

Thermo
S C I E N T I F I C

pragolab
laboratorní přístroje a zařízení

Generálním sponzorem Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci je firma ThermoFisher Scientific s.r.o. spolu s partnery Pragolab s.r.o. a Nicolet CZ s.r.o.

BULLETIN
SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI
JANA MARKA MARCI

Číslo 154

leden 2012

<http://www.spektroskopie.cz>
e-mail sekretariátu: immss@spektroskopie.cz
telefonní číslo sekretariátu: 722 554 326

P.F. 2012

Redakční rada Bulletinu přeje všem členům Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci do nového roku hodně štěstí, zdraví a úspěchů v práci i v osobním životě. Předem děkujeme za Vaše příspěvky a upozornění na zajímavé akce u nás i v zahraničí.

91. schůze hlavního výboru Společnosti

Dne 12. prosince 2011 se konala schůze hlavního výboru naší Společnosti, z jejíhož programu uvádíme hlavní body:

- zpráva o hospodaření za rok 2011
- zpráva o činnosti redakční rady Bulletinu
- odborná činnost v r. 2011:
 - kurz Měření vibračních spekter 17.-21. 1. 2011, VŠCHT, Praha 6, Technická 5 (46 účastníků)
 - kurz Interpretace vibračních spekter 24.-28. 1. 2011, VŠCHT, Praha 6, Technická 5 (60 účastníků)
 - 26. konference NMR, 1.-4. 5. 2011, Valtice (95 účastníků)

- kurz AAS II - pro pokročilé, 2.-5. května 2011, Praha (29 účastníků)
- 6. kurz ICP spektrometrie, 24.-26. května 2011, Brno (46 účastníků)
- Škola luminiscenční spektroskopie, 15.-17. června 2011, Brno (26 účastníků)
- seminář Radioanalytické metody IAA 11, 29.-30. 6. 2011, Praha (39 účastníků)
- 12. ročník Školy hmotnostní spektrometrie, 12.-16. září 2011, hotel Srní na Šumavě (200 účastníků)
- kurz NMR, 10.-12. října 2011, Praha
- Škola CG/MS (ve spolupráci s firmou Pragolab), 29.11.-1.12.2011, Praha (22 účastníků)
- akce připravované v r. 2012:
 - kurz Měření vibračních spekter 16.-20.1. 2012, VŠCHT, Praha 6, Technická 5
 - kurz Interpretace vibračních spekter 23.-27. 1. 2012, VŠCHT, Praha 6, Technická 5
 - Škola CG/MS (ve spolupráci s firmou Pragolab), 3.-5. 4. 2012, Praha
 - kurz Laserová ablace, květen 2012

- seminář Radioanalytické metody IAA 12
 - konference Rentgenfluorescenční spektrometrie, červen 2012, Pardubice
 - 13. ročník Školy hmotnostní spektrometrie, 3.-7. září 2011, hotel Srní na Šumavě
 - Podzimní škola rtg. mikroanalýzy, 22.-25. října 2012, Žďár nad Sázavou
 - Spolu se Slovenskou spektroskopickou společností European Symposium on Atomic Spectrometry ESAS 2012 a XXth Slovak - Czech Spectroscopic Conference, 7.-12. 10. 2012 Grandhotel Praha, Tatranská Lomnica, Slovensko (více na <http://www.spektroskopia.sk/esas-scsc/>)
- vytvoření Sekce hmotnostní spektrometrie
 - volba nového předsedy Sekce speciálních spektroskopických metod (Ing. Tomáš Černošský, CSc.)
 - prezentace příspěvků účastníků soutěže mladých spektroskopiků a vyhlášení výsledků.

VZPOMÍNKA NA MILENU ZÁVĚTOVOU

Vladimír Vorlíček a Josef Zemek
Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Praha

Krátce po svých 78. narozeninách, 29. května 2011, opustila svoji rozsáhlou rodinu, přátele a kolegy někdejší vedoucí vědecká pracovnice FZÚ AV ČR, RNDr. Milena Závětová, CSc. Dlouholetá funkcionářka Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci (dříve Československá spektroskopická společnost – ČSSS), držitelka Medaile Jana Marka Marci z Kronlandu, zasloužilá členka Jednoty českých matematiků a fyziků (JČMF) a členka redakčního kruhu Československého časopisu pro fyziku (ČČF) podlehla v zápase s chorobami, které jí již dlouho pronásledovaly a znepríjemňovaly jí více než deset posledních let života. Naštěstí jí nedokázaly vzít radost z úspěchů vnoučat a prvních krůčků pravoučat.

Ač patřila k jednomu z posledních ročníků, který mohl odmaturovat na osmiletém gymnáziu, přesto se ani jí úplně nevyhnuly reformy doprovázející školní docházku a studia snad všech následujících generací: Po maturitě nastoupila na Přírodovědeckou fakultu UK, aby v r. 1956 univerzitu opustila jako absolventka MFF UK, a to po 9 semestrech, zatímco její předchůdci končili po 8 a následovníci po 10. Po promoci nastoupila na umístěnku do Laboratoře optiky ČSAV, vedené nestorem československé optiky profesorem Bedřichem Havelkou. V r. 1958 přešla do Ústavu technické fyziky ČSAV (později

Ústav fyziky pevných látek, od r. 1979 Fyzikální ústav ČSAV, dnes Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i.) do skupiny profesora Jana Tauce.

Byla tedy při tom, když ústav pořádal ony památné a svým způsobem přelomové konference: velkou 5. mezinárodní konferenci o fyzice polovodičů v r. 1960 a první – naopak velmi komorní – konferenci o amorfních polovodičích v r. 1965. Ta založila dodnes živou tradici (letos se konal již 24. ročník) a svým rozsahem se „velkým“ polovodičovým konferencím již dávno vyrovná. Konference o fyzice polovodičů byla významná už jen tím, že šlo o první konferenci tohoto typu za železnou oponou. Takový nádech „exotičnosti“ by však sotva byl důvodem uspořádat konferenci právě v Praze. Rozhodující byly výsledky J. Tauce a jeho spolupracovníků. K lesku konference přispěla i účast nedávných laureátů Nobelovy ceny za fyziku (1956) W. Shockleyho, W.H. Brattaina a J. Bardeena. Milena Závětová samozřejmě nebyla jen při tom, ale aktivně pracovala v programovém výboru konference a jako pomocná sekretářka a překladatelka v průběhu jejího zasedání.

Po celý svůj profesní život se zabývala spektroskopii pevných látek. Jejíma rukama prošla celá řada nejrůznějších materiálů, nicméně hlavním předmětem jejího zájmu bylo využití optických vlastností ke studiu elektronové struktury polovodičů. Její kandidátská disertační práce (obhajoba v r. 1962) byla věnovaná struktuře absorpční hrany CdSb. Publikace, které ze své disertace vytěžila, měly velice dobrý ohlas. (Vyšly v Czech. J. Phys. Možnost uveřejnění v zahraničním časopise jako Physical Review, dnes zcela běžná, byla tehdy ani ne hypotetická!)

Zhruba v polovině 60. let se Milena Závětová začala intenzivně věnovat studiu amorfních polovodičů, na něž prof. Tauc svoji laboratoř postupně orientoval. Bylo to amorfní germanium (a-Ge), amorfní křemík (a-Si) a kovalentní skla (chalkogenidová a skla na bázi CdAs₂). Tento program pokračoval i po Taucově odchodu do USA. Je všeobecně známo a zmíněná tradice mezinárodních konferencí je toho nejzřetelnějším dokladem, že obor amorfních polovodičů dnes představuje neobyčejně plodnou oblast fyziky pevných látek a materiálového výzkumu, jejíž šíří si v oněch pionýrských dobách sotvakdo uměl představit. Není na škodu připomenout si některé zajímavé výsledky z oné doby.

