



SPEKTROSKOPICKÁ SPOLEČNOST JANA MARCA MARCI

—————

**BULLETIN**  
**SPEKTROSKOPICKÉ SPOLEČNOSTI**  
**JANA MARCA MARCI**

Číslo 91

prosinec 1997

**64. schůze Hlavního výboru Společnosti**

Schůze se konala 11. prosince 1997 na stavební fakultě ČVUT a řídil ji předseda Společnosti Prof. Karel Volka. V úvodu schůze byli jmenováni čestní členové Společnosti Dr. Milan Horák, Dr. Ivan Rubeška, Doc. Bohumil Strauch a Dr. Milena Závětová. Následovalo předání cen vítězům soutěže mladých spektroskopiků:

*kategorie A*

1. cena: Mgr. Kateřina Chmelová (Vibrační stavy složek nukleových kyselin v pevné fázi)
2. cena: Ing. Jaroslava Šperková (Validace stanovení některých kovů v biotických matricích metodou ICP-MS)

*kategorie B*

1. cena neudělena
2. cena: Mgr. Tomáš Matoušek (On-line atomization of selenium hydride in graphite furnaces: Estimate of atomic absorption coefficient and spectroscopic temperature).

Zprávu o činnosti představenstva přednesla Ing. Spěváčková. Představenstvo se v uplynulém období sešlo 4x. Na schůzích byla projednávána příprava konferencí a kurzů, které budou pořádány v příštím roce a „Projekt překladu názvosloví v oboru spektroskopie“. V roce 1999 bude 50. výročí založení Společnosti (první sídlo Společnosti bylo na VŠCHT u prof. Quadráta), uvažuje se o vytvoření informačního posteru, který bude instalován na konferencích.

Ing. Koliňová přednesla zprávu o hospodaření, výdaje Společnosti jsou ve srovnání s minulým rokem úměrné, ke zvýšení došlo pouze u nákladů za tisk a telefon. Příspěvky zaplatilo 92% členů. Pokud se týká placení daně z příjmů, je předpoklad, že částka nepřesáhne odečitatelnou položku.

Zprávu o odborné činnosti přečetl Dr. Urban. V letošním roce byly uspořádány 4 kurzy (180 účastníků), 2 konference (180 účastníků), 1 seminář (45 účastníků) a 4 přednášky. Současně byl předložen a diskutován plán odborných akcí na r. 1998 (viz dále).

#### Plán odborných akcí na rok 1998

##### Sekce optické atomové spektroskopie

- a) 3<sup>rd</sup> European Furnace Symposium (14.-18. 6. 1998, Praha)
- b) Kurz AAS pro začátečníky (podzim 1998)

##### Sekce molekulové spektroskopie

- a) Kurz měření IČ spekter (26.-30. 1. 1998, Praha)
- b) Kurz interpretace IČ spekter (2.-6. 2. 1998, Praha)
- c) 13. NMR konference (27.-29. 4. 1998, Valtice)
- d) EUCMOS XXIV (23.-28. 8. 1998, Praha)
- e) 15. mezinárodní konference vysokého rozlišení (30.8.-4. 9. 1998, Praha)
- f) OS spektroskopie pevného stavu:
  - seminář s Fyzikálním ústavem z Řezna
  - seminář s firmou RBM z Mnichova

##### Sekce speciálních spektroskopických metod

- a) seminář RTG analýza (30.3. - 1.4. 1998, Bohdaneč)
- b) 13. Radiochemická konference (22.-30.4. 1998, Mariánské Lázně)

Dále se předpokládají akce v rámci specializovaných komisí, jejich plán bude oznámen později.

#### XIV<sup>th</sup> Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy Glasgow, září 1997

*Petr Pracna*

Ve dnech 7.-11. 9. 1997 proběhlo ve skotském Glasgow XIV<sup>th</sup> Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, mezinárodní konference pořádaná ve dvouletém cyklu střídavě na Université de Bourgogne v Dijonu, která je zakladatelem této série konferencí, a na některém z významných pracovišť z oboru molekulové spektroskopie vysokého rozlišení západní Evropy. Do Velké Británie se konference takto vrátila po 20 letech od roku 1977, kdy jejím pořadatelem byla universita v Readingu. V sudých letech mezi konferencemi v západní Evropě je pořadatelem konference obdobného rozsahu Ústav fyzikální chemie AV ČR ve spolupráci se Spektroskopickou společností Jana Marce Marci s tradicí začínající v roce 1970.

