, kyselina benzoová, nonylaldehyd, 3-nonanon, 2-jodpropan, 1-hexen, uhličitán vápenatý (kalcit), hydratovaný křemičitan vápenatý a oxid vápenatý (kontaminace H<sub>2</sub>O a CO<sub>2</sub>). Nejlepší řešitelé, odměnění cenami:

|                      |                              |        |
|----------------------|------------------------------|--------|
| 1. Petr Foltýn,      | Univerzita Tomáše Bati, Zlín | 105 b. |
| 2. Alena Kalendová,  | Univerzita Tomáše Bati, Zlín | 97 b.  |
| 3. Robert Kusák      | Univerzita Tomáše Bati, Zlín | 96 b.  |
| 4. Tetjana Ostapčuk, | Fyzikální ústav AVČR         | 95 b.  |
| 5. Alena Glabazňová, | IVAX-CZ, Opava               | 72 b.  |

Tentokrát jsme v úvodu kurzu zapomněli na „seznamovací Mixer“, napraveno bylo ve čtvrtek; z anketních lístků přišly některé podněty, motivující nás k dalším zlepšením. Bude vhodné názorný program Tutor zařadit v úvodu s opětným opakováním a prezentaci spekter digitalizovat s projekcí. Z profilu frekventantů rovněž vyplývá, že ne všichni mají dostatečnou chemickou erudici, což vyžaduje hlubší popis konstituce molekul (s terminologií), možná na úkor palety příkladů. Kurz je pochopitelně náročný jak fyzicky, tak intelektově. Je hodnocen obecně velmi přínosně. Frekventanti obdrželi opět absolventská

osvědčení. Za organizační a technické zajištění kurzů patří dík Dr. P. Matějкови a pí. Pavle Vampolové.

### Kurz „Kvantitativní molekulová spektroskopie“

*Pavel Matějka*

Ve dnech 4. - 6. 2. 2002 proběhl v prostorách VŠCHT ve svém prvním ročníku kurz kvantitativní analýzy v molekulové spektroskopii za účasti 24 frekventantů. Kurz zahájil doc. Strauch a všichni účastníci se krátce představili s důrazem na zaměření jejich odborné práce.

Základy kvantitativní analýzy podrobně probral Dr. Hilgard. Na odpolední program se účastníci rozdělili do dvou skupin a postupně absolvovali ukázkou softwaru pro „klasickou“ kvantitativní analýzu (s důrazem na výběr spektrálních oblastí) a kratší přednášku doc. Horáka o mezipřístrojové přenositelnosti dat a výsledků.

Úterní program byl věnován multivariačním metodám. V prvé přednášce seznámil doc. Malec s matematickým aparátem multivariačních metod a dále pak Ing. Tenkl pohovořil o možnostech i limitech použití těchto metod, ukázal některé praktické aplikace a představil základy softwaru TQ-Analyst. Program byl uzavřen přednáškou Dr. Matějky s ukázkami využití programu The Unscrambler pro multivariační analýzu spektrálních dat, ať již pro „kvalitativní“ porovnání dat (analýza hlavních komponent), tak pro tvorbu kalibračních modelů v kvantitativní analýze (regresní metody).

Středeční program byl po skupinách věnován praktickým ukázkám zpracování dat (Ing. Machovič) a cvičení s limitovanou verzí programu The Unscrambler Introducer.

Program byl uzavřen předáním osvědčení a připomínkami účastníků. Účastníci hodnotili kurz převážně pozitivně, do budoucna by uvítali praktická cvičení se softwarovými prostředky v menších skupinách (obdobně jako probíhají cvičení v kurzu měření spekter) a přednášku, která by propojovala problematiku měření spekter různými technikami a použitelností získaných dat pro kvantitativní analýzu. Účastníci se shodli na tom, že účast na kurzu byla pro ně přínosná, a také uváděli, že další ročník kurzu by doporučili svým kolegům, či svým studentům a doktorandům.



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

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, Sombrilla, TotalChrom)

Firma PerkinElmer uvádí na trh novinku, přístroj pro atomovou absorpční spektrometrii

## **AAnalyst 200**

- intuitivní ovládání pomocí velkého dotykového barevného LCD displeje – eliminace nutnosti zaškolení pracovníků
- dvoupaprskový Echelle optický systém kombinovaný s polovodičovým detektorem
- plně automatické řízení plynů a integrovaná kontrola bezpečnosti
- velmi jednoduché nastavení a spuštění přístroje
- zabudovaná knihovna doporučí měřicí podmínky pro každý prvek; možnost snadného nastavení metody a její uložení
- integrovaná servisní diagnostická sekce je k dispozici pro snadné vyřešení nesází
- upgrade softwaru je možno stáhnout přes internet a automaticky nainstalovat bez vyřazení přístroje z provozu
- veškerá elektronika je umístěna do jednoduchých, uživatelem vyměnitelných modulů. Uživatel pouze vyjme modul z přístroje a nahradí ho novým.
- kompaktní konstrukce šetří laboratorním prostorem



### **3. Seminář o metodách blízkého pole**

Již třetí seminář o metodách blízkého pole, tj. o rastrovací tunelovací mikroskopii, spektroskopii a příbuzných technikách, se bude konat v Lázních Bohdaneč (u Pardubic) ve dnech 23. – 25. září 2002. Seminář se koná ve spolupráci s OS fyziky tenkých vrstev a povrchů JČMF.

Předpokládaný účastnický poplatek je 700,- Kč, ubytování je zajištěno v hotelu s cenou přibližně 250,- Kč/osobu a noc. Informace podá Dr. Josef Zemek (FÚ AV ČR, Cukrovarnická 10, 162 53 Praha 6) na adrese: zemek@fzu.cz.

### **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 |
| Kvalita výsledků v ET AAS   | 137,- Kč |
| Metodická příručka pro uživatele FTIR spektrometru                        | 100,- Kč |
| Nejistota a návaznost výsledků spektroskopických metod.<br>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).

---

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

<http://www.spektroskopie.cz>

adresa sekretariátu: Thákurova 7, 166 29 Praha 6; tel./fax: (02) 3333 2343

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

tech. redakce: Pavla Vampolová

redakční uzávěrka: únor 2002, uzávěrka příštího čísla: duben 2002