Školní rok 1968 – 1969 strávila se svým manželem na Marylandské státní univerzitě v USA, kde se věnovala studiu optických vlastností slitiny a-Ge-Si

(spolu s D. Beagleholem – J. Non-Cryst. Solids 4 (1970) 272). Bylo to jedno z prvních (ne-li úplně první) měření tohoto typu na světě, právě tak jako studium teplotní závislosti absorpční hrany a-Ge (viz J. Stuke, tamtéž, s. 5). Ve studiu a-Ge a a-Si Milena Závětová pokračovala i po návratu do vlasti. Svoje síly spojila se zkušeným (Stanislav Koc) a tehdy začínajícím (Josef Zemek) odborníkem v oboru povrchových vlastností pevných látek. Systematickým studiem elektronových vlastností a-Si se tento tým začal zabývat jako první v ČSSR. Mezi pracemi z této doby má zásadní význam zjištění vlivu přítomnosti kyslíku na tvar absorpční hrany a-Ge (Czech. J. Phys. B 22 (1972) 429). Tento výsledek výrazně přispěl k rozřešení tehdy velmi aktuálního „horkého“ problému, zda je známkou intrinsického materiálu hrana strmá nebo povlovná; jinými slovy, jsou-li hrany valenčního a vodivostního pásu a-Ge ostré nebo rozmyté (srov. Phys. Rev. Lett. 27 (1971), stránky 1217 a 1220).

Přínos kolektivů, v nichž Milena Závětová působila, ke studiu amorfních a sklovitých polovodičů byl nejenom několikrát oceněn odměnou a jednou cenou ČSAV, ale také výzvami k přednesení referátů na konferencích a seminářích, k příspěvkům k jubileím významných badatelů v oboru (S.R. Ovshinski) a také přizváním do redakční rady časopisu Solar Energy Materials v letech 1980 až 1995. Nesporným vyvrcholením v tomto směru byla kapitola *Optical transitions of electrons in covalent semiconducting glasses*, kterou spolu s Bedřichem Velickým připravila pro sborník *Optical Properties of Solids; New Developments* (editor B.O. Seraphin, North-Holland 1976, ss. 379 – 436).

Při své práci se Milena Závětová řídila Faradayovým heslem „work – finish – publish“ a k tomuto přístupu vedla i své mladší kolegy. Důslednému uplatnění této zásady („Dokud to nesepíšeš, tak žádá další měření!“) vděčí jeden z autorů této vzpomínky (VV) za to, že „v reálném čase“ dokončil svoji disertaci.

Tak jako řada jiných z její generace (i generací pozdějších) se nechala přesvědčit, že bude užitečné, rozšíří-li řady členů KSČ a po úspěšné obhajobě kandidátské disertace do strany vstoupila. Měla-li pochybnosti o správnosti tohoto počínu – na jaře památného roku 1968 se poprvé od „Vítězného února“ začalo otevřeněji mluvit o realitě nedávných let – zaplašilo je téměř všeobecné přesvědčení, že se slušní komunisté musí zasadit o očistu strany. O rok později se ovšem ukázalo, že nové vedení má o pojmu očista zcela jiné představy a Milena ze strany okamžitě po svém návratu z USA v létě 1969 vystoupila. Tím soudruhům ušetřila pozdější eventuální rozhodování, mají-li ji vyloučit nebo

jenom vyškrtnout a zavřela si dveře k dalším cestám na Západ i na mnohé konference. Samozřejmě se zbavila i starostí spojených s případným podáním doktorské disertace.

Do konce šedesátých let spadá i začátek její dlouholeté práce v ČČF. Velmi aktivně se podílela na zásadní změně profilu tohoto časopisu, který se pod vedením hlavního redaktora Zdeňka Málka tématicky zcela oddělil od své mezinárodní verze. A práci v redakčním kruhu „žlutého“ časopisu zůstala věrnou až do prvních let třetího tisíciletí.

Svoje mimořádné organizační a přesvědčovací schopnosti Milena prokázala nejen v běžných diskusích nad vědeckým programem a výsledky, ale i jako funkcionářka Spektroskopické společnosti nebo Jednoty československých matematiků a fyziků, v práci pro ČČF a samozřejmě při organizaci nesčetných seminářů a řady konferencí. (Nebýt Milenina přesvědčování, řada seminářů by se byla sotva konala a mnoho článků a aktualit v ČČF by si čtenáři vůbec nepřečetli.) Patřila k těm organizátorům, které zpravidla není příliš vidět, ale plody jejich úsilí jsou nepřehlédnutelné.

Ve Spektroskopické společnosti dlouhou řadu let vedla odbornou skupinu Spektroskopie pevného stavu, v letech 1987 a 1988 pracovala jako vědecká tajemnice Společnosti. Členkou předsednictva Hlavního výboru byla déle než patnáct let. Její činnost byla v r. 1991 po zásluze oceněna udělením Medaile Jana Marka Marci z Kronlandu.

Mohlo by se zdát, že – vedle péče o rodinu – byla náplní života Mileny Závětové fyzika, spektroskopie a organizování nejrůznějších odborných akcí. Sotva která představa je však vzdálenější skutečnosti. Všichni, kdo ji trochu poznali, obdivovali její široký kulturní rozhled zvláště po literatuře, hudbě a výtvarném umění. Při rozhovoru s ní se nikdo rozhodně nenudil. Měla vrozený talent navazovat kontakty, vést a vhodně usměrňovat konverzaci na nejrůznější úrovni. Připočteme-li k tomu ještě výbornou jazykovou vybavenost, nepřekvapí, že naprosto nebyla zaskočena povinností rozmlouvat při zmíněné památné polovodičové konferenci s laureáty Nobelovy ceny a že si za léta své činnosti získala řadu velice dobrých známých a přátel prakticky po celém světě.

Jakkoli se při odchodu naší blízké spolupracovnice a kolegyně nedokážeme ubránit smutku, v naší paměti Milena zůstane taková, jakou jsme ji znali z každodenního styku a jak ji v r. 1989 s kolegy a přáteli zdařile zachytil náhodný snímek pořízený při

výletu během brněnské konference *Optické vlastnosti pevných látek v základním výzkumu a aplikacích*.



Gordon Research Conferences; Gaseous Ions: Structures, Energetics and Reactions Galveston, Texas, USA, 27.2. - 4.3. 2011.

Lucie Jašíková (Ducháčková)

Na začátku roku 2011 proběhla v malebném texaském městečku Galveston konference s názvem „*Gaseous Ions: Structures, Energetics and Reactions*“, která patří do cyklu tzv. Gordon Research Conferences. Jedná se o menší konferenci přibližně se stovkou účastníků. Hlavním tématem byla iontová chemie zaměřená na interakci iontů s molekulami, povrchem, elektrony a světlem. Na konferenci se objevily jak přednášky teoretické, tak i přednášky zaměřené na experimentální výzkum od molekulárních přes biologické až k materiálovým.