Konference v Glasgow přivítala přes 280 účastníků ze všech kontinentů, Česká republika byla zastoupena 6 pracovníky. Konference byla organizována tradiční formou 16 plenárních přednášek a 8 sekcí plakátových sdělení. Důraz na posterové sekce, v nichž bylo prezentováno

přes 300 sdělení, odráží pracovní charakter setkání, kde je dán široký prostor k diskusím. Ty se týkaly jak vlastní práce, tak i organizačních záležitostí. V rámci konference proběhly koordinační schůzky několika mezinárodních výzkumných projektů a také jednání organizačního a programového výboru příští XV. mezinárodní konference o spektroskopii vysokého rozlišení, která se bude konat v září 1998 v Praze a bude součástí oslav 650. výročí založení University Karlovy. Šlo především o projednání výběru zvaných řečníků a koordinaci s další významnou spektroskopickou konferencí EUCMOS (European Congress of Molecular Spectroscopy), která těsně předchází námi pořádanou konferencí.

Výběr témat vyžádaných plenárních přednášek dobře odrazil hlavní a nejvíce se rozvíjející směry oboru. Potvrdil rostoucí snahu molekulové spektroskopie přispět k řešení otázek spojených s chemickou reaktivitou studiím krátce žijících molekulových specií i silně vzbuzených stavů stabilních molekul. Dokumentoval obrovský pokrok experimentálních metod časově rozlišené spektroskopie studující intra- i inter-molekulární přenos energie a na druhé straně i odpovídajícího teoretického aparátu. Jiným důležitým aspektem studia zmíněných systémů je zvyšování citlivosti a frekvenční přesnosti experimentálních metod dosažované využitím laserů. S problémy chemické reaktivity je spjato i studium procesů probíhajících v zemské atmosféře souvisejících s rozkladem ozónové vrstvy. Spektroskopické informace o atmosféricky relevantních molekulách jsou shromažďovány do rozsáhlých databází a využívány k interpretaci technicky velmi náročných experimentů, které monitorují časově a výškově proměnné koncentrace těchto látek od zemského povrchu až do stratosféry. Takto získané informace jsou podkladem pro modelování chemických procesů svázaných s rozkladem ozónu.

Na rozdíl od vyváženého výběru témat plenárních přednášek byla volba pozvaných řečníků v několika případech již méně zdařilá. Na druhé straně měla většina plenárních přednášek vynikající obsahovou i formální úroveň. Chtěl bych se zde o některých z nich zmínit podrobněji.

Úvodní plenární přednáška prof. Hai-Lung Dai (University of Pennsylvania, USA) podala přehled časově rozlišené emisní spektroskopie silně vzbuzených molekul, ukazující, že rozhodující úlohu v intermolekulárním přenosu energie hrají síly dlouhého dosahu. Přednáška dr. H. Oelhafa (Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Karlsruhe, SRN) byla výborným přehledem pozemských i „balónových“ experimentů monitorování atmosférických polutantů včetně velice zajímavých a někdy překvapivých výsledků jejich vyhodnocení. Přednáška dr. P. Chapovského (Ústav automatizace a elektrometrie, Novosibirsk, Rusko) byla nesmírně zajímavou diskusí efektů, které jdou za hranice tradičního chápání termodynamických rovnováh a které je zcela nezbytné uvažovat při studiu chemické reaktivity. Dr. T. Huet (Laboratoire de Spectroscopie Hertzienne, Lille, Francie) představila vysoce citlivé laserové experimentální metody vhodné pro studium vysoce vzbuzených stavů molekul a molekulárních iontů.

Určitou nevýhodu mělo letošní spektroskopické setkání v citelně vyšších nákladech na účast, než bývá obvyklé například při jeho pořádání v Dijonu. Bylo to dáno jednak vzdáleností místa konání, ale i výší konferenčních poplatků. To se projevilo například v nižší účasti především mladých pracovníků a studentů, které se jinak tomuto typu konferencí daří přitáhnout.

Organizace konference byla profesionální, v některých bodech ovšem v duchu pořádající země. Velice příjemné bylo umístění všech jejích složek (ubytování, přednáškový a posterový sál, stravování) do areálu University of Strathclyde s celou řadou prostor pro diskuse. Samozřejmostí byl zcela volný přístup účastníků k počítačům s připojením do Internetu. Zajímavý byl i doprovodný program pro dvě volná odpoledne, který nabídl zájemcům pohled na kulturní stánky největšího skotského města jakož i na krásy přírody v jeho blízkém okolí.