Velký důraz byl kladen na část věnující se prezentování posterů. Na rozdíl od velkých konferencí zde byla možnost pro mladé účastníky s posterem prezentovat svoji práci ve dvou dnech a celkem ve čtyřech sekcích. Především velmi oblíbená byla večerní posterová sekce

s občerstvením, která trvala dokud byl zájem účastníků o postery. Atmosféra na konferenci byla velmi přátelská a příjemná, tudíž mohu konference z cyklu Gordon Research Conferences vřele doporučit.

Na závěr bych ráda poděkovala Spektroskopické společnosti Jana Marka Marci za udělený cestovní grant, díky kterému jsem měla možnost zúčastnit se této konference a prezentovat zde poster s názvem „*Gold Catalysis: Structure and Bonding of Gold Complexes with Unsaturated Hydrocarbons*“.



Soutěž o nejlepší práci v oboru spektroskopie mladých autorů (do 35 let) ročník 2011

Tomáš Matoušek

Jak už se stalo tradicí, součástí prosincové schůze Hlavního výboru Spektroskopické společnosti JMM jsou prezentace prací Soutěže mladých spektroskopiků. Už třetím rokem byla generálním sponzorem firma [Thermo Fisher Scientific](#) společně s partnery [Pragolab](#) a [Nicolet CZ](#), a tak se opět soutěžilo vedle cen i o zajímavé cestovní granty.

Obě kategorie byly v letošním roce velice slušně obsazené. Nejprve se představilo pět autorů diplomových prací. Letos tuto kategorii ovládla molekulová spektroskopie: Nejvíce si členy hlavního výboru získala práce **Mgr. Jakuba Klenera**, vypracovaná na Fyzikálním ústavu MFF UK, zkoumající možnosti diagnostiky neurodegenerativních chorob pomocí Ramanovy spektroskopie. Těsným rozdílem druhou cenu získala **Mgr. Markéta Kokošková** z Katedry anorganické chemie PřF UK s prací věnovanou studiu mechanismu povrchem modifikovaných optických procesů a třetí cenu **Mgr. Marek Scholz** z Katedry chemické fyziky a optiky MFF UK, studující fotosensibilizační procesy vedoucí ke vzniku

singletního kyslíku. Pochvalné recenze získaly i práce **Ing. Lukáše Krásného** z Ústavu biochemie a mikrobiologie VŠCHT (MALDI-TOF MS) a rozsáhlá diplomová práce **Ing. Jakuba Visňáka** (FJFI ČVUT) věnovaná zpracování dat v časově rozlišené laserem indukované fluorescenční spektroskopii.

Po přestávce nastoupili zkušení spektroskopici v kategorii souborů prací. Hlavní výbor se nakonec rozhodl po nerozhodném hlasování udělit tři první ceny za tři vynikající a velmi obsáhlé soubory prací: **RNDr. Ireně Matulkové, Ph.D.** z Katedry anorganické chemie PŘF UK za práce zabývající se detailní spektroskopickou charakterizací materiálů pro nelineární optiku metodami vibrační spektroskopie a dvěma pánům z ÚOCHB AV ČR - **RNDr. Martinu Dračínskému, Ph.D.**, kombinujícímu experimentální NMR data s teoretickými výpočty, a **RNDr. Vladimíru Vrkoslavovi, Ph.D.**, rozvíjejícímu MALDI-TOF MS analýzu neutrálních lipidů na biologických objektech. Když se dva další přihlášení soutěžící omluvili pro nemoc, zbylo pak v takové konkurenci nevděčné čtvrté místo na **Ing. Michala Setničku** z Katedry fyzikální chemie FCHT University Pardubice (UV-VIS spektroskopie s difuzní reflektancí).

Vítězům gratulujeme k cenám i finančním odměnám, vítězům v kategorii B přejeme úspěšnou účast na konferencích s podporou cestovních grantů ve výši 20 tisíc Kč a děkujeme sponzorům soutěže i recenzentům za posudky soutěžních prací.

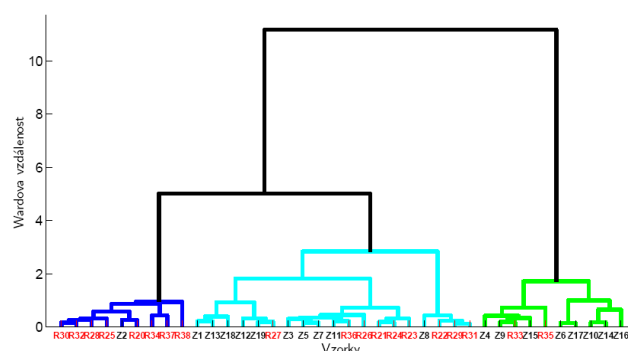
Souhrny oceněných prací přinášíme níže.

Diagnostika neurodegenerativních chorob pomocí Ramanovy spektroskopie

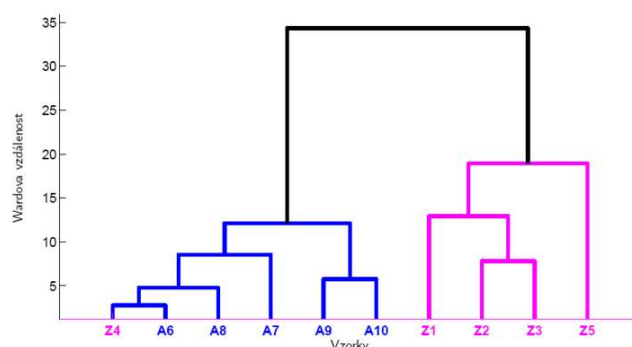
Jakub Klener, 1. cena kategorie A

Léčba neurodegenerativních chorob je často velmi obtížná a její úspěšnost závisí na včasné diagnóze. Proto jsme v této práci vyvíjeli novou diagnostickou metodu roztroušené sklerózy a Alzheimerovy nemoci pomocí Ramanovy spektroskopie kapkově nanášených povlaků (DCDR) mozkomíšního moku (CSF). Podařilo se nám nalézt podmínky měření, za kterých byla měřená spektra dostatečně reprodukovatelná a které jsou přijatelné pro běžnou diagnostickou praxi. Přitom jsme zjistili, že CSF podléhá poměrně rychlé degradaci při pokojové teplotě, která byla ve spektrech s jistotou detekovatelná již po 5 hodinách, a degradaci vlivem

opakovaného zamrazování. DCDR spektra CSF od jednotlivých pacientů byla analyzována pomocí faktorové a shlukové analýzy. Roztroušená skleróza se ve spektrech projevila sníženou intenzitou Ramanova pásu na 1080 cm^{-1} , který pravděpodobně souvisí s nějakým obecnějším patologickým stavem. Spektrální změny způsobené Alzheimerovou nemocí byly mnohem komplexnější a kromě změn ve výše zmíněném páse zde byly identifikovány také změny na intervalu $1200\text{--}1800\text{ cm}^{-1}$ a $2870\text{--}2950\text{ cm}^{-1}$ související se změnami ve skladbě a konformacích proteinu. Navíc se nám podařilo pomocí DCDR spekter rozlišit mladé zdravé pacienty od starších ročníků. V této práci bylo tedy ověřeno, že DCDR spektroskopie je vhodnou diagnostickou metodou pro klinickou praxi k určení neurodegenerativních chorob prostřednictvím komplexní analýzy CSF.



Obr. 1: Dendrogram shlukové analýzy Ramanových spekter vzorků pacientů trpících roztroušenou sklerózou (v grafu zvýraznění červeně a označení písmenem R) a k nim příslušejících zdravých kontrol (v grafu zvýraznění černě a označení písmenem Z). Zcela napravo se formuje shluk zdravých proti shluku nemocných, který je viditelný na levé straně obrázku. Ve středu obrázku se napravo začíná tvořit další shluk nemocných a nalevo shluk zdravých pacientů.



Obr. 2: Dendrogram shlukové analýzy Ramanových spekter vzorků pacientů trpících Alzheimerovou nemocí (v grafu zvýraznění modře a označení písmenem A) a k nim příslušejících kontrol (v grafu zvýraznění fialově a označení písmenem Z). Zcela napravo se formuje shluk zdravých proti shluku nemocných, který je viditelný na levé straně obrázku.

Přítomnost zdravého pacienta ve shluku nemocných pravděpodobně poukazuje na to, že nová metoda je schopná odhalit nemoc ve stádiu, kdy je současnými metodami zatím nediodnostikovatelna.

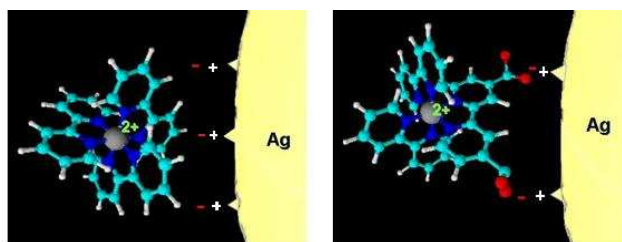
Bipyridylové komplexy Ru(II) jako SERS spektrální sondy pro studium mechanismu povrchem modifikovaných optických procesů

Markéta Kokošková, 2. cena kategorie A

Tato práce se věnuje studiu rozdílného způsobu adsorpce strukturně analogických komplexů Ru(II) na povrch nanočástic stříbra a jeho vlivu na tlumení molekulární rezonance v procesu SERRS (povrchem zesílený rezonanční Ramanův rozptyl) těchto komplexů lokalizovaných v systémech agregovaných nanočástic s velmi silnými optickými poli, tzv. „hot spots“, konkrétně ve fraktálních agregátech.

Získaná SE(R)RS spektra kationtu bis(2,2'-bipyridyl)-(4,4'-dikarboxy-2,2'-bipyridyl)ruthenatého /Ru(bpy)₂(dcbpy)/ v systémech s nemodifikovanými a/nebo s chloridy modifikovanými Ag nanočásticemi (AgNČ) byla porovnána s odpovídajícími spektry kationtu tris(2,2'-bipyridyl)ruthenatého /Ru(bpy)₃/. Štěpení několika pásů a přítomnost nového pásu 1367 cm⁻¹ pozorované pouze v SE(R)RSuRu(bpy)₂(dcbpy) v systému s chloridy nemodifikovanými agregáty AgNČ bylo přisouzeno chemisorpci komplexu na povrch AgNČ prostřednictvím dvou karboxylových skupin. Dále bylo zjištěno, že získané SE(R)RS excitační profily spektrálních pásů odpovídajících Ru-dcbpy jednotce chemisorbovaného komplexu dosahují maxima při excitaci 488 nm, zatímco profily dvou Ru-bpy jednotek ho dosahují při 458 nm. Srovnání profilů s elektronovým absorpčním spektrem volného Ru(bpy)₂(dcbpy) odhalilo, že chemisorpce komplexu zapříčiňuje posun pásu přenosu náboje přechodu Ru→(dcbpy) do červené oblasti. Pozorovaný pokles energie přenosu náboje přechodu Ru→(dcbpy) je vysvětlen nárůstem schopnosti dvou COO⁻ skupin čerpat elektrony vlivem jejich adsorpce na povrch AgNČ. Koncentrační hodnoty meze SERRS spektrální detekce obou komplexů v systémech s unifikovanou morfologií AgNČ byly porovnány při λ_{exc} = 441,6 nm. Pro chemisorbovaný Ru(bpy)₂(dcbpy) činí mez detekce 1·10⁻⁹ M a pro elektrostaticky vázaný Ru(bpy)₃ 1·10⁻¹² M. Hlavní podíl na zvýšení meze detekce Ru(bpy)₂(dcbpy) oproti Ru(bpy)₃ má větší tlumení molekulární

rezonance (přibližně 500-násobně) způsobené jeho přímou adsorcí na povrch AgNČ.



Schématické znázornění rozdílného způsobu adsorpce studovaných komplexů. Vlevo Ru(bpy)₃, vpravo Ru(bpy)₂(dcbpy).

Methods of Study of Photosensitizer-photophysics with Application on Thiazolyl-porphyrins

Marek Scholz, 3. cena kategorie A

Singletní kyslík, nejnižší excitovaný stav molekulárního kyslíku, je v mnoha směrech pozoruhodná molekula. Chemie singletního kyslíku a základního tripletního stavu se značně liší. Singletní kyslík ochotně reaguje s širokou škálou biologických a organických materiálů, což vede k jejich alteraci a degradaci. Pravděpodobně nejvýznamnější cestou vzniku singletního kyslíku je takzvaný fotosensibilizační proces: Světlem excitovaná molekula vhodného barviva přenáší energii na molekulární kyslík za vzniku singletního kyslíku. Příroda je velmi bohatá na barviva schopná generovat singletní kyslík, příkladem jsou fotosyntetické pigmenty nebo protoporfyrin IX (prekursor pro hem). Singletní kyslík je součástí mnoha různých biochemických procesů, jako je fotosyntéza, buněčná signalizace, imunitní reakce či degradace polymerů. Výzkum v oblasti singletního kyslíku a fotosensibilizačního procesu má řadu perspektiv. Obzvláště zajímavým směrem je potom fotodynamická terapie rakoviny a jiných onemocnění, jež je slibnou medicínskou technikou s potenciálem širokého využití. Příprava, charakterizace a klinický výzkum nových vysoce efektivních fotosensibilizačních barviv je důležitým úkolem pro současnou i budoucí vědu.

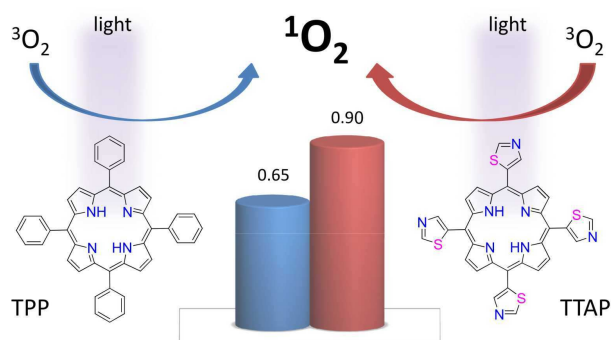
Předkládaná práce se zaměřuje právě na podrobnou fotofyzikální charakterizaci dvou nově vysyntetizovaných fotosensibilizátorů, a sice mono- a bi-thiazolyl-porfinu. Tyto sloučeniny jsou srovnávány s chemicky příbuzným a dobře známým tetra-fenyl-porfinem (TPP). Byla změřena a vyhodnocena celá řada charakteristik thiazolyl-

porfinů a TPP, zejména absorpční, fluorescenční a fosforescenční spektra, doby života tripletu ve vzduchem a argonem nasycených vzorcích, T-S spektra, energie tripletu, zpožděná fluorescence, a kvantové výtěžky tripletu a singletního kyslíku pomocí optoakustické i luminiscenční spektroskopie. Ukázalo se, že přítomnost atomů síry vede ke značnému zesílení intersystémového přechodu do tripletu a potažmo k výraznému zvýšení kvantového výtěžku singletního kyslíku, jež je pro thiazolyl-porfíny blízko 1.0 (ve srovnání s 0.65 pro TPP). Nová barviva mají oproti TPP výrazně menší dobu života i kvantový výtěžek fluorescence. Fosforescence je pro thiazolyl-porfíny značně rozšířena do červena. Měření byla prováděna ve třech rozpouštědlech: toluenu, tetrahydrofuranu a dimethylformamidu. Thiazolyl-porfíny lze díky jejich vysokému kvantovému výtěžku singletního kyslíku navrhnout jako nový fotosensibilizační standard. Aplikační možnosti jsou však omezeny horší rozpustností. Pozorování vlivu thiazolové skupiny na fotofyziku barviva je cennou informací pro další vývoj fotosensibilizačních barviv.