**XXX. CSI Melbourne**  
21.- 26. září 1997

*Jiří Toman, Labtech s.r.o., Brno*

XXX. CSI bylo pořádáno ve spolupráci Royal Australian Chemical Institute-Analytical Chemistry Division s Academy of Science v budově World Congress Centre na okraji Melbourne City. Po nedělní registraci bylo uskutečněno neformální setkání s připitkem v improvizovaném prostředí stanu na břehu Yarry v sousedství kongresového centra.

Po oficiálním pondělním zahájení a po úvodní plenární přednášce prof. Adamse probíhalo nadále jednání vždy paralelně ve 4 sekcích ve třech menších a 1 velkém přednáškovém sále, v němž byly předneseny také všechny plenární přednášky v následujících dnech.

Organizace celé akce byla bezchybná, časový rozvrh jednání se podařilo bez výjimek přesně dodržet, takže, i s ohledem na snadnou dostupnost jednotlivých přednáškových sálů, nebyl problém sledovat všechny časově nekolidující přednášky. Jistou stinnou stránkou kolokvia byl poměrně malý počet zahraničních účastníků, zejména pak z některých evropských zemí. Celkem se kolokvia zúčastnilo 328 odborníků z 31 zemí. Podle očekávání však počtem značně převládali účastníci z pořádající Austrálie (151). Větší počet účastníků pak přijel z Velké Británie (26), Německa (25), Japonska (19), Jihoafrické republiky (12), USA a Norska (po 11 účastnících). Ostatní země byly pak již zastoupeny méně, mezi nimi i ve spektroskopii tak významné, jako např. Kanada 3 a Rusko pouze 1 účastníkem. Některé další země, s odborníky v oboru dobře známými, nebyly pak zastoupeny vůbec, např. Ukrajina, Bulharsko, Slovensko a pod. Stav zřejmě odráží současné finanční problémy s náklady spojené s účastí. Na tuto okolnost bylo některými delegáty, např. Řecka, poukázováno jako na nedostatek, který by bylo vhodné nějakým přiměřeným způsobem k udržení odborného vývoje a kontaktu s těmito zeměmi řešit.



**HILGER**  
**CS, s.r.o.**

HILGER CS, s.r.o.  
Místecká 258  
720 02 Ostrava-Hrabová  
tel./fax: (69) 35 86 82

### **HILGER CS, s.r.o. zastupuje:**

- Hilger Analytical, GB
- Thermo Jarrell Ash Corporation, USA
- Ströhlein, NSR
- TN spectrace, USA

### **PROVÁDÍME PRODEJ A SERVIS PŘÍSTROJŮ:**

#### **Laboratorní optické emisní spektrometry s**

- jiskrovým výbojem
- doutnavým výbojem GDS
- plasmovým buzením ICP

#### **Energodisperzní rentgenové spektrometry**

- laboratorní
- mobilní

#### **Atomové absorpční spektrometry AAS**

#### **Analyzátory kovů a pevných látek**

- analyzátory uhlíku a síry
- analyzátory kyslíku a dusíku
- analyzátory vodíku

#### **Analyzátory organických složek**

- stanovení organického chlóru AOX, EOX, POX, TX
- stanovení organického uhlíku TOC, TC, TIC
- stanovení síry AOS

<b>Odběrové systémy</b>	<b>Prodej standardů pro optickou</b>
<b>Analytické váhy</b>	<b>emisní spektrometrii</b>
<b>Laboratorní pece</b>	<b>Poradenství a konzultační činnost</b>

# Nicolet

INSTRUMENTS OF DISCOVERY

## SPECIALISTÉ V OBORU FTIR

- infračervené spektrometry s Fourierovou transformací pro náročné aplikace i rutinní použití
- příslušenství k IR a FTIR spektrometrům
- specializované databáze IČ spekter
- rychlá kvantitativní analýza ropného znečištění včetně jeho identifikace
- modemové napojení na rozsáhlou databanku spekter
- analyzátor olejů
- analyzátory plynů - multikomponentová analýza až 20 složek bez separace
- infračervené mikroskopy
- spojení FTIR se separačními metodami a TGA
- zakázkový vývoj analytických metod včetně programování
- bezplatné předvedení přístrojů zájemcům s možností měření vlastních vzorků