Kromě uvedeného byly navrženy a optimalizovány nové postupy sběru a zpracování dat optoakustické spektroskopie pro vyhodnocení kvantových výtěžků tripletu a singletního kyslíku. Část práce byla rovněž věnována vývoji nové aparatury pro mikroskopické a mikrospektroskopické zobrazování infračervené fosforescence s užitím unikátní infračervené kamery. Tato nová metoda by mohla významně přispět k porozumění fotosensibilizačního procesu přímo v živých buňkách. Předkládaná práce si mimo jiné klade za cíl vysvětlit principy všech použitých metod.

Nejdůležitější výsledky práce byly shrnuty v publikaci [1].

[1] Marek Scholz, Roman Dědic, Rodolfo Lavilla, Miriam Miguel, Santi Nonell: Thiazolyl-substituted porphyrins as standards for singlet molecular oxygen photosensitization, *Journal of Porphyrins and Phtalocyanines*, 2011, Volume 15, Issue 11n12, pages1202-1208, DOI: 10.1142/S1088424611004129



Singlet Oxygen Quantum Yields

Schematické znázornění fotosensibilizačního procesu. Thiazolyl-porfin (TTAP) má kvantový výtěžek singletního kyslíku blízky jedničce.

Kombinace experimentálních NMR dat s teoretickými výpočty pro studium struktury, vlastností a reaktivity molekul

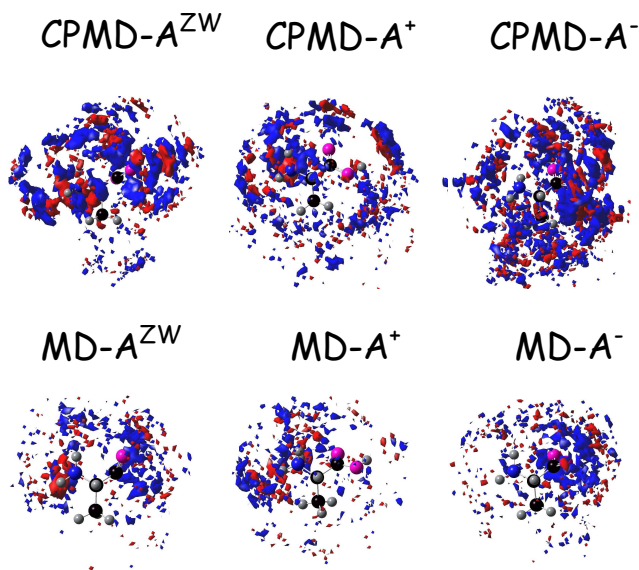
Martin Dračinský, 1. cena kategorie B

Experimentální NMR data (zejména chemické posuny a interakční konstanty) odráží lokální strukturu molekul i jejich dynamické vlastnosti (například stabilitu, tautomerní rovnováhy, reaktivitu). Některé informace však nelze z NMR spekter extrahovat přímo. V takových případech může být významným pomocníkem při odhalování vlastností molekul kombinace experimentálních NMR dat s teoretickými výpočty.

Předkládaný soubor prací lze rozdělit do dvou skupin. První skupina prací se zabývá studiem stability a vlastností modifikovaných bází nukleových kyselin. Například pomocí sledování kinetiky izotopových výměn vodíku ^1H za deuterium přímo v NMR spektrometru byla prokázána přítomnost atypických tautomerů u derivátů pyrimidinu¹ a byl navržen mechanismus jejich vzniku.² Výsledky této studie byly využity při přípravě tritiem značených derivátů pyrimidinu, které byly prokázány pomocí ^3H NMR spektroskopie.³ V jiné práci byly sledovány různé tautomery isocytosinu pomocí NMR spektroskopie v pevném stavu a byly zjištěny vlivy vodíkových vazeb a uspořádání krystalu na chemické posuny.⁴ Dále byla studována stabilita derivátů 5-azacytosinu, který má antivirové účinky a byla zjištěna struktura produktů jejich rozpadu.⁵ V další práci byla objasněna struktura kovalentních aduktů enzymaticky aktivovaného Sudanu I, který má karcinogenní účinky, a byl navržen mechanismus vzniku těchto

aduktů. Získané výsledky přispěly k pochopení karcinogenního účinku Sudanu I.⁶

Druhá část předkládaných prací se zabývá rozvojem teoretických metod pro výpočet NMR parametrů a ověřování těchto metod na modelových látkách. Byly prostudovány různé metody pro modelování rozpouštědla⁷ a vibračního středování⁸ při výpočtech NMR parametrů a bylo ukázáno, že pomocí kombinace *ab initio* molekulové dynamiky s experimentálními daty lze studovat nejen strukturu rozpuštěných látek ale i jejich solvatačního obalu.⁹



Obr. 1. Distribuce pravděpodobnosti výskytu molekul vody (červená barva pro atom kyslíku a modrá barva pro atom vodíku) v okolí molekul alaninu (zwitterion, kation, anion) získaná z *ab initio* (nahore) a klasické (dole) molekulové dynamiky.

Bylo také ukázáno, že konfiguraci chirálních sulfoxidů, která je běžnými NMR metodami obtížně zjištělná, lze bezpečně určit porovnáním experimentálních a vypočtených ¹³C chemických posunů.^{10,11} V další práci byl určen mechanismus přesmyku derivátů Dewarova benzenu na základě porovnání vypočtených aktivačních energií s experimentálními daty získanými pomocí ¹H NMR spektroskopie.¹² Dále byly pozorovány a teoreticky popsány a vysvětleny neobvyklé interakční konstanty mezi vodíky ¹H, které mezi sebou nemají kovalentní vazbu (interakce přes prostor).¹³

Reference

1) Dračínský M., Holý A., Jansa P., Kovačková S., Buděšínský M.: Isotopic exchange of hydrogen at C-5 in pyrimidine derivatives – tautomers with sp³-hybridised C-5 carbon atom. *Eur. J. Org. Chem.* **2009**, 4117-4122.

- 2) Dračínský M., Jansa P., Chocholoušová J., Vacek J., Kovačková S., Holý A.: Mechanism of isotopic exchange reaction of the 5-H hydrogen of uracil derivatives in water and nonprotic solvents. *Eur. J. Org. Chem.* **2011**, 777-785.
- 3) Dračínský M., Jansa P., Elbert T.: Isotope Exchange Reactions of the Hydrogen H-5 of Selected Pyrimidine Derivatives and the Preparation of Tritium-Labeled Pyrimidines. *Collect. Czech. Chem. Commun.* **2011**, v tisku.
- 4) Dračínský M., Jansa P., Ahonen K., Buděšínský M.: Tautomerism and the protonation/deprotonation of isocytosine in liquid and solid states studied by NMR spectroscopy and theoretical calculations. *Eur. J. Org. Chem.* **2011**, 1544-1551.
- 5) Dračínský M., Krečmerová M., Holý A.: Study of chemical stability of antivirally active 5-azacytosine acyclic nucleoside phosphonates using NMR spectroscopy. *Bioorg. Med. Chem.* **2008**, *16*, 6778.
- 6) Dračínský M., Cvačka J., Semanská M., Martínek V., Frei E., Stiborová M.: The mechanism of formation of (deoxy)guanosine adducts derived from peroxidase-catalyzed oxidation of the carcinogenic non-aminoazo dye 1-phenylazo-2-hydroxynaphthalene (Sudan I). *Chem. Res. Tox.* **2009**, *22*, 1765-1773.
- 7) Dračínský M., Bouř P.: Computational analysis of solvent effects in NMR spectroscopy. *J. Chem. Theory Comput.*, **2010**, *6*, 288-299.
- 8) Dračínský M., Kaminský J., Bouř P.: Relative Importance of First and second Derivatives of NMR Chemical Shifts and Spin-Spin Coupling Constants for Vibrational Averaging. *J. Chem. Phys.* **2009**, *130*, 094106.
- 9) Dračínský M., Kaminský J., Bouř P.: Structure of the Alanine Hydration Shell Probed by NMR Chemical Shifts and Indirect Spin-Spin Coupling. *J. Phys. Chem. B* **2009**, *113*, 14698-14707.
- 10) Dračínský M., Pohl R., Slavětínská L., Buděšínský M.: Observed and calculated ¹H and ¹³C chemical shifts induced by *in situ* oxidation of model sulfides to sulfoxides and sulfones. *Magn. Res. Chem.*, **2010**, *48*, 718-726.
- 11) Dračínský M., Pohl R., Slavětínská L., Janků J., Buděšínský M.: The Determination of Sulfoxide Configuration in Six-Membered Rings Using NMR Spectroscopy and DFT Calculations. *Tetrahedron Asymmetry* **2011**, *22*, 356-366.
- 12) Dračínský M., Castaño O., Kotora M., Bouř P.: Substituent induced rearrangement of Dewar benzene studied by DFT. *J. Org. Chem.*, **2010**, *75*, 576-581.
- 13) Dračínský M., Jansa P., Bouř P.: Computational and Experimental Evidence of Through Space

Příprava a detailní spektroskopická charakterizace materiálů pro nelineární optiku

Irena Matulková, 1. cena kategorie B

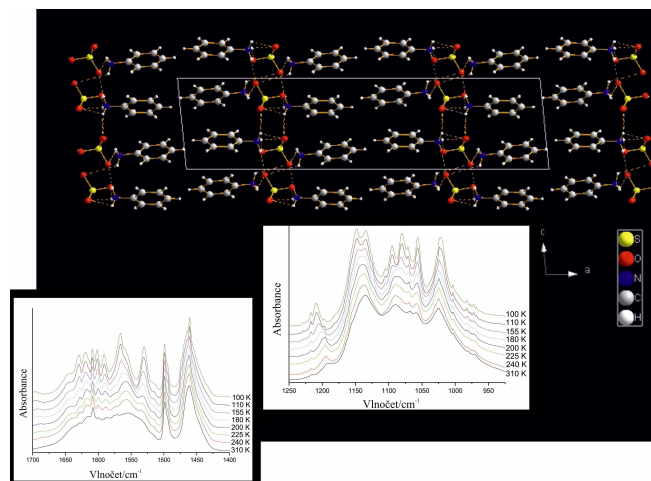
Materiály s nelineárními optickými vlastnostmi (NLO) nalézají v současnosti mnoho různých technických uplatnění – od konverze vlnových délek přes analýzu krátkých pulzů až po optické zpracování a ukládání informací. V námi studované podskupině materiálů je velmi důležitá volba vhodných stavebních bloků (molekul) pro přípravu materiálů s nelineárními optickými vlastnostmi, která je založena jednak na kvantově-chemických výpočtech (predikce hodnot hyperpolarizibilit – pro generování druhé harmonické frekvence) a také na hledání společných strukturních znaků ve skupinách již známých látek.

V souboru pěti prací¹⁻⁵ je prezentována příprava a studium 13 nově připravených materiálů (z kategorie solí a kokystalů vybraných organických dikarboxylových a anorganických oxokyselin). Předkládané práce se soustředily na studium solí acyklických biguanidů^{1,2}, cyklických aminotriazolů^{3,4} a anilinu⁵, které patří mezi perspektivní organické báze pro generování druhé harmonické frekvence díky delokalizovaným π -elektronům a vysokým hodnotám hyperpolarizibilit (liší se pro různé stupně protonizace). Na druhou stranu vysoké hodnoty dipólových momentů těchto molekul zapříčiňují přirozenou tendenci kationtů ke tvorbě centrosymetrických párů^{1,2}, což znemožňuje existenci nelineárních optických vlastností druhého řádu.

Z celého množství supramolekulárních interakcí hrají klíčovou roli vodíkové vazby, které se významnou měrou uplatňují i při přípravě NLO materiálů. Díky vhodnému zapojení silných vodíkových vazeb typu O-H...O, N-H...O a N-H...N může dojít k zamezení uspořádání se středem symetrie a lze tak získat řadu krystalických sloučenin splňujících nezbytná symetrická kritéria.

Připravené materiály byly s ohledem na jejich možné uplatnění v oblasti nelineární optiky charakterizovány řadou metod od RTG strukturní analýzy, přes kvantově chemické výpočty, vibrační a elektronovou spektroskopii až ke generování druhé harmonické frekvence. V případě přípravy slibných materiálů pro nelineární optiku byla z hlediska jejich dalšího

uplatnění testována teplotní stabilita a podrobněji studovány nalezené tepelné efekty^{2,5} (Obrázek 1). Velká pozornost byla v předkládané skupině publikací věnována detailní interpretaci vibračních spekter, která následně umožnila jednoznačné definování materiálů v případech, kdy nebylo možné získat monokrystal. Pro studium vibračních projevů byla použita kombinace přístupů: provedení kvantově-chemických výpočtů vibračních frekvencí organických molekul, příprava deuterovaných analogů a použití korelačních diagramů pro přiřazení projevů atomů zapojených do vodíkových vazeb a v neposlední řadě i faktor-grupová analýza solí anorganických oxokyselin. Kvantově-chemické výpočty^{1,3,4} byly provedeny se zanedbáním vzájemných interakcí tedy na izolovaných molekulách (nenabitá i do různých stupňů protonizovaná organická báze) za použití různých typů výpočetních přístupů (HF, DFT, MP2) a vybraných středně velkých basí (např. 6-31G, 6-311G, 6-311G (d,p)).



Obr. 1: Uspořádání v buňce a teplotně závislá infračervená spektra síranu anilinia

Získané detailní přiřazení vibračních projevů ve spojení s RTG strukturní analýzou hraje velmi důležitou roli zejména při studiu stupně protonizace organické báze, který zásadně ovlivňuje hodnoty hyperpolarizibility a tím i nelineární optické vlastnosti – např. soli biguanidia^{1,2}. Díky kombinaci difrakčních, kalorimetrických a spektroskopických metod se podařilo objasnit i mechanismus pozorovaných fázových přechodů (síran anilinia⁵).

Reference

1. Matulková I, Němec I, Císařová I, et al. Inorganic salts of biguanide - Searching for new materials for second harmonic generation. *J. Mol. Struct.* 2008; 886: 103-120.