---

NICODOM, REP. NICOLET INSTRUMENT, HLAVNÍ 2727, 141 00 PRAHA 4  
Tel.: 02 - 76 68 59, - 76 49 97, Fax: - 76 68 59

## PERKIN ELMER

Nad Ostrovem 1119/7  
147 00 Praha 4  
tel. 02-61222164-7, fax 02-61222168

Firma Perkin Elmer zajišťuje prodej a servis přístrojů v těchto oblastech:

- ◆ spektroskopie (AAS, ICP-OES, ICP-MS, UV/VIS, FTIR, Fluorescence)
- ◆ termická analýza (DSC, DTA, TGA, DMA, DPA)
- ◆ plynová chromatografie (GC, GC-MS)
- ◆ polarimetrie
- ◆ kapalinová chromatografie (LC, LC/MS, LC/MS/MS)
- ◆ laboratorní informační systémy (LIMS)
- ◆ elementární analýza

Firma Perkin Elmer představuje hlavní novinky v oblasti AAS

Jedná se o novou generaci AAS spektrometrů AAnalyst 700/800, která byla vyvinuta s ohledem na maximální zjednodušení obsluhy při dosažení špičkových parametrů.

### Základní popis přístrojů:

#### AAnalyst 700:

kombinace plamene s klasickou grafitovou píčkou, deuteriová korekce pozadí

#### AAnalyst 800:

kombinace plamene s deuteriovou korekcí a příčně vyhřívané grafitové pícky (THGA) se Zeemanovou podélnou korekcí pozadí.

### Hlavní přednosti řady AAnalyst 700/800:

- ◆ plně automatické špičkové dvoupaprskové spektrometry s automatickou výměnou mezi plamenem a grafitovou píčkou
- ◆ osmilampový karusel s možností zapojení jak HCL tak EDL lamp
- ◆ automatická justace lamp
- ◆ unikátní optický systém s optickým vláknem pro referenční paprsek a s plošným polovodičovým detektorem
- ◆ software napsaný v prostředí Windows umožňuje jednoduchou obsluhu.

### Pozvánka na firemní semináře:

- 17. 2. 1998: Nové přístroje a aplikace v oblasti GC/MS a LC/MS
- 3. 3. 1998: Novinky v oblasti AAS a ICP-OES

Podrobnější informace o programu a přihlášky Vám poskytne Ing. Kateřina Diblíková na výše uvedené adrese.



Na kolokviu bylo předneseno 6 plenárních (60 min.), 31 vyžádaných přednášek (25 min.) a 107 (15 min.) orálních příspěvků. Kromě toho bylo prezentováno 125 posterů. Plenární přednášky byly v jednotlivých dnech zaměřeny na základní a aktuální otázky mikroskopické XRF a příbuzných metod (F. Adams), časově rozložené mikroskopie a interferometrie organických mezoskopických materiálů (H. Masuhara), postavení laserů v analytické atomové spektroskopii (N. Omenetto), ICP spektrometrii a jejím informačním možností (B. Sharp), Ramanově spektrometrii v průmyslovém prostředí (B. Chase) a MS v medicíně a biologii (M.L. Gross).

Vyžádané přednášky pokrývaly v pondělních dopoledních sekcích otázky vývoje a případně novější aplikační možnosti atomové spektroskopie obecně, XRF a interpretace XRF dat, magnetické rezonance v lékařské diagnostice, obecné otázky metod AS a problémy její aplikace při analýze složek životního prostředí. Odpolední jednání bylo zahájeno vyžádanými přednáškami uvádějícími FTIR spektroskopii s jejími možnostmi při sledování krátkodobých jevů a vzdálených objektů, AAS, speciální ve spojení s AAS, ICP-OES a ICP-MS, lasery indukovanou fotoakustickou spektroskopii, chemiluminiscenční metody a perspektivy AS v prostředí laserem chlazených atomů.

V úterních sekcích byly dopoledne předneseny vyzvané přednášky diskutující otázky aplikace polovodičových laserů typu AIII-BV ve spektroskopii, chemetrie NMR, MW plazmové spektrometrie a on-line MW úpravy vzorků pro ETAAS. Odpoledne pak byly věnovány otázkám průmyslových aplikací on-line spektroskopické analýzy, novým možnostem GD a ICP-MS, otázkám FTIR v praktických analýzách obecně a ED XRF.

Ve středu dopoledne byly předneseny vyžádané přednášky jednáající o možnostech využití laserů, plazmat a magnetických polí v instrumentaci nové generace, HRFT UV/VIS, MS při studiu biomolekulárních interakcí a speciální jako budoucím trendu v AS. Odpolední zasedání se pak zabývalo detekcí jednotlivých molekul FS, speciální prvků v atmosféře pracovního prostředí, NIRS v potravinářství a současnému hodnocení vlivu matrix a pomocných činidel v ICP-MS.

Ve čtvrtek dopoledne byla zasedání jednotlivých sekcí uvedena vyžádanými přednáškami o pokrocích při aplikaci FTIR mikroskopie v průmyslové praxi, o použití tenzidů ve stopové speciální analýze, o vlivu parametrů GD pro kvantitativní hloubkové profilování OES a významu základních fyzikálních měření při vývoji nových plazmových zdrojů. Odpoledne byla zasedání uvedena vyžádanými přednáškami věnovanými novému zdroji TOF-MS, foto-termické spektrometrii a vývoji instrumentace pro atomovou spektroskopii obecně.

Krátké příspěvky (15 min.) se vesměs dotýkaly témat uvedených vyžádanými přednáškami a byly do jednotlivých sekcí zařazovány poměrně úspěšně podle metodického, příp. aplikačního zaměření, takže újeji orientovaní účastníci byli nuceni střídat přednáškové sály poměrně zřídka. Tato organizace vedla také ke vcelku rovnoměrnému zastoupení jednotlivých metod atomové i molekulové spektroskopie, příp. jejich aplikací v různých dalších

oborech a příspěvků zaměřených jak na základní teoretické, tak aplikační problémy. Z metod mírně převažovala hmotnostní spektrometrie a z ní opět elementární MS s ICP a GD jako ionizačními zdroji. Významný podíl zaujímaly příspěvky zaměřené na zpracování měřených dat a chemometrické problémy spektrometrie.

Organizace kolokvia vedla nyní již k běžnému většímu podílu příspěvků prezentovaných formou posterů. Ty však již byly metodicky orientovány poněkud více na oblast atomové než molekulové spektroskopie s dominancí AAS a ICP OES a zvl. MS než příspěvky orální. Větší pozornost byla věnována u těchto technik úpravám pro stanovení toxických elementů, tvořících těžké hydridy, ale i dalších, tvořících jiné těžké sloučeniny a elektro-termickému odpařování vzorku nebo atomizaci analytu, příp. přímé analýze pevné fáze jinými technikami. V oblasti molekulové spektroskopie převládala FTIR spektrometrie, Ramanova a UV/VIS spektrometrie. Dostí velký počet posterů (9) se soustředoval na přípravu vzorků a separaci analytů před spektrometrickou koncovkou.

Problémově byly postery zaměřeny převážně na oblast instrumentálních, příp. metodických úprav, zahrnujících různé on-line techniky zakoncentrování nebo separace analytů. Z oblasti aplikací byla v posterových sekcích věnována větší pozornost analýze složek životního prostředí, aplikacím v medicíně, farmacii, toxikologii a biologii, dále v různých průmyslových odvětvích, vč. analýzy surovin, méně pak aplikacím v geologii, zemědělství a potravinářství.

CSI se zúčastnilo 19 vystavujících firem a organizací prezentujících výrobky (instrumentaci, doplňky a materiál) a služby ve 30 stáncích výstavního sálu situovaného bezprostředně mezi menšími přednáškovými sály. V tomto sále byly také instalovány postery odpoledních posterových sekcí. Prostřednictvím stánku Royal Society of Chemistry byla také prezentována informace o 3<sup>rd</sup> European Furnace Symposiumu v Praze v červnu 1998 včetně vyložení přihlášek pro zájemce.

Společenský program pro účastníky kolokvia sestával kromě nedělního seznamovacího setkání také z koktejlu, pořádaného u úterý večer ve společenském sále melbournské radnice. Při něm byla předána prof. Lvovovi cena XXX.CSI. Ve čtvrtek večer bylo pak po odpoledním oficiálním závěru kolokvium ukončeno večerním banketem. Pro zájemce byl na pátek organizován výlet do údolí Yarry a přírodního zooparku místní chráněné fauny u Healesville. Pro doprovázející osoby byl připraven atraktivní program prohlídek zajímavostí ve městě a okolí.

---

**Spektroskopická společnost Jana Marca Marci**

adresa sekretariátu: Thákurova 7, 166 29 Praha 6

redakční rada:

Dr. M. Fara, Dr. K. Jurek, Dr. J. Sysalová, Dr. B. Vlčková

tech. redakce: P. Vampolová

redakční uzávěrka: prosinec 1997, uzávěrka příštího čísla: únor 1998