- Matulková I, Němec I, Císařová I, et al. Organic salts of biguanide - An attempt to crystal engineering of novel materials for second harmonic generation. *J. Mol. Struct.* 2010; 966: 23-32.
- Matulková I, Němec I, Císařová I, et al. Novel material for second harmonic generation: 3-Amino-1,2,4-triazolinium(1+) hydrogen L-tartrate. *J. Mol. Struct.* 2007; 834-836: 328-335.
- Matulková I, Němec I, Teubner K, et al. Novel compounds of 4-amino-1,2,4-triazole with dicarboxylic acids – crystal structures, vibrational spectra and non-linear optical properties. *J. Mol. Struct.* 2008; 873: 46-60.
- Matulková I, Cihelka J, Fejfarová K, et al. Semi-organic salts of aniline with inorganic acids: prospective materials for second harmonic generation. *CrystEngComm* 2011; 13(12): 4131-4138.

Nové metody pro analýzu neutrálních lipidů a sledování jejich distribuce na biologických objektech

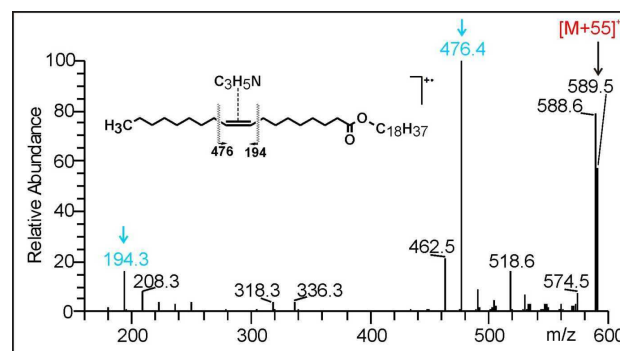
Vladimír Vrkoslav, 1. cena kategorie B

Lipidy jsou širokou skupinou látek. Jejich společným znakem je, že ve své struktuře obsahují dlouhé alifatické řetězce. Protože hrají důležitou roli v biochemických a biologických procesech, lékaři, biochemici a biologové vyvíjí tlak na vývoj nových metod jejich analýzy. Je třeba vyvíjet nové metody jak pro rychlé mapování složitých směsí, tak pro detailní charakterizace jednotlivých látek v těchto směsích. Předkládané práce se věnují vývoji metod analýzy neutrálních lipidů a jejich 2D zobrazování na povrchu hmyzu a rostlin, se zaměřením na voskové estery (VE), triacylglyceroly (TG) a uhlovodíky (HC), za využití technik HPLC/APCI-MS a MALDI-TOF.

První práce popisuje vývoj MALDI-TOF metody pro analýzu VE¹. Jako matrice byly využívány soli kyseliny 2,5-dihydroxybenzoové. Nejvhodnější testovanou matricí pro analýzu VE byla lithná sůl kyseliny 2,5-dihydroxybenzoové. V druhé práci byla vyvinuta metoda pro analýzu TG². Nejlepších výsledků z hlediska citlivosti a reprodukovatelnosti bylo dosaženo s matricí sodnou solí kyseliny 2,5-dihydroxybenzoové. Vyvinutou metodou bylo možné získat spektra směsí TG různých druhů čmeláků a pomocí analýzy hlavních komponent jednotlivé druhy od sebe odlišit. Získaných zkušeností s MALDI analýzou lipidů bylo využito pro zobrazování lipidů na planárních površích

biologických objektů – rostlin a hmyzu³. Metodou MALDI imaging byla zobrazena distribuce VE, HC a TG na povrchu křídel hmyzu a listech rostlin.

Další předkládané práce se věnují analýze VE pomocí HPLC/APCI-MS^{4,5}. Cílem bylo vytvořit metodu vhodnou pro separaci přírodních směsí voskových esterů s důrazem na přesnou charakterizaci polohy esterové vazby a poloh vazeb dvojných. Využívá se zde separace VE na koloně Novapak C18 (Waters, UK) v mobilní fázi složené z acetonitrilu a ethylacetátu. Kromě molekulových aduktů $[M+H]^+$ se tvoří další molekulové adukty s ionty vznikajícími v APCI zdroji z acetonitrilu. Fragmentací $[M+H]^+$ vznikají majoritní fragmenty odpovídající odštěpení kyselinové části VE. Fragmenty odpovídající alkoholové části nejsou ve spektru intenzivní, ale alkoholovou část lze snadno dopočítat. Fragmentací aduktu $[M+C_3H_5N]^+$ vznikají fragmenty určující polohu dvojných vazeb. Nejintenzivnější signály ve spektru odpovídají štěpení před a za dvojnou vazbou (obr. 1). V případě více dvojných vazeb v jedné části molekuly poskytují nejintenzivnější signály fragmenty před první a za poslední dvojnou vazbou. Ve spektrech jsou přítomny i diagnostické fragmenty odpovídající polohám ostatních dvojných vazeb v dané části molekuly. Vyvinutou metodou byly maximálně charakterizovány směsi voskových esterů z včelího vosku a jojobového oleje. V těchto směsích byla nalezena řada nových ještě nepopsaných polynenasycených voskových esterů.



Obr. 1. CID APCI MS/MS spektrum $[M+C_3H_5N]^+$ stearyl oleátu (VE 18:0-18:1(n-9)).

Reference

- V. Vrkoslav, R. Míková, J. Cvačka, Characterization of natural wax esters by MALDI-TOF mass spectrometry, *J. Mass. Spectrom.* 44 (2009) 101-110, DOI: 10.1002/jms.1476.
- E. Kofroňová, J.Cvačka, V. Vrkoslav, R. Hanus, P. Jiroš, J. Kindl, O. Hovorka, I. Valterová, A comparison of HPLC/MS and MALDI-MS for characterising triacylglycerols in insects: species-specific composition of lipids in the fat bodies of

bumblebee males, *J. Chromatogr. B*, 887 (2009) 3878-3884, DOI: 10.1016/j.jchromb.2009.09.040.

V. Vrkoslav, A. Muck, J. Cvačka, A. Svatoš, MALDI Imaging of neutral cuticular lipids in insects and plants, *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* 21 (2010) 220–231, DOI: 10.1016/j.jasms.2009.10.003.

V. Vrkoslav, K. Urbanová, J. Cvačka, Analysis of wax ester molecular species by high performance liquid chromatography/atmospheric pressure chemical ionisation mass spectrometry,

J. Chromatogr. A, 1217 (2010) 4184–4194, DOI: 10.1016/j.chroma.2009.12.048.

V. Vrkoslav, M. Háková, K. Pecková, K. Urbanová, J. Cvačka, Localization of double bonds in wax esters by high-performance liquid chromatography/Atmospheric pressure chemical ionization mass spectrometry utilizing the fragmentation of acetonitrile-related adducts. *Anal. Chem.*, 83 (2011) 2978–2986, DOI: 10.1021/ac1030682.

SPECTRO CS

s.r.o.

Rudná 1361/ 51
700 30 Ostrava, Zábřeh

Certifikace dle ISO 9001: 2001

Certifikát TÜV CZ, číslo: 1387-1

☎ 596 762 840, Fax: 596 762 849

info@spectro.cz , www.spectro.cz

specialisté v oboru spektrometrie nabízejí:

RUČNÍ A MOBILNÍ SPEKTROMETRY:

- SPECTRO ISORT
- ruční přístroj, napájený z akumulátorku, analýza NL a Cr oceli včetně C
 - oblouk na vzduchu (bez argonu nebo radioaktivního zdroje záření)
- SPECTROTEST ^{CCD} **TXC25** *Nový model*
- analýza a určení jakosti za 4s, metoda Fingerprint (otisk prstu), ICAL
 - mobilní spektrometr s parametry laboratorního přístroje
- SPECTRO xSORT *Novinka*
- analýza včetně N, C, B, As, Sn, P a S v oceli, měření obsahu C na vzduchu
 - ruční RTG spektrometr, analýza a třídění kovů, půd a odpadů, RoHS
 - bezpečný, spolehlivý, rychlý, SDD detektor - rozlišení méně než 160 eV

STACIONÁRNÍ - LABORATORNÍ SPEKTROMETRY:

- SPECTROMAXx D *Nový model*
- rozsah vln. délek 233 až 670 nm, stolní provedení, váha cca. 60 kg.
 - analýza Al, Zn a Mg báze
- SPECTROMAXx F (M) *Nový model*
- rozsah vln. délek 160(140) až 670 nm, provedení stolní a s podstavcem
 - analýza Fe, Ni, Al, Cu, Zn, Pb, Sn, Co, Ti a Mg báze. Libovolná vlnová délka
 - ICAL - recalibrace všech programů jediným vzorkem
- SPECTROLAB
- spektrometr nejvyšší kategorie s **hybridním opt. systémem** (PMT a CCD)
 - extrémně nízké limity detekce (jednotky mg/kg u stopových prvků)
 - analytické moduly pro všechny báze v jediném přístroji
 - rozsah vlnových délek 120 – 780 nm, včetně analýzy N,O a H, SSE

AUTOMATICKÉ SYSTÉMY:

- NUCLEUS
- bezobslužná provozní laboratoř, umístění v kontejneru pro nečisté prostředí

PŘÍSTROJE S ICP:

- SPECTRO ARCOS
- simultánní analýza všech čar mezi 130-770 nm za méně než 2 sekundy
 - unikátní 3x750 mm optický systém, spektrální rozlišení 8 pm (130 – 340 nm)
 - měření prvků včetně C, N, Br, I, Cl a suspenzí (tzv. „slurry“ technika)
 - simultánní analýza, 400 mm CCD optika, ICAL
- SPECTRO GENESIS *Nový model*

RENTGENOVÉ SPEKTROMETRY:

- SPECTRO XEPOS *Nový model*
- stolní RTG spektrometr pro analýzu Na – U
- SPECTRO MIDEX *Nový model*
- nový RTG spektrometr pro analýzu drahých kovů, M-verze s velkou komorou
- SPECTRO PHOENIX II
- malé, stolní, levné analyzátoři včetně systémů on-line
- SPECTRO IQ II *Novinka*
- nový stolní RTG spektrometr pro nízké limity Na, Mg, Al, Si, P, S a Cl

SPEKTROMETRY S DOUTNAVÝM VÝBOJEM:



- Německo

- SPECTRUMA GDA 750 (550)
- spektrometr s doutnavým výbojem, optika 750 mm, DC (HF) zdroj GD
 - měření vrstev (pokovení, nitridování, nauhličení atd.), USU - analýza nepravidelných tvarů, drátů, aj.
- SPECTRUMA GDA 650 (150HR) *Novinka*
- GDA spektrometr s unikátní 400 mm CCD optikou, DC (HF) zdroj GD

ZAŘÍZENÍ PRO MĚŘENÍ ČÁSTIC A SYPNÝCH HMOT FIRMY: SEISHIN - Japonsko

- LMS-30 (laserový analyzátor částic)
- stanovení velikosti částic 0,1 – 1000 µm, mokry i suchý způsob měření
- DALŠÍ PŘÍSTROJE
- hustoměry, tryskové mlýny, třídičky, rozsěvačky

ZAŘÍZENÍ PRO TRIBOTECHNIKU FIRMY:



- USA

- FluidScan *Novinka*
- ruční, výkonný IČ spektrometr
- LNF
- analyzátor velikosti částic v kombinaci s identifikací částic pomocí knihoven
- SPECTROIL M, C
- opticko emisní spektrometr s rotační diskovou elektrodou pro analýzu olejů
- Ferografy, Fuel Snifer, Viskozimetry
- chemické složení nečistot a aditiv, viskozita, ředění palivem atd.

ZAŘÍZENÍ OD FIRMY

FLUXANA

Zařízení pro přípravu materiálů – TAVIČKY, certifikované referenční materiály a spotřební materiál pro XRF

CERTIFIKOVANÉ REFERENČNÍ MATERIÁLY:

Firm: MBH Analytical a BAS, Velká Británie, Hydro Bonn a SUS, SRN, Alcan Švýcarsko, Aluminium Pechiney Francie, a.j.

Podrobnější informace o přístrojích získáte na <http://www.spectro.cz>

Zastoupení ve SR: **SPECTRO APS**, spol. s.r.o., Izabely Textorisovej 13, 036 01 Martin

Tel/Fax: +421 434 222 314. Mobil: +421 903 707 145, E-mail: spectroaps@spectroaps.sk

NABÍDKA PUBLIKACÍ SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI JMM

Škola luminiscenční spektrometrie 2011 - sborník přednášek na CD	199,- Kč
Podzimní škola rentgenové mikroanalýzy 2010, sborník přednášek na CD	199,- Kč
Inorganic Environmental Analysis	161,- Kč
Referenční materiály (přednášky)	93,- Kč
Názvosloví IUPAC (Part XII: Terms related to electrothermal atomization; Part XIII: Terms related to chemical vapour generation)	35,- Kč
Kurz ICP pro pokročilé	245,- Kč
5. kurz ICP spektrometrie 2009	350,- Kč
6. kurz ICP spektrometrie 2011	350,- Kč
Kurz AAS pro pokročilé (1996)	120,- Kč
Metodická příručka pro uživatele FTIR	100,- Kč
Skripta Kurz HPLC/MS (2001)	100,- Kč
12. Spektroskopická konference	190,- Kč
13. Spektroskopická konference (2007 Lednice)	130,- Kč
Sborník přednášek ze semináře Radioanalytické metody IAA '03	62,- Kč
Sborník přednášek ze semináře Radioanalytické metody IAA '04	78,- Kč
AAS II – kurz pro pokročilé (2006)	435,- Kč
Sborník přednášek ze semináře Radioanalytické metody IAA '05	126,- Kč

Spektroskopická společnost Jana Marka Marci

se sídlem: Thákurova 7, 166 29 Praha 6 e-mail: immss@spektroskopie.cz

<http://www.spektroskopie.cz>

Adresa pro zasílání korespondence: Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity, Kotlářská 2,
611 37 Brno

Adresa sekretariátu pro osobní kontakt: Univerzitní kampus Bohunice, pavilon A14

Úřední hodiny: úterý 10 – 12 h, čtvrtek 10 – 12 h

Telefon: 549 49 1436, fax: 549 49 2494, mobil: 722 554 326, tajemnice Markéta Koželouhová

redakční rada:

prof. RNDr. Josef Komárek, DrSc. (předseda)

Doc. Ing. Josef Čáslavský, CSc., prof. RNDr. Viktor Kanický, DrSc.

tech. redakce: Mgr. Rostislav Červenka

redakční uzávěrka: 31. 12. 2011

uzávěrka příštího čísla: 31. 3. 